

صلى الله عليه وسلم

همه امتیازات این پایان نامه به دانشگاه لرستان تعلق دارد. در صورت استفاده از تمام یا بخشی از مطالب آن در مجلات، کنفرانس ها یا سخنرانی ها، باید نام دانشگاه لرستان (یا استاد یا اساتید راهنمای پایان نامه) و دانشجو با ذکر مأخذ و ضمن کسب مجوز کتبی از دفتر تحصیلات تکمیلی دانشگاه ثبت شود. در غیر این صورت مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت.

دانشگاه لرستان
دانشکده علوم پایه
گروه فیزیک

عنوان پایان نامه

بررسی ویژگی‌های اپتیکی ترکیبات سه تایی



نگارش

بشری کیانی صدر

استاد راهنما

دکتر مهرداد دادستانی

پایان نامه جهت دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته فیزیک

بهمن ۱۳۹۰

فصل اول: معرفی ساختار، خواص و کاربردهای ترکیبات بور

۲	مقدمه.....
۳	۱-۱ نیمرساناها.....
۵	۲-۱ بور.....
۶	۳-۱ ترکیبات بور.....
۸	۱-۳-۱ ویژگی خاص ترکیبات بور.....
۹	۲-۳-۱ اثر فشار بر روی ترکیبات بور.....
۱۱	۴-۱ بررسی خواص ساختاری و الکترونی ترکیبات بور.....
۱۱	۱-۴-۱ نتایج نظری.....
۱۸	۲-۴-۱ نتایج تجربی.....
۲۰	۵-۱ معرفی آلیاژهای بور (BP_xAs_{1-x} و BN_xAs_{1-x} ، BN_xP_{1-x}).....
	۱-۵-۱ نحوه تغییرات پارامتر شبکه و مدول حجمی بر حسب غلظت در مقایسه با قانون
۲۴	تجربی و گارد.....
۲۷	۲-۵-۱ محاسبه پارامتر خمش گاف اپتیکی.....
۲۹	۳-۵-۱ محاسبه خمش گاف اپتیکی به روش برنارد و زونگر.....

فصل دوم: مطالعه سیستم‌های بس ذره‌ای و ویژگی‌های اپتیکی مواد

مقدمه.....	۳۴
۱-۲ مطالعه کوانتومی بلور.....	۳۶
۲-۲ تقریب بورن-اپنهایمر.....	۳۷
۳-۲ معادله شرودینگر بس الکترونی.....	۳۸
۱-۳-۲ تاریخچه‌ای برای حل سیستم‌های بس ذره‌ای.....	۳۹
۲-۳-۲ معادلات هارتری.....	۳۹
۳-۳-۲ معادلات هارتری-فوک.....	۴۲
۴-۲ نظریه تابعی چگالی (DFT).....	۴۶
۱-۴-۲ فضایای هوهنبرگ-کان.....	۴۶
۲-۴-۲ معادلات کان-شم.....	۵۱
۵-۲ تابعی انرژی تبادل-همبستگی.....	۵۶
۱-۵-۲ تقریب چگالی موضعی (LDA).....	۵۷
۲-۵-۲ تقریب گرادیان تعمیم‌یافته (GGA).....	۵۸
۶-۲ روش‌های حل معادلات خودسازگار کان-شم.....	۶۰
۱-۶-۲ روش امواج تخت بهساخته (APW).....	۶۱
۲-۶-۲ روش موج تخت بهساخته خطی (LAPW).....	۶۳
۳-۶-۲ روش موج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW).....	۶۵
۷-۲ ویژگی‌های اپتیکی مواد.....	۶۷

عنوان	صفحه
۲-۷-۱ نظریه ماکروسکوپی ضرایب اپتیکی در مواد همگن.....	۶۷
چهار	

۲-۷-۲ رهیافت درود برای ویژگی های اپتیکی فلزات.....	۷۲
۲-۷-۳ پاسخ اپتیکی.....	۷۶
۲-۷-۴ تقارن تانسور دی الکتریک.....	۸۰
۲-۷-۵ تبدیلات کرامرز-کرونیک و ثابت های اپتیکی.....	۸۱

