

در این پایان نامه سعی بر آن شده است تا خواص الکترونیکی و نوری ساختار های نامتجانس عمودی مبتنی بر مواد دوبعدی فسفرین سیاه - مولیبیدن دی سولفاید و فسفرین سیاه-تنگستن دی سولفاید با استفاده از روش های محاسباتی اصول اولیه مورد بررسی و محاسبه قرار بگیرد. این بررسی ها نشان می دهد که این ساختارها به لطف مقدار گپ مناسب در محدوده ی نور مرئی می توانند نامزد بسیار مناسبی برای به کار بردن در ادوات نوری مانند ادوات آشکار سازی فوتون و سلول های خورشیدی شوند. همچنین تفاوت در تابع کار این ساختار های نامتجانس، جدا سازی جفت اکترون-حفره های تولید شده بر اثر تحریک نوری را ساده تر می کند و این فرایند نیازمند انرژی کمتری است که این مهم می تواند نقش بسزایی در افزایش بازده ادوات نوری داشته باشد. همچنین نتایج محاسبات و شبیه سازی ها در این پروژه نشان می دهد که میزان جذب نور در این ساختار ها بسیار مطلوب است.

همچنین بررسی خواص الکترونیکی نشان می دهد این مواد از لحاظ الکترونیکی نیمه هادی هستند و حامل های آن ها به نسبت دیگر مواد قابلیت تحرک نسبتا بالایی دارند که این ویژگی ها می تواند کاربرد و اهمیت این مواد در آینده ی صنعت الکترونیک را پیشبینی کند. قابلیت مهندسی باند این ساختارها این ویژگی را فراهم میکند تا با توجه به کار بردهای خاص، ساختار های متفاوتی را نتیجه بگیریم. به طور مثال بند گپ توده ی این مواد به مقدار قابل ملاحظه ای کمتر از حالت های کم لایه این مواد است، همچنین با اعمال کرنش و میدان های الکتریکی می توان این مواد را از حالت گپ غیر مستقیم به مستقیم تغییر داد.

چکیده پایان نامه

از میان تمام ویژگی های ساختار های نامتجانس، به دلیل مشکلاتی که در محاسبه ضریب دی الکتریک ساختار های دوبعدی وجود دارد به این مهم یا کمتر پرداخته شده است یا محاسبات از دقت مناسبی برخوردار نیستند، از این رو در این پایان نامه سعی بر آن شده است با استفاده از روش های مختلف و پشت سر هم، این محاسبات و شبیه سازی ها به صورت خاص برای دو ساختار نامتجانس انجام شود. نتایج این شبیه سازی ها نشان می دهد با توجه به ناهمسانگردی این مواد، ضریب دی الکتریک و به تبع آن جذب و بازتاب در راستاهای مختلف X و Y و Z متفاوت است.

ضریب دی الکتریک، ساختار های نامتجانس، ماده ی دوبعدی، مولیبیدن دی سولفاید، فسفرین سیاه، تنگستن دی سولفاید، نظریه تابع چگالی

کلمات کلیدی

DFT, GW, Heterostructures

کلمات کلیدی انگلیسی