Journal of Advanced Materials and Technologies

Journal Homepage: www.jamt.ir

Materials and Energy Research Center

MERC

Original Research Article - Extended Abstract

Density of States and Electronic Structure of InSb with QUANTUM ESPRESSO Computational Approach

Shahin Atashbar Tehrani [1,2*], Nader Morshedian [3]

[1] *Assistant Professor, School of Particles and Accelerators, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), P.O.Box 19395-5531, Tehran, Iran.*

[2] *Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Nano and Bio Science and Technology, Persian Gulf University, P.O. Box: 75169, Bushehr, Iran.*

[3] *Assistant Professor, Plasma and Nuclear Fusion Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran.*

*Corresponding Author's Email: atashbar@ipm.ir (Shahin Atashbar Tehrani)

Paper History:
Received: 2024-11-06
Revised: 2024-12-28
Accepted: 2025-01-11

Keywords:
Total State Density,
Partial Density of States,
Band Structure,
Fermi Level

Abstract: In this study, the electronic properties of indium antimony have been comprehensively investigated using density functional theory for InSb semiconductors. The total Density of States (DOS) and Partial Density of States (PDOS) were analyzed to evaluate the contribution of individual atomic orbitals in the atomic structure. In addition, the band structure and electron scattering properties of InSb were determined. The Fermi levels in this crystal were also identified, and the calculations revealed significant features of its electronic structure, thereby providing a theoretical basis for further experimental research and wider technological applications. The current research investigated the band structure and Fermi levels of InSb crystal. The band structure examination shows that the energy of the band gap is approximately 0.17 electron volts, which aligns closely with the measurements obtained from the Hall effect. These calculations were performed using Quantum Espresso software, the results of which exhibited good agreement with the experimental results.

https://doi.org/10.30501/jamt.2025.485779.1309 URL: https://www.jamt.ir/article_214533.html

1. INTRODUCTION

Indium antimony is a compound semiconductor belonging to the group III-V of the periodic table, characterized by a long zinc-blende crystal structure. Examining the performance and electronic characteristics of this material is of particular importance. Due to its narrow band gap and high electron mobility, InSb is particularly considered for applications (Morisaki, 1970; Sugiyama & Kataoka, 1985; Alberga et al., 1982; Tukioka, 1991; Tanenbaum & Maita, 1953). It is widely used in infrared sensors, optoelectronic components, and devices with its electronic specifications as an important materl (Hilal et al., 2016) In these calculations, total Density of State (DOS) and Partial Density of State (PDOS) were determined using Density Functional Theory (DFT).

By assessing the charge carrier behavior near the Fermi level, innovative applications can be developed, and semiconductor devices can be improved. The analysis of the band structure of InSb provides the possibility to accurately determine the positions of the conduction and capacitance bands. Furthermore, calculation of the Fermi level is essential to predict the conduction behavior at different temperatures.

These calculations were conducted using Quantum Espresso software package (Giannozzi et al., 2009), a widely-used tool for quantum calculations in various fields of material science. The algorithm of the software is designed to simulate the electronic structure of materials, plane waves, and DFT. Performing based on DFT, this algorithm employ quasi-potential approach for simulation. Using Quantum Espresso facilitates faster calculations owing to its implementation of the full-potential approach, unlike codes that rely on pseudo-potentials such as WIEN2K.

It is particularly useful for simulations involving nanomaterials and crystals at the atomic scale. This software also supports parallel calculations, significantly enhancing its speed and efficiency in complex calculations. Quantum Espresso is widely used in scientific research fields such as solid-state physics, material science, and nanotechnology. Figure 1 illustrates the InSb crystal structure in the zinc-blende crystal structure.

Please cite this article as: Atashbar Tehrani, Sh. & Morshedian, N. (2024). Density of States and Electronic Structure of InSb with QUANTUM ESPRESSO Computational Approach. *Journal of Advanced Materials and Technologies*, Vol. 13, No. 3, 75-81. [in Persian]. https://doi.org/10.30501/jamt.2025.485779.1309.

