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 ویژگی های اپتیکی ترکیب $Zn_{1-x}Be_xSe$ با استفاده از نظریه ی تابعی چگالی

زینب خلیلیان، فرزاد احمدیان

گروه فیزیک،دانشکده علوم دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهرضا،شهرضا

چکیده –در این مطالعه، با استفاده از روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی ، خواص اپتیکی آلیاژ $Zn_{1-x}Be_xSe$ را در فاز بلند روی به ازای غلظت های مختلف بررسی کرده ایم. ویژگی های اپتیکی از جمله ثابت دی الکتریک، ضریب شکست، تابع اتلاف انرژی و... محاسبه و با حالت های خالص آنها مقایسه گردیده است. نتایج محاسبات نشان می دهد حالت های p اتم Se نقش حالت های اولیه و حالت های $4s$ اتم Zn و s و p اتم های Be و Se نقش حالت های نهایی را در گذارهای اپتیکی بازی می کنند.

کلید واژه- ثابت دی الکتریک ، ضریب شکست ، نظریه تابعی چگالی ،$Zn_{1-x}Be_xSe$

Investigation of the optical properties of $Zn_{1-x}Be_xSe$ using density functional theory

Zeinab khalilian,Farzad ahmadian

Physics Groups, Department of science, Islamic Azad University, Shahreza branch,Shahreza

Abstract- In this study, using the full-potential linearized plane wave within density functional theory, the optical properties of the alloy $Zn_{1-x}Be_xSe$ zinc blende phase for the different concentrations have been investigated. Optical properties such as dielectric constant, refractive index, and the energy loss function... Pure modes are calculated and compared. The results show that the initial state of modes p Se atoms and 4s Zn atoms and the s and p states , Be and Se atoms the final state of the optical transitions are playing.

Keywords: dielectric constant, refractive index, density functional theory, $Zn_{1-x}Be_xSe$

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

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-01]

مقدمه

نیم رساناهای II-VI به دلیل گاف پهن نواری و قابلیت کاربرد برای قطعات اپتوالکترونیک بسیار مورد توجه قرار گرفته اند. انرژی گاف آن ها بین ۱تا ۳ الکترون ولت می-باشد، از این رو ابزار مناسبی برای این قطعات در ناحیه مرئی طیف هستند.[1] سه مشکل عمده برای قطعات نیم رسانای با گاف پهن، سطوح ناخالصی، ایجاد ثابت های اهمی زیاد و نیمه عمر آن هاست. برای حل این مشکلات از آلیاژهای سه تایی، چهارتایی و ... استفاده می کنیم که به صورت لایه اولیه، لایه محافظ، مواد موثر قطعات اپتوالکترونیک و غیره به کار می روند.

با وجود کاربردهای فراوان این مواد در صنایع اپتیکی متاسفانه تا کنون یک مطالعه نظری جامع در خصوص ویژگی های اپتیکی آن ها گزارش نشده است. به همین منظور در کار حاضر، به بررسی ویژگی های اپتیکی این مواد با اعمال مقادیر مختلف ناخالصی می پردازیم.

روش محاسبات

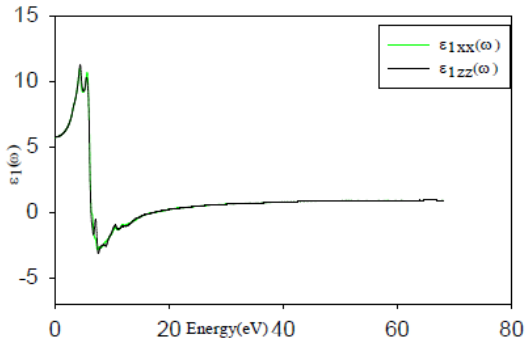
محاسبات به روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل (FPLAPW) در چارچوب نظریه ی تابعی چگالی توسط کد محاسباتی Wien2k و تقریب EV-GGA انجام شده است[2].در این محاسبات پارامتر $R_{mt}K_{max}$ (R_{mt} شعاع کوچکترین کره مافین-تین و K_{max} بردار موج قطع است.) برابر ۸، بیشینه عدد کوانتومی تکانه زاویه ای برای بسط تابع موج درون کره های اتمی برابر ۱۰ و بردار موج قطع برای بسط پتانسیل و چگالی بار $G_{max}=12$ در نظر گرفته شده است.