فصل سوم: خواص ساختاری و الکترونی ترکیب های دوتایی و آلیاژهای سه تایی بور

مقدمه.....	۸۵
۳-۱ روش و جزئیات محاسبات ساختاری.....	۸۵
۳-۲ خواص ساختاری ترکیبات دوتایی بور.....	۸۶
۳-۳ خواص ساختاری آلیاژهای سه تایی بور.....	۸۹
۳-۴ روش و جزئیات محاسبات ساختار نواری.....	۹۶
۳-۴-۱ بررسی ساختار نواری ترکیبات دوتایی BN، BP و BPAs.....	۹۸
۳-۴-۲ بررسی ساختار نواری آلیاژهای سه تایی BN_xP_{1-x} ، BN_xAs_{1-x} و BP_xAs_{1-x}	۱۰۰
۳-۵ روش و جزئیات محاسبات چگالی حالت های ترکیبات بور.....	۱۰۵

فصل چهارم: بررسی خواص اپتیکی ترکیبات دوتایی و آلیاژهای سه تایی بور

مقدمه.....	۱۲۰
۴-۱ روش و جزئیات محاسبات اپتیکی ترکیبات بور.....	۱۲۲
۴-۲ تحلیل طیف حاصل از بخش های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک برای ترکیبات دوتایی و	

آلیاژهای سه تایی بور..... ۱۲۵

صفحه

عنوان

پنج

۳-۴ بررسی طیف اتلاف انرژی الکترون و دیگر پارامترهای اپتیکی، برای همه ترکیبات بور..... ۱۴۴

۴-۴ مقایسه با نتایج تجربی..... ۱۵۶

بحث و نتیجه گیری..... ۱۶۱

منابع..... ۱۶۳

فهرست جدول‌ها

شش

صفحه

عنوان

۱۳جدول ۱-۱ نتایج گزارش شده برای BN
۱۴جدول ۱-۲ تمامی نتایج گزارش شده برای BN
۱۵جدول ۱-۳ نتایج گزارش شده برای BP
۱۶جدول ۱-۴ تمامی نتایج گزارش شده برای BP
۱۷جدول ۱-۵ نتایج گزارش شده برای BAs
۱۷جدول ۱-۶ تمامی نتایج گزارش شده برای BAs
۱۸جدول ۱-۷ نتایج تجربی گزارش شده برای BN
۱۹جدول ۱-۸ نتایج تجربی گزارش شده برای BP
۱۹جدول ۱-۹ نتایج تجربی گزارش شده برای BAs
جدول ۱-۱۰ نتایج گزارش شده برای BN_xP_{1-x} با استفاده از تقریب PBE-GGA و EV-GGA در
۲۲حجم تعادلی
۲۲جدول ۱-۱۱ نتایج گزارش شده برای BN_xP_{1-x} با استفاده از تقریب PW-GGA در حجم تعادلی
جدول ۱-۱۲ نتایج گزارش شده برای BP_xAs_{1-x} با استفاده از تقریب PBE-GGA و EV-GGA در
۲۳حجم تعادلی
۲۳جدول ۱-۱۳ نتایج گزارش شده برای BP_xAs_{1-x} با استفاده از تقریب PW-GGA در حجم تعادلی
جدول ۱-۱۴ نتایج گزارش شده برای BN_xAs_{1-x} با استفاده از تقریب PBE-GGA و EV-GGA در
۲۴حجم تعادلی

