

صلى الله عليه وسلم

يا نور المستوحشين في الظلم يا عالماً لا يعلم ادر كنى

بحق لطفك انحنى



دانشگاه پیام نور

دانشکده‌ی علوم پایه مرکز اهواز

پایان‌نامه‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک

با عنوان:

بررسی پارامترهای ساختاری و الکترونی ترکیب گالیم سلنید

با استفاده از مفاهیم اولیه

نگارش:

مطهره کهوازی

استاد راهنما:

دکتر حمداله صالحی

استاد مشاور:

دکتر علیرضا رازقی‌زاده

تیرماه ۱۳۹۱

صور تجلسه دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

جلسه دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد خانم/ آقای: مجتبه کوهناری

دانشجوی رشته فیزیک (حالت جامد) به شماره دانشجویی: ۸۸۵۷۴۲۱۷

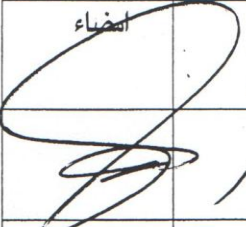
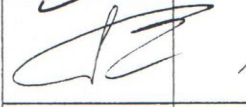


تحت عنوان: بررسی بارهای بیافزایی و الکترون Gas با استفاده از دستگاه اولیو

با حضور هیات داوران در روز پنجم مورخ ۱۹/۴/۹۱ ساعت ۹:۳۰

در محل تحصیلات تکمیلی دانشگاه پیام نور استان خوزستان مرکز اهواز برگزار شد و هیات

داوران پس از بررسی، پایان نامه مذکور را شایسته نمره به عدد ۱۹/۵ به

حروف نوزده و پنجم با درجه عالی تشخیص داد.

ردیف	نام و نام خانوادگی	هیات داوران	مرتبه دانشگاهی	امضاء
۱	محمد حسینی	استاد راهنما	دانشیار	
۳	عبدرضا رازینی زاده	استاد مشاور	دانشیار	
۲	علیرضا محمدی	استاد داور	استادیار	
۵	محمدرضا خدایی طرابی	نماینده تحصیلات تکمیلی	استادیار	

پیشکش بہ آستان مقدس

عالم آل محمد امام علی ابن موسی الرضا (ع)

و

قطرہ قطرہ خون شہیدانی کہ مظلومانہ رفتند تا مادر آرامش بانیم و بدانیم.

با حمد و سپاس الهی که توانایی تحصیل علم و معرفت را به انسان ارزانی داشت و با درود بر پیامبر اکرم (ص) که ما را به کسب علم و دانش سفارش نمود.

و با سپاس

از پدرم، استاد تمام درس زحمت و تلاش در لحظه لحظه‌ی زندگی ام، وجود نازنین مادرم که از جهان دوران کودکی به من لذت دانستن و تحقیق کردن را چشاند، از آناه به خاطر تمام پشتیبانی‌های معنوی و مادی و خریدن با ارزش‌ترین کالای دنیای منی زمان و علم کمال شکر و قدردانی را دارم.

از تمام اعضای خانواده ام که در این مدت با من صبوری کردند.

از استاد پر تلاشم دکتر حمداله صالحی که مرابا دنیای فیزیک محاسباتی آشنا کرد.

از آقایان دکتر علیرضا رازقی زاده، دکتر احمد آخوند و دکتر علی توانا که حضور پربرکت ایشان در زندگی ام دیدگاه تازه‌ای از دنیای فیزیک به من داد و سختی‌های راه را بر ایتم میسر نمود.

از خانم دکتر فاطمه پودات که مراد زینده‌ی جستجوی مطالب پشتیبانی کرد.

از آقای مهندس محمد عین حصارمی و خانم مهندس مریم سعودی که تجربه‌های نرم افزاری خود را، بی دریغ و سخاوتمندانه در اختیار من قرار دادند.

و از تمامی معلمان و اساتیدی که از کودکی تا به امروز مرا مورد آموزش، تعلیم و تربیت قرار داده اند با مدد گرفتن از کلام مولای علی (ع) که می فرماید:

«هر کس یک کلمه به من آموزش داد مرا تا آخر عمر می‌یون خود ساخته است» کمال شکر و قدردانی را می‌رسانم.

