

## عنوان مقاله:

مقاله پژوهشی: محاسبه ساختار الکترونی و نوارهای انرژی InP در حالت نانو سیم و انبوهه به روش شبه پتانسیل

## محل انتشار:

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران، دوره 12، شماره 3 (سال: 1401)

تعداد صفحات اصل مقاله: 15

## نویسندگان:

حمداء.. صالحی - دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

حسین طولابی نژاد - دانش آموخته کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

## خلاصه مقاله:

در این مقاله ویژگی های الکترونی و ساختاری از جمله ثابت های شبکه، ساختار نوارهای انرژی و چگالی حالت های در حالت انبوهه و نانوسیم محاسبه و مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) و با استفاده از نرم افزار کوانتوم اسپرسو با تقریب های چگالی موضعی (LDA) و تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) صورت گرفته است. نتایج به دست آمده نشان می دهد که نوارهای انرژی سطح فرمی را قطع نکرده و دارای یک شکاف انرژی به اندازه  $4/1$  الکترون ولت در نقطه  $\Gamma$  در منطقه بریلوین می باشد که سازگاری خوبی با نتایج تجربی دارد. همچنین شکاف نواری در حالت نانوسیم ها حدود  $49/1$  الکترون ولت به دست آمد که نسبت به شکاف نواری در حالت انبوهه افزایش یافته است. در نهایت، پارامترهای محاسبه شده سازگاری خوبی با دیگر نتایج دارد.

## کلمات کلیدی:

InP، نظریه تابعی چگالی، شبه پتانسیل ساختار نواری، نانو سیم

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1506054>