- جدول ۱-۱۵ تجزیه خمش گاف اپتیکی به سهم‌های تغییر شکل حجم (VD)، تبادل بار (CE) و واهلش ساختاری (SR)، به روش برنارد در مقایسه با خمش گاف اپتیکی اندازه‌گیری شده بوسیله برازش تغییرات غیرخطی گاف نواری نسبت به غلظت با استفاده از توابع دو جمله‌ای..... ۳۱
- جدول ۱-۳ ثابت شبکه تعادلی، بالک مدول و مشتق بالک مدول برای ترکیبات دوتایی بور با تقریب GGA و مقایسه با مقادیر تجربی..... ۸۸
- جدول ۲-۳ ثابت شبکه تعادلی، بالک مدول و مشتق بالک مدول برای آلیاژ BN_xP_{1-x} و مقایسه با مقادیر تجربی..... ۹۲
- جدول ۳-۳ ثابت شبکه تعادلی، بالک مدول و مشتق بالک مدول برای آلیاژ BN_xAs_{1-x} و مقایسه با مقادیر تجربی..... ۹۳
- جدول ۴-۳ ثابت شبکه تعادلی، بالک مدول و مشتق بالک مدول برای آلیاژ BP_xAs_{1-x} و مقایسه با مقادیر تجربی..... ۹۴
- جدول ۳-۵ شعاع کره موفین-تین بر حسب (a.u.) برای اتم‌های تشکیل دهنده ترکیبات دوتایی و آلیاژهای سه‌تایی بور..... ۹۵
- جدول ۳-۶ گاف انرژی محاسبه شده برای ترکیبات دوتایی و مقایسه با مقادیر تجربی..... ۱۰۰
- جدول ۳-۷ گاف انرژی محاسبه شده برای ترکیبات دوتایی و آلیاژهای سه‌تایی بور..... ۱۰۴
- جدول ۴-۱ ثابت دی‌الکتریک محاسباتی ترکیبات دوتایی به همراه نتایج تجربی..... ۱۲۳
- جدول ۴-۲ ثابت دی‌الکتریک محاسبه شده برای ترکیبات دوتایی و آلیاژهای سه‌تایی بور..... ۱۲۴
- جدول ۴-۳ مکان پیک‌های طیف $\epsilon_2(\omega)$ به همراه گذارهای عمده در ناحیه بریلوئن برای ترکیبات دوتایی..... ۱۲۷

۱۳۱	جدول ۴-۴ مکان پیک‌های طیف $\varepsilon_p(\omega)$ به همراه گذارهای عمده در ناحیه بریلوئن برای آلیاژهای $\text{BN}_x\text{P}_{1-x}$ ۱۳۱
۱۳۶	جدول ۵-۴ مکان پیک‌های طیف $\varepsilon_p(\omega)$ به همراه گذارهای عمده در ناحیه بریلوئن برای آلیاژهای $\text{BN}_x\text{As}_{1-x}$ ۱۳۶
۱۴۱	جدول ۶-۴ مکان پیک‌های طیف $\varepsilon_p(\omega)$ به همراه گذارهای عمده در ناحیه بریلوئن برای آلیاژهای $\text{BP}_x\text{As}_{1-x}$ ۱۴۱

- شکل ۱-۱ ساختار الماسی ۳
- شکل ۲-۱ ساختار سولفید روی ۵
- شکل ۳-۱ چگالی های بار والانس BP (a) ، BAs (b) در صفحه (۱۱۰) در حجم تعادلی ۸
- شکل ۴-۱ چگالی بار والانس BN (a) ، BP (b) در صفحه (۱۱۰) در حجم تعادلی ۹
- شکل ۵-۱ ساختار نواری ترکیب BSb ، (a) در فاز زینک بلند (ZB) در حجم تعادلی (b) در فاز راکسالت (RS) در حجم تعادلی ۱۰
- شکل ۶-۱ ساختار نواری ترکیب BN در فاز زینک بلند (ZB) (چپ) در فاز راکسالت (RS) (راست) در حجم تعادلی ۱۰
- شکل ۷-۱ (a) نمودار تغییرات ثابت شبکه بر حسب غلظت برای آلیاژ BN_xP_{1-x} (مربعهای توپر) (b) نحوه تغییرات مدول حجمی بر حسب غلظت. خطوط نقطه چین برای مقایسه تغییرات پارامترها با قانون تجربی و گارد رسم شده اند. ۲۵
- شکل ۸-۱ (a) نمودار تغییرات ثابت شبکه بر حسب غلظت برای آلیاژ BN_xAs_{1-x} (مربعهای توپر) (b) نحوه تغییرات مدول حجمی بر حسب غلظت. خطوط نقطه چین برای مقایسه تغییرات پارامترها با قانون تجربی و گارد رسم شده اند. ۲۶
- شکل ۹-۱ (a) نمودار تغییرات ثابت شبکه بر حسب غلظت برای آلیاژ BP_xAs_{1-x} (مربعهای توپر) (b) نحوه تغییرات مدول حجمی بر حسب غلظت. خطوط نقطه چین برای مقایسه تغییرات پارامترها با قانون تجربی و گارد رسم شده اند. ۲۶

