

محاسبه خواص ساختاری و الکترونی ترکیبات نیم‌رسانای III-V با استفاده از تابعی‌های پیشرفته نظریه تابعی چگالی

علی محمد نیکو^۱، حسین صادقی^۱، علی عرب^۱ و سیدجواد هاشمی فر^۲

۱. مجتمع دانشگاهی علوم کاربردی، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، شاهین شهر

۲. دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

پست الکترونیکی: hsadeghi@mut-ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۸/۰۵/۲۳؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۸/۰۹/۱۱)

چکیده

در این پژوهش خواص ساختاری و الکترونی ترکیبات نیم‌رسانای III-V با استفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی به روش امواج تخت بهبود یافته خطی بررسی شده‌اند. پس از بررسی چندین تابعی تبدیلی-همبستگی، مشخص شد که تابعی‌های SOGGA و WC-GGA گزینه‌های مناسبی برای محاسبه خواص ساختاری ترکیبات مورد نظر هستند. برای محاسبه خواص الکترونی و به ویژه گاف انرژی، تابعی GGA-EV و پتانسیل تبدیلی TB-mBJ همراه با تصحیح اسپین-مدار مورد تأیید قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهند که پتانسیل تبدیلی TB-mBJ+SOC گاف نواری این ترکیبات را با دقت بسیار خوبی محاسبه می‌کند. در مورد موادی مانند TIAS که گاف منفی دارند، مشخص شد که پتانسیل تبدیلی TB-mBJ قادر به پیش‌بینی این گاف نیست و در حقیقت گاف بر روی صفر تنظیم می‌شود. برای محاسبه جرم مؤثر نیز از چندین روش استفاده شد و پس از مقایسه با داده‌های تجربی مشخص شد که، تابعی‌های GGA-PBE و GGA-EV این کمیت را به ترتیب برای مواد با گاف کوچک و گاف بزرگ با دقت خوبی محاسبه می‌کنند و البته بهترین نتایج جرم مؤثر با روش تابعی هیبرید HSEbgfit به دست آمد. همچنین، نتایج نشان می‌دهند که تصحیح اسپین-مدار باعث می‌شود تا نتایج جرم مؤثر محاسبه شده به مقادیر تجربی نزدیک‌تر شوند.

واژه‌های کلیدی: مواد III-V، ثابت شبکه، گاف انرژی، جرم مؤثر، نظریه تابعی چگالی

۱. مقدمه

استفاده در آشکارسازها، دیودهای نوری، لیزر دیودها، سلول‌های خورشیدی، تلفیق‌کننده‌های موجبرهای الکترواپتیکی و خازن‌های فلز-اکسید-نیم‌رسانا هستند [۱-۳]. از این مجموعه، ترکیب‌های با گاف انرژی کوچک برای

ترکیبات گروه III-V مواد بسیار مهم و راهبردی در صنعت هستند. این آلیاژها به علت پتانسیل کاربرد آنها در قطعات فوتونیک، الکترونیک و الکترواپتیکی مواد نوید دهنده‌ای برای

انرژی یکی از چالش‌های پیش روی محققان با استفاده از نظریه تابعی چگالی است؛ چون این پارامتر بسیار مهم است و بر بعضی از خواص دیگر ماده نیز تأثیر گذار است. همچنین باید توجه داشت که، یکی از پارامترهایی که خود در محاسبه گاف انرژی تأثیر زیادی دارد، ثابت شبکه است. در نتیجه محاسبه این کمیت نیز، نیاز به دقت کافی دارد. در ضمن با توجه به کاربردهای مواد III-V در ساخت وسایل الکترونیکی و الکترواپتیکی، تحرک‌پذیری الکترون‌ها و حفره‌ها یکی از مهم‌ترین پارامترهای مورد توجه محققان است. از آنجایی که تحرک‌پذیری حامل‌های بار به طور مستقیم از محاسبات به دست نمی‌آید، به منظور مقایسه این پارامتر فیزیکی در مواد مختلف، از پارامتر جرم مؤثر حامل‌های بار که رابطه عکس با تحرک‌پذیری دارد و به طور مستقیم از محاسبات قابل استخراج است، استفاده می‌شود. به همین علت پارامتر جرم مؤثر پارامتر بسیار مهمی است که در این کار مورد توجه قرار گرفته است. برای دستیابی به هدف مذکور، خواص چند ترکیب دو اتمی از دسته مواد III-V که نتایج تجربی آنها موجود است، با تابعی و روش‌های مختلف محاسبه شده و نتایج مقایسه می‌شوند تا مشخص شود که برای هر خصوصیتی کدام روش یا تابعی مناسب‌تر است.

۲. روش انجام محاسبات

برای ارزیابی خواص ساختاری و الکترونی ترکیبات دو اتمی GaAs, InSb, InAs و TIAs در ساختار زینک بلند، از روش پتانسیل کامل با امواج تخت بهبود یافته خطی (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) که در کد محاسباتی WIEN2k [۲۹] به کار گرفته شده، استفاده کردیم. در این روش یاخته واحد به کره‌های اتمی و منطقه بین جایگاهی تقسیم می‌شود. در منطقه بین جایگاهی (بین کره‌های اتمی) از توابع موج تخت با عدد قطع $R_{MT}K_{max}=9$ برای بسط تابع موج استفاده شد، که R_{MT} کوچک‌ترین شعاع کره اتمی و K_{max} بزرگ‌ترین بردار موج در بسط امواج تخت بود. شعاع کره اتمی برای اتم‌های Ga, As, In, Sb و TI به ترتیب ۲٫۲۵، ۲٫۴۸، ۲٫۵ و ۲٫۵ بوهر در نظر گرفته شد. برای

