

სიმკვრივის ფუნქციონალის თეორია პრაქტიკაში: Ga_2O_3 -ის ელექტრონული სტრუქტურა და ზონის საზღვრის ხასიათი Al_2O_3 მატრიცაში

ზაალ მაჭავარიანი, თამარ ჭელიძე^ბ

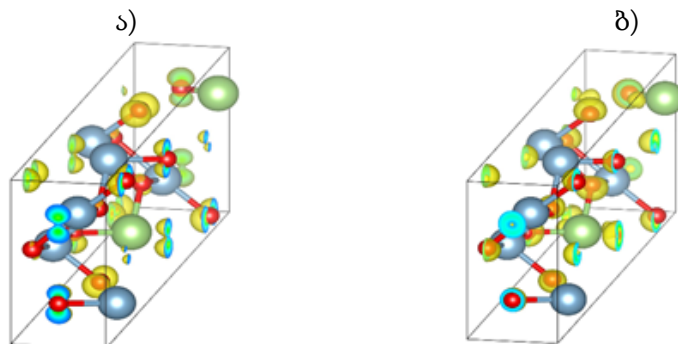
ელ-ფოსტა: zaal.machavariani@tsu.ge

^ა ატომისა და ატომბირთვის ფიზიკის კათედრა, ^ბ კონდენსირებული გარემოს ფიზიკის კათედრა, ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი, ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი, ი. ჭავჭავაძის გამზ. 3, 0179, თბილისი, საქართველო

იმის გაგება, თუ როგორ გავლენას ახდენს ლოკალური ქიმია და სტრუქტურა ელექტრონულ თვისებებზე, ფუნდამენტურად მნიშვნელოვანია ახალი თაობის ოპტოელექტრონული და სენსორული მასალების შესაქმნელად. ამ მოხსენებაში ჩვენ ვაჩვენებთ, თუ როგორ შეიძლება სიმკვრივის ფუნქციონალის თეორიის (DFT) გამოყენება ალუმინის ოქსიდის (Al_2O_3) მატრიცაში ჩაშენებული გალიუმის ოქსიდის (Ga_2O_3) რეგიონის ელექტრონული სტრუქტურის გასაანალიზებლად. აღნიშნული მოდელური სისტემა მოტივირებულია ულტრაიისფერი ფოტოდეტექტორებისა და „მზისგან ბრმა“ (solar-blind) მოწყობილობების პოტენციური გამოყენებით.

Al_2O_3 -ის მესრისგან მიღებული ქიმიურად ჩაშენებული, გალიუმით მდიდარი სუპერუჯრედიდან დაწყებული, ჩვენ ვატარებთ თვითშეთანხმებულ DFT გამოთვლებს ძირითადი მდგომარეობის ელექტრონული სიმკვრივის, მდგომარეობათა სრული და პროეცირებული სიმკვრივების (DOS/PDOS) და ზონის კიდებთან დაკავშირებული რეალური სივრცის მუხტის სიმკვრივების მისაღებად. ჩვენი შედეგები ავლენს მკაფიო აკრძალულ ზონას დაახლოებით 4.1 eV (PBE) სიდიდით, სადაც ვალენტური ზონის მაქსიმუმში დომინირებს O-2p მდგომარეობები, ხოლო გამტარებლობის ზონის მინიმუმში Ga-p მდგომარეობები. ორბიტალური დეკომპოზიცია აჩვენებს ღრმა Ga-d მდგომარეობებს ვალენტურ არეში და დამახასიათებელ ანტიბმულ მდგომარეობების თვისებებს აკრძალული ზონის ზემოთ.

მუხტის სიმკვრივის ვიზუალიზაცია ადასტურებს, რომ ყველაზე მაღალი დაკავებული ელექტრონული მდგომარეობები ლოკალიზებულია ძირითადად ჟანგბადზე, ხოლო ყველაზე დაბალი თავისუფალი მდგომარეობები — გალიუმის კვანძებზე. ეს მიგნებები ქმნის ერთიან სურათს ჩაშენებული ოქსიდური სისტემების ზონის კიდის ფიზიკის შესახებ და აყალიბებს ბაზისს ქიმიურად შეზღუდული კვანტური წერტილებისა და UV-აქტიური მასალების შემდგომი კვლევებისთვის.



ნახ 1: კონ-შამის მუხტის სიმკვრივის იზოზედაპირული წარმოდენა სავალენტო ზონის ზედა კიდეზე (VBM) ა) და გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდეზე (CBM) მდგომარეობებისათვის ბ). ა)-ში მუხტის სიმკვრივე ძლიერად არის ლოკალიზებული ჟანგბადის ატომებზე, მაშინ როცა გამტარების ზონის კიდეზე მუხტის სიმკვრივე ძირითადად გალიუმის ატომებზეა დაფიქსირებული. გალიუმის ატომები-მწვანე, ჟანგბადის ატომები-წითელი ბურთულები.