- شکل ۱۰-۱ نمودار تغییرات گاف نواری محاسبه شده بر حسب غلظت با استفاده از تقریب GGA (مربع توپر) و EVGGA (دایره توپر) (a) برای آلیاژ BN_xP_{1-x} و (b) برای آلیاژ BN_xAs_{1-x} ۲۷
- شکل ۱۱-۱ نمودار تغییرات گاف نواری محاسبه شده بر حسب غلظت با استفاده از تقریب GGA (مربع توپر) و EVGGA (دایره توپر) برای آلیاژ BP_xAs_{1-x} ۲۸
- شکل ۱-۲ نمایش تناظر یک به یک بین پتانسیل خارجی و چگالی بار ۴۸
- شکل ۲-۲ تقسیم بندی بلور به دو ناحیه در روش APW ۶۱
- شکل ۳-۲ منحنی $u_l(r, E)$ در روش ویگنر سائتر برای تعیین E_l ۶۴
- شکل ۴-۲ هندسه انتخاب شده برای توصیف میدان‌های الکترومغناطیسی عرضی در مواد همگن. میدان الکتریکی و چگالی جریان داخلی در راستای محور x هستند، میدان مغناطیسی در راستای محور y و انتشار موج در امتداد محور z می‌باشد ۶۸
- شکل ۵-۲ نمایش فرود، انعکاس و انتقال امواج الکترومغناطیس روی سطح (در صفحه $z=0$) در یک ماده همگن ۷۱
- شکل ۱-۳ نمودارهای انرژی بر حسب حجم سلول واحد برای ترکیبات دوتایی BN، BP و BAs ۸۷
- شکل ۲-۳ نمایش ساختار آلیاژهای BN_xP_{1-x} برای $X=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ ۹۰
- شکل ۳-۳ نمایش ساختار ترکیبات سولوانیت Cu_TMS_f ($TM = V, Nb, Ta$). توپ‌های آبی، قرمز و زرد به ترتیب اتم‌های Cu، TM و S را مشخص می‌کنند ۹۰
- شکل ۴-۳ نمایش تشکیل ساختار تتراگونال از بلورهای مکعبی ۹۱

شکل ۳-۵ نمودارهای انرژی بر حسب حجم سلول واحد برای آلیاژهای $BN_{.75}P_{.25}$ ، $BN_{.5}P_{.5}$ ،	
۹۱ $BN_{.75}P_{.25}$
شکل ۳-۶ نمودارهای انرژی بر حسب حجم سلول واحد برای آلیاژهای $BN_{.75}As_{.25}$ ، $BN_{.5}As_{.5}$ ،	
۹۳ $BN_{.75}As_{.25}$ ،
شکل ۳-۷ نمودارهای انرژی بر حسب حجم سلول واحد برای آلیاژهای $BP_{.75}As_{.25}$ ، $BP_{.5}As_{.5}$ ،	
۹۴ $BP_{.75}As_{.25}$ ،
شکل ۳-۸ ساختار نواری ترکیبات دوتایی BP ، BN	
۹۸
شکل ۳-۹ ساختار نواری ترکیب دوتایی Bas	
۹۹
شکل ۳-۱۰ ساختار نواری آلیاژهای $BN_{.75}P_{.25}$ ، $BN_{.5}P_{.5}$	
۱۰۰
شکل ۳-۱۱ ساختار نواری آلیاژ $BN_{.75}P_{.25}$	
۱۰۱
شکل ۳-۱۲ ساختار نواری آلیاژهای $BN_{.75}As_{.25}$ ، $BN_{.5}As_{.5}$ ، $BN_{.25}As_{.75}$	
۱۰۲
شکل ۳-۱۳ ساختار نواری آلیاژهای $BP_{.75}As_{.25}$ ، $BP_{.5}As_{.5}$ ، $BP_{.25}As_{.75}$	
۱۰۳
شکل ۳-۱۴ چگالی حالت‌های کلی (راست) و چگالی حالت‌های جزئی (چپ) برای ترکیب BN ...	
۱۰۶	
شکل ۳-۱۵ چگالی حالت‌های کلی (راست) و چگالی حالت‌های جزئی (چپ) برای ترکیب BP ...	
۱۰۷	
شکل ۳-۱۶ چگالی حالت‌های کلی (راست) و چگالی حالت‌های جزئی (چپ) برای ترکیب Bas .	
۱۰۸	
شکل ۳-۱۷ چگالی حالت‌های کلی و جزئی برای آلیاژهای (الف) $BN_{.75}P_{.25}$ (ب) $BN_{.5}P_{.5}$ (ج)	
۱۱۰ $BN_{.75}P_{.25}$

