

## بررسی ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و اپتیکی ترکیب BSb در حالت سطح (۱۱۰) و انبوهه با استفاده از مفاهیم اولیه

حجت‌اله باده‌یان<sup>۱</sup>، حمداله صالحی<sup>۲</sup> و منصور فرید<sup>۲</sup>

۱. گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه فسا، فسا  
۲. گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران، اهواز

(دریافت مقاله: ۱۳۹۲/۱۰/۳؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۳/۸/۲)

### چکیده

در کار حاضر خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی ترکیب BSb در حالت انبوهه و سطح (۱۱۰) مورد مطالعه قرار گرفته شده است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت‌شده خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی با استفاده از نرم‌افزار WIEN2k در تقریب‌های مختلف انجام شده است. خواص ساختاری این ترکیب در حالت انبوهه از جمله ثابت شبکه، مدول حجمی و ثابت‌های کشسان با استفاده از چهار تقریب مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. گاف نواری انبوهه و سطح (۱۱۰) این ترکیب به ترتیب ۱٫۰۸۲ و ۰٫۳۸ الکترون‌ولت به‌دست آمد. همچنین انرژی سطح، تابع کار، واهلش سطح، حالت‌های سطح و ساختار نوارهای انرژی سطح (۱۱۰) BSb با استفاده از بره ۱۵ لایه‌ای استکیومتریکی متقارن و ۲۰ بوهر خلأ محاسبه شده است. به‌علاوه سهم‌های موهومی و حقیقی تابع دی‌الکتریک بره (۱۱۰) BSb را در راستاهای x و z همراه با نتایج انبوهه آن نیز مورد بررسی قرار گرفته شده است. نتایج به‌دست آمده سازگاری خوبی با نتایج دیگران دارد.

واژه‌های کلیدی: BSb، FP-LAPW، DFT، انرژی سطح، تابع کار، خواص اپتیکی

### ۱. مقدمه

فونونی و ساختار نواری آنها می‌باشد [۲-۶]. انرژی سطح،  $\sigma$ ، و تابع کار،  $\phi$ ، دو پارامتر ضروری برای شناخت کامل سطوح می‌باشند [۷، ۸] این روزها سطوح متفاوت ترکیبات III-V به علت کاربرد آنها در لایه‌نازک، در حال پیشرفت و گسترش هستند و چون فناوری پردازش لایه‌ای نازک به طور تنگاتنگی با تحقیقات اساسی روی سطوح و فصل مشترک‌ها ارتباط دارد، ابتدا باید پارامترهای اصلی آنها شامل انرژی سطح و تابع کار به طور دقیقی

مطالعه سطوح ترکیبات نیم‌رساناهای III-V، به این علت که عملکرد ابزارهای مدرن الکترونیکی به شدت تحت تأثیر تمیزی، هندسه و خواص فوتوالکتریک این سطوح می‌باشند، دارای اهمیت اساسی می‌باشند [۱] در میان جهت‌های مختلف سطح، سطح غیر قطبی (۱۱۰) به‌صورت گسترده‌ای مورد مطالعه قرار گرفته است. همچنین بیشترین تمرکز بر روی هندسه واهلش یافته، ارتعاشات

چارچوب نظریه تابعی چگالی<sup>۴</sup> انجام شده است. تقریب‌های چگالی موضعی<sup>۵</sup> و شیب تعمیم یافته<sup>۶</sup> برای جمله تبادلی-همبستگی استفاده شده است. برای محاسبات بره BSb(110) ابتدا باید محاسبات مربوط به انبوهه این ترکیب را انجام داد. همان طور که می‌دانیم، نیم رساناهای III-V دارای ساختار بلند روی<sup>۷</sup> و چهار کاتیون (B) و چهار آنیون (Sb) در یک یاخته بسیط می‌باشند (شکل ۱ الف)). در محاسبه انبوهه BSb، شعاع کره مافین تین را برای اتم‌های B و Sb به ترتیب ۲ و ۲٫۲ بوهر انتخاب کردیم. همچنین برای رسیدن به همگرایی، توابع موج را در نواحی بین جایگاهی بر حسب امواج تخت تا بردار موج قطع  $K_{max}=8/R_{MT}$  بسط داده شد که  $R_{MT}$  شعاع کره مافین تین و  $K_{max}$  بیانگر بزرگ‌ترین بردار موج K در بسط تابع موج می‌باشد. توابع موج ظرفیت در کره مافین تین تا  $L_{max}=10$  و چگالی بار تا  $G_{max}=14$  (a.u.) بسط داده شد. نقاط k را به صورت یک مش  $16 \times 16 \times 16$  با استفاده از همگرایی انرژی بر حسب تعداد نقاط k انتخاب شد. کل محاسبات خود سازگار را با همگرایی انرژی کل  $10^{-5}$  ریدبرگ در نظر گرفتیم.