نتایج و بحث

ساختار بلوری ترکیبات دوتایی ZnSe وBeSe بلند روی با گروه فضایی $(F\bar{4}3m)$ می باشد که در یاخته بسیط آن دو اتم پایه یکی در مکان (۰،۰،۰) و دیگری در مکان (۱/۴، ۱/۴، ۱/۴) قرار گرفته است. برای مقدار ۰/۲۵ و $x =$ ۰/۷۵ ساختار، شبکه مکعبی ساده شامل ۸ اتم با گروه فضایی $(P\bar{4}3m)$ می شود. به ازای مقدار $x =$۰/۵ ساختار، یک یاخته تتراگونال شامل ۴ اتم با گروه فضایی $(P\bar{4}m2)$ است. برای محاسبه خواص ساختاری آلیاژ $Zn_{1-x}Be_xSe$ ابتدا مقادیر انرژی برحسب حجم را برای هر ساختار محاسبه و سپس آن را با معادله حالت مورناگون برازش می دهیم. پارامتر شبکه بهینه محاسبه شده برای این آلیاژ به ازای مقادیر ۱ و ۰/۷۵ ، ۰/۵ ، ۰/۲۵ ، ۰ = x به ترتیب برابر ۵/۷۳ ، ۵/۶۳، ۵/۵۱، ۵/۳۶ و۵/۱۸ محاسبه شده است. مقادیر تجربی پارامتر شبکه برای ترکیبات دوتایی ZnSe وBeSe به ترتیب برابر ۵/۶۶Å [3] و۵/۱۳ Å [4] می باشد که تطابق بسیار خوبی با پارامترهای شبکه محاسبه شده دارد. برای ترکیبات سه تایی هیچ نتیجه تجربی گزارش نشده است.

ویژگی های اپتیکی مواد با محاسبه تابع دی الکتریک $\varepsilon(\omega)$ بررسی می شود. تابع دی الکتریک دارای دو سهم درون نواری و بین نواری است که سهم درون نواری برای فلزات بکار می رود. گذارهای بین نواری به دو نوع گذارهای مستقیم و غیرمستقیم تقسیم می شوند. در اینجا برای محاسبه خواص اپتیکی از گذارهای بین نواری غیرمستقیم که شامل پراکندگی فونون است و همچنین دارای سهم اندکی در تابع دی الکتریک است چشم پوشی می کنیم. برای محاسبه سهم بین نواری مستقیم از سهم موهومی تابع دی الکتریک، بایستی روی همه گذارهای ممکن از حالت های اشغال شده به حالت های اشغال نشده جمع بسته شود. به دلیل تشابه نتایج در ادامه، خواص اپتیکی آلیاژ $Zn_{0.5}Be_{0.5}Se$ بررسی می شود. با توجه به ساختار تتراگونال به ازای $x =$ ۰/۵ ، یک ناهمسانگردی بین طیف های محاسبه شده در راستای x وz مشاهده می شود. در شکل ۱، سهم حقیقی تابع دی الکتریک برای ترکیب $Zn_{0.5}Be_{0.5}Se$ که با بکارگیری تبدیلات کرامرز-کرونیگ محاسبه می شود، نشان داده شده است. ساختار اصلی در این منحنی عبارتست از: دو پیک در مکان های تقریبی ۴/۳ و ۵/۷ (۴/۴ و۵/۶) الکترون ولت ، یک شیب در حال کاهش تا انرژی ۶/۳ (۶/۷) ، یک کمینه در ۷/۰۵ (۷/۷) برای $\varepsilon_{1xx}(\omega)$ ($\varepsilon_{1zz}(\omega)$) و به دنبال آن یک افزایش به طرف صفر در انرژی های بالاتر مشاهده می شود. ثابت دی الکتریک محاسبه شده برای آلیاژ $Zn_{1-x}Be_xSe$ به ازای مقادیر ۱ و ۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵ ، ۰ = x به ترتیب برابر با ۶/۲ ، ۵/۹، ۵/۷، ۵/۵، ۵/۳ می باشد. مشاهده می شود که با افزایش غلظت اتم بریلیوم ثابت دی الکتریک کاهش پیدا می کند.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-01]

