بیست و یکمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و هفتمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۲۳ تا ۲۵ دی ماه ۱۳۹۳، دانشگاه شهید بهشتی

بررسی وابستگی خواص الکترونیکی و اپتیکی ZnSe به فشار بوسیله امواج تخت بهبود یافته خطی

آرش عبدالهی[۱]، سید مقصود گلزان[۲] و کوروش آقایار[۳]

دانشگاه ارومیه، دانشکده علوم، گروه فیزیک

چکیده – وابستگی خواص الکترونی و اپتیکی سلنید روی به فشار بوسیله نظریه تابعی چگالی و توسط روش موج تخت بهبود یافته خطی مطالعه شده است. با استفاده از تابعی *PBESOL*، قسمتهای حقیقی و موهومی تابع شکست، تابع دی الکتریک، تابع رسانندگی اپتیکی و ضریب شکست محاسبه شده اند. نتایج بدست آمده نشان میدهد که گاف انرژی *ZnSe* با افزایش فشار افزایش می یابد. تغییرات گاف انرژی، به خصوص در فشارهای بالا، غیر خطی است. تمام خصوصیات اپتیکی در فشار های مختلف تا ۱۴ گیگاپاسکال محاسبه و با یکدیگر مقایسه شده اند.

کلید واژه- نظریه تابعی چگالی، خواص الکترونیکی، خواص اپتیکی، فشار

A study of the Pressure dependence of electronic and optical properties of ZnSe under LAPW method

Arash Abdollahi[1], Seyed Maghsoud Gholzan[2], Korosh Aghayar[3]

Department of physics, Faculty of Science, Urmia University, Urmia, Iran

Abstract- The pressure dependence of electronic and optical properties of zinc selenide have been studied by using density functional theory and linear augmented plane-wave method. The real and imaginary parts of refractive index, dielectric function, optical absorption coefficient and reflectance have been calculated by using PBESOL functional. The obtained results show that the gap energy of ZnSe icreases nonlinearly with pressure. All of the optical properties at different pressures up to 14 GPa have been calculated and compared with each other.

Keywords: Density functional theory, electronic properties, optical properties, pressure

[1] arash_abdollahi60@yahoo.com

[2] m.golzan@urmia.ac.ir

[3] k.aghayar@urmia.ac.ir

[Downloaded from opsi.ir on 2025-11-01]

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

۱- مقدمه

سلنید روی (ZnSe) به عنوان نیم رسانای گروه ۶-۲ و با داشتن گاف انرژی در حدود ۲/۷ eV ، کاربردهای زیادی در تجهیزات اپتوالکتریکی، آشکارسازها، لیزرهای گسیلنده نوری سبز-آبی، لیزرهای دیودی و سنسورها دارد [۱] سلنید روی به دلیل داشتن خواص اپتیکی ویژه، مانند جذب پایین در گستره وسیعی از طول موج، خاصیت پاد بازتابی در ناحیه فرو سرخ و داشتن ضریب بازتاب بالا برای سایر طول موجها، در سلولهای خورشیدی مورد استفاده قرار می گیرد [۲].

خصوصیات الکترونی کلیه مواد، در مقابل تغییرات شرایط محیطی، از جمله فشار، دستخوش تغییراتی می گردد. این، به دلیل تغییر در فواصل بین اتمی و پارامتر های شبکه بلوری است. با توجه به گاف انرژی نسبتا کوچک در مواد نیمه رسانا، تاثییر این تنش ها در تغییر انرژی فرمی و پهنای گاف از اهمیت بیشتری برخوردار است، به نحوی که می توان، با تغییرات اندک در فشار، خصوصیات رسانندگی این مواد را به نحوی که مطلوب استفاده های صنعتی باشد بهبود بخشید. سلنید روی در دمای اتاق و در فشارهای کمتر از ۱۵ گیگا پاسکال (GPa)، در فاز zinc blende موجود است[۳].