در محاسبات سطح، بره (110) BSb بر اساس ساختار بهینه‌شده انبوهه ساخته می‌شود. در این محاسبات از تناوب مصنوعی در راستای Z برای شبیه‌سازی استفاده شده است. در این محاسبات برای یکسان بودن شرایط،  $K_{max}$ ،  $R_{MT}$ ،  $L_{max}$  و  $G_{max}$  را مانند شبیه‌سازی انبوهه در نظر گرفته شده است. تعداد نقاط k را به صورت یک مش  $15 \times 10 \times 1$  با استفاده از همگرایی انرژی کل بر حسب تعداد نقاط k مختلف انتخاب شده است. همچنین ضخامت بهینه شده برای این بره ۱۵ لایه به دست آمد. ضخامت بره باید به گونه‌ای باشد که پس از واهلش سطح، لایه‌های وسط بره متقارن خاصیت انبوهه داشته باشد. به علاوه خلأ بهینه شده برای شبیه‌سازی سطح BSb در راستای (110) حدود ۱۵ بوهر به دست آمد که برای حصول اطمینان بیشتر، این خلأ را ۲۰ بوهر در نظر گرفتیم. خلأ بین بره‌ها در راستای Z باید به گونه‌ای

تعیین شوند. به هر حال علی‌رغم کاربردهای وسیع آنها، به دلیل سختی و پیچیدگی در اندازه‌گیری، تعداد بسیار کمی مطالعه روی سطح (۱۱۰) انجام شده است.

انرژی سطح به عنوان تفاوت بین انرژی آزاد اتم سطح و اتمی که درون جامد هست در نظر گرفته می‌شود که یکی از ویژگی‌های بنیادی برای توصیف پایداری سطح می‌باشد [۹] در اکثر آزمایش‌های تجربی  $\sigma$  با برون‌یابی مقادیر انرژی‌های سطح مایع در دماهای بالا به دست می‌آید که این منجر به ایجاد داده‌های تجربی کم اعتبار برای مواد می‌شود [۱۰] تابع کار ابتدا توسط انیشتین هنگام کار بر روی اثر فوتوالکتریک مطرح شد و به عنوان کار کمینه مورد نیاز برای جدا کردن الکترون آزاد از درون یک جامد به جایی کاملاً دور در خلأ تعریف می‌شود [۱۱] در آزمایشگاه‌های تجربی کاوشگر<sup>۱</sup> کلوین مناسب‌ترین وسیله برای اندازه‌گیری مقدار  $\phi$  می‌باشد که اختلاف پتانسیل تماسی بین سطح مورد بررسی و سطح آرمانی (استاندارد) را اندازه‌گیری می‌کند. اگرچه این روش ساده و غیر مخرب است ولی مقدار  $\phi$  بسیار حساس به وجود ناخالصی، ناهمواری و جهت دقیق سطح می‌باشد. به علاوه بعضی عوامل از قبیل بس بلوری (پلی کریستالی)<sup>۲</sup> و تضمینی نبودن خلأ بسیار بالای مورد نیاز، دقت آزمایشات را کاهش می‌دهند [۱۲]. طبق اطلاعات موجود تاکنون هیچ کار تجربی بر روی سطح و انبوهه BSb انجام نشده است و بیشتر کارهای نظری روی ترکیب انبوهه این ترکیب هستند. در سال ۲۰۰۸ و ۲۰۰۹، باگسی<sup>۳</sup> و همکارانش مطالعه نظری به روش شبه پتانسیل روی سطح (۱۱۰) این ترکیب انجام داده‌اند [۱۳، ۱۴] اکثر مطالعات نظری سطوح نیز روی عناصر خالص هستند [۱۲].

## ۲. محاسبات

تمامی محاسبات این مقاله با کد WIEN2k با استفاده از روش امواج تخت تقویت‌شده خطی با پتانسیل کامل (FP-LPAW) در

۴. Density Functional Theory (DFT)

۵. Local Density Approximation (LDA)

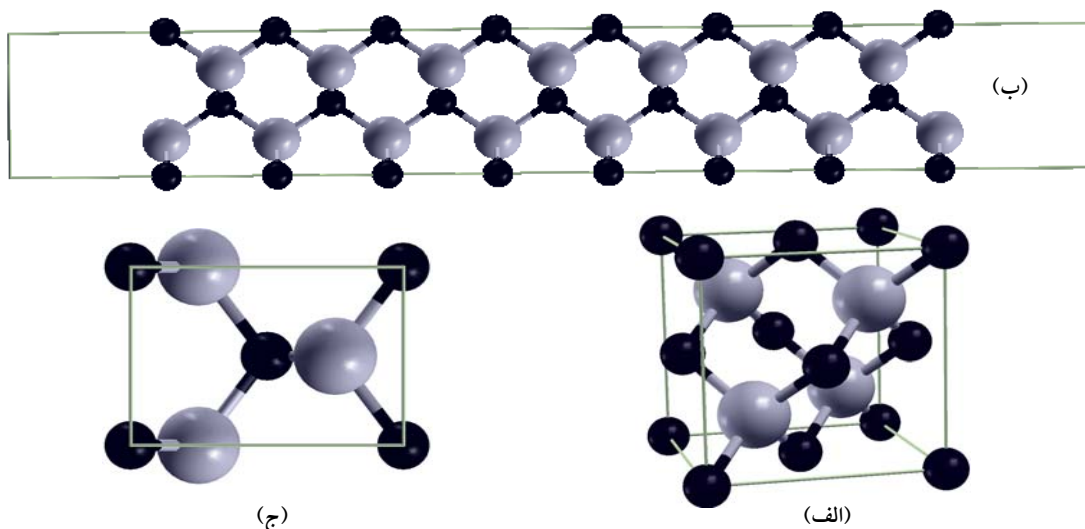
۶. Generalized Gradient Approximation (GGA)