- شکل ۳-۱۸ چگالی حالت‌های کلی و جزئی برای آلیاژ $BN_{0.75}As_{0.75}$ ۱۱۲
- شکل ۳-۱۹ چگالی حالت‌های کلی و جزئی برای آلیاژهای (الف) $BN_{0.75}As_{0.75}$ (ب) $BN_{0.5}As_{0.5}$ ۱۱۴
- شکل ۳-۲۰ چگالی حالت‌های کلی و جزئی برای آلیاژهای (الف) $BP_{0.75}As_{0.75}$ (ب) $BP_{0.5}As_{0.5}$ ۱۱۶
- شکل ۳-۲۱ نمایش چگالی حالت‌های کلی آلیاژهای BN_xP_{1-x} ، BN_xAs_{1-x} و BP_xAs_{1-x} با $x=0$ و 0.25 و 0.5 و 0.75 ۱۱۸
- شکل ۴-۱ بخش‌های حقیقی (آبی رنگ) و موهومی (قرمز رنگ) تابع دی‌الکتریک برای BN ، BP و BAs ۱۲۵
- شکل ۴-۲ بخش‌های حقیقی (چپ) و موهومی (راست) تابع دی‌الکتریک برای آلیاژ $BN_{0.75}P_{0.25}$ ۱۲۸
- شکل ۴-۳ بخش‌های حقیقی (چپ) و موهومی (راست) تابع دی‌الکتریک در دو راستای xx و zz برای آلیاژ $BN_{0.5}P_{0.5}$ ۱۲۹
- شکل ۴-۴ بخش‌های حقیقی (چپ) و موهومی (راست) تابع دی‌الکتریک برای آلیاژ $BN_{0.75}P_{0.25}$ ۱۳۰
- شکل ۴-۵ بخش‌های حقیقی (چپ) و موهومی (راست) تابع دی‌الکتریک برای آلیاژ $BN_{0.75}As_{0.75}$ ۱۳۳
- شکل ۴-۶ بخش‌های حقیقی (چپ) و موهومی (راست) تابع دی‌الکتریک در دو راستای xx و zz برای آلیاژ $BN_{0.5}As_{0.5}$ ۱۳۴

شکل ۴-۷	بخش‌های حقیقی (چپ) و موهومی (راست) تابع دی‌الکتریک برای آلیاژ BN _{۰.۷۵} As _{۰.۲۵}	۱۳۵
شکل ۴-۸	بخش‌های حقیقی (چپ) و موهومی (راست) تابع دی‌الکتریک برای آلیاژ BP _{۰.۲۵} As _{۰.۷۵}	۱۳۷
شکل ۴-۹	بخش‌های حقیقی (چپ) و موهومی (راست) تابع دی‌الکتریک در دو راستای xx و zz برای آلیاژ BP _{۰.۵} As _{۰.۵}	۱۳۸
شکل ۴-۱۰	بخش‌های حقیقی (چپ) و موهومی (راست) تابع دی‌الکتریک برای آلیاژ BP _{۰.۷۵} As _{۰.۲۵}	۱۳۹
شکل ۴-۱۱	طیف حاصل از قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک برای همه ترکیبات دوتایی و آلیاژهای سه‌تایی بور.....	۱۴۲
شکل ۴-۱۲	طیف حاصل از قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک برای همه ترکیبات دوتایی و آلیاژهای سه‌تایی بور.....	۱۴۳
شکل ۴-۱۳	طیف مربوط به اتلاف انرژی الکترون برای تمامی ترکیبات دوتایی و آلیاژهای سه‌تایی بور.....	۱۴۵
شکل ۴-۱۴	طیف مربوط به ضریب شکست برای تمامی ترکیبات دوتایی و آلیاژهای سه‌تایی بور.....	۱۵۰
شکل ۴-۱۵	طیف مربوط به ضریب خاموشی برای تمامی ترکیبات دوتایی و آلیاژهای سه‌تایی بور..	۱۵۱
شکل ۴-۱۶	طیف مربوط به ضریب بازتاب برای تمامی ترکیبات دوتایی و آلیاژهای سه‌تایی بور.....	۱۵۲
شکل ۴-۱۷	طیف مربوط به ضریب جذب برای تمامی ترکیبات دوتایی و آلیاژهای سه‌تایی بور.....	۱۵۳
شکل ۴-۱۸	طیف بازتاب برای c-BN (a) نمونه متخلخل c-BN به کار رفته در طیف تجربی (b) میکروبلور c-BN به کار رفته در طیف تجربی (نتایج تجربی در واحدهای اختیاری می‌باشند)، (c) طیف محاسباتی در کار حاضر.....	۱۵۷

