SID

فیلم های آموزشی

سامانه ویراستاری STES

بلاگ مرکز اطلاعات علمی

کارگاه های آموزشی

سرویس ترجمه تخصصی

ابزارهای پژوهش

کارگاه‌های آموزشی مرکز اطلاعات علمی

آموزش نرم‌افزار Word برای پژوهشگران

روش تحقیق کمی

آموزش مهارت‌های کاربردی در تدوین و چاپ مقالات ISI

Archive of SID

مطالعه خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی آلیاژهای $Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$ بر پایه اصول اولیه

کهیش سرداری، مهتاب [۱]؛احمدیان ، فرزاد[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهرضا، شهرضا

[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهرضا، شهرضا

چکیده

در این مطالعه، خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی آلیاژهای $Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$ با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی بررسی شد. برای این آلیاژ پارامترهای شبکه، مدول حجمی، انرژی بستگی، گاف نوار انرژی و چگالی حالتهای الکترونی محاسبه شد.علاوه بر این، ما به محاسبه پارامترهای اپتیکی (بخشهای حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، تابع اتلاف انرژی و ضریب شکست) پرداخته ایم. نتایج مشخص می کنند که حالتهای Se, 4p نقش حالتهای اولیه و حالتهای Cd 5s, Mg 3s و Se 4p نقش حالتهای نهایی را در گذارهای اپتیکی بازی می کنند.

First principles calculations of structural electronic , and optical properties of zinc blende $Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$ alloy

Mahtab, Kahyash Sardari [1]; Farzad, Ahmadian[2]

[1] *Physics Groups, Department of Science, Islamic Azad University, Shahreza Branch, Shahreza*
[2] *Physics Groups, Department of Science, Islamic Azad University, Shahreza Branch, Shahreza,*

Abstract

In this study, the structural, electronic and optical properties of $Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$ ternary alloy were investigated using FPLAPW method within density functional theory (DFT). For these alloys lattice parameters, bulk modulus, cohesive energy, band gap energy and density of states were calculated. Besides, we have calculated the optical parameters (the real and imaginary dielectric functions, energy loss function, and refractive index) of these semiconductor alloys. The results indicate that the Se 4p states are initial states while Cd 5s, Mg 3s and Se 4p states are final states in the optical transitions.

PACS No. *(۷۱, ۷۸)*

مقدمه

نیمرساناهای گروه II-IV 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 اینرو ابزار مناسبی برای این قطعات در ناحیه مرئی طیف هستند[۱]. نیمرساناهای II-IV شامل Mg با گاف پهن نواری، برای قطعات اپتوالکترونیک به کار می روند[۲] از اینرو از این مواد برای ساختن آشکارسازهای پرتو x و γ استفاده شده است. آلیاژهای $Cd_{1-x}Mg_xS$ که به آلیاژهای ترکیبی معروف هستند دارای گاف های مستقیم و بزرگ می باشند و همواره از نظر تکنولوژی مد نظر بوده اند[۳]. خواص ساختاری، ترابری و اپتیکی این نیمرساناها با تغییر مقدار x تغییر می کند و از این نظر این مواد کاربردهای زیادی دارند[۴] و در زمینه های مختلف علمی و

www.SID.ir

Archive of SID

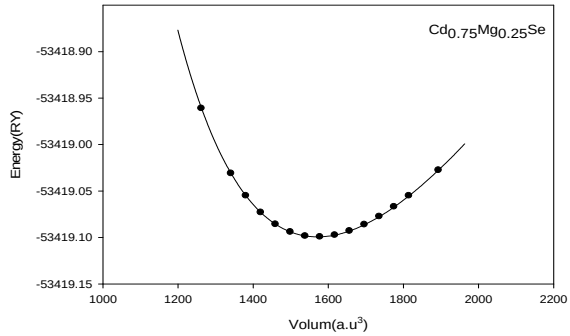
فناوری، پزشکی، زیست فناوری و ساخت وسایل الکترونیکی استفاده می شوند[۵]. علیرغم اهمیت و کاربردهای فراوان این آلیاژها تا کنون هیچ مطالعه ای روی خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی این آلیاژها صورت نگرفته است.