2783-0829/© 2024 The Author(s). Published by MERC.
This is an open access article under the CC BY license (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/legalcode)

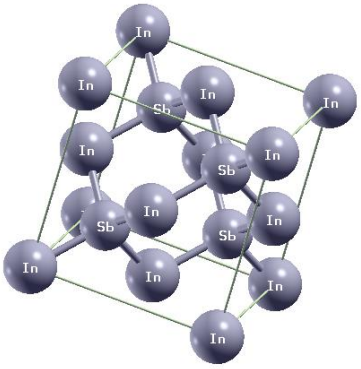


Figure 1. Crystal stracture of InSb

2. CONCLUSION

The Fermi level is a key concepts in solid state physics, which represents the highest energy level occupied by electrons in the ground state. The study of the Fermi level provides a better understanding of the behavior of charge carriers in regions close to the Fermi energy of InSb, particularly at low temperatures and under specific conditions such as strong magnetic field. The band structure and energy related to Density Functional Theory (DFT) were calculated by using Quantum Espresso software and complex quantum calculations. Upon using DFT, the value of electrons density within the crystal was approximated to determine the Fermi level position of a narrow band semiconductor. The Fermi level is located in the band gap, meaning the valence band is filled while the conduction band remains empty. This energy distribution causes the material to exhibit semiconductor behavior at room temperature.

Under certain conditions, such as the applied electric field or low temperature, it can produce free charge carriers. Due to the narrow gap width or energy gap in InSb, even small changes in the Fermi energy level can have significant effects on the number of electrons in the conduction band. This characteristic makes InSb a valuable material in advanced electronic and optoelectronic applications in the infrared detectors.

Based on the results from the Fermi level calculation and orbital structure analysis through the Quantum Espresso software, the material's potential for high-performance electronic devices and other properties can be investigated.

3. ACKNOWLEDGEMENT

This research was conducted with the support of IPM, and the authors express their gratitude to this institution, as well as to all the respected library staff of the Energy Materials Research Institute for their assistance in updating this manuscript.

REFERENCES

1. Morisaki, H. "Measurement of Hall effect in InSb by self-magnetic field." *Solid-State Electronics* 13,7 (1970): 911-918. https://doi.org/10.1016/0038-1101(70)90087-0
2. Sugiyama, Y., and S. Kataoka. "S/N study of micro-Hall sensors made of single crystal InSb and GaAs." *Sensors and Actuators* 8.1 (1985): 29-38. https://doi.org/10.1016/0250-6874(85)80022-6
3. Alberga, G. E., R. G. Van Welzenis, and W. C. De Zeeuw. "High electric-field hall effect measurements on n-type InSb at 77 K." *Applied Physics A* 27 (1982): 107-120. https://doi.org/10.1007/BF00615813
4. Tukioka, Kunio Tukioka Kunio. "The determination of the deformation potential constant of the conduction band in InSb by the electron mobility in the intrinsic range." *Japanese journal of applied physics* 30.2R (1991): 212. https://iopscience.iop.org/issue/1347-4065/30/2R
5. Tanenbaum, M., and J. P. Maita. "Hall effect and conductivity of InSb single crystals." *Physical Review* 91,4 (1953): 1009. https://doi.org/10.1103/PhysRev.91.1009
6. Muhammad Hilal, Bahroz Rashid, Shah Haider Khan, Afzal Khan, Investigation of electro-optical properties of InSb under the influence of spin-orbit interaction at room temperature,Materials *Chemistry and Physics*, 184, 41-48(2016) https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2016.09.009
7. Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... & Wentzcovitch, R. M. (2009) QUANTUM ESPRESSO: A Modular and Open Source Software Project for Quantum Simulations of Materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, *21*(39), 395502. http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502

فصلنامه مواد و فناوری‌های پیشرفته

Journal Homepage: www.jamt.ir

مقاله‌ی کامل پژوهشی

چگالی حالات و ساختار الکترونی InSb با رویکرد محاسباتی کوانتوم اسپرسو

شاهین آتشبار تهرانی [۱و۲*]، نادر مرشدیان [۳]

[۱] استادیار، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی، پژوهشکده‌ی ذرات و شتابگرها، تهران، ایران

[۲] استادیار، گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم و فناوری نانو و زیست، دانشگاه خلیج‌فارس، بوشهر، ایران

[۳] استادیار، پژوهشکده‌ی پلاسما و گداخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی ایران، تهران، ایران

تاریخچه‌ی مقاله:

ثبت اولیه: ۱۴۰۳/۰۸/۱۶

بازنگری: ۱۴۰۳/۱۰/۰۸

پذیرش قطعی: 1403/10/22

کلیدواژه‌ها:

چگالی حالت کل،

چگالی حالت جزئی،

ساختار نواری،

سطح فرمی

چکیده در این مطالعه با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی برای نیمه‌رسانای InSb به مطالعه و بررسی جامع ویژگی الکترونیکی ایندیم آنتیموان پرداخته شده است. چگالی حالات کل DOS و چگالی حالات جزئی PDOS بررسی شده است. همچنین، سهم اوربیتال‌های اتمی فردی در ساختار اتمی بررسی شد و، علاوه بر این، ساختار نواری و پخش الکترونی آن مشخص شده است. به‌علاوه، با محاسبات و شبیه‌سازی، سطوح فرمی در این بلور مشخص شده است و ویژگی‌های مهمی از ساختار الکترونیکی را پدیدار می‌کند. این نکات بستری را برای مبنای نظری به‌منظور تحقیقات تجربی بیشتر و کاربردهای فناورانه‌ی دقیق‌تر فراهم می‌کند. در این بررسی، ساختار نواری و سطوح فرمی بلور InSb بررسی شده است. بررسی ساختار نواری نشان می‌دهد که انرژی نوار ممنوعه در حدود ۰/۱۷ الکترون ولت است که با اندازه‌گیری‌هایی که از اثر هال به دست آمده هماهنگی خوبی دارد. در این محاسبات از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو استفاده شده است و نتایج به‌دست‌آمده با نتایج آزمایشگاهی مطابقت خوبی دارد.

https://doi.org/10.30501/jamt.2025.485779.1309 https://www.jamt.ir/article_214533.html

۱- مقدمه

ایندیم آنتیموان نیمه‌رسانایی ترکیبی از گروه III-V جدول تناوبی است و با ساختار بلوری زینک‌بلند Zinc Blend شکل ۱ نمایش داده شده است. به‌دلیل شکاف نواری باریک و تحرک بالای الکترونی، به این ماده توجه ویژه‌ای در کاربرد شده است (Morisaki, 1970; Sugiyama & Kataoka, 1985; Alberga et al., 1982; Tukioka, 1991; Tanenbaum & Maita, 1953). این ماده به‌عنوان حسگر مادون قرمز در قطعات اپتوالکترونیکی و دستگاه‌های نیمه‌رسانای پرسرعت استفاده می‌شود و ویژگی‌های الکترونیکی این ماده اهمیت خاصی دارد (Hilal et al., 2016). در این محاسبات، چگالی حالت کل (DOS) و همچنین چگالی حالت جزئی (PDOS) با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی محاسبه شده است. با ارزیابی رفتار حامل‌های بار در نزدیکی سطح فرمی در این ماده، می‌توان کاربردی نوآورانه برای آن ایجاد کرد. این امر خود به توسعه و بهبود دستگاه‌ها و تجهیزات دارای این‌گونه از نیمه‌هادی کمک می‌کند. تحلیل ساختار نواری این ماده امکان تعیین دقیق موقعیت باندهای رسانش و ظرفیت را فراهم می‌کند. همچنین، محاسبه سطح فرمی برای پیش‌بینی رفتار رسانایی در دماهای متفاوت ضروری است.

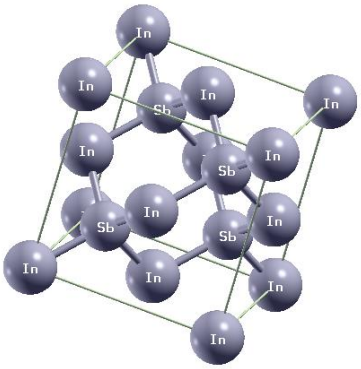
در این محاسبات از بسته‌ی نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو (Giannozzi et al., 2009) استفاده شده که برای انجام محاسبات کوانتومی در انواع حوزه‌های علم مواد به کار می‌رود. این نرم‌افزار به‌صورت گسترده برای شبیه‌سازی ساختار الکترونی مواد و بررسی امواج مسطح و DFT به کار می‌رود. این الگوریتم بر پایه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی برای شبیه‌سازی از رویکرد شبه‌پتانسیل بهره می‌گیرد. کوانتوم اسپرسو به‌دلیل استفاده از WIEN2K، برخلاف کدهایی مانند شبه‌پتانسیل‌ها، محاسبات را سریع‌تر انجام می‌دهد. به‌ویژه برای شبیه‌سازی‌های مربوط به نانومواد و بلورها در مقیاس اتمی مناسب است. این نرم‌افزار همچنین قابلیت استفاده از محاسبات موازی را دارد که سبب