آشکارسازهای فرسرخ با طول موج بلند و ترانزیستورهای اثر میدانی برای کاربردهای الکترونیکی و اپتوالکترونیکی مورد توجه قرار گرفته‌اند [۲]. تولید این دسته از مواد، نسبتاً ساده است و بنابراین با استفاده از روش‌های نظری و تجربی مختلفی مورد مطالعه قرار می‌گیرند. ترکیب‌های III-V اغلب در دو ساختار بلوری زینک بلند^۱ و ورتزایت^۲ متبلور می‌شوند. بیشتر این مواد در فاز B_۳ (زینک بلند) پایدارترین حالت خود را دارند، به همین علت فاز B_۳ این مواد در محاسبات نظری بیشتر مورد توجه قرار می‌گیرد [۴-۷]. محققان در مطالعات از روش‌های مختلفی برای بررسی این مواد استفاده کرده‌اند. یکی از روش‌هایی که کارایی بالایی در ارزیابی نظری مواد دارد، روش محاسبات ابتدا به ساکن بر پایه نظریه تابعی چگالی [۸] است که توسط پژوهشگران متعددی برای بررسی ترکیب‌های آلیاژی مورد نظر به کار گرفته شده است [۱-۴ و ۹-۱۶]. مازوز و همکاران با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن، خواص ساختاری و الکترونی ترکیب‌های TI-V را ارزیابی کردند. آنها در محاسبات از تقریب LDA [۱۷] استفاده کرده و ثابت شبکه، مدول انبوهه و ساختار نواری ترکیب‌های مذکور را به دست آوردند [۱۸]. لی و همکاران نیز با استفاده از روش مطالعات ابتدا به ساکن شبه پتانسیل امواج تخت و با استفاده از تابعی GGA خواص ساختاری، الکترونیکی و الاستیکی مواد TI-V را گزارش کردند [۱۹]. در مطالعات دیگر، محققان از نسخه‌های مختلف تابعی GGA [۲۰، ۲۱]، پتانسیل تبدالی mBJ [۲۲] و تابعی‌های هیبرید برای بررسی ترکیب‌های III-V استفاده کرده‌اند [۱۰، ۱۲، ۲۳-۲۸].

در مطالعه مواد جدید سه اتمی و چهار اتمی که نتایج تجربی در مورد آنها وجود ندارند، انتخاب روش‌ها و تابعی‌ها نتایج متفاوتی را به همراه دارد، که باعث می‌شود خصوصیات ماده، با دقت‌های متفاوتی به دست آیند. لذا باید از روش و تابعی‌های تبدالی همبستگی مناسبی استفاده کرد که نتایج دقیق‌تری به همراه داشته باشند. در این کار هدف یافتن روش‌ها و تابعی‌های مناسب برای محاسبه خواص مختلف ماده، نظیر خواص ساختاری و الکترونی است. محاسبه گاف

۱. Zinc blende Crystal Structure

۲. Wurtzite Crystal Structure

قرار می‌گیرد. این پتانسیل استتار تنها بر روی برهم‌کنش تبدلی اعمال می‌شود و قسمت بلند-برد تبدلی دقیق را استتار می‌کند. در تابعی هیبریدی، کسری از پتانسیل نیمه موضعی تبدلی مطابق رابطه زیر، با پتانسیل تبدلی دقیق هارتری فوک جایگزین می‌شود [۲۹]:

$$E_{xc}^{HSE} = E_x^{SL} - \alpha E_x^{SL,SR} + \alpha E_x^{HF,SR} + E_c^{SL}, \quad (2)$$

که در رابطه (۲)، $E_x^{SL,SR}$ قسمت کوتاه برد انرژی تبدلی تابعی نیمه موضعی و $E_x^{HF,SR}$ قسمتی از انرژی تبدلی دقیق هارتری فوک است که با پتانسیل کولن استتار نشده و E_c^{SL} انرژی همبستگی تابعی نیمه موضعی است و پارامتر α کسری از تبدلی دقیق هارتری فوک است که جایگزین تبدلی نیمه موضعی می‌شود. رابطه (۲) را می‌توان به طور خلاصه به صورت زیر نوشت [۳۴]:

$$E_{xc}^{HSE} = E_{xc}^{SL} + \alpha (E_x^{HF} - E_x^{SL}). \quad (3)$$

به منظور محاسبه دقیق‌تر جرم مؤثر با استفاده از تابعی هیبرید HSE، ابتدا گاف انرژی ترکیبات مورد نظر با تغییر پارامتر آلفا مطابق با نتایج تجربی موجود تنظیم شد و سپس محاسبات جرم مؤثر با تابعی مذکور با نام اختصاری HSE_{bgfit} محاسبات جرم مؤثر با تابعی مذکور با نام اختصاری HSE_{bgfit} انجام شد.

۳. نتایج و بحث

۳.۱. پارامترهای ساختاری

همان‌طور که گفته شد، برای محاسبه خواص ساختاری علاوه بر تابعی‌های رایج LDA و GGA-PBE و تابعی‌های جدیدتر SOGGA و GGA-WC نیز مورد استفاده قرار گرفتند. برای هر تابعی، ابتدا ترکیب مورد نظر را در حجم‌های مختلف محاسبه کرده و سپس نمودار انرژی کل بر حسب حجم به دست آمده را با معادله حالت مورناگان [۳۵] برازش دادیم:

$$E = E_T + \frac{B_0 V}{B_0'} \left[\frac{\left(\frac{V_0}{V}\right) B_0'}{B_0' - 1} + 1 \right] - \frac{B_0 V_0}{B_0' - 1}. \quad (4)$$