۷. Zinc Blende (ZB)

۱. Probe

۲. Polycrystalline

۳. Bagci



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) گلوله‌های مشکی نمایانگر اتم B و گلوله‌های خاکستری نمایانگر اتم Sb می‌باشند، (الف) سلول واحد انبوهه BSb، (ب) نمای بره متقارن (۱۱۰) از روبرو، (ج) نمای بره متقارن (۱۱۰) از بالا.

شده BSb را با تقریب‌های ذکر شده به دست آورده شد. خواص ساختاری از قبیل ثابت شبکه ساختاری در حالت پایه، مدول حجمی، مشتق آن را با استفاده از بهینه کردن انرژی بر حسب حجم طبق معادله مورناگون و ثابت‌های کشسان با روش توماس چارپین [۱۶] محاسبه شدند. ثابت شبکه ساختاری در حالت پایه، مدول حجمی، مشتق آن و ثابت‌های کشسان در فاز ZB با استفاده از تقریب‌های مختلف در جدول ۱ لیست شده و با دیگر داده‌های موجود مقایسه شده‌اند، که سازگاری خوبی با نتایج دیگران دارند. ثابت‌های کشسان محاسبه شده شرایط پایداری مکانیکی  $C_{11} - C_{12} > 0$ ،  $C_{11} > 0$ ،  $C_{44} > 0$ ،  $C_{11} + 2C_{12} > 0$ ، و همچنین شرایط پایداری مکعبی  $C_{11} < B < C_{12}$  را برآورده می‌کنند [۱۷]. بنابراین ثابت‌های کشسان محاسبه شده طبق شرایط ذکر شده معتبر هستند. همچنین این ضرایب توافق نسبتاً خوبی با نتایج تجربی و نظری دارند.

### ۲.۳. ساختار الکترونی و اتمی سطح (۱۱۰) BSb

در محاسبات سطح، طبیعی است که انتظار داشته باشیم مکان اتم‌ها روی سطح و همچنین فواصل بین چند لایه اول تا حدودی با ساختار انبوهه تفاوت

باشد که بره‌ها هیچ‌گونه برهم‌کنشی با هم نداشته باشند. برای تقارن بیشتر و محاسبات سریع‌تر بره را متقارن طراحی کردیم به طوری که در بالا و پایین بره به اندازه  $10^\circ$  بوهر خلأ وجود داشته باشد (شکل ۱- (ب) و (ج)).

## ۳. نتایج

### ۱.۳. محاسبات ساختاری و الکترونی انبوهه

جامدات تحت تأثیر نیروهای خارجی تغییر شکل می‌دهند و این با کمیت فیزیکی کشش توصیف می‌شود. نیروی مکانیکی داخلی دستگاه که در برابر این تغییر شکل مقاومت می‌کند و تمایل دارد که دستگاه را به حالت اولیه‌اش برگرداند، تحت عنوان کمیت فیزیکی تنش شناخته می‌شود. بررسی پاسخی که اجسام در مقابل تنش‌های مختلف از خود نشان می‌دهند، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. مدول انبوهه معیاری از سختی اجسام در مقابل تنش بوده و ثابت‌های کشسانی معیاری از تغییر شکل اجسام در مقابل تنش است. همچنین خواص کشسانی نقش مهمی در دستیابی اطلاعات مفیدی درباره طبیعت ناهمسانگرد پیوندها، پایداری ساختارها و خواص پیوندی بین صفحات اتمی مجاور ایفا می‌کند [۱۵]. قبل از محاسبات سطح، برخی از ویژگی‌های ساختاری انبوهه بهینه

جدول ۱. خواص ساختاری انبوهه BSb شامل ثابت شبکه ساختاری در حالت پایه، مدول بالک و مشتق آن و ثابت‌های کشسان در فاز بلند روی با استفاده از تقریب‌های مختلف.