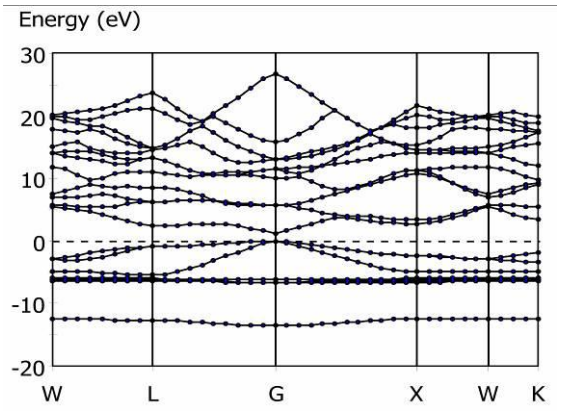
۲- روش محاسبات

تمامی محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT) [۴] انجام گرفته است، که امروزه از اهمیت بسیاری در امر محاسبات خواص مواد و ساختارهای گوناگون برخوردار است. برای محاسبه خواص شبکه بلوری از روش امواج تخت بهبود یافته خطی (LAPW) [۵] بهره گرفته شده است. برای محاسبه انرژی بر هم کنشی الکترونها از تابعی جدید تبادلی-همبستگی PBEsol [۶] تحت تقریب گرادیان تعمیم یافته [۷] استفاده شده است. این تابعی نسخه اصلاح شده تابعی PBE جهت تخمین دقیق تر پارامترهای شبکه و طول پیوندها است که برای ساختار جامد تنظیم شده است. محاسبات الکترونی و اپتیکی به کمک نرم افزار محاسباتی WIEN2k [۸] صورت گرفته است. برای محاسبه تاثیرات فشار خارجی بر ساختار ZnSe، پارامترهای شبکه و جایگاههای اتمی چنان تغییر داده میشود که حاصل تقسیم نیروی وارد بر هر صفحه بلوری بر مساحت صفحه، یا به عبارت دیگر فشار استاتیکی وارد بر آن با فشار وارد بر دیگر صفحه ها برابر و مقدار فشار با مقدار تعیین شده برابر گردد. پارامترهای به کار رفته در تمامی محاسبات مشابه بوده و به شرح زیر هستند:

مقدار انرژی جنبشی قطع موج تخت، ۱۲۰ ریدبرگ (Ry) منظور شده است و انتگرال گیری بر روی منطقه بریلوئن با بردارهای شبکه وارون در یک شبکه (۸×۸×۸) انجام شده است. شعاع کره موفین تین (RMT) برای اتم های تشکیل دهنده ی این ترکیب به ترتیب برای سلنیم (Se) و روی (Zn)، ۱/۶۵ و ۲/۲ واحد اتمی منظور شده است و RMT×kmax برابر ۸ انتخاب شده است. برای رسیدن به مقادیر دقیقی از انرژی سیستم و نیروهای بین مولکولی که نقش مهمی در برآورد فشار وارد بر ساختار دارند، مقدار بازه همگرایی انرژی $۱۰^{-۱۰}$ ریدبرگ و بازه همگرایی نیرو $۱۰^{-۶}$ ریدبرگ بر واحد اتمی انتخاب شده است.

۲-۱- نتایج محاسبات

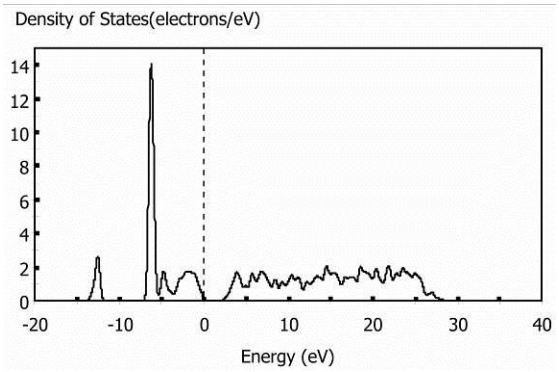
نتایج مربوط به ساختار نواری ZnSe، در فشار صفر در شکل ۱ آمده است. پهنای مابین بالاترین نوار اشغال شده والانس و پایین ترین نوار اشغال نشده رسانش، گاف انرژی است. در شکل تمامی مقادیر انرژی نسبت به انرژی فرمی ترسیم شده تا درک مناسبتری از فواصل بین نواری حاصل شود. شکل ۲ چگالی اشغال ترازهای انرژی الکترونی را نشان می دهد. همانطور که از شکل پیداست فاصله مربوط به گاف انرژی بصورت ناحیه ای با چگالی اشغال صفر دیده می شود.