در این معادله حالت، V_0 حجم تعادلی، B_0 و B_0' به ترتیب

محاسبه خواص ساختاری از تابعی‌های تبدلی همبستگی LDA، GGA-PBE [۳۰]، SOGGA [۲۱] و GGA-WC [۲۰] استفاده کردیم، در حالی که برای محاسبه خواص الکترونی تابعی‌های GGA-EV [۳۱] و پتانسیل تبدلی TB-mBJ نیز در نظر گرفته شدند. پتانسیل تبدلی TB-mBJ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$v_{x,\sigma}^{mBJ}(\vec{r}) = cv_{x,\sigma}^{BR}(\vec{r}) + (\gamma c - \gamma) \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{5}{6}} \sqrt{\frac{t_\sigma(\vec{r})}{\rho_\sigma(\vec{r})}}, \quad (1)$$

که $\rho_\sigma(r)$ چگالی بار الکترونی، $t_\sigma(r)$ چگالی انرژی جنبشی، $v_{x,\sigma}^{BR}(\vec{r})$ پتانسیل بکه-روسول و c ضریب تصحیح است. این نشان می‌دهد که ابتدا باید انرژی تبدلی-همبستگی اولیه با تابعی‌های LDA یا GGA محاسبه شود و سپس انرژی تبدلی حاصل برای به دست آوردن پتانسیل تبدلی TB-mBJ مورد استفاده قرار گیرد. در محاسبات TB-mBJ ضریب تصحیح c به طور خودسازگار همگرا می‌شود [۳۲].

به منظور محاسبه دقیق‌تر گاف انرژی در بررسی خواص الکترونی با پتانسیل تبدلی TB-mBJ، اثر اسپین-مدار را نیز لحاظ کردیم.

جرم مؤثر الکترون و حفره سبک و سنگین به ترتیب با انحنا پایین‌ترین تراز رسانش و بالاترین ترازهای ظرفیت رابطه دارند. برای محاسبه این پارامتر، ترازهای مذکور در نظر گرفته شده و سپس نقاط اکسترم آن مشخص می‌شوند. آنگاه به تراز انرژی در نقاط اکسترم معادله درجه دو برازش می‌شود. با در نظر گرفتن واحد کمیت‌های مورد استفاده در محاسبات، پارامتر ثابتی حاصل می‌شود که از حاصل ضرب این پارامتر در عکس ضریب جمله درجه دو، جرم مؤثر نسبت به جرم الکترون به دست می‌آید [۳۳]. برای محاسبه جرم مؤثر، تابعی‌های تبدلی همبستگی SOGGA، GGA-PBE، GGA-EV و پتانسیل تبدلی TB-mBJ مورد توجه قرار گرفتند. همچنین برای ارزیابی اثر اسپین-مدار بر روی جرم مؤثر، این پارامتر با پتانسیل تبدلی TB-mBJ همراه با این اثر نیز در نظر گرفته شد. در نهایت از تابعی هیبریدی نیز برای محاسبه جرم مؤثر استفاده شد. تابعی هیبریدی مورد استفاده در این کار از روش HSE [۳۴] پیروی می‌کند. در تابعی HSE یک پتانسیل تبدلی کوتاه برد استتار مورد استفاده

جدول ۱. خواص ساختاری مواد GaAs, InAs, InSb و TIAs.

ماده	تابعی	ثابت شبکه (Å)	مدول انبوهه (GPa)	مشتق مدول انبوهه	
GaAs	LDA	۵,۶۰۷	۷۴,۴	۴,۶۶	
	GGA- PBE	۵,۷۴۸	۶۰,۶۹	۵,۰۹	
	SOGGA	۵,۶۴۱	۷۱,۶	۵,۱	
	GGA- WC	۵,۶۶۴	۶۹,۵	۴,۵۴	
	کار دیگران	GGA- WC	۵,۶۶۴ (الف)	۶۸,۹۸ (الف)	۴,۶۲ (الف)
		LDA	۵,۶۰۳ (ب)	۷۵,۰۳ (ب)	۴,۲۶۹ (ب)
		تجربه	۵,۶۵۳ (پ)	۷۵,۵ (ت)	---
	InAs	LDA	۶,۰۳۰	۵۹,۹	۴,۷۹
		GGA- PBE	۶,۱۹۱	۴۸,۹۲	۴,۳۹
		SOGGA	۶,۰۶۹	۵۷,۴۷	۴,۶۱
GGA- WC		۶,۰۹۲	۵۵,۶۹	۴,۷۶	
کار دیگران		GGA	۶,۱۹۵ (ج)	۴۸,۱ (ج)	۴,۹۴ (ج)
		LDA	۶,۰۲۶ (ب)	۶۰,۱۶ (ب)	۴,۹۹ (ب)
		تجربه	۶,۰۵۸ (چ)	۵۸ (ج)	---
InSb		LDA	۶,۴۵۳	۴۶,۶۵	۴,۷۸
		GGA- PBE	۶,۶۳۶	۳۷,۸۷	۴,۳۷
		SOGGA	۶,۴۹۷	۴۴,۵۹	۴,۶۵
	GGA- WC	۶,۵۲۳	۴۳,۳۹	۴,۵۹	
	کار دیگران	GGA	۶,۶۴ (ر)	۳۷ (ر)	۴,۴۳ (ر)
		LDA	۶,۴۵۶ (ر)	۴۶ (ر)	۴,۵۱ (ر)
		تجربه	۶,۴۷۸ (ز)	۴۶ (ز)	---
	TIAs	LDA	۶,۱۷۵	۵۰,۳۸	۵,۱۱
		GGA- PBE	۶,۳۵۸	۳۹,۰۱	۴,۵۳
		SOGGA	۶,۲۰۶	۴۷,۹۰	۴,۸۷
GGA- WC		۶,۲۴۸	۴۶,۰۹	۴,۶۶	
کار دیگران		GGA	۶,۲۱۳ (ض)	۴۳,۸ (ض)	۴,۸ (ض)
		LDA	۶,۱۶۹ (ص)	۵۱,۵۳ (ص)	۴,۸۶ (ض)
		تجربه	۶,۱۸۰ (ص)	---	---

الف[۲۴]-ب[۲]-پ[۳۶]-ت[۳۷]-ج[۷]-چ[۳۸]-ر[۳۹]-ز[۴۰]-ص[۴۱]-ض[۱۹].