تقریب	a(Å)	B(GPa)	B'(GPa)	C <sub>۲۲</sub> (GPa)	C <sub>۱۲</sub> (GPa)	C <sub>۱۱</sub> (GPa)
GGA-PBE	۵,۲۸۰۹	۹۸,۹۲۶	۴,۷۶۶	۱۱۷,۷	۵۴,۷۳	۱۸۲,۴
LDA	۵,۱۹۵۴	۱۱۵,۰۵	۴,۰۵۷	۱۳۷,۶۹	۶۲,۰۱	۲۰۶,۲
PBEsol	۵,۲۳۱۶	۱۰۸,۲۱	۴,۹۰۷	۱۲۰,۵۹	۵۶,۲۵	۲۰۳,۹
WU-Chen	۵,۲۳۵۴	۱۰۷,۷۳	۴,۸۸۱	۱۲۳,۳۹	۵۵,۱۹	۲۰۴,۵
نتایج دیگران	۵,۲۷۹ <sup>b</sup> , ۵,۲۷۸ <sup>c</sup> , ۵,۱۹۱ <sup>d</sup> , ۵,۲۰۱ <sup>e</sup> , ۵,۱۴۵ <sup>f</sup> , ۵,۲۱ <sup>g</sup> , ۵,۲۵ <sup>h</sup> , ۵,۱۷۷ <sup>i</sup> , ۵,۲۷۸ <sup>j</sup>	۹۶ <sup>b</sup> , ۱۰۰ <sup>c</sup> , ۱۱۱ <sup>d</sup> , ۱۱۶ <sup>e</sup> , ۱۱۸ <sup>f</sup> , ۱۱۰ <sup>g</sup> , ۱۰۳ <sup>h</sup> , ۱۱۰ <sup>i</sup> , ۱۰۰ <sup>j</sup>	۴,۵۵ <sup>b</sup> , ۴,۴۰ <sup>c</sup> , ۴,۳۶ <sup>d</sup> , ۴,۱۶ <sup>e</sup> , ۴,۳۱ <sup>f</sup> , ۴,۰۷ <sup>g</sup> , ۳,۶۲ <sup>h</sup> , ۴,۲۳ <sup>i</sup> , ۴,۴۰ <sup>j</sup>	۱۱۲ <sup>a</sup> , ۲۵ <sup>c</sup> , ۱۲۲ <sup>f</sup> , ۱۰۴ <sup>g</sup> , ۱۰۵ <sup>h</sup> , ۱۰۵ <sup>i</sup>	۶۲,۵ <sup>a</sup> , ۱۰۷ <sup>c</sup> , ۶۲ <sup>e</sup> , ۶۲,۶ <sup>f</sup> , ۶۸,۴ <sup>g</sup> , ۵۸,۸ <sup>h</sup> , ۴۷ <sup>j</sup>	۲۰۵ <sup>a</sup> , ۲۰۷ <sup>c</sup> , ۲۲۳ <sup>e</sup> , ۲۳۶ <sup>f</sup> , ۱۹۴ <sup>g</sup> , ۱۹۲ <sup>h</sup> , ۲۰۷ <sup>j</sup>

<sup>a</sup> PP-LDA [۱۹], <sup>b</sup> FP-GGA [۲۰], <sup>c</sup> FP-GGA [۲۱], <sup>d</sup> FP-LDA [۲۰], <sup>e</sup> FP-LDA [۲۱], <sup>f</sup> PP-GGA [۲۲],  
<sup>g</sup> PP-GGA [۲۳], <sup>h</sup> FP-GGA [۲۴], <sup>i</sup> FP-GGA [۲۵], <sup>j</sup> FP-GGA [۲۶]

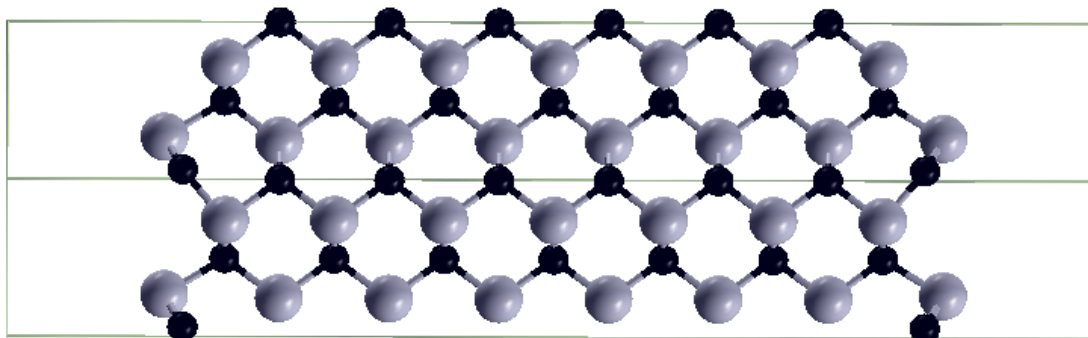
جدول ۲. جابه‌جایی‌های اتمی محاسبه شده نسبت به مکان ایده‌آل ( $\delta_z$  (Å) برای سطح (۱۱۰) BSb.