عهده‌دار مکاتبات: شاهین آتشبار تهرانی

نشانی: ایران، تهران پژوهشگاه دانش‌های بنیادی IPM پژوهشکده‌ی **ذرات و شتابگرها، صندوق پستی:** 19395-5746، **تلفن:** 950 80 22 (21) 98+

پیام‌نگار: atashbar@ipm.ir

افزایش سرعت و کارایی آن در پردازش پیچیده می‌شود. کوانتوم اسپرسو در تحقیقات علمی مانند فیزیک حالت جامد، علم مواد و نانوفناوری به‌طور گسترده استفاده می‌شود.



شکل ۱. ساختار بلور InSb

۲- جزئیات محاسباتی

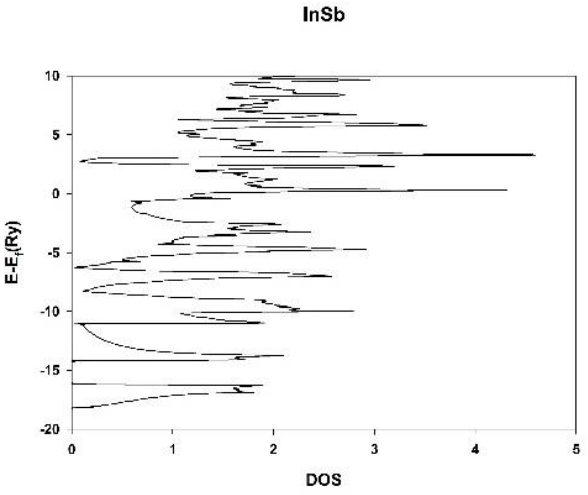
محاسبات با استفاده از روش انرژی کل شبه‌پتانسیل موج صفحه خودسازگار بر پایه‌ی روش تابعی چگالی در کد اسپرسو کوانتومی اجرا شده است. از این روش برای مطالعه‌ی خواص الکترونیکی گرافن با وارد کردن ناخالصی و بدون آن استفاده شده است (Mukherjee & Kaloni, 2012). پتانسیل هم‌بستگی تبادل با تقریب گرادیان تعمیم می‌یابد و با استفاده از عملکرد Perdew-Wang91(GGAPW91) (Perdew et al., 1992) تقریب زده می‌شود. موقعیت‌های اتمی و پارامترهای سلول در حالت پایدار با هم‌گرایی انرژی $۱۰^{-۹}$ الکترون ولت قابل‌دسترسی است. از برش تابع موج و چگالی به‌ترتیب ۲۵ و ۳۰ریدبرگ استفاده شده است. ابتدا ثابت شبکه‌ی a در فرایند کمینه‌سازی انرژی کل به دست می‌آید. برای انجام محاسبات ساختار بهینه‌شده، مختصات با استفاده از Monkhorst-Pack (Monkhorst & Pack, 1976) با kاش ۸×۸×۸ در توالی خود ناسازگار برای سازه‌های نواری انجام می‌شود.

۳- چگالی حالات کل (DOS)

یکی از ابزار مهم در بررسی خواص مهم و ویژگی‌های الکتریکی بلور ایندیم آنتیموان، مطابق شکل ۱، بررسی چگالی حالات کل است. در خصوص ایندیم آنتیموان چگالی حالت‌های کل نشان‌دهنده‌ی تعداد حالات الکترونی موجود در هر واحد انرژی برای (DOS) و پخش الکترون‌ها در سراسر ساختار نواری است. این اطلاعات توزیع الکترون‌ها در باند ظرفیت و رسانش را مشخص می‌کند.