## "چکیده‌ی پایان‌نامه"

نام خانوادگی: کهوازی	نام: مطهره
عنوان پایان‌نامه: بررسی پارامترهای ساختاری و الکترونی گالیم‌سلنید با استفاده از مفاهیم اولیه	
استاد راهنما: دکتر حمدا... صالحی	استاد مشاور: دکتر علیرضا رازقی‌زاده
درجه‌ی تحصیلی: کارشناسی ارشد	رشته: فیزیک
محل تحصیل: دانشگاه پیام‌نور واحد اهواز	دانشکده: علوم پایه
واژه‌های کلیدی: گالیم‌سلنید، پارامترهای ساختاری، ساختار نواری، چگالی ابرالکترونی، چگالی حالت‌ها.	
GaSe, structure parameter, band gap structure, electron charge density, density of states.	
چکیده:	
<p>در این پایان‌نامه، خصوصیات ساختاری و الکترونی ترکیب GaSe در دو فاز <math>\epsilon</math> و <math>\beta</math> با ساختار هگزاگونال مورد بررسی و محاسبه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش شبه‌پتانسیل، در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی با کد Pwscf در بسته‌ی نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو انجام گرفته است. ثابت‌های شبکه در این محاسبات برای فاز <math>\epsilon</math> برابر <math>a=3/755\text{\AA}</math> و <math>c=15/94\text{\AA}</math> و برای فاز <math>\beta</math> برابر <math>a=3/743\text{\AA}</math> و <math>c=15/919\text{\AA}</math> می‌باشند. در این تحقیق خصوصیات ساختاری ترکیب GaSe از جمله ثابت‌های شبکه، مدول حجمی، تراکم‌پذیری، خواص اپتیکی و مدهای فونونی محاسبه شده است. نتایج به‌دست آمده از محاسبات مدول حجمی و تراکم‌پذیری و همچنین ساختار چگالی ابرالکترونی و ساختار نوار انرژی دو فاز <math>\epsilon</math> و <math>\beta</math> حاکی از آن است که ترکیب GaSe در دو فاز مورد نظر یک ترکیب نیم‌رسانای کاملاً لایه‌ای و فوق‌نرم است و در فاز <math>\beta</math> بر ساختار لایه‌ای گرافیت منطبق است. علاوه بر این محاسبات چگالی حالت‌های جزئی نشان‌دهنده‌ی هیبریداسیون قوی بین اربیتال‌های <math>\epsilon p</math> اتم گالیم و <math>\epsilon p</math> اتم سلنیم می‌باشد که تأییدی بر خاصیت کووالانسی این ترکیب است. همچنین بررسی ویژگی‌های فونونی نشان می‌دهد که در این ترکیب هر دو فاز <math>\epsilon</math> و <math>\beta</math> دارای مدهای فعال در محدوده‌ی IR و رامن است. مدهای فونونی در محدوده‌ی مادون قرمز نشان از آن دارد که این ترکیب توانایی تبدیل هارمونیک دوم (SHG) در فرایندهای نوری غیرخطی را دارد.</p>	

## فهرست مطالب

صفحه

عنوان

### فصل اول: بررسی ویژگی‌های ساختاری و فیزیکی ترکیب کالیم سelenید

۲	۱-۱ مقدمه
۲	۲-۱ عناصر تشکیل دهنده و چگونگی رشد ترکیب GaSe
۲	۱-۲-۱ گالیم (Ga)
۳	۲-۲-۱ سelenیم (Se)
۴	۳-۲-۱ چگونگی رشد ترکیب GaSe
۵	۳-۱ ساختار ترکیب GaSe
۸	۱-۳-۱ ساختار تحت فشار ترکیب GaSe
۸	۲-۳-۱ شکل شناسی ترکیب GaSe
۱۰	۳-۳-۱ طیف‌نگاری پرتوی ایکس ترکیب GaSe
۱۱	۴-۱ ساختار الکترونی ترکیب GaSe
۱۱	۱-۴-۱ ساختار نواری و گاف انرژی ترکیب GaSe
۱۳	۲-۴-۱ رسانندگی الکتریکی و تحرک پذیری