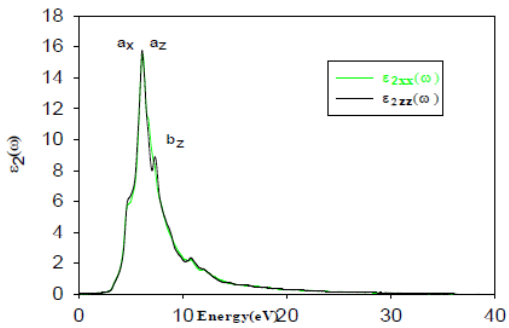


شکل ۱: سهم حقیقی تابع دی الکتریک آلیاژ $Zn_{0.5}Be_{0.5}Se$

سهم موهومی تابع دی الکتریک $\varepsilon_2(\omega)$ برای ترکیب $Zn_{0.5}Be_{0.5}Se$ در شکل ۲ نشان داده شده است. ساختارهای اصلی در $\varepsilon_{2xx}(\omega)$ و $\varepsilon_{2zz}(\omega)$ به ترتیب با حروف a_x و a_z و b_z نامگذاری شده اند. مطابق آنالیز نواری صورت گرفته حالت های ۳p اتم Se به عنوان حالت های ابتدایی و حالت های s و p اتم های Be و Se و s اتم Zn به عنوان حالت نهایی در گذار اپتیکی نقش عمده را به عهده دارند و منشا ساختارهای a_x و a_z و b_z ناشی از این انتقال ها است.

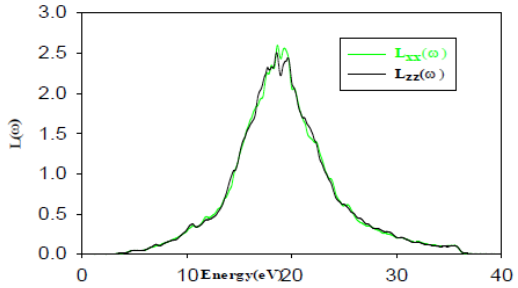
جدول ۱: مقادیر ثابت دی الکتریک استاتیک برای آلیاژ $Zn_{1-x}Be_xSe$

x	ثابت دی الکتریک کار حاضر	ثابت دی الکتریک نتایج دیگران
۰	۶/۲	۶/۴[۵]
۰/۲۵	۵/۹	
۰/۵	۵/۷	
۰/۷۵	۵/۵	
۱	۵/۳	۵/۶[۶]

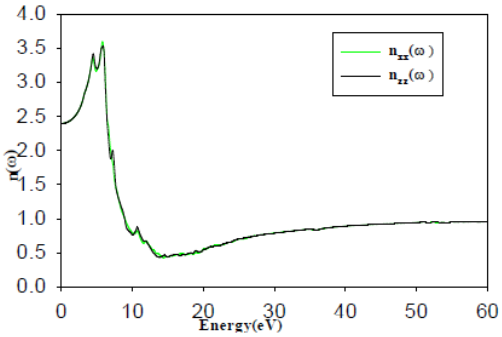


شکل ۲:سهم موهومی تابع دی الکتریک آلیاژ $Zn_{0.5}Be_{0.5}Se$

در ادامه به منظور بررسی بیشتر خواص اپتیکی، تابع اتلاف انرژی الکترون $L(\omega)$ که یکی از مهمترین کمیت ها به منظور بررسی خواص ماکروسکوپی و میکروسکوپی جامدات می باشد و در شکل ۳ برای ترکیب $Zn_{0.5}Be_{0.5}Se$ نشان داده شده است، می پردازیم. این تابع متناسب با احتمال اتلاف انرژی در واحد طول برای یک الکترون در حال عبور از محیط است. شاخص ترین قله در تابع اتلاف بعنوان قله پلاسمونی شناخته می شود که بیانگر برانگیختگی های جمعی چگالی بار الکترونی در بلور است.همان گونه که از شکل پیداست یک بیشینه در ۱۸/۶۱ و ۱۸/۵۳ الکترون ولت برای $L_{xx}(\omega)$ و $L_{zz}(\omega)$ وجود دارد این بیشینه متناظر با پلاسمون حجمی است. وجود قله های پلاسمونی در این نقاط چندان هم دور از انتظار نیست، زیرا در این نقاط قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مقدار بسیار کوچکی دارند، بنابراین در این انرژی ها در منحنی های مربوط به تابع اتلاف انرژی الکترون با قله هایی مواجه خواهیم شد.