لایه‌ها	$\delta_z$ (Å)
اول	B
	Sb
دوم	B
	Sb
سوم	B
	Sb

کوچک‌تر هستند تا جایی که تغییرات لایه وسط بسیار ناچیز می‌باشد و این بدان معناست که لایه‌های میانی خاصیت انبوهه دارند که وجود این شرط برای مطالعه سطح ضروری است. علامت منفی نشانه واهلش اتم به سمت داخل سطح و علامت مثبت نشانه واهلش به سمت بیرون سطح می‌باشد زاویه انحراف<sup>۱</sup> لایه سطح نیز برابر ۳۱ درجه می‌باشد. هر آنیون روی سطح (۱۱۰) دارای دو پیوند با کاتیون روی سطح و یک پیوند با کاتیون لایه دوم دارد. همین شرایط برای کاتیون نیز صادق است. چون پیوند معلق آنیون از لحاظ انرژی پایین‌تر از تراز پیوند معلق کاتیون است [۱۲]، بار به حالتی با انرژی کل کمتر منتقل می‌شود. بنابراین پیوندهای معلق آنیون کاملاً پر و پیوندهای معلق کاتیون کاملاً خالی هستند. متعاقباً سطحی که

داشته باشد. چون با شکافتن سطح تعدادی پیوندهای آویزان و الکترون‌های غیرمقید (آزاد) ایجاد می‌شود. این پدیده تغییر مکان اتمهای روی سطح و فاصله لایه‌ها را واهلش سطح می‌نامیم. محاسبات واهلش سطح در DFT به صورت بهینه‌سازی انرژی کل بره نسبت به مکان اتم‌ها در حالتی که فقط چند لایه اول نزدیک به خلأ مجاز به حرکت باشند، انجام می‌شود. پس از طراحی و ساخت ابر یاخته مورد نظر برای محاسبات سطح، آن را واهلش می‌دهیم. جدول ۲ واهلش اتمی محاسبه شده برای سطح (۱۱۰) BSb تا سه لایه اول نشان می‌دهد. همچنین ساختار واهلش یافته در شکل ۲ نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می‌شود آنیون به سمت خارج و کاتیون به سمت داخل سطح واهلش می‌یابد و تغییرات عمده مربوط به لایه اول می‌باشد و تغییرات لایه‌های بعدی خیلی

۱. Tilt angle



شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) ساختار واهلش یافته بره (۱۱۰) BSb برای دو بره به هم چسبیده.

ممکن در نوار فرمی بر اساس آمار فرمی دیراک اشغال شده باشند. مقادیر انرژی به دست آمده برای انرژی سطح و تابع کار سطح (۱۱۰) BSb به ترتیب در حالت واهلش یافته  $J/m^2$   $1/814$  و  $4/56$  eV می‌باشند و در حالت واهلش یافته  $J/m^2$   $1/355$  و  $4/34$  eV می‌باشند. متأسفانه داده تجربی و نظری برای این ترکیب برای مقایسه وجود نداشته و این داده‌ها می‌توانند برای تحقیقات آینده بر روی سطح BSb مورد استفاده قرار بگیرند. در واقع ما تعداد لایه‌ها و خلأ را بر حسب انرژی سطح و تابع کار بهینه کردیم که خلأ بهینه و تعداد لایه بهینه برای سطح (۱۱۰) BSb به ترتیب ۱۵ لایه و ۲۰ بوهر به دست آمدند.

#### ۴.۳. ویژگی‌های الکترونی انبوهه و (۱۱۰) BSb

اکثر مطالعات روی ترکیب انبوهه BSb به صورت نظری بوده است و به لحاظ نظری و محاسبات ما این ترکیب یک نیم رسانا با گاف نواری حدود ۰/۵ تا ۱/۳ الکترون ولت می‌باشد. گاف نواری این ترکیب را در حالت انبوهه با تقریب‌های مختلف محاسبه و نتایج به دست آمده در جدول ۳ آورده شده است و با هم و نتایج دیگران مقایسه شده‌اند. در مورد بره ۱۵ لایه‌ای BSb در صفحه (۱۱۰) نیز کاری انجام نشده است که به بتوان با آن مقایسه نمود. برای شناسایی حالت‌های سطح در ترکیب مورد بحث، ابریاخته‌ای مشابه با ابریاخته شبیه‌سازی سطح ولی بدون خلأ طراحی کردیم. با مقایسه ساختار نوارهای انرژی ابریاخته بدون خلأ طراحی شده با ابریاخته طراحی شده برای

انتظار می‌رود با نوار پیوندهای معلق نیمه‌پر کاتیون و آنیون خواص فلزی داشته باشد، خواص نیم رسانایی دارد. کاتیون به علت این که بار از دست داده به سمت داخل سطح حرکت می‌کند تا به هندسه‌ای برسد که نزدیک به  $sp^2$  نزدیک شود. این فرآیند باعث واهلش سطح می‌شود که در آن تقارن سطح حفظ، ولی زوایای پیوندها به علت هیبریداسیون تغییر می‌کنند.