۱۳	۳-۴-۱ جرم حفره‌ها
۱۳	۴-۴-۱ ساختار فونونی
۱۴	۵-۱ بررسی خواص اپتیکی ترکیب GaSe
۱۴	۱-۵-۱ ضریب شکست
۱۶	۲-۵-۱ تابع دی‌الکترونیک
۱۸	۲-۵-۱ اثر فوتورخشانی
۱۹	۶-۱ کاربردها

## فصل دوم: بررسی مدل‌های برهم‌کنش ذرات و معرفی کد محاسباتی

۲۲	۱-۲ مقدمه
۲۳	۲-۲ سیستم‌های بس‌ذره‌ای
۲۴	۱-۲-۲ تقریب بورن - اپن‌هایمر
۲۵	۲-۲-۲ تقریب الکترون مستقل
۲۵	۳-۲ نظریه‌ی تابعی چگالی
۲۵	۱-۳-۲ تاریخچه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی
۲۷	۲-۳-۲ کاربردهای نظریه‌ی تابعی چگالی



- ۲۷ ۳-۳-۲ قضایای هوهنبرگ - کوهن
- ۲۸ ۴-۳-۲ رهیافت کوهن - شم
- ۲۹ ۵-۳-۲ پتانسیل تبادلی - همبستگی
- ۳۱ ۶-۳-۲ شمای حل خودسازگار نظریه‌ی تابعی چگالی
- ۳۲ ۴-۲-۴ روش‌های محاسبه‌ی ساختار نواری
- ۳۳ ۱-۴-۲ روش موج تخت (Pw)
- ۳۴ ۲-۴-۲ روش امواج تخت عمود بر هم (opw)
- ۳۵ ۳-۴-۲ روش شبه‌پتانسیل
- ۳۹ ۵-۲-۵ معرفی انواع روش شبیه‌سازی
- ۳۹ ۱-۵-۲ آشنایی با دینامیک مولکولی آغازین (مفاهیم اولیه)
- ۴۲ ۶-۲-۶ معرفی کد محاسباتی
- ۴۳ ۱-۶-۲ شبیه‌سازی در کوانتوم اسپرسو
- ۴۴ ۷-۲-۷ برنامه‌ی اصلی
- ۴۴ ۱-۷-۲ برنامه‌ی اصلی (Pw.x)
- ۵۰ ۸-۲-۸ خطاهای موجود در شبیه‌سازی

## فصل سوم: محاسبه پارامترهای ساختاری و ساختار الکترونی، بسطی و مد های فونونی ترکیب گالیم سelenide

۵۲	۱-۳ مقدمه
۵۲	۲-۳ توصیف روش محاسبات
۵۵	۳-۳ بررسی خواص ترکیب GaSe
۵۵	۱-۳-۳ بررسی خواص ساختاری GaSe در دو فاز $\epsilon$ و $\beta$
۶۰	۲-۳-۳ بررسی اثر فشار
۶۳	۳-۳-۳ تراکم پذیری بلور
۶۴	۴-۳-۳ تراکم پذیری خطی
۶۷	۵-۳-۳ چگالی
۶۸	۴-۳ بررسی خواص الکترونی
۶۸	۱-۴-۳ ساختار نواری
۷۰	۲-۴-۳ چگالی حالت های کل
۷۲	۳-۴-۳ چگالی حالت های کلی با در نظر گرفتن قطبش اسپینی
۷۳	۴-۴-۳ چگالی حالت های جزئی
۷۶	۵-۴-۳ چگالی ابرالکترونی
۷۹	۵-۳ بررسی خواص اپتیکی
۷۹	۱-۵-۳ بررسی تابع دی الکتریک

۸۱	۳-۵-۲ تابع اتلاف انرژی
۸۳	۳-۶ بررسی خواص دینامیکی
۸۳	۳-۶-۱ محاسبه‌ی مدهای فونونی
۸۷	۳-۷ نتیجه‌گیری کلی
۸۹	۳-۸ چشم اندازی به آینده
۹۱	انتشارات
۹۲	مراجع
۹۸	واژه‌نامه