را نسبت به مقادیر تجربی با دقت بهتری محاسبه می‌کنند [۲۸]. همچنین نتایج حاصل در توافق خوبی با نتایج حاصل از کار دیگران هستند. با بررسی نتایج محاسبه شده برای مدول انبوهه، مشاهده می‌شود که تابعی‌های LDA، SOGGA و GGA- WC این پارامتر را با دقت بسیار خوبی نسبت به مقادیر تجربی محاسبه می‌کنند. در مورد مشتق مدول انبوهه نیز همین تابعی‌ها مناسب هستند. در ضمن باید اشاره کرد که

مدول انبوهه و مشتق آن هستند. نتایج محاسبه شده برای مواد مورد نظر در جدول ۱ به همراه نتایج تجربی و نتایج محاسباتی دیگران آورده شده‌اند.

نتایج حاصل نشان می‌دهند که، تابعی LDA پارامتر شبکه را کمتر و تابعی GGA- PBE کمی بیشتر محاسبه می‌کند؛ در حالی که دو نسخه جدیدتر SOGGA و GGA- WC، که تابعی‌های پیشرفته‌تری نسبت به GGA هستند، پارامتر شبکه

جدول ۲. گاف انرژی مواد GaAs, InAs, InSb و TIAs.

گاف انرژی (eV)				ماده	تابعی
TIAs	InSb	InAs	GaAs		LDA
(indirect) -۰,۱۸۸	۰,۰	۰,۰	۰,۳۰۲		GGA- PBE
(indirect) -۰,۰۵۲	۰,۰	۰,۰	۰,۵۳۸		SOGGA
(indirect) -۰,۱۰۵	۰,۰	۰,۰	۰,۵۱۱		GGA- EV
۰,۰	۰,۳۱۷	۰,۳۴۶	۱,۱۳۶		TB- mBJ
۰,۰	۰,۴۴۴	۰,۶۳۰	۱,۶۲۰		SOGGA+SOC
(indirect) -۰,۲۴۱	۰,۰	۰,۰	۰,۴۰۱		TB- mBJ+SOC
۰,۰	۰,۲۲۹	۰,۵۳۱	۱,۵۲۷		کار دیگران
(پ) -۰,۱۰۴ (LDA)	(ب) ۰,۲ (GGA- EV)	(الف) ۰,۵۹۳ (mBJ)	(الف) ۱,۵۶ (mBJ)		تجربه
(ج) -۱,۸۶	(ج) ۰,۲۵	(ث) ۰,۴۲	(ت) ۱,۵۲		

الف [۴۳]- ب [۳۹]- پ [۴۱]- ت [۴۴]- ث [۴۵]- ج [۴۶]- چ [۹].

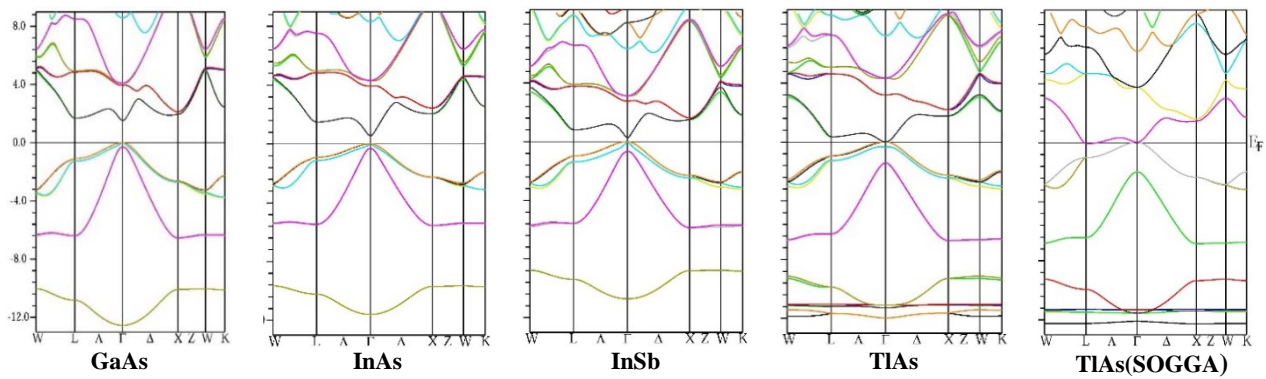
تبادلی همبستگی و مشتق بار را به طور همزمان با دقت تولید کنند [۷]. نتایج این تابعی‌ها نشان می‌دهند که، تابعی LDA گاف را کوچک‌تر از تابعی SOGGA و آن هم کوچک‌تر از تابعی GGA- PBE محاسبه می‌کنند. همچنین نتایج نشان می‌دهند که تابعی GGA- EV نسبت به تابعی‌های قبلی گاف را بهتر محاسبه می‌کند. تابعی GGA- EV نسخه جدیدی از GGA است که می‌تواند توصیف بهتری برای پتانسیل تبادلی ارائه کند، ولی در توصیف انرژی تبادلی ناموفق است. این تابعی به جدایی بهتر ترازها از هم منجر می‌شود، در نتیجه برای محاسبه خواص الکترونی و به ویژه گاف نواری گزینه مناسبی است [۷ و ۲۳]. با بررسی نتایج مشخص می‌شود، که پتانسیل تبادلی TB- mBJ برای محاسبه گاف انرژی بهترین گزینه است. قدرت پتانسیل تبادلی TB- mBJ در این است که به عنوان یک پتانسیل چند گانه، می‌تواند گاف انرژی نیم رساناها و عایق‌ها را با دقت بیشتری نسبت به دیگر روش‌ها محاسبه کند و هزینه محاسبات آن، هم مرتبه با محاسبات GGA رایج است. برای محاسبه گاف انرژی، پتانسیل TB- mBJ همان دقتی را دارد، که روش‌های هیبریدی و GW با هزینه محاسباتی بسیار بالاتر دارند. لذا این روش برای محاسبه گاف نواری با دقت کافی بسیار مناسب است [۴۲]. تنها اشکال پتانسیل تبادلی TB- mBJ در محاسبه گاف نواری