- شکل ۴-۱۹ طیف $\epsilon_2(\omega)$ برای c-BN (a) نمونه بلورین c-BN به کار رفته در طیف تجربی (خط پر)، (b) میکروبلور c-BN به کار رفته در طیف تجربی (خط چین)، (c) طیف محاسباتی در کار حاضر (نقطه خط)..... ۱۵۷
- شکل ۴-۲۰ طیف مربوط به ضریب شکست برای c-BN به همراه نتایج تجربی موجود..... ۱۵۹
- شکل ۴-۲۱ مقایسه طیف ضریب خاموشی ترکیب c-BN با نتایج تجربی موجود..... ۱۵۹
- شکل ۴-۲۲ طیف مربوط به ضریب جذب برای c-BN به همراه نتایج تجربی موجود..... ۱۶۰
- شکل ۴-۲۳ طیف مربوط به اتلاف انرژی الکترون (EELS) برای c-BN و مقایسه با نتایج تجربی موجود..... ۱۶۰

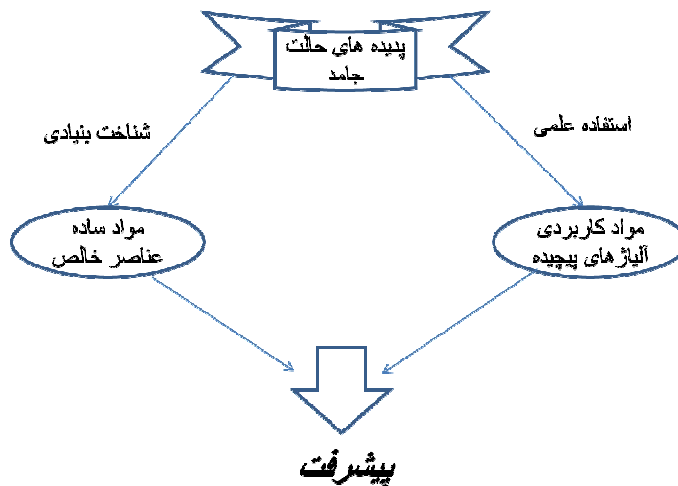
عنوان پایان‌نامه: بررسی ویژگی‌های اپتیکی ترکیبات سه‌تایی BN_xP_{1-x} ، BN_xAs_{1-x} ، BP_xAs_{1-x}		
استاد راهنما: دکتر مهرداد دادستانی		
درجه تحصیلی: دکترا	رشته: فیزیک	گرایش: حالت جامد
محل تحصیل (دانشگاه): لرستان	دانشکده: علوم پایه	گروه آموزشی: فیزیک
تاریخ فارغ التحصیلی: ۱۳۹۰/۱۱/۱۶	تعداد صفحات: ۱۶۰	
کلیدواژه‌ها:		
فارسی: ترکیبات بور، نظریه تابعی چگالی، روش امواج تخت به‌ساخته خطی با پتانسیل کامل، خواص اپتیکی		
انگلیسی: Boron Compounds, DFT, FP-LAPW, Optical properties		
چکیده:		
<p>در این مطالعه با بکارگیری روش (FP-LAPW) و در چارچوب نظریه تابعی چگالی خواص الکترونی و اپتیکی ترکیبات بور BN_xP_{1-x}، BN_xAs_{1-x}، BP_xAs_{1-x} در غلظت‌های (۱ و $0/75$، $0/50$، $0/25$، $x=0$) انجام شده است. آلیاژهای نیم‌رسانا محلولهای جامدی هستند که از دو یا تعداد بیشتری عنصر تشکیل می‌شوند و از نظر فناوری خصوصاً در صنایع الکتریکی و الکترواپتیکی بسیار مورد توجه‌اند. یکی از راههای تغییر کارایی و عملکرد نیم‌رساناها در جهت ایجاد مواد جدید، تشکیل آلیاژهایی از این مواد است که با وارد کردن ناخالصی ایجاد می‌شود. این امر سبب تغییر گاف اپتیکی این مواد شده که می‌تواند مصارف گوناگونی در صنایع اپتیکی داشته باشد. هم‌اکنون هدف اصلی در مهندسی مواد توانایی تنظیم گاف نواری به