شکل ۱: ساختار نواری انرژی ZnSe، خط چین نشان

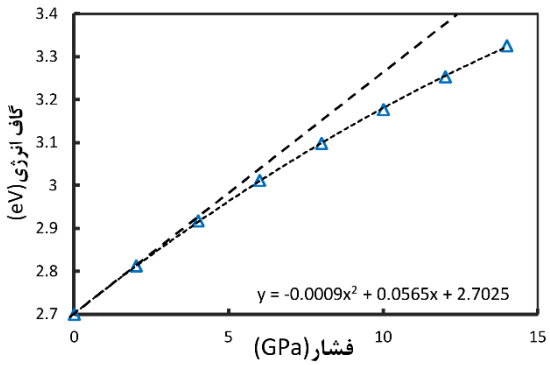
[Downloaded from opsi.ir on 2025-11-01]

دهنده محل انرژی فرمی است.



شکل ۲: چگالی حالتهای الکترونی ZnSe، خط چین نشان دهنده محل انرژی فرمی است.

برای محاسبه تاثیر افزایش فشار، ساختار ZnSe در حضور عامل فشار خارجی که بطور همگن در جهات صفحات بلوری ساختار مکعبی آن، وارد شده است، بهینه سازی شد. ساختارهای بهینه شده برای محاسبه خواص الکترونیکی و اپتیکی به کار رفتند و نتایج بر حسب فشار خارجی بدست آمد. در شکل ۳، وابستگی گاف انرژی ZnSe به فشار خارجی، نشان داده شده است.