همان‌گونه که در شکل ۲ ساختار اوربیتالی بلور InSb مشخص شده است، به‌دلیل شکافت نوار باریک در حدود ۰/۱۷ الکترون ولت، چگالی حالات الکترون‌ها نزدیک به سطح فرمی به‌سرعت افزایش می‌یابد. این امر نشان‌دهنده‌ی حضور قابل‌توجه حامل‌های بار در ناحیه‌ی انرژی‌های نزدیک به سطح فرمی است و سبب تحرک الکترونی بالا و رسانش قوی در دماهای پایین می‌شود. به‌دلیل چگالی بالای الکترون‌ها در اوربیتال‌های مربوط به اتم‌های ایندیم و آنتیموان، چگالی حالات نیز در ناحیه‌ای که باند ظرفیت بیشتر از باند هدایت است بیشتر می‌شود.

علاوه بر این، بررسی دقیق چگالی حالت‌ها در نزدیکی باند هدایت می‌تواند اطلاعاتی در خصوص خواص نیمه‌رسانایی و نحوه‌ی انتقال الکترون‌ها در این ماده ارائه دهد (Tehrani & Morshedian, 2024). همچنین، چگالی حالت کل می‌تواند به پیش‌بینی رفتار الکترونی این ماده در شرایط دمای بالا یا در حضور میدان مغناطیسی یا الکتریکی کمک کند.

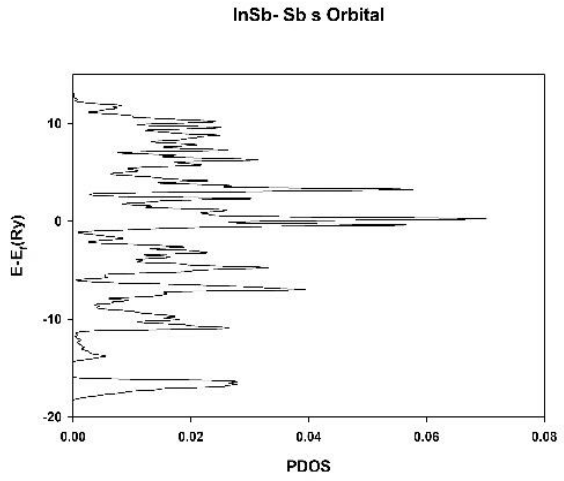


شکل ۲. شکل ساختار اوربیتالی بلور InSb

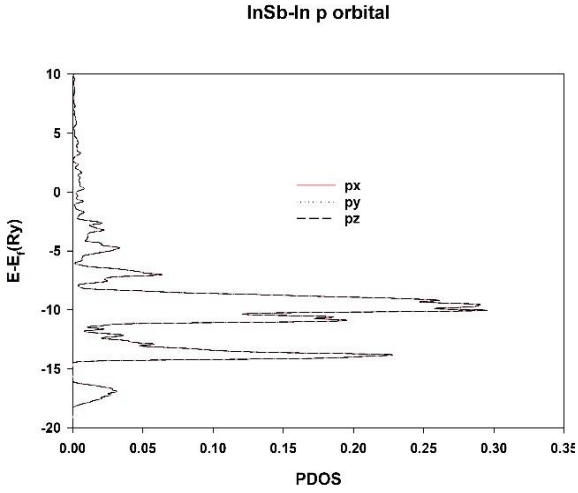
٤- چگالی حالات جزئی (PDOS)

توزیع الکترونی را برای هریک از اوربیتال‌های ایندیم و آنتیموان برای چگالی حالات جزئی (PDOS) می‌توان در شکل‌های ۳ و ٤ و ۵ بررسی کرد. در ایندیم آنتیموان در ساختار نواری، ویژگی‌های (s, p, d) جداگانه محاسبه می‌شود تا نقش اوربیتال‌های مختلف Sb این ماده، که نقش مهمی در تشکیل باند ظرفیت دارد، از نظر الکترونیکی بهتر درک شود. در اتم انتیموان اوربیتال‌های p و در اتم ایندیم اوربیتال s و p، الکترون‌های خارجی در بخش نوار ظرفیت قرار می‌گیرند و درنتیجه