منظور به دست آوردن خواص مورد علاقه است. از این میان ترکیبات III-V با ساختار ZnS مربوط به بورن شامل BN، BP، BAS به دلیل خواص منحصر به فرد و متفاوت که با دیگر ترکیبات III-V دارند در سال‌های اخیر به عنوان نیم‌رساناهای با گاف انرژی بالا، مورد توجه خاص پژوهشگران قرار گرفته‌اند. در این مطالعه در گام نخست خواص الکترونی (ساختار نواری و چگالی حالت-های اتم‌های تشکیل دهنده) محاسبه شده است. بررسی ساختار نواری ترکیبات دوتایی BN، BP، BAS، نشان می‌دهد که این ترکیبات یک نیم‌رسانا با گاف نواری غیرمستقیم بین نقاط Γ و X هستند. در آلیاژهای BN_xP_{1-x} (و BN_xAs_{1-x}) با کاهش غلظت اتم نیتروژن، گاف انرژی و ویژگی‌های یونی به مراتب کاهش یافته و خاصیت فلزی آشکار می‌گردد. علت اصلی این امر به اختلاف زیاد الکترونگاتیوی اتم N با دو اتم P و As برمی‌گردد. همچنین محاسبات ساختار نواری این آلیاژها در $0/75$ و $0/25$ نشان می‌دهد که این ترکیبات یک نیم‌رسانا با گاف انرژی مستقیم، در نقطه Γ می‌باشند. در حالیکه در $x=0/5$ یک نیم‌رسانا با گاف انرژی غیرمستقیم، بین نقاط Γ و M می‌باشد. برای آلیاژ BP_xAs_{1-x}، با افزایش غلظت اتم فسفر تغییر چندانی در مقدار گاف مشاهده نمی‌شود. این آلیاژ در $0/75$ و $x=0/25$ یک نیم‌رسانا با گاف انرژی غیرمستقیم، بین نقاط Γ و X و در $0/5$ $x=0/25$ یک نیم‌رسانا با گاف انرژی غیرمستقیم بین نقاط M و Γ است. محاسبات مربوط به چگالی حالت‌ها برای آلیاژهای BN_xP_{1-x} و BN_xAs_{1-x} در هر سه درصد ۲۵، ۵۰ و ۷۵ نشان می‌دهد که سهم عمده چگالی حالت‌ها در پائین و بالای سطح فرمی، تقریباً مربوط به اوربیتال ۲p اتم نیتروژن می‌باشد. اما در آلیاژ BP_xAs_{1-x}، سهم عمده چگالی حالت‌ها در پائین و بالای سطح فرمی تقریباً مربوط به اوربیتال‌های p هر سه اتم یعنی ۲p اتم بور، ۳p اتم فسفر و ۴p اتم آرسنیک می‌باشد. در گام بعدی خواص اپتیکی این ترکیبات با اندازه‌گیری ثابت دی‌الکتریک، بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، تابع اتلاف انرژی</p>		