## فهرست شکل‌ها

۵	شکل ۱-۱: ساختار گالیم سلنید
۶	شکل ۲-۱: فازهای مختلف ترکیب گالیم سلنید
۷	شکل ۳-۱: نمای سه بعدی از $\beta$ -GaSe
۷	شکل ۴-۱: نمای سه بعدی از $\varepsilon$ -GaSe
۸	شکل ۵-۱: تصویر SEM تک بلور GaSe در حال رشد
۹	شکل ۶-۱: تصویر شماتیک کوره‌ی تولید نانولوله GaSe
۱۰	شکل ۷-۱: تصویر نانولوله‌های GaSe

- شکل ۱-۸: طیف پراش پرتوی ایکس تک بلور GaSe در حال رشد ۱۰
- شکل ۱-۹: ساختار الکترونی ترکیب  $\epsilon$ -GaSe ۱۱
- شکل ۱-۱۰: ساختار الکترونی ترکیب  $\beta$ -GaSe ۱۲
- شکل ۱-۱۱: ساختار فونونی ترکیب  $\epsilon$ -GaSe ۱۴
- شکل ۱-۱۲: تغییرات ضریب شکست نسبت به انرژی فوتون فرودی ۱۶
- شکل ۱-۱۳: سهم حقیقی و موهومی تابع کرامرز-کرونیگ ۱۷
- شکل ۱-۱۴: سهم حقیقی و موهومی فاز  $\epsilon$ -GaSe ۱۸
- شکل ۱-۱۵: تصویر شماتیک آزمایش کاربردی تولید پالس‌های کوتاه لیزر و اندازه‌گیری بازدهی SHG ۱۹
- شکل ۲-۱: شمای حل خودسازگار نظریه‌ی تابعی چگالی ۳۲
- شکل ۲-۲: مراحل دینامیک مولکولی آغازین ۴۱
- شکل ۲-۳: لیست ورودی Control محیط گرافیکی pwscf ۴۵
- شکل ۲-۴: سربرگ Required Variables لیست ورودی System در محیط pwscf ۴۶
- شکل ۲-۵: سربرگ Optional Variables لیست ورودی System در محیط pwscf ۴۷
- شکل ۲-۶: لیست ورودی Lattice & Atomic در محیط گرافیکی pwscf ۴۷
- شکل ۲-۷: لیست ورودی K-point data در محیط گرافیکی pwscf ۴۸
- شکل ۲-۸: تصویر شماتیک از ناحیه‌ی مرزی منطقه‌ی اول بریلوئن ۴۹

- شکل ۳-۱: نمودار انرژی کل برحسب حجم یاخته‌ی قراردادی  $\epsilon$ -GaSe ۵۸
- شکل ۳-۲: نمودار انرژی کل برحسب حجم یاخته‌ی قراردادی  $\beta$ -GaSe ۵۸
- شکل ۳-۳: نمودار تغییرات حجم یاخته‌ی بسیط برحسب فشار برای ترکیب GaSe ۶۱  
دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$
- شکل ۳-۴: نمودار تغییرات نسبی پارامتر شبکه  $a_0/a$  بر حسب فشار برای ترکیب GaSe در دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۶۲
- شکل ۳-۵: نمودار تغییرات نسبی پارامتر شبکه  $c_0/c$  بر حسب فشار برای ترکیب GaSe در دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۶۲
- شکل ۳-۶: نمودار تغییرات  $Lna$  برحسب حجم یاخته‌ی قراردادی برای دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۶۵
- شکل ۳-۷: نمودار تغییرات  $Lnc$  برحسب حجم یاخته‌ی قراردادی برای دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۶۵
- شکل ۳-۸: ساختار نواری ترکیب  $\epsilon$ -GaSe با استفاده از روش شبه‌پتانسیل ۶۹
- شکل ۳-۹: ساختار نواری ترکیب  $\beta$ -GaSe با استفاده از روش شبه‌پتانسیل ۶۹
- شکل ۳-۱۰: چگالی حات‌های کلی برای ترکیب GaSe در فاز  $\epsilon$  ۷۱
- شکل ۳-۱۱: چگالی حات‌های کلی برای ترکیب GaSe در فاز  $\beta$  ۷۱
- شکل ۳-۱۲: چگالی حات‌های کلی با در نظر گرفتن قطبش اسپینی برای ترکیب GaSe در فاز  $\epsilon$  ۷۲
- شکل ۳-۱۳: چگالی حات‌های کلی با در نظر گرفتن قطبش اسپینی برای ترکیب GaSe در فاز  $\beta$  ۷۳