روش انجام محاسبات

محاسبات بر پایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی و به روش امواج تخت بهبود یافتهٔ خطی با پتانسیل کامل (FPLAPW) و با استفاده از نرم افزار محاسباتی WIEN2K صورت گرفته است. در این محاسبات پارامتر R_{kmax} (R شعاع کوچکترین کره موفین تین و Kmax بردار موج قطع است) برابر ۸ در نظر گرفته شده است. تعداد ۲۲۰۰ نقطه k برای همگرایی انرژی در منطقهٔ اول بریلوئن انتخاب شده است که این تعداد برای محاسبهٔ خواص اپتیکی به ۱۰۰۰۰ نقطه افزایش یافته است. در محاسبات از دو تقریبEV-GGA و PBE-GGA استفاده شده است.

نتایج و بحث

ساختار بلوری آلیاژ $Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$ شبکه مکعبی ساده شامل ۸ اتم با گروه فضایی P-43m می باشد. برای محاسبه پارامترهای ساختار تعادلی این آلیاژانرژی کل بلور بر حسب حجم یاخته بسیط محاسبه و با معادله حالت بریش مورناگون برازش داده می شود و نمودار انرژی–حجم برای این آلیاژ حاصل می گردد که در شکل ۱ این نمودار برای نشان داده است.



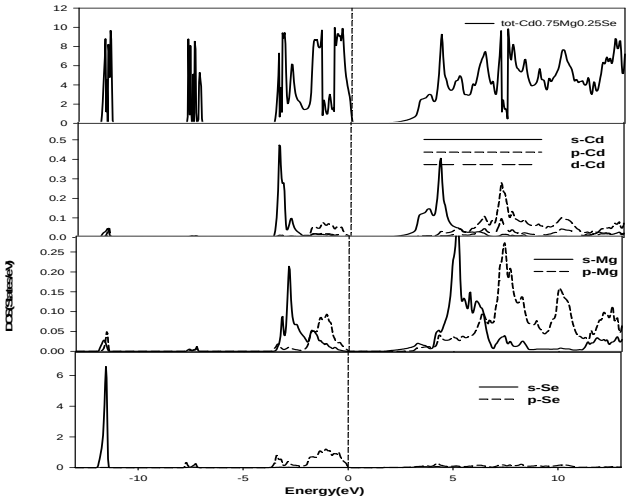
شکل۱:نمودار انرژی بر حسب حجم آلیاژ $Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$

پارامترهای ساختار تعادلی نمودار انرژی بر حسب حجم در جدول ۱ گزارش شده است.

جدول۱:مقادیر پارامتر شبکه(a,c)، مدول حجمی(B)، انرژی ترکیبی(E_{mix}) و انرژی بستگی (E_c)

$Cd_{0.75}Mg_{025}Se$	a (A^0)	B(GPa)	Emix(Ry)	Ec(Ry)
	۶/۱۶	۴۴/۳۱	۰/۰۰۱۲	-۰/۴۴

چگالی حالتهای کلی وجزئی یک بلور که نشان دهنده نحوه توزیع حالتهای الکترونی بلور در نواحی مختلف انرژی است برای این آلیاژ نیز محاسبه شده است، که در شکل ۲ چگالی حا لت های کلی و جزئی آلیاژ نشان داده شده است.



شکل ۲: چگالی حالت های کلی و جزئی آلیاژ $Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$

طبق شکل ۲ سهم عمده حالت های اشغال شده مربوط به اربیتال های p اتم Se،s و p اتم Mg و۵s اتم Cd می باشد . اربیتال ۴s در اتم Se ، دور از سطح فرمی و جایگزیده می باشد و میلی به شرکت در رسانش ندارد. پس از سطح فرمی گاف انرژی در حدود ۱/۶۶ الکترون ولت وجود دارد. همچنین هیبریدشدگی بین اربیتالهای s اتم Cd و اربیتالهای s و p اتم Mg وP اتم Se مشاهده می شود.