انرژی کل محاسبه شده به وسیله تابعی GGA- EV دقت کافی را ندارد، لذا برای محاسبه کمیت‌هایی که به توصیف دقیق انرژی تبادلی نیاز دارند، از قبیل حجم تعادل، پارامتر شبکه و مدول انبوه و به طور کلی خواص ساختاری، تابعی مناسبی نیست [۷ و ۲۳].

۲.۳. خواص الکترونی

با توجه به موفقیت بالای تابعی SOGGA در پیش‌بینی ثابت‌های شبکه ترکیبات مورد نظر، از ثابت‌های شبکه حاصل از این تابعی برای محاسبه خواص الکترونی و گاف انرژی توسط سایر تابعی‌ها (LDA, GGA- PBE, SOGGA, GGA- EV, TB- mBJ) استفاده شد. همچنین اثر اسپین-مدار را در مورد تابعی SOGGA و پتانسیل تبادلی TB- mBJ اعمال کرده و گاف را در حضور این تصحیح نسبی به دست آوردیم. نتایج حاصل از محاسبه گاف انرژی، در جدول ۲ آورده شده‌اند. در همین جدول نتایج تجربی و کار دیگران نیز جهت مقایسه آورده شده‌اند.

با بررسی نتایج محاسبه شده برای گاف انرژی مشخص می‌شود که تابعی‌های LDA, GGA- PBE, SOGGA گاف را به طور محسوسی کوچک‌تر از نتایج تجربی پیش‌بینی می‌کنند؛ چون این تابعی‌ها شکل ساده‌ای دارند و نمی‌توانند انرژی



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) ساختارهای نواری محاسبه شده با پتانسیل تبدالی TB- mBJ+SOC، در مورد ترکیب TIAs تابعی SOGGA نیز لحاظ شده است.

محاسبه شده برخلاف نتیجه پتانسیل تبدالی TB- mBJ و GGA- EV غیرمستقیم است.

۳.۳. جرم مؤثر

کمیت جرم مؤثر با استفاده از تابعی‌های SOGGA، GGA- PBE، GGA- EV و پتانسیل تبدالی TB- mBJ بدون اثر اسپین-مدار و همراه با این اثر و در نهایت تابعی هیبرید HSE_{bgfit} محاسبه شده و در جدول ۳ آورده شده‌اند. در هنگام استفاده از تابعی هیبریدی، ابتدا با تنظیم پارامتر آلفا، گاف نواری ترکیب با مقدار گاف نواری محاسبه شده به روش TB- mBJ+SOC منطبق شده و سپس جرم مؤثر با تابعی هیبرید HSE_{bgfit} محاسبه شد.

مشاهده می‌شود که نتایج همخوانی خوبی با نتایج دیگران دارد و همچنین باید اشاره کرد که تابعی SOGGA جرم مؤثر حفره سبک و سنگین را با دقت نسبتاً خوبی محاسبه می‌کند. تابعی GGA- EV نسبت به تابعی SOGGA نتایج را بهتر محاسبه می‌کند. نتایج محاسبه شده با تابعی‌های SOGGA و GGA- PBE نشان می‌دهند که برای ترکیبات با گاف انرژی بزرگ، جرم مؤثر محاسبه شده کمتر از مقادیر تجربی به دست می‌آید. از نتایج محاسبات مشخص می‌شود که با کاهش جرم مؤثر الکترون و حفره سبک، نتایج تابعی‌های SOGGA و GGA- EV که ابتدا کمتر از مقادیر تجربی به دست می‌آید، افزایش یافته و بزرگ‌تر از نتایج تجربی می‌شود. همچنین از نتایج دریافت می‌شوند که تابعی GGA- PBE جرم مؤثر را برای ترکیبات با گاف کوچک بسیار نزدیک به مقادیر تجربی

ترکیبات فوق، این است که گاف‌های محاسبه شده، اندکی از مقادیر تجربی بزرگ‌ترند. اعمال اثر اسپین-مدار باعث باز شدن ترازها از یکدیگر و در نتیجه کاهش گاف می‌شود. با اعمال این اثر، نتایج این پتانسیل به مقادیر تجربی بسیار نزدیک می‌شوند و بر اساس محاسبات انجام شده، بهترین روش برای محاسبه گاف، پتانسیل تبدالی TB- mBJ همراه با اثر اسپین-مدار تشخیص داده شد.

اغلب ترکیبات بررسی شده، در تمام تابعی‌های مورد استفاده دارای گاف مستقیم هستند. تنها برای ترکیب TIAs گاف محاسبه شده با تابعی‌های LDA، GGA- PBE، SOGGA، SOGGA+SOC و غیرمستقیم به دست آمد. این نکته را نیز باید اشاره کرد که محل قله تراز ظرفیت در همه تابعی‌ها یکسان است و در نقطه Γ قرار دارد، در حالی که محل دره تراز رسانش در موارد گاف غیرمستقیم جابه‌جا شده است و در نقطه L مشاهده می‌شود. در ادامه ساختار نواری هر چهار ترکیب با استفاده از پتانسیل تبدالی TB- mBJ همراه با اثر اسپین-مدار در شکل ۱ آورده شده‌اند.