#### ۳.۳. انرژی سطح و تابع کار (۱۱۰) BSb

انرژی سطح و تابع کار دو کمیت بسیار مهم در مطالعات سطح به شمار می‌روند که اندازه‌گیری آنها در آزمایشگاه‌های تجربی نیاز به دستگاه‌های بسیار با دقت داشته و هزینه فراوان دارد. انرژی سطح، انرژی لازم برای شکافت بلور جامد در امتداد صفحه سطح می‌باشد. در محاسبات DFT برای محاسبه این انرژی می‌توانیم از رابطه زیر بهره بگیریم [۲۷]

$$\sigma = \frac{1}{2A} (E_{\text{slab}} - NE_{\text{bulk}}) \quad (1)$$

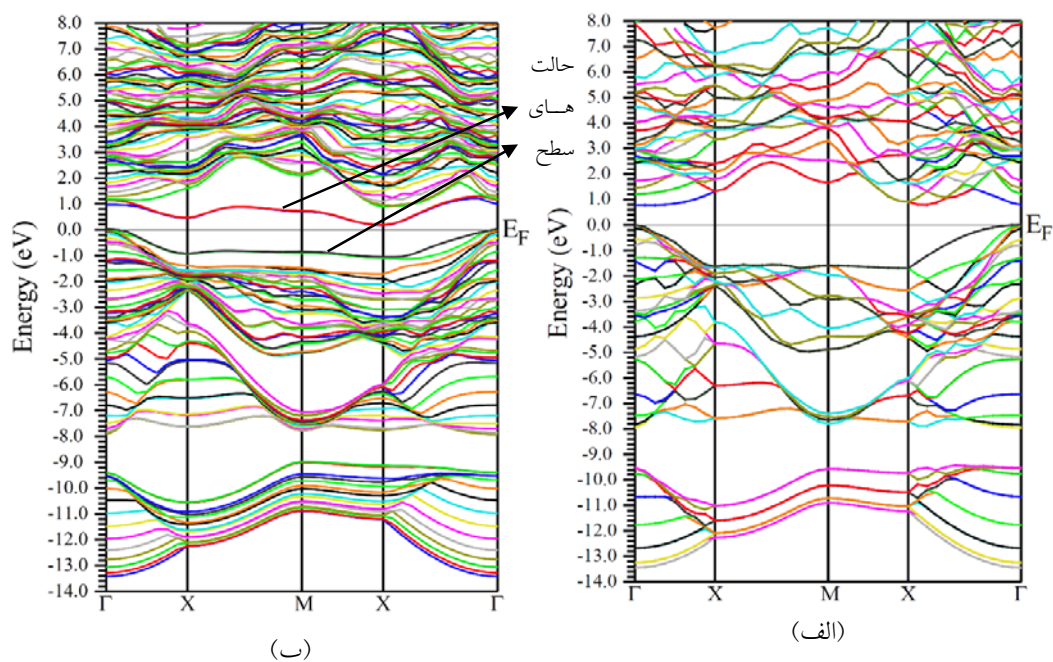
که در آن  $E_{\text{slab}}$  انرژی کل بره،  $E_{\text{bulk}}$  انرژی کل یک یاخته بسیط انبوهه،  $N$  تعداد یاخته‌های بسیط موجود در بره و  $A$  مساحت کل سطح بره (بالا و پایین) می‌باشد. انرژی سطح معمولاً بر حسب  $J/m^2$  بیان می‌شود. تابع کار به عنوان اختلاف انرژی بین تراز خلأ  $E_{\text{vac}}$  و انرژی فرمی  $E_{\text{F}}$  تعریف می‌شود و داده می‌شود با [۲۸]:

$$\phi = E_{\text{VAC}} - E_{\text{F}} \quad (2)$$

در محاسبات DFT، مقدار انرژی پتانسیل در وسط خلأ می‌باشد و  $E_{\text{F}}$  انرژی است که در آن نصف ترازهای انرژی

جدول ۳. گاف نواری محاسبه شده انبوهه BSb و بره (۱۱۰) BSb با دو تقریب GGA و mBJ

نتایج نظری دیگران	mBJ-GGA	GGA-PBE	تقریب
[۲۰] ۰٫۷۵۱ ، [۳۰] ۰٫۵۲۷ ، [۲۹] ۰٫۷۵	۱٫۰۸۲	۰٫۶۸۷	انبوهه BSb
[۳۱] ۰٫۵۴ ، [۲۱] ۰٫۵۶ ، [۲۰] ۱٫۳۳۴	۰٫۳۸	۰٫۲۰	بره BSb(۱۱۰)



شکل ۳. ساختار نواری ابریاخته ۱۵ لایه‌ای (۱۱۰) (الف) بدون خلأ، (ب) با خلأ.