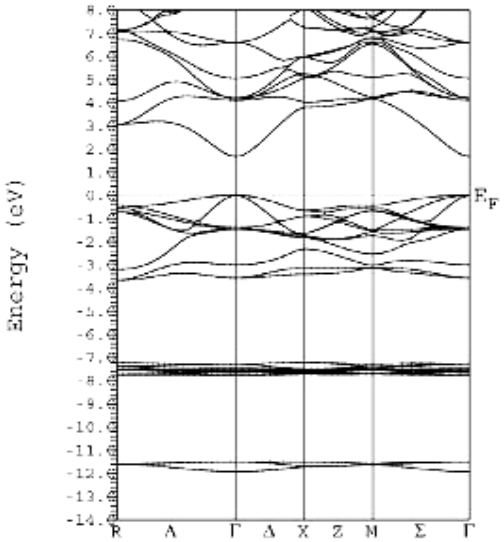
محاسبات ساختار نواری نشان می دهد که این ترکیب، نیمرسانا و دارای گاف نواری مستقیم در نقطه Γ در مرکز منطقه اول بریلوئن

www.SID.ir

Archive of SID

هستند. مقادیر گاف انرژی آلیاژ با استفاده از تقریب EV-GGA برابر ۱/۶۶ و با استفاده از تقریب PBE-GGA برابر ۱می باشد، که نشان مید هد مقادیر گاف انرژی با استفاده از تقریب EV-GGA بهبود یافته اند.

همچنین نمودار ساختار نواری برای آلیاژ$Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$ در شکل ۳ آورده شده است.



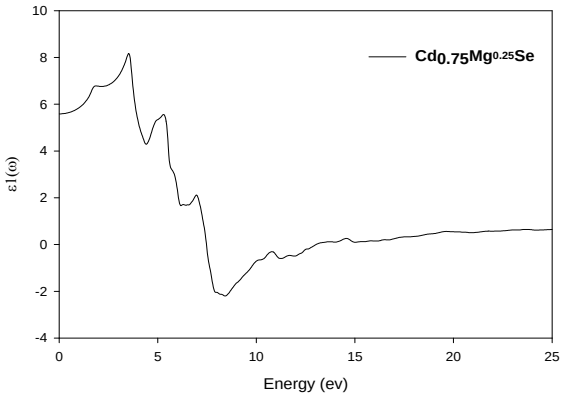
شکل۳: ساختار نوار ظرفیت ترکیب $Cd_{0.75}Mg_{02.5}Se$

ویژگی های اپتیکی

ویژگی های اپتیکی مواد با محاسبهٔ تابع دی الکتریک $\varepsilon(\omega)$ بررسی می شوند. تابع دی الکتریک دارای دو سهم درون نواری و بین نواری است که سهم درون نواری برای فلزات به کار می رود.

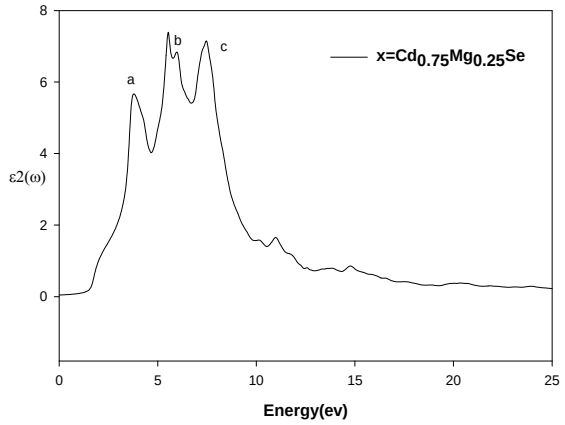
در اینجا برای محاسبهٔ خواص اپتیکی از گذارهای بین نواری غیر مستقیم که شامل پراکندگی فونون هاست و همچنین دارای سهم اندکی در تابع دی الکتریک است چشم پوشی می کنیم. در شکل۴، قسمت حقیقی تابع دی الکتریک که با به کارگیری تبدیلات کرامرز کرونیگ محاسبه می شود نشان داده شده ا ست.

طبق شکل ۴ برای آلیاژ$Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$ یک پیک قابل توجه در مکان ۵/۷۸ الکترون ولت وجود دارد.پس از آن یک کاهش قابل ملاحظه در گستره (۶/۹۸–۷/۹۱) دیده می شود همچنین مقدار ثابت دی الکتریک استاتیک محاسبه شده برای این ترکیب به ترتیب مقادیر ۵/۵۸ می باشد.