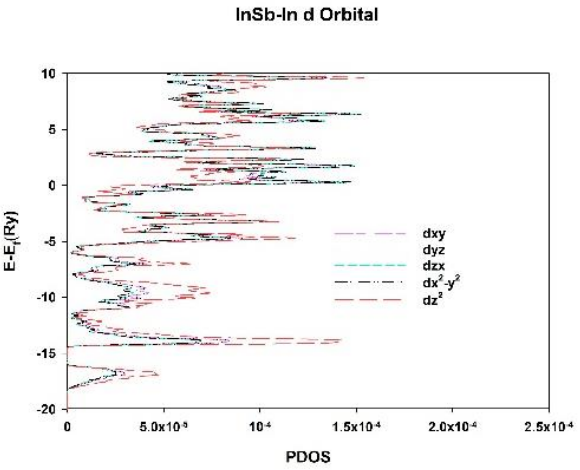
اوربیتال‌های بیشتری نیز در باند رسانش قرار خواهند داشت. این توزیع ترکیب اوربیتال‌های ایندیم آنتیموان را نشان می‌دهد و نقش هر اوربیتال در باندهای انرژی مختلف به‌تفکیک قابل‌مشاهده است. می‌توان نشان داد که کدام اوربیتال، در نواحی خاصی از ساختار نواری، بیشترین حالت‌های PDOS آنتیموان را دارد. باندهای پایین‌تر از سطح فرمی عمدتاً اوربیتال‌هایی هستند که نقش مهمی در تشکیل باند ظرفیت دارند. شایان ذکر است که این نتایج درک عمیقی از رفتار اوربیتال p و s در باند رسانش را القا می‌کند. ترکیبی از اوربیتال‌ها و نقش اوربیتال‌های خاص در حمل‌ونقل الکترون‌ها برای چگونگی شناخت تعامل اتم‌های مختلف در تشکیل ساختار الکترونی و همچنین بهبود در PDOS نیز مورد نظر است. این مطالعات برای طراحی دستگاه‌های نیمه‌هادی و اپتوالکترونیک بسیار مهم به شمار می‌رود.



شکل ۳. شکل اوربیتالی آنتیموان برای اوربیتال s



شکل ٤. شکل اوربیتالی ایندیم برای اوربیتال p



شکل ۵. شکل اوربیتالی ایندیم برای اوربیتال d

۵- ساختار نواری بلور InSb توسط کوانتوم اسپرسو

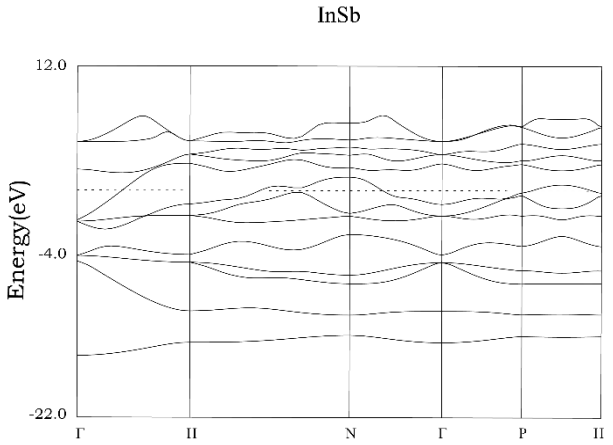
ساختار نواری یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های الکترونیکی در مواد نیمه‌رسانا به شمار می‌رود و نشان‌دهنده‌ی توزیع دقیق انرژی ساختار نواری در باند رسانش و ظرفیت است. نرم‌افزار اسپرسو بر اساس نظریه‌ی تابع چگالی (DFT) عمل می‌کند و محاسبات کوانتومی را برای تعیین موقعیت باندهای انرژی دارای شکاف نواری مستقیم انجام می‌دهد. معمولاً در نقطه‌ی Γ باند ظرفیت در پایین‌ترین نقطه‌ی باند رسانش است و، در نقطه‌ای مشخص از فضای k، این شکاف نواری در محدوده‌ی انرژی ۰/۱۷ الکترون ولت است. این امر نشان‌دهنده‌ی یک نیمه‌رسانای باریک برای کاربردهایی همانند آشکارساز مادون قرمز بسیار مناسب است.

شکل ٦ شکاف نواری کوچک قابلیت رسانش از باند ظرفیت و باند رسانش را نشان می‌دهد. این ساختار نواری به‌وسیله‌ی کوانتوم اسپرسو در اوربیتال p محاسبه شده است. باند ظرفیت بیشتر تحت‌تأثیر اوربیتال‌های p و s مختلف منطقه‌ی بریلوئن[1] اتم‌های ایندیم In است، درحالی‌که باند رسانش آنتیموان (sb) سهم بزرگی از رسانش InSb را دربر دارد. توزیع این باندها خواص نیمه‌رسانایی ماده را به‌خوبی توجیه و به درک رفتار الکترونی در شرایط مختلف کمک می‌کند.