- شکل ۳-۱۴: نمودار چگالی حالت‌های جزئی برای ترکیب GaSe در فاز  $\epsilon$  ۷۴
- شکل ۳-۱۵: نمودار چگالی حالت‌های جزئی برای ترکیب GaSe در فاز  $\beta$  ۷۵
- شکل ۳-۱۶: چگالی ابرالکترونی ترکیب GaSe در فاز  $\epsilon$  در صفحه (۲۰۰) ۷۸
- شکل ۳-۱۷: چگالی ابرالکترونی ترکیب GaSe در فاز  $\beta$  در صفحه (۵۰۰) ۷۸
- شکل ۳-۱۸: سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک ترکیب GaSe در دو فاز دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۸۱
- شکل ۳-۱۹: سهم موهومی تابع دی‌الکتریک ترکیب GaSe در دو فاز دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۸۲
- شکل ۳-۲۰: نمودار اتلاف انرژی ترکیب GaSe در دو فاز دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۸۳

### فهرست جدول‌ها

- جدول ۱-۱: مقدار گاف انرژی تجربی ترکیب GaSe ۲
- جدول ۱-۲: پارامترهای رابطه‌ی تجربی ضریب شکست ۱۵
- جدول ۱-۳: ثابت‌های دی‌الکتریک تک‌بلور GaSe ۱۷
- جدول ۳-۱: تفیک الکترونی اتم‌های Ga و Se ۵۳
- جدول ۳-۲: داده‌های ورودی چرخه‌ی خودسازگار ترکیب GaSe در دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۵۴
- جدول ۳-۳: داده‌های ورودی و خروجی چرخه‌ی خودسازگار برای بهینه‌سازی ترکیب GaSe در دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۵۵

- جدول ۳-۴: داده‌های ورودی و خروجی چرخه‌ی خودسازگار برای ساختار الکترونی،  
اپتیکی و فونونی ترکیب GaSe در دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۵۵
- جدول ۳-۵: اشکال مختلف ترکیب GaSe در دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۵۶
- جدول ۳-۶: پارامترهای ساختاری محاسبه شده برای ترکیب GaSe در دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۵۹
- جدول ۳-۷: ضرایب بستگی ثابت‌های شبکه به فشار برای ترکیب GaSe در دو فاز  $\epsilon$   
و  $\beta$  ۶۳
- جدول ۳-۸: مقادیر تراکم‌پذیری حجمی و خطی محاسبه شده برای ترکیب GaSe  
در دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۶۶
- جدول ۳-۹: مقدار چگالی محاسبه شده برای ترکیب GaSe در دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۶۷
- جدول ۳-۱۰: نتایج حاصل از محاسبه‌ی گاف نواری برای ترکیب GaSe در دو فاز  $\epsilon$   
و  $\beta$  ۷۰
- جدول ۳-۱۱: بیشینه‌ی سهم هر اربیتال در ساختار چگالی حالت جزئی برای ترکیب  
GaSe در دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۷۶
- جدول ۳-۱۲: ضریب شکست استاتیک محاسبه شده در راستای محور C برای ترکیب  
GaSe در دو فاز  $\epsilon$  و  $\beta$  ۸۰
- جدول ۳-۱۳: فرکانس مدهای فونونی ترکیب GaSe در فاز  $\epsilon$  ۸۶
- جدول ۳-۱۴: فرکانس مدهای فونونی ترکیب GaSe در فاز  $\beta$  ۸۷