همچنین در شکل ۱، ساختار نواری ترکیب TIAs با استفاده از تابعی SOGGA نیز آورده شده است. با بررسی ساختار نواری TIAs که گاف منفی دارد، مشخص شد که پتانسیل تبدالی TB- mBJ نمی‌تواند گاف را منفی محاسبه کند و گاف را حداقل بر روی صفر تنظیم می‌کند. همچنین مشاهده می‌شود که گاف با تابعی SOGGA منفی به دست می‌آید در ضمن گاف

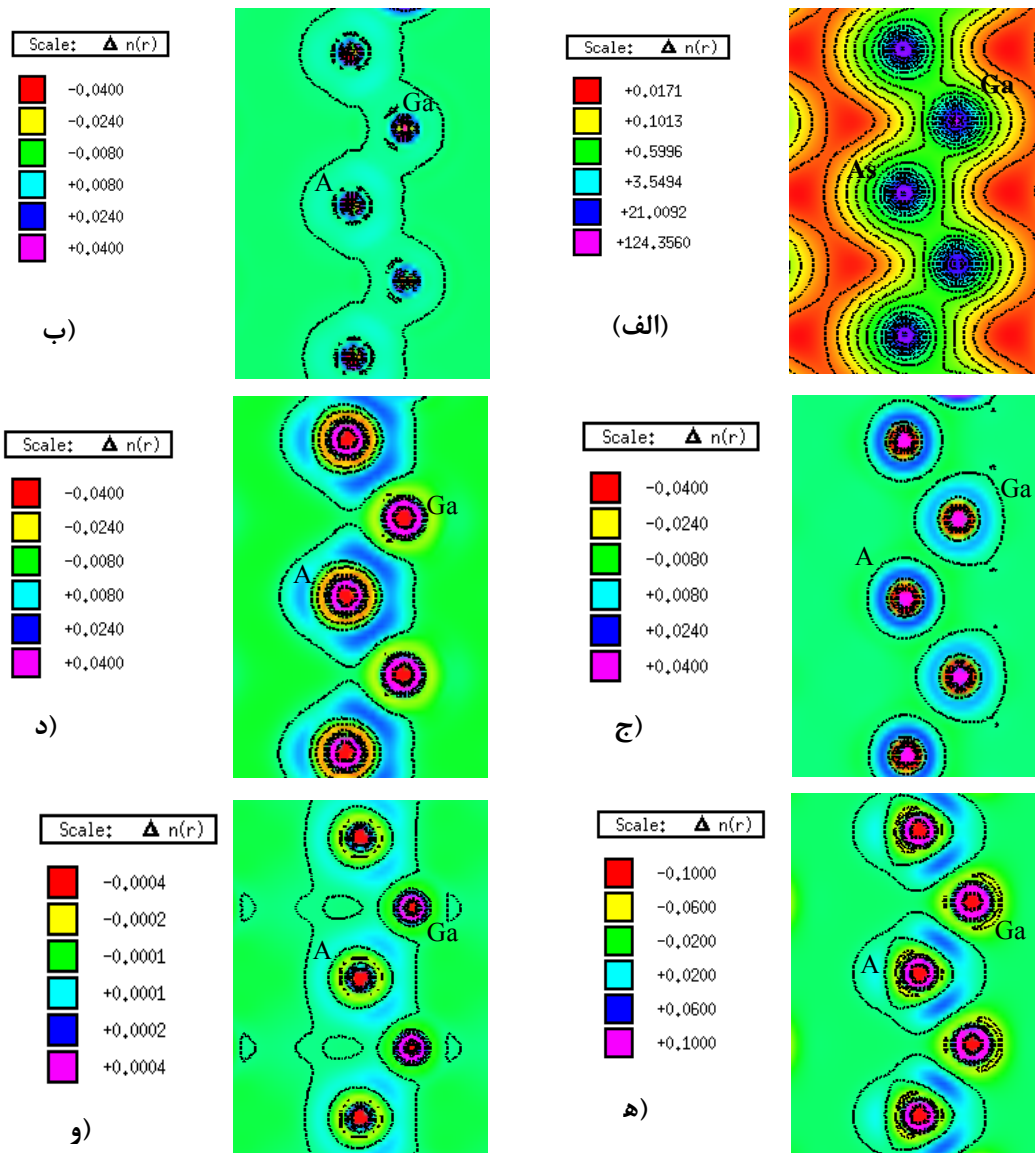
جدول ۳. جرم مؤثر الکترون و حفره سبک و سنگین مواد GaAs، InAs و InSb.