در محاسبه‌ی ساختار نواری، دقت بالایی در مدل‌سازی و پیش‌بینی و ویژگی‌های کوانتوم اسپرسو به کار رفته و خواص الکترونیکی این ماده بررسی شده است. این نرم‌افزار از

1. Brillouin Zone

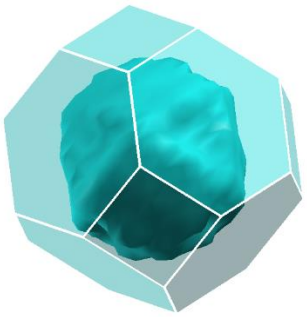
الگوریتم‌های پیشرفته برای حل معادلات کوانتومی استفاده می‌کند و نتایج آن به‌طور گسترده برای طراحی و بهینه‌سازی مواد در حوزه‌ی مختلف الکترونیک و اپتوالکترونیک استفاده می‌شود.



شکل ٦. ساختار نواری بلور InSb

٦- سطح فرمی بلور InSb با استفاده از کوانتوم اسپرسو

تحلیل ساختار الکترونی InSb ازطریق محاسبات چگالی حالت کل DOS و چگالی حالت جزئی PDOS به همراه ساختار نواری و سطح فرمی مطابق شکل ۷ بررسی شده است. چگالی حالت کل DOS، در نزدیکی سطح فرمی، تراکم قابل‌توجهی از حالت‌های الکترونی وجود دارد و، همان‌گونه که در بالا اشاره شد، به‌دلیل شکاف باریک گاف ۰/۱۷ الکترون ولت است. این ویژگی باعث تحرک بالای الکترون‌ها خواهد شد و رفتار مناسب الکتریکی ایندیم آنتیموان را خواهیم داشت. اندازه‌گیری شکاف انرژی به‌وسیله‌ی اندازه‌گیری اثر هال انجام می‌شود (Tehrani & Morshedian, 2024). همچنین، مقدار تحرک بالای این بلور در در اندازه‌گیری اثر هال آزمایش و وابستگی آن به دما به دست آمده است (Tehrani & Morshedian, 2024). ساختار نواری ایندیم آنتیموان نشان می‌دهد که در نقطه‌ی Γ یک شکاف نواری مستقیم داریم که این ماده را برای کاربردهایی مانند حسگرهای مادون قرمز مناسب می‌سازد. همچنین، سطح فرمی ایندیم آنتیموان، به‌دلیل موقعیت شکاف در نوار انرژی و تأثیر آن بر رفتار رسانایی، برای مطالعه در شرایط خاص مانند دمای پایین و میدان‌های قوی بسیار حائز اهمیت است.



شکل ۷. شکل سطح فرمی بلور InSb

۷- نتیجه‌گیری

سطح فرمی یکی از مفاهیم کلیدی در فیزیک حالت جامد است و بالاترین سطح انرژی اشغال‌شده به‌وسیله‌ی الکترون‌ها در حالت پایه را نشان می‌دهد. مطالعه‌ی سطح فرمی به ما کمک می‌کند تا رفتار حامل‌های بار در نواحی نزدیک به انرژی فرمی InSb را در دمای پایین و شرایط خاص مانند میدان مغناطیسی قوی درک کنیم. با استفاده از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو و محاسبات کوانتومی پیچیده، ساختار نواری و انرژی مربوط با DFT محاسبه شده است. با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی، مقدار چگالی الکترون‌های درون بلور برآورد و از آن برای تعیین موقعیت سطح فرمی یک نیمه‌رسانای باریک باند استفاده شده است. سطح فرمی در شکاف نواری قرار دارد، یعنی انرژی موجود در بلور InSb برای باند ظرفیت پُر شده است و باند رسانش خالی است. این توزیع انرژی سبب می‌شود ماده در دمای اتاق به‌صورت نیمه‌رسانا عمل کند و در شرایط خاص (مانند اعمال میدان الکتریکی یا دمای پایین) بتواند حامل‌های بار آزاد تولید کند. به‌دلیل باریک بودن پهنای شکاف یا گاف انرژی در InSb، تغییرات کوچک سطح انرژی فرمی می‌تواند تأثیرات چشمگیری بر تعداد الکترون‌های موجود در باند رسانش بگذارد. این امر آن را به یک ماده ارزشمند در کاربردهای الکترونیکی و اپتوالکترونیکی پیشرفته در آشکارسازهای مادون قرمز تبدیل می‌کند. با استفاده از روش کوانتوم اسپرسو در این پژوهش، می‌توان قابلیت عملکرد دستگاه‌های الکترونیکی و دیگر شاخص‌های مورد نظر را بررسی و حسگرهای دقیق بر پایه‌ی این ماده را تولید کرد. یکی از کارهای جدیدی را که توسط کوانتوم اسپرسو انجام شده است می‌توان در منبع (Gholami et al., 2024) پیدا کرد.