شکل۴: بخش حقیقی تابع دی الکتریک آلیاژ$Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$

همچنین بخش موهومی تابع دی الکتریک $\varepsilon_2(\omega)$ آلیاژ$Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$ در شکل ۵ نشان داده شده است. پیکهای عمده در قسمت موهومی دی الکتریک با حروف a,b,c مشخص شده اند.



شکل ۵: بخش حقیقی تابع دی الکتریک الیاژ $Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$

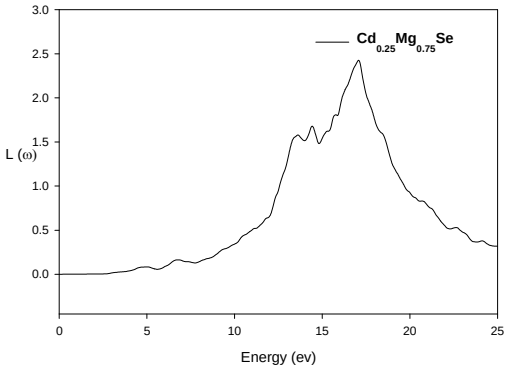
با توجه به شکل۵ و همچنین چگالی حالتها وطبق آنالیز نواری صورت گرفته نتیجه می شود که اربیتال ۴p در اتم Se به عنوان حالت اولیه و اربیتالهای ۵s در اتم Cd و ۳s در اتم Mg و ۴p اتم Se به عنوان حالتهای نهایی نقش اصلی را در گذارهای اپتیکی بر عهده دارند.

www.SID.ir

Archive of SID

در ادامه طیف مربوط به ضریب شکست $n(\omega)$ برای آلیاژهای $Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$ نیز محاسبه شده است که مقدار ضریب شکست در فرکانس صفر برای آلیاژ مذکور برابر ۲/۳۶ می باشد.

در نهایت با استفاده از بخش های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، مقدار تابع اتلاف انرژی برای این آلیاژ محاسبه و در شکل ۶ معرفی شده است. این تابع دارای یک پیک عمده می باشد که اصطلاحا به فرکانس پلاسما معروف است و مقدار آن برای آلیاژهای $Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$ برابر ۱۷/۰۸ می باشد.



شکل۶: نمودار تابع اتلاف آلیاژ $Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$

نتیجه گیری

با بکارگیری روش (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی خواص ساختاری، الکترونی واپتیکی ترکیب نیمرساناهای $Cd_{0.75}Mg_{0.25}Se$ بررسی شد. نتایج ساختار نواری نشان میدهد که این ترکیب دارای گاف نواری مستقیم در نقطه Γ می باشند. محاسبات مربوط به چگالی حالت ها حاکی از آن است که حالت-های ۴p اتم Se بعنوان حالت اولیه و حالت‌های ۵s اتم Cd، ۳s اتم Mg و ۴p اتم Se بعنوان حالت نهایی نقش اصلی را در انتقالهای بین نواری در طیف‌های اپتیکی بر عهده دارند. همچنین طیف های اپتیکی برای این الیاژ به دست آمد. لازم به ذکر است که فرکانس پلاسما برای آلیاژ ۱۷/۰۸ می باشد.

مرجع ها

[1] X. Liu and J. K. Furdyna; J. Appl. Phys. **95** (2004) 7754
[2] M.A. Hasse, J. Qiu, J.M. DePuydt, H. Cheng, Appl. Phys. Lett. **59**(1991) 1272.
[3] A. Marini, C. Hogan, M. Grüning, and D. Varsano, Comput. Phys. Commun. **180**, 1392 _.
[4] M.C.GUPTA,J,JBallato(Eds),Handbook of photonics ,Tylor and Francis.2006
[5] Katayama, K., et al., *ZnSe-based white LEDs.* Journal of Crystal Growth, 2000. **214-215**:.

www.SID.ir

SID

فیلم های آموزشی

سامانه ویراستاری STES

بلاگ مرکز اطلاعات علمی

کارگاه های آموزشی

سرویس ترجمه تخصصی

ابزارهای پژوهش

کارگاه‌های آموزشی مرکز اطلاعات علمی

آموزش نرم‌افزار Word برای پژوهشگران

روش تحقیق کمی

آموزش مهارت‌های کاربردی در تدوین و چاپ مقالات ISI