جرم مؤثر			روش	ماده
$ m_{light-hole}^*/m_e $	$ m_{heavy-hole}^*/m_e $	$ m_{electron}^*/m_e $		
۰٫۰۳۷	۰٫۳۳۷	۰٫۰۳۷	SOGGA	GaAs
۰٫۰۳۶	۰٫۳۴۵	۰٫۰۳۶	GGA- PBE	
۰٫۰۶۷	۰٫۳۵۷	۰٫۰۶۹	GGA- EV	
۰٫۰۸۹	۰٫۳۸۳	۰٫۰۹۰	TB- mBJ	
۰٫۱۱۳	۰٫۳۶۳	۰٫۰۸۹	TB- mBJ + SOC	
۰٫۰۶۴	۰٫۳۳۴	۰٫۰۶۵	HSE _{bgfit}	
(الف) ۰٫۱۱۲	(الف) ۰٫۳۷۲	(الف) ۰٫۰۹۰	کار دیگران (mBJ)	
(الف) ۰٫۰۹۰	(ب) ۰٫۳۵۰	(ب) ۰٫۰۶۷	تجربه	
۰٫۰۲۷	۰٫۳۵۷	۰٫۰۵۱	SOGGA	InAs
۰٫۰۲۶	۰٫۴۰۰	۰٫۰۲۶	GGA- PBE	
۰٫۰۳۵	۰٫۴۲۵	۰٫۰۳۵	GGA- EV	
۰٫۰۴۷	۰٫۴۴۴	۰٫۰۴۷	TB- mBJ	
۰٫۰۵۷	۰٫۴۱۱	۰٫۰۴۴	TB- mBJ + SOC	
۰٫۰۳۲	۰٫۳۷۳	۰٫۰۳۲	HSE _{bgfit}	
(الف) ۰٫۰۴۴	(الف) ۰٫۴۰۷	(الف) ۰٫۰۳۶	کار دیگران (mBJ)	
(الف) ۰٫۰۲۷	(ب) ۰٫۳۳۳	(ب) ۰٫۰۲۶	تجربه	
۰٫۰۲۳	۰٫۳۰۱	۰٫۰۲۳	SOGGA	InSb
۰٫۰۲۰	۰٫۳۰۷	۰٫۰۲۰	GGA- PBE	
۰٫۰۲۸	۰٫۳۲۱	۰٫۰۲۸	GGA- EV	
۰٫۰۳۱	۰٫۳۳۸	۰٫۰۳۲	TB- mBJ	
۰٫۰۲۶	۰٫۲۹۰	۰٫۰۲۴	TB- mBJ + SOC	
۰٫۰۱۹	۰٫۲۹۶	۰٫۰۱۹	HSE _{bgfit}	
(الف) ۰٫۰۲۴	(الف) ۰٫۲۹۲	(الف) ۰٫۰۲۲	کار دیگران (mBJ)	
(الف) ۰٫۰۱۵	(ب) ۰٫۲۶۳	(ب) ۰٫۰۱۴	تجربه	

الف [۴۷] - ب [۴۸].

شده و جرم مؤثر محاسبه شده با پتانسیل تبادل TB- mBJ همراه با تصحیح اسپین- مدار در مقایسه با نتایج تجربی با دقت بیشتری به دست آمده‌اند. همچنین مشاهده می‌شود که برای مواد با گاف انرژی کوچک‌تر، جرم مؤثر محاسبه شده با پتانسیل TB- mBJ+SOC بهتر از تابعی GGA- EV است. نتایج محاسبه شده با تابعی هیبرید HSE_{bgfit} برای جرم مؤثر الکترون و حفره با مقادیر تجربی همخوانی خوبی را نشان

محاسبه می‌کند. با این وجود می‌توان گفت که نتایج تابعی GGA- EV برای محاسبه جرم مؤثر ترکیبات با گاف انرژی بزرگ با هزینه کم مناسب هستند و نتایج تابعی GGA- PBE برای محاسبه جرم مؤثر ترکیباتی که دارای گاف بزرگ هستند، بسیار مناسب است. نتایج محاسبات جرم مؤثر با پتانسیل تبادل TB- mBJ با نتایج دیگران همخوانی داشت. با اعمال اثر اسپین- مدار، شکل ترازهای انرژی دچار تغییر کوچکی



شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) چگالی بار الکترونی گالیم آرسناید (الف) با تابعی SOGGA، (ب) تفاوت چگالی بار الکترونی تابعی PBE با تابعی SOGGA، (ج) تفاوت چگالی بار الکترونی تابعی LDA با تابعی SOGGA، (د) تفاوت چگالی بار الکترونی تابعی GGA-EV با تابعی SOGGA، (ه) تفاوت چگالی بار الکترونی پتانسیل تبدیلی TB-mBJ با تابعی SOGGA و (و) تفاوت چگالی بار الکترونی پتانسیل تبدیلی TB-mBJ+SOC با پتانسیل تبدیلی TB-mBJ.

۴.۳. چگالی الکترونی

به منظور تحلیل تابعی‌های مختلف استفاده شده برای محاسبه گاف انرژی، چگالی بار الکترونی تابعی SOGGA و اختلاف چگالی الکترونی سایر تابعی‌ها با تابعی SOGGA رسم شده است. چگالی بار الکترونی بر روی سطوح بلوری (۱۱۰) رسم شده است. با توجه به شکل ۲. الف مشخص می‌شود، که توزیع بار الکترونی در تابعی SOGGA در محل اتم‌ها بیشترین مقدار را دارد و با فاصله گرفتن از محل اتم‌ها کاهش

دادند. بر اساس نتایج حاصل بهترین روش برای محاسبه جرم مؤثر روش تابعی هیبرید HSE_{bgfit} است. تنها ایراد این روش هزینه بالای محاسبات آن است. برای محاسبه خواص اپتیکی مواد، مهم است که گاف درست محاسبه شده باشد تا محل قله‌ها در خواص اپتیکی درست محاسبه شود. لذا با توجه به این مطلب پتانسیل تبدیلی TB-mBJ در حضور و در غیاب اثر اسپین-مدار و تابعی هیبرید باید برای محاسبه خواص اپتیکی مناسب هستند.