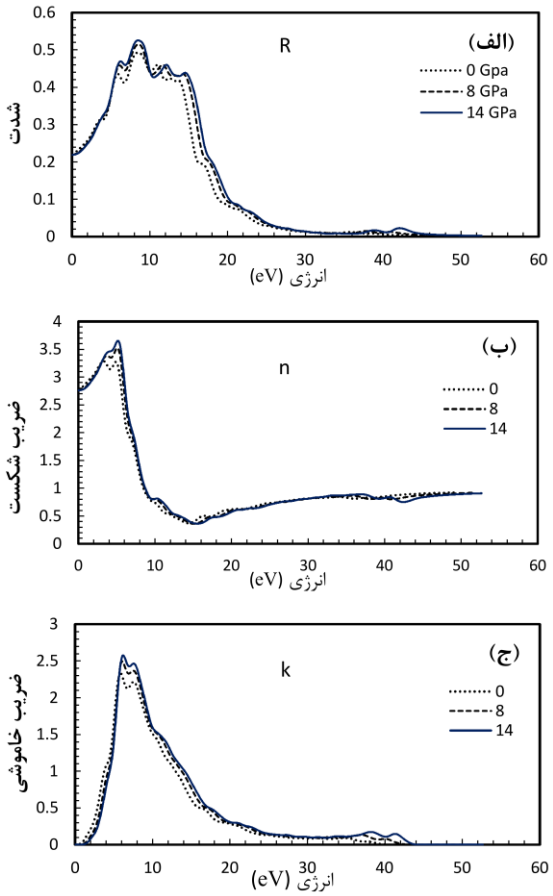


شکل ۳: نمودار تغییرات مقدار گاف انرژی ZnSe بر حسب فشار

با در نظر داشتن این نکته که به دلیل چشمپوشی از اندرکنشهای چند ذره ای در نظریه تابعی چگالی تخمین این نظریه در خصوص گاف انرژی معمولا کمتر از مقدار واقعی است، مقادیر گاف طوری تغییر مقیاس یافته است که مقدار آن در فشار صفر با مقدار تجربی منطبق شود. همانطور که از شکل پیداست، مقدار پهنای گاف انرژی با افزایش فشار بطور غیر خطی افزایش می یابد. به نحوی که با افزایش فشار تا ۱۰ گیگاپاسکال، مقدار پهنای گاف انرژی به اندازه ۰/۵ eV افزایش می یابد. نحوه این تغییرات، غیر خطی است و از فرم

$$gap = -9\times10^{-4} P^2 + 0.0565 P + 2.7025 \qquad (۱)$$

پیروی می کند. کلیه خواص اپتیکی ساختار، ناشی از امکان گذارهای بین نواری و درون نواری و فاصله مابین نوارهاست، بنابراین تغییرات فشار نقش مستقیمی در تغییر در نتایج محاسبات خواص اپتیکی خواهد داشت. نتایج محاسبات برای توابع بازتاب، ضریب شکست و خاموشی در شکل ۴، رسانندگی اپتیکی در شکل ۵ و تابع دی الکتریک در شکل ۶ آمده است.

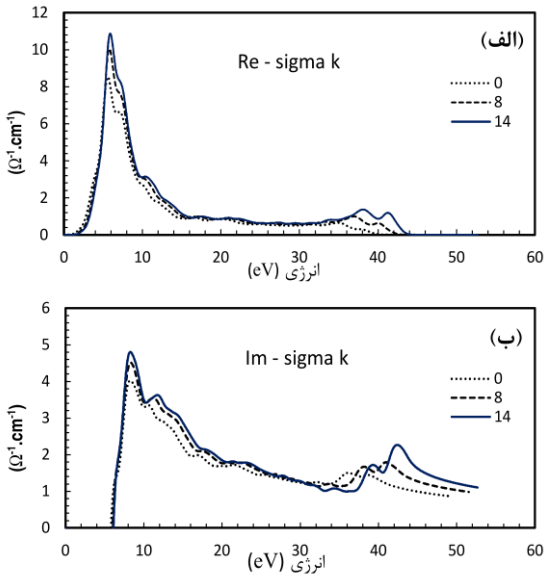


شکل ۴: تغییرات تابع بازتاب (الف)، ضریب شکست (ب) و ضریب خاموشی (ج) بر حسب فشار

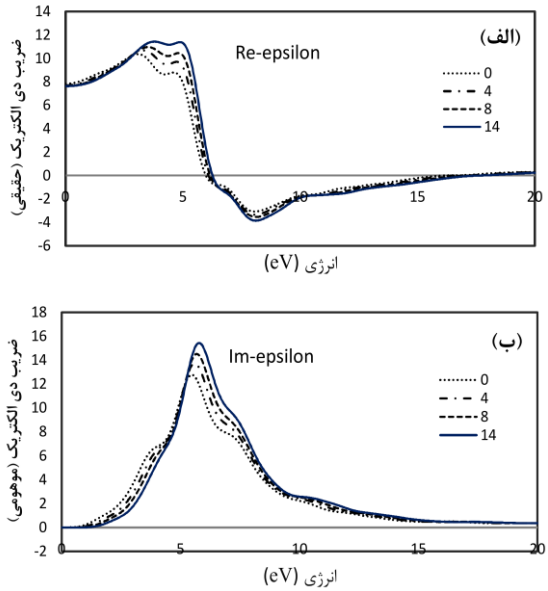
همانطور که در شکل ها دیده می شود، با افزایش فشار، رفتار توابع اپتیکی چه در بازه انرژی فوتون و چه در شدت دچار تغییرات محسوسی می گردد. به عنوان مثال، نتایج نشان می دهد مقدار انرژی قطع رسانندگی اپتیکی در فشار ۱۴ گیگاپاسکال، به اندازه ۴ eV بیشتر از مقدار آن

[Downloaded from opsi.ir on 2025-11-01]

در فشار صفر است. نتایج محاسبه تغییرات ضریب دی الکتریک نشان می دهد، با وجود افزایش مقدار این کمیت در اثر افزایش فشار، رفتار ضریب دی الکتریک در فرکانسهای پایین کمتر دچار تغییر میگردد اما در فرکانسهای بالاتر فرکانس پیکها دچار تغییراتی قابل توجه می گردد.