# فصل اول

بررسی ویژگی‌های ساختاری و فنریکی

ترکیب کالیم سلنید



## ۱-۱ مقدمه

در سال‌های اخیر، ترکیبات گروه III VI، به علت داشتن خواص الکترونیکی و اپتیک غیرخطی، توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است [۱]. در میان این ترکیبات، GaSe به علت داشتن خواص نیم‌رسانایی، اپتیک غیر خطی، فوتورسانندگی، مقاومت معکوس، رخشانی<sup>۱</sup> در دمای پایین [۲]، گاف نواری پهن و همچنین خواص بی‌نظیر وابسته به ساختار لایه‌ای [۳، ۴]، موضوع مورد توجه بسیاری از پژوهشگران تجربی و نظری قرار گرفته است [۱]. این ترکیب دارای کاربردهای زیادی از جمله، تبدیل مادون قرمز دور در ابزارهای فوق دقیق، ابزارهای الکترونیکی صنعتی و لیزرها می‌باشد [۵]. تک بلور GaSe به وسیله روش عمودی بریجمن، با ساختار هگزاگونال رشد می‌یابد [۶]. نقطه‌ی ذوب این ترکیب نسبتاً پایین (۹۶۰ درجه‌ی سلسیوس) است [۱]. شبکه‌ی سلول واحد آن دو لایه دارد که هر لایه از پیوند چهار اتم، به شکل صفحه‌ای از Se-Ga-Ga-Se به صورت متوالی با ضخامت ۰/۷۹۷ نانومتر ساخته می‌شود و به علت اختلاف در توالی حلقه‌ها، چهار فاز  $\delta$  و  $\beta, \gamma, \epsilon$  از این ترکیب گزارش شده است [۷، ۸، ۱]. تاکنون محققان زیادی بر روی خواص مختلف این ترکیب کار کرده‌اند بطوری که در یک جستجوی ساده بیشتر از ۷۰۰ مقاله‌ی انتشار یافته از این ترکیب گردآوری شده است که بیشتر این مقالات بر روی رشد، خواص ساختاری، مکانیکی، حرارتی، الکترونیکی، اپتیکی و همچنین کاربرد آن در اپتیک غیرخطی تک بلور این ترکیب متمرکز شده است و کمتر به کار نظری پرداخته شده است که در این بررسی برخی از ویژگی‌های مهم این ترکیب را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

## ۲-۱ عناصر تشکیل دهنده و چگونگی رشد ترکیب GaSe

### ۱-۲-۱ گالیم (Ga)

ترکیب گالیم سلینید با نماد GaSe، یک ترکیب شیمیایی نیم‌رسانا با ساختار هگزاگونال است. تقریباً ۶۶/۸۹ درصد این ترکیب از عنصر گالیم با نماد شیمیایی Ga که دارای عدد اتمی ۳۱ و عدد جرمی

<sup>۱</sup> Luminescence

$^{78}\text{Se}$  است، تشکیل شده است. این عنصر با آرایش الکترونی  $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^4$  متعلق به گروه ۱۳، دوره تناوب ۴، بلوک p است و در حالت استاندارد یعنی دمای ۲۹۸ کلوین جامدی نرم و نقره‌ای رنگ است و جزء فلزات به حساب می‌آید. نقطه‌ی ذوب گالیم  $30^\circ\text{C}$  و شعاع یون  $0.62 \text{ \AA}$  است. این عنصر تنها به مقدار جزئی در کانیهای آلومینیوم و روی یافت می‌شود. گالیم در ترکیب گالیم‌آرسنیک موارد استعمالی زیادی در وسایل ترانزیستوری دارد. این عنصر دارای خاصیت فلزی است و خواص شیمیایی ترکیبات آن در مرز یونی و کووالانسی است و ترکیبات سه والانسی تولید می‌نماید ولیکن والانس یک این عنصر بسیار پراهمیت است. گالیم معمولاً از طریق الکترولیز محلول‌های آبی نمک‌هایشان به دست می‌آید و این امکان ناشی از ولتاژ زیاد این فلز برای آزاد شدن هیدروژن است. این فلز نسبتاً فعال است و به سادگی در اسیدها حل می‌شود. [۹]