۸- سپاسگزاری

این پژوهش با پشتیبانی مرکز فیزیک نظری انجام شده است و نویسندگان مقاله کمال تشکر را از این مرکز ابراز می‌دارند. همچنین، از کلیه‌ی کارکنان محترم کتابخانه پژوهشگاه مواد انرژی در امر به‌روزرسانی این مقاله نهایت سپاسگزاری را داریم.

مراجع

1. Alberga, G. E., Van Welzenis, R. G., & De Zeeuw, W. C. (1982). High electric-field hall effect measurements on n-type InSb at 77 K. *Applied Physics A, 27*, 107-120. https://doi.org/10.1007/BF00615813
2. Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... & Wentzcovitch, R. M. (2009) QUANTUM ESPRESSO: A Modular and Open Source Software Project for Quantum Simulations of Materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, *21*(39), 395502. http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502
3. Gholami, M., Hajiahmadi, Z., & Naghavi, S. S. (2024). Unlocking the potential of coinage-based quaternary chalcogenides for thermoelectricity. *Journal of Materials Chemistry A, 12*(10), 5846-5857. https://doi.org/10.1039/D3TA07747K
4. Hilal, M., Rashid, B., Khan, S. H., & Khan, A. (2016). Investigation of electro-optical properties of InSb under the influence of spin-orbit interaction at room temperature, Materials. *Chemistry and Physics*, *184*, 41-48. https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2016.09.009
5. Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). Special Points for Brillouin Zone Integrations. *Physical Review B: Solid State, 13*, 5188-5192. http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188
6. Morisaki, H. (1970). Measurement of Hall effect in InSb by self-magnetic field. *Solid-State Electronics*, *13*(7), 911-918. https://doi.org/10.1016/0038-1101(70)90087-0
7. Mukherjee, S., & Kaloni, T. P. (2012). Electronic Properties of Boron- and Nitrogen-Doped Graphene: *A First-Principles Study. Journal of Nanoparticle Research*, *14*, 1059. http://dx.doi.org/10.1007/s11051-012-1059-2
8. Perdew, J., Chevary, J., Vosko, S., Jackson, K., Pederson, M., Singh, D., & Fiolhais, C. (1992). Solids and Surfaces: Applications of the Generalized Gradient Approximation for Exchange and Correlation. *Physical Review B, 46*, 6671-6687. http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.46.6671
9. Sugiyama, Y., & Kataoka, S. (1985). S/N study of micro-Hall sensors made of single crystal InSb and GaAs. *Sensors and Actuators*, *8*(1), 29-38. https://doi.org/10.1016/0250-6874(85)80022-6
10. Tanenbaum, M., & Maita, J. P. (1953). Hall effect and conductivity of InSb single crystals. *Physical Review*, *91*(4), 1009. https://doi.org/10.1103/PhysRev.91.1009
11. Tehrani, S. A., & Morshedian, N. (2024). Study of Electrical Property of Single Crystal InSb. *JAMT*, *13*(2), 53-62. [In Persian]. https://doi.org/10.30501/jamt.2024.447841.1298
12. Tukioka, K. T. K. (1991). The determination of the deformation potential constant of the conduction band in InSb by the electron mobility in the intrinsic range. *Japanese journal of applied physics*, *30*(2R), 212. https://iopscience.iop.org/issue/1347-4065/30/2R