### ۵.۳. ویژگی‌های اپتیکی سطح (۱۱۰) و انبوهه BSb

ویژگی‌های اپتیکی جامدات، یکی از مهم‌ترین موضوعات برای تحقیق و پژوهش است و کاربردهای فراوانی در صنعت دارد. به عنوان مثال؛ زمانی که درباره منشأ اصلی فرآیندهای برانگیختگی الکترون‌ها در جامدات مطالعه می‌کنیم، ویژگی‌های اپتیکی در بسیاری ابزارهای الکترواپتیکی به توصیف برهم‌کنش‌های مختلف الکترون-فونون می‌پردازد. علاوه بر آن، روش‌های اپتیکی برای تعیین ویژگی‌های ساختار نواری در جامدات نیز کاربردهای فراوانی دارند. ویژگی‌های اپتیکی یک ماده را با تابع دی‌الکتریک مختلط  $\epsilon(\omega)$  می‌توان توصیف نمود. با تعیین آن می‌توان سایر پارامترهای اپتیکی را نیز به درستی به دست آورد، که می‌توان آن را به صورت معادله زیر نوشت [۳۲]:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (3)$$

شبهه‌سازی سطح می‌توان به راحتی ساختارهای سطح را تعیین و مشاهده کرد. ساختار نوارهای انرژی دو ابریاخته ذکر شده با تقریب GGA-PBE برای ترکیب BSb در شکل ۳ رسم شده‌اند.

همان‌طور که از شکل ۳ مشاهده می‌شود، گاف نواری محاسبه شده در حالت سطح برای مقدار کمتری نسبت به حالت انبوهه به دست آمده است که علت آن به وجود آمدن حالت‌های سطح در اثر ایجاد سطح در صفحه (۱۱۰) ترکیب‌ها است. در ساختار نواری (۱۱۰) BSb پایین‌ترین حالت سطح در نوار رسانش بین گاف اصلی مربوط به اربیتال‌های آویزان هیبریدی  $sp^2$  کاتیون خالی است، درحالی‌که حالت‌های سطح در بالای نوار ظرفیت بین گاف اصلی عمدتاً ناشی از اربیتال‌های پر آویزان p کاتیون است.

ماهیت مکعبی ترکیبات مورد مطالعه منجر به یک تانسور دی‌الکتریک قطری و همگن می‌شود. سهم موهومی تابع دی‌الکتریک  $(\epsilon_p(\omega))$  داده می‌شود با:

$$\epsilon_p(\omega) = \left( \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \right) \sum_i \left( |M_{ij}|^2 \right) f_i (1-f_i) \times \delta(E_f - E_i - \omega) d^3k \quad (4)$$

که در آن  $M$  ماتریس دوقطبی،  $i$  و  $j$  به ترتیب حالت‌های اولیه و نهایی،  $f_i$  تابع توزیع فرمی برای حالت  $i$  و  $E_i$  انرژی الکترون در حالت  $i$  می‌باشد. سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک  $(\epsilon_1(\omega))$  از قسمت موهومی با استفاده از رابطه کرامرز-کرونینگ به دست می‌آید:

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \epsilon_p(\omega') d\omega'}{(\omega'^2 - \omega^2)} \quad (5)$$

که در آن  $P$  مقدار اصلی انتگرال می‌باشد.

در این کار، سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط را برای انبوهه و بره (۱۱۰) ترکیب BSb محاسبه و با یکدیگر مقایسه کرده‌ایم. نتایج در شکل ۴ آورده شده است. همچنان که از روی این شکل دیده می‌شود شمای کلی سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک در دو حالت انبوهه و سطح تقریباً شبیه به هم هستند با این تفاوت که نمودارهای حالت سطح کمی به پایین جابه‌جا شده‌اند و چون بره فقط در دو جهت  $x$  و  $y$  تقارن دارد، بنابراین در این دو جهت تابع دی‌الکتریک یکسان دارد. از این رو ما بره را در راستاهای  $x$  و  $z$  مورد بررسی قرار داده‌ایم (شکل ۴ (ب)).

ثابت دی‌الکتریک استاتیک در فرکانس حدود صفر برای انبوهه، بره (۱۱۰) BSb در جهت  $x$  و  $z$  به ترتیب ۹/۸۵، ۱۱/۱۹ و ۹/۳۰ می‌باشند، که ضریب شکست استاتیک آن طبق رابطه

#### ۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی بلور BSb فاز مکعبی در حالت سطح (۱۱۰) و انبوهه با استفاده از روش FP-LAPW، در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با اعمال تقریب‌های مختلف مطالعه و بررسی شده است. خواص ساختاری انبوهه از جمله ثابت شبکه تعادلی بلور، مدول بالک، مشتق آن و ثابت‌های الاستیک محاسبه و با دیگر داده‌های موجود مقایسه شده است و نتایج به دست آمده سازگاری خوبی با آنها دارد. واهلش سطح برای سه لایه اول بره (۱۱۰) این ترکیب مورد بررسی قرار گرفت و زاویه انحراف ۳۱ درجه برای این ترکیب به دست آمد. همچنین انرژی سطح و تابع کار سطح BSb(۱۱۰) را هم در حالت واهلش نیافته و هم واهلش یافته محاسبه کردیم. به علاوه ساختار نوارهای انرژی سطح و انبوهه این ترکیب و گاف انرژی آنها محاسبه شد که کاهش گاف نواری در سطح BSb(۱۱۰) نسبت به حالت انبوهه ناشی از وجود حالت‌های سطح بود. در نهایت نیز تابع دی‌الکتریک انبوهه و بره (۱۱۰) BSb مورد بررسی قرار گرفته شده است و ثابت دی‌الکتریک و ضریب شکست استاتیک نیز هم برای بره و هم برای انبوهه ترکیب BSb محاسبه شد. نتایج به دست آمده هم‌خوانی خوبی با نتایج در دسترس دارد.

#### مراجع

1. P Ebert, *Surface Science Reports* **33** (1999) 121.
2. H M Tütüncü, and G P Srivastava, *Physical Review B* **59** (1999) 4925.
3. H Nienhaus, *Physical Review B* **56** (1997) 13194.
4. N Esser, K Hinrichs, J R Power, W Richter, and J Fritsch, *Physical Review B* **66** (2002) 075330.
5. H Nienhaus and W Mönch, *Physical Review B* **50** (1994) 11750.
6. M Ferhat and A Zaoui, *Physical Review B* **73** (2006) 115107.
7. N Ooi and J B Adams, *Surface Science* **574** (2005) 269.
8. W Liu, X Liu, W T Zheng, and Q Jiang, *Surface Science* **600** (2006) 257.
9. Q Jiang, D S Zhao, and M Zhao, *Acta Materialia* **49** (2001) 3143.

- Solidi* **246** (2009) 119.
23. E Deligoz, K Colakoglu, and Y O Ciftci, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **68** (2007) 482.
  24. F E H Hassan, H Akbarzadeh, and M Zoeter, *J. Phys.: Condens. Matter* **16** (2004) 293.
  25. S Q Wang and H Q Ye, *Physical Review B* **66** (2002) 235111.
  26. D Strauch, “*BSb: Elastic Coefficients, Internal Strain Parameter*”, Edited by U. Rössler. Springer, Berlin, Heidelberg (2011).
  27. J C Boettger, *Physical Review B* **49** (1994) 16798.
  28. D Y Li and W Li, *Applied Physics Letters* **79** (2001) 4337.
  29. B Bachir, H Aourag, and M Certier, *Journal of Physics: Condensed Matter* **12** (2000) 5655.
  30. M Ferhat, B Bouhafs, A Zaoui, and H Aourag, *Journal of Physics: Condensed Matter* **10** (1998) 7995.
  31. A Zaoui, S Kacimi, A Yakoubi, B Abbar, and B Bouhafs, *Physica B: Condensed Matter* **367** (2005) 195.
  32. M Grundmann, “*Kramers–Kronig Relations, The Physics of Semiconductors*”, Graduate Texts in Physics. Springer Berlin Heidelberg (2010).
  33. S Labidi, H Meradji, S Ghemid, S Meçabih, and B Abbar, *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials* **11** (2009) 994.
  10. G Renaud, *Surface Science Reports* **32** (1998) 5.
  11. W Li and D Y Li, *The Journal of Chemical Physics* **122** (2005) 064708.
  12. W Liu, W T Zheng, and Q Jiang, *Physical Review B* **75** (2007) 235322.
  13. S Bağci, S Duman, H M Tütüncü, and G P Srivastava, *Journal of Physics: Conference Series* **100**, 7 (2008) 072013.
  14. S Bağci, S Duman, H M Tütüncü, and G P Srivastava, *Physical Review B* **79** (2009) 125326.
  15. A Bouhemadou, R Khenata, F Zegrar, M Sahnoun, H. Baltache, and A H Reshakd, *Computational Materials Science* **38** (2006) 263.
  16. A H Reshak and M Jamal, *Journal of Alloys and Compounds* **543** (2012) 147.
  17. J Wang, S Y S R Phillpot, and D Wolf, *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993) 4182.
  18. S F Pugh, *Philosophical Magazine Series 7*, **45** (1954) 823.
  19. S Q Wang and H Q. Ye, *Physica Status Solidi* **240** (2003) 45.
  20. A Rashid, E A Fazal, S J Hashemifar, R Haris, and H Akbarzadeh, *Communications in Theoretical Physics* **52** (2009) 527.
  21. H Meradji, S Drablia, S Ghemid, H Belkhir, B Bouhafs, and A Tadjer, *Physica Status Solidi* **241** (2004) 2881.
  22. S Cui, W Feng, H Hu, and Z Feng, *Physica Status*