#### ۱-۲-۲ سلنیم (Se)

حدود ۵۳/۱۱ درصد ترکیب گالیم سلنید از اتم سلنیم با نماد شیمیایی Se، که دارای عدد اتمی ۳۴ و عدد جرمی ۷۸/۹۶ است، تشکیل شده است. این عنصر با آرایش الکترونی  $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^4$  متعلق به گروه ۱۶، در دوره‌ی ۴، بلوک p قرار دارد و در دمای ۲۹۸ کلوین به رنگ خاکستری تیره است و جزء مواد غیر فلز به حساب می‌آید. نقطه‌ی ذوب عنصر سلنیم  $217^\circ\text{C}$  و شعاع کووالانسی  $1.17 \text{ \AA}$  و شعاع یونی  $0.2 \text{ \AA}$  است. ترکیبات این عنصر خصلت یونی کمتری دارد. سلنیم یک عنصر کمیاب است، ولیکن بسیاری از اوقات در کانیهای سولفید به خصوص سولفیدهای Ag و Au، به صورت کانیهای سلنید یافت می‌شود. این عنصر را می‌توان از غبار کوره‌هایی که برای احتراق کانیهای سولفید به کار می‌روند، به دست آورد. عنصر سلنیم در اثر گرما در هوا می‌سوزد و دیوکسید مربوطه را تشکیل می‌دهد. این عنصر همچنین در اثر گرما با هالوژن‌ها و بیشتر فلزات و غیرفلزات وارد واکنش می‌شود [۹].

### ۱-۲-۳ چگونگی رشد ترکیب GaSe

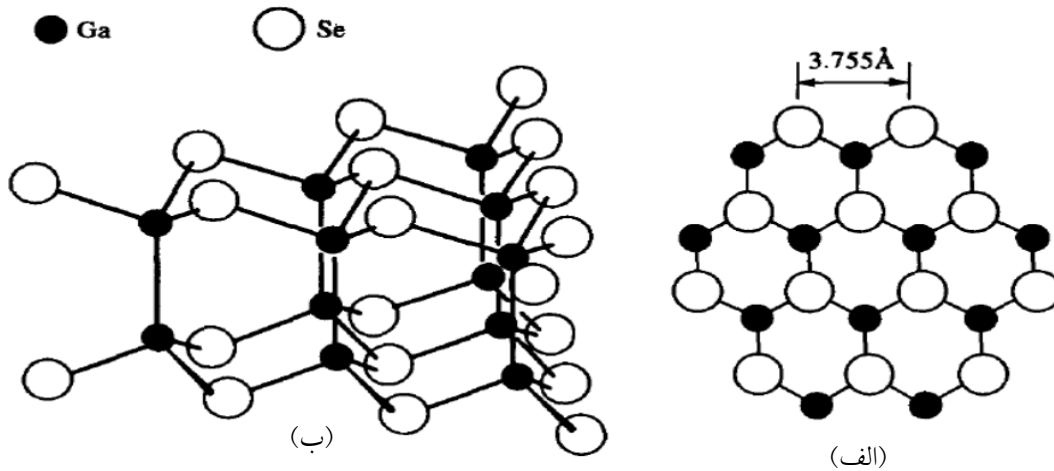
اصول فنی زیادی برای رشد این ترکیب وجود دارد. یکی از روش‌های متداول برای رشد تک بلور گالیم سلنید در ساختار هگزاگونال به روش عمودی بریجمن استوکبرگر<sup>۱</sup> است. رشد تک کریستال گالیم سلنید به روش عمودی بریجمن به این صورت است که ابتدا لامپ کوارتز را با آب مقطر و سپس با استون شستشو داده و در دمای  $400^{\circ}\text{C}$  به مدت ۴ ساعت حرارت داده می‌شود. سپس پودر سنتز شده‌ی پلی کریستال ترکیب شفاف GaSe را در لامپ کوارتز با قطر  $10\text{mm}$  و مهر و موم کرده سپس لامپ طولی حامل پودر را به وسیله‌ی سیستم خلأ بالا  $10^{-6}$  تور تخلیه می‌شود. عملیات تخلیه و مهر و موم لامپ در شیب دمای کوره‌ی مناسب انجام می‌شود. توزیع دمای کوره را می‌توان به سه نقطه دمای بالا (نقطه‌ی داغ)، نقطه‌ی شیب دما و نقطه‌ی با دمای پایین تقسیم کرد. در ابتدا لامپ از یک دستگیره در نقطه‌ی داغ از حفره آویزان می‌شود و در دمای  $975^{\circ}\text{C}$  یعنی  $15^{\circ}\text{C}$  بالاتر از نقطه‌ی ذوب GaSe به مدت ۴ ساعت نگه داشته می‌شود. در طول این مدت فرایند ذوب به صورت همگن در لامپ کوارتز که با سیستم بریجمن استوکبرگر در حال چرخش است انجام می‌شود. بعد از آن دسته شروع به کار می‌کند و به لامپ اجازه می‌دهد تا به بخش‌های پایین در امتداد محور کوره با سرعت  $4\text{mm/h}$  حرکت کند. در طول این مدت لامپ در حال چرخش است تا درجه حرارت کوره با توزیع مساوی به همه جای آن برسد. بعد از این عملیات دمای کوره را تا  $25^{\circ}\text{C}$  به آرامی با نرخ حدود  $1^{\circ}\text{C}$  در هر یک دقیقه کاهش و در مدت یک شبانه‌روز خنک می‌شود. در طول این مدت دمای کوره توسط یک کنترل‌کننده‌ی قابل برنامه‌ریزی با دقت  $\pm 1^{\circ}\text{C}$  کنترل می‌شود. در نهایت، لامپ خنک شده و کوره خاموش می‌شود و تک کریستال شفاف و قهوه‌ای رنگ GaSe با قطر حدود  $10\text{mm}$  و با طول  $2/5\text{cm}$  با ساختار هگزاگونال حاصل می‌شود [۶]. همان‌طور که در بالا توضیح داده شد روش بریجمن استوکبرگر نیاز به خلوص، خلأ و دمای بالا دارد [۱۰]. گاهی در طول رشد بلور ناخالصی مناسب مثل In به عنوان جانشین Ga را به ترکیب اضافه می‌کنند تا بلور به سختی مناسب برسد [۱۱].