الکترون (EELS)، ضرایب شکست، بازتاب، جذب و خاموشی محاسبه شده است. نتایج محاسبات حاکی از آن است که سهم اصلی در انتقال‌های اپتیکی و منشأ ساختارهای موجود در طیف‌های اپتیکی BN، BP، BAs و به ترتیب ناشی از (حالت‌های ۲p اتم نیتروژن به عنوان حالت اولیه و حالت‌های ۲s اتم بور و نیتروژن به عنوان حالت‌های نهایی)، (۲p اتم بور و ۳p اتم فسفر به ۲s اتم بور و ۳d اتم فسفر)، (۲p اتم بور و ۴p اتم آرسنیک به ۲s اتم بور) می‌باشد. در آلیاژهای BN_xAs_{1-x} و BN_xP_{1-x} برای هر سه درصد ۲۵، ۵۰ و ۷۵، سهم اصلی در گذارهای اپتیکی برای حالت‌های اولیه مربوط به اوربیتال ۲p اتم نیتروژن می‌باشد و برای حالت‌های نهایی به ترتیب درصدها مربوط به، ۲s اتم نیتروژن و ۳d اتم فسفر (۲s اتم بور)، ۳d اتم فسفر و ۲s اتم نیتروژن (۲s اتم نیتروژن و بور) و ۳d اتم فسفر (۲s اتم نیتروژن و بور) می‌باشد. اما مطابق آنالیز نواری صورت گرفته برای آلیاژ BP_xAs_{1-x} ، در هر سه درصد ذکر شده، اوربیتال‌های p هر سه اتم بور، فسفر و آرسنیک به عنوان حالت‌های اولیه نقش اصلی در گذارهای اپتیکی را به عهده دارند و حالت‌های نهایی به ترتیب درصدهای ۲۵، ۵۰ و ۷۵ مربوط به ۳d اتم فسفر، ۳d اتم فسفر و ۲s اتم بور، ۳d اتم فسفر می‌باشد. بررسی طیف اتلاف انرژی الکترون (EELS) منجر به یک پیک پلاسمونی در انرژی‌های ۳۵/۸۲، ۲۲/۶۸ و ۲۱/۳۲ الکترون ولت به ترتیب برای ترکیب‌های BN، BP، BAs می‌شود. همچنین پیک پلاسمونی در آلیاژهای BN_xAs_{1-x} و BN_xP_{1-x} برای ۰/۷۵، ۰/۵ و ۰/۲۵ به ترتیب برابر ۲۲/۹۲ (۲۲/۵۴)، ۲۵/۱۸ در راستای x و ۲۵/۱۵ در راستای z (۲۴/۱۷) در راستای x و ۲۳/۸۵ در راستای z) و ۲۹/۲۱ (۲۷/۹۸) الکترون ولت می‌باشد. اما برای آلیاژ BP_xAs_{1-x} مقدار پیک پلاسمونی در درصدهای ذکر شده به ترتیب برابر ۲۱/۵۹، ۲۱/۸۳ در راستای x و ۲۱/۹۴ در راستای z، $22/13 \text{ eV}$ می‌باشد. در پایان می‌توان گفت، انطباق مطلوبی میان نتایج محاسباتی ما با نتایج تجربی حاصل شده است.

فصل اول:

معرفی ساختار، خواص و کاربردهای ترکیبات بور

معمولاً درک پدیده‌های حالت جامد بسیار دشوار است و نیاز به ساده سازی مسائل تا حد ممکن دارد. این نیاز موجب شد تا دانش پژوهان به مطالعه‌ی فلزات خالص، آلیاژهای ساده و یا ترکیبهای مشخص بپردازند. از سوی دیگر مهندسان یا دانش پژوهان علم مواد که تمایل به کاربرد پدیده‌های حالت جامد دارند به ندرت از عناصر خالص، به همان صورتی که در طبیعت وجود دارند، استفاده می‌کنند، بلکه با طراحی و یا با آزمون و خطا موادی می‌سازند که از نظر کاربردی و قیمت تمام شده نیاز آنها را برآورده سازند. این دو سیما را در یک نمودار ساده نمایش می‌دهیم.



پیشرفت در هر یک از این دو شاخه، به دنبال شناخت متقابل هدف و مبادله‌ی اطلاعات بین پژوهندگانی که اصولاً با مسائل بنیادی درگیرند و آنها که با موارد استفاده علمی سروکار دارند، به دست آمده است. بدین منظور بر آن شدیم در این فصل ابتدا به معرفی ترکیب‌های ساده بور BN، BP، و BAS پردازیم و ویژگی‌های ساختاری و الکترونی را بر مبنای نتایج نظری و تجربی موجود بررسی کرده و سپس به مطالعه آلیاژهای بور BN_xP_{1-x} ، BN_xAs_{1-x} و BP_xAs_{1-x} پرداخته، ساختار و ویژگی‌های کلی آنها را بیان و به مقایسه محدود کارهای صورت گرفته بر روی این آلیاژها خواهیم پرداخت.