شکل ۵: تغییرات قسمت حقیقی (الف) و قسمت موهومی (ب) تابع رسانندگی الکتریکی بر حسب فشار



شکل ۶: تغییرات قسمت حقیقی (الف) و قسمت موهومی (ب) تابع دی الکتریک بر حسب فشار

۳- نتیجه‌گیری

در این مطالعه با بکارگیری نظریه تابعی چگالی و تقریب گرادیان تعمیم یافته، خواص الکترونی و اپتیکی ساختار ZnSe محاسبه شده است. با توجه به اهمیت تغییرات گاف انرژی در تعیین خصوصیات رسانندگی نیمه رساناها، و اهمیت فراوان صنعتی این خصوصیات، تاثیر فشار خارجی بر تغییرات پهنای گاف انرژی و انرژی فرمی، مورد محاسبه قرار گرفته است. نتایج نشان می دهد که تغییرات فشار خارجی حتی در مقیاس محدود نقش تعیین کننده ای، در کنترل خواص رسانندگی ZnSe خواهد داشت، به گونه ای که با افزایش فشار تا ۱۰ گیگاپاسکال ، پهنای گاف انرژی به اندازه ۰/۵ eV افزایش می یابد. نحوه این تغییرات، غیر خطی است و از فرم

$$gap = -9\times10^{-4} P^2 + 0.0565 P + 2.7025$$

پیروی می کند. همچنین وابستگی تمامی توابع اپتیکی به فشار، محاسبه شده است و نتایج، حاکی از وابستگی محسوس این توابع به عوامل تنش خارجی است.

مراجع

[1] Minqiang W., Yaohui X., Zhonghai L., Xiao H., Jianping L., Xi Y., Preparation and optical properties of silica gel–glass dopedwith ZnSe nanoparticles, Ceramics International 34 (2008) 1077–1080.

[2] Rumberg A., Sommerhalter Ch., Toplak M., Jäger-Waldau A., Lux-Steiner M.Ch., ZnSe thin films grown by chemical vapour deposition for application as buffer layer in CIGSS solar cells, Thin Solid Films 361-362 (2000) 172-176.

[3] Karzel H., Potzel W., Kofferlein M., Schiessl W., Steiner M., Hiller U., Kalvius G. M., Mitchell D. W., Das T. P., Blaha P., Schwarz K., Pasternak M. P., Lattice dynamics and hyperfine interactions in ZnO and ZnSe at high external pressures, Phys. Rev. B 53 (1996) 11425.

[4] Hohenberg P., Kohn W., Inhomogeneous Electron Gas, Phys. Rev. 136 (1964) B864-871.

[5] Singh, D. J., Planewaves, pseudopotentials and the LAPW method , Kluwer Academic Publisher, Boston, Dordrecht, London, 1994.

[6] Perdew, J. P., Ruzsinszky, A., Csonka, G. I., Vydrov, O. A., Scuseria, G. E., Constantin, L., Zhou, X., Burke, K., Restoring the Density-Gradient Expansion for Exchange in Solids and Surfaces, Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 136406.

[7] Wu, Z., Cohen, R. E., More accurate generalized gradient approximation for solids, Phys. Rev. B 73 (2006) 235116.

[8] Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G.K.H., Kvasnicka, D., Luitz, J., An augmented plane wave plus local orbitals program For calculating crystal properties : WIEN2k user's manual, Vienna University of Technology, Austria 2001.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-11-01]