<sup>۱</sup> Bridgeman Stockbarger

از روش‌های دیگر برای رشد ترکیب GaSe، می‌توان روش رسوب بخار شیمیایی<sup>۱</sup>، انتقال فضای بخار شیمیایی محبوس شده، برآرایی فاز بخار، تعویض واکنش بسیار آلی، تبخیر سطحی حرارتی، برآرایی باریکه مولکولی و روش‌های دیگر را نام برد [۱۰].

### ۳-۱ ساختار ترکیب GaSe

گزارشات اولیه در مورد ترکیب GaSe، در سال ۱۹۳۴ توسط کلیم<sup>۲</sup> نشان داد که ترکیب GaSe دارای ساختار لایه‌ای شش ضلعی مانند شکل (۱-۱) است.



شکل ۱-۱: ساختار گالیم سلیئید، الف) نمای بالا، ب) نمای سه بعدی [۱].

فازهای مختلف این ترکیب در سال ۱۹۷۵ توسط کوهن<sup>۳</sup> کشف شد. در سال‌های بعد گزارشات زیادی در مورد فازهای مختلف ترکیب GaSe و تقسیم‌بندی آنها به چهار فاز  $\delta$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\varepsilon$  اعلام شد، و همگی آنها به این موضوع اتفاق نظر دارند که: فاز  $\beta$  در گروه فضایی  $D_{3h}^4 - P6_3/mc$  دارای ساختار هگزاگونال با ثابت شبکه‌ی  $a=3/755\text{\AA}$  و  $c=15/94\text{\AA}$  و تقریباً منطبق بر ساختار GaS است. فاز  $\varepsilon$  نیز دارای گروه فضایی  $D_{3h}^1 - P6_3m_2$  دارای ساختار هگزاگونال با ثابت شبکه‌ی  $a=3/755\text{\AA}$  و  $c=15/95\text{\AA}$

<sup>۱</sup> Chemical Vapor Deposition

<sup>۲</sup> Klemm

<sup>۳</sup> Kuhn