شکل۳:طیف اتلاف انرژی الکترون مربوط به آلیاژ $Zn_{0.5}Be_{0.5}Se$



شکل۴: طیف مربوط به ضریب شکست آلیاژ$Zn_{0.5}Be_{0.5}Se$

ضریب شکست $n(\omega)$ در شکل ۴ برای ترکیب $Zn_{0.5}Be_{0.5}Se$ نشان داده شده است. مقادیر ضریب شکست $n(0)$ محاسبه شده برای آلیاژ$Zn_{1-x}Be_xSe$ مطابق طیف ضریب شکست به ازای مقادیر ۱ و ۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵ ، ۰ = x به ترتیب برابر ۲/۴۹ ، ۲/۴۴ ، ۲/۳۹، ۲/۳۴، ۲/۳۱ به دست آمده است. ضریب شکست

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-01]

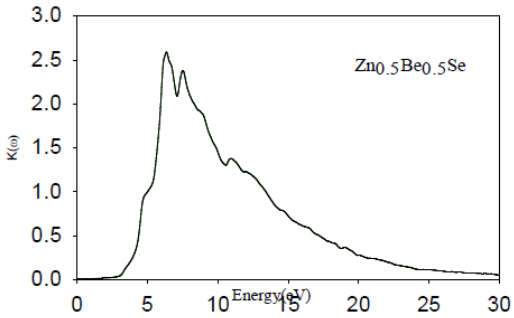
استاتیک محاسبه شده طبق معادله ی (۱) در جدول ۲ آورده شده است که هماهنگی خوبی با مقادیر استخراج شده از طیف ضریب شکست دارند.

$$n(0)=\sqrt{\varepsilon(0)} \qquad (۱)$$

جدول۲: مقادیر ضریب شکست استاتیک برای آلیاژ $Zn_{1-x}Be_xSe$

ضریب شکست نتایج دیگران[۶]	ضریب شکست کار حاضر	x
۲/۵۳	۲/۴۹	۰
_	۲/۴۳	۰/۲۵
_	۲/۳۹	۰/۵
_	۲/۳۴	۰/۷۵
_	۲/۳۰	۱

در شکل ۵ طیف ضریب خاموشی برای ترکیب $Zn_{0.5}Be_{0.5}Se$ نشان داده است. طیف ضریب خاموشی نیز به ازای مقادیر ۱ و۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، ۰ = x برای این آلیاژ به ترتیب در انرژی های ۶/۰۸، ۶/۱، ۶/۲، ۶/۴ و ۶/۹ الکترون ولت دارای مقادیر ماکزیمم می باشد.



شکل۵: طیف مربوط به ضریب خاموشی آلیاژ$Zn_{0.5}Be_{0.5}Se$

نتیجه گیری

با بکارگیری روش FP-LAPW در چارچوب نظریه تابعی چگالی خواص اپتیکی ترکیب نیمرسانای $Zn_{1-x}Be_xSe$ بررسی شد. شد.نتایج بیانگر این است که انرژی پلاسمون حجمی برای ترکیب $Zn_{0.5}Be_{0.5}Se$ دارای مقدار ۱۸/۶۱ الکترون ولت و ضریب شکست استاتیک آن به ازای مقادیر ناخالصی۱ و ۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، ۰ = x به ترتیب برابر ۲/۴۹، ۲/۴۳، ۲/۳۹، ۲/۳۴ و۲/۳۰ می باشد که با داده های موجود سازگاری دارد. با توجه به اینکه هیچ گونه گزارش قبلی در مورد خواص اپتیکی و ثابت های دی الکتریک این ترکیب گزارش نشده است این محاسبات می تواند موجب غنای دانسته های اپتیکی این ترکیب شود.

مراجع

[1] X. Liu and J. K. Furdyna; J. **Appl. Phys**. 95 (2004) 7754.

[2] E.Engel, S.H.Vosko**, phy. Rev**. B 50**, (**1994**),** 10498

[3] H. Okuyama, Y. Kishita, and A. Ishibashi, **Phys. Rev.** B 57(1998), 2257

[4] H. Luo, K. Ghandehair, R. G. Geene, A. L. Ruoff, S. S. Trail, and F. J. DiSalvo, **Phys. Rev.** B 52, (1995) 7058**.**

[5] N. Korozlu , K. Colakoglu , E. Deligoz , Y.O. Ciftci, *The structural, electronic and optical properties of $Cd_xZn_{1-x}Se$ ternary alloys*, **Optics Communications** 284 (2011) 1863–1867

[6] Khenata.R , Bouhemadou.A, Hichour,M, Baltache.H, Rached.D, Rerat.M , *" Elastic and optical properties of BeS, BeSe, and BeTe under pressure "* ,*Solid-State Electronics* 50-2006 http:// www.elsevier.com/locate/ese

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-01]