می‌یابد. همچنین اختلاف چگالی بار الکترونی در شکل‌های ۲. ب و ج نشان می‌دهند که توزیع بار الکترونی در تابعی‌های LDA, GGA- PBE و SOGGA بسیار به هم شبیه است و در بیشتر نقاط رفتار یکسانی دارند، اما در محل‌ها تفاوت‌هایی دیده می‌شود، از جمله این که در مرکز اتم‌ها چگالی بار الکترونی تابعی LDA بیشتر از تابعی SOGGA است و با فاصله گرفتن از مرکز اتم چگالی بار الکترونی کمتر شده و دوباره کمی بیشتر می‌شود؛ به طوری که با فاصله کمی از مرکز اتم تغییرات صفر می‌شود. مقایسه چگالی بار الکترونی تابعی GGA- EV و SOGGA (شکل ۲. د) نشان می‌دهد که تابعی GGA- EV چگالی بار الکترونی را در مرکز هر دو اتم گالیم و آرسنیک کمتر در نظر می‌گیرد. تفاوت قابل توجهی که مشاهده می‌شود این است که، در مقایسه با تابعی‌های قبلی، تغییر چگالی بار الکترونی اطراف اتم آرسنیک بزرگ‌تر شده و برعکس اطراف اتم گالیم کوچک‌تر شده است که باعث شده گاف با دقت بسیار بهتری محاسبه شود. مقایسه چگالی الکترونی پتانسیل تبدالی TB- mBJ با تابعی SOGGA (شکل ۲. و) شبیه مقایسه تابعی GGA- EV و SOGGA است با این تفاوت که، کاهش چگالی بار الکترونی اطراف هر دو اتم در پتانسیل تبدالی TB- mBJ بیشتر است به خصوص در اطراف اتم گالیم که در نهایت منجر به محاسبه گاف بزرگ‌تری نسبت به تابعی GGA- EV شده است. با مقایسه چگالی بار الکترونی پتانسیل تبدالی TB- mBJ و TB- mBJ+SOC مشاهده می‌شود که در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار، در مرکز اتم آرسنیک با کاهش چگالی مواجه هستیم و همچنین فضای بزرگ‌تری از اطراف اتم آرسنیک با افزایش کم چگالی الکترونی مواجه است و چگالی الکترون نزدیک مرکز اتم گالیم با افزایش مواجه است. با توجه به این که برای ترکیبات حاضر گاف با تابعی TB- mBJ بزرگ‌تر از داده‌های تجربی به دست می‌آید، تأثیر تصحیح اسپین-مدار باعث کاهش اندکی در اندازه گاف می‌شود.

۴. نتیجه‌گیری

در این تحقیق، ما مطالعات ابتدا به ساکن را با روش پتانسیل

کامل امواج تخت بهبود یافته خطی، در نظریه تابعی چگالی برای بررسی تابعی‌های مختلف در مورد ترکیبات III-V به کار گرفتیم. ترکیبات منتخب گستره متنوعی از مقادیر گاف انرژی را دارند: گاف بزرگ (GaAs)، گاف متوسط (InAs)، گاف کوچک (InSb) و گاف منفی (TIAs). خواص ساختاری شامل ثابت شبکه، مدول انبوهه و مشتق آن با تابعی‌های LDA, GGA- PBE, SOGGA و GGA- WC مورد محاسبه قرار گرفتند. مشخص شد که تابعی SOGGA پیش‌بینی خواص ساختاری را نسبت به سایر تابعی‌ها بهبود می‌بخشد و بهترین گزینه برای محاسبه خواص ساختاری ترکیبات III-V است. سپس خواص الکترونی مواد مذکور شامل گاف انرژی، ساختار نواری و جرم مؤثر الکترون و حفره سبک و سنگین محاسبه شدند. در محاسبه خواص الکترونی، از تابعی‌های SOGGA, GGA- EV و پتانسیل تبدالی TB- mBJ و تابعی هیبرید HSE_{bgfit} استفاده شد. دریافتیم که پتانسیل تبدالی TB- mBJ در حضور تصحیح اسپین-مدار منجر به مقادیر گاف نواری بسیار نزدیک به داده‌های تجربی می‌شود. همچنین با رسم ساختار نواری مشخص شد که همه ترکیبات مذکور با تابعی GGA- EV و پتانسیل تبدالی TB- mBJ گاف مستقیم دارند. تنها برای ماده TIAs نتایج تابعی‌های LDA, GGA- PBE و SOGGA گاف انرژی را منفی نشان می‌دهند. در محاسبه جرم مؤثر از تابعی‌های SOGGA+SOC, SOGGA, GGA- PBE, GGA- EV, TB- mBJ, TB- mBJ+SOC و TB- mBJ تابعی هیبرید HSE_{bgfit} استفاده شد. مشاهده شد که اثر اسپین-مدار باعث بهتر شدن نتایج جرم مؤثر در مقایسه با نتایج تجربی می‌شود. همچنین دریافت شد که تابعی هیبریدی HSE_{bgfit} بهترین نتایج جرم مؤثر را در مقایسه با نتایج تجربی به دست می‌دهد. با رسم چگالی بار الکترونی گالیم آرسناید با تابعی‌های مختلف، مشخص شد که تابعی‌هایی که توزیع چگالی بار الکترونی اطراف اتم گالیم و آرسنیک را همگن محاسبه کرده‌اند، گاف را کوچک محاسبه می‌کنند و تابعی‌ها و پتانسیل تبدالی که چگالی بار الکترونی اطراف اتم آرسنیک و همچنین فضای بین اتم گالیم و آرسنیک را دقیق‌تر توزیع کرده‌اند، گاف را با دقت بسیار بهتری محاسبه می‌کنند. در

حقیقت تابعی‌هایی که قدرت الکترون‌خواهی اتم‌ها را با دقت

بهتری در نظر می‌گیرند، گاف را بهتر محاسبه می‌کنند.

مراجع

- and A Sher, *Applied Physics Letters* **65** (1994) 2714.
26. J ZHOU, X- M REN, Y- Q HUANG, Q WANG, and H HUANG, *Chinese Physics Letters* **25** (2008) 3353.
27. S Kacimi, H Mehnane, and A Zaoui, *Journal of Alloys and Compounds* **587** (2014) 451.
28. P Haas, F Tran, and P Blaha, *Physical Review B* **79** (2009) 085104.
29. B Peter, et al, *Journal of Chemical Physics* **152.7** (2020) 074101.
30. J P Perdew, K Burke, and M Ernzerhof, *Errata:(1997) Physical Review Letters* **78** (1996) 1396.
31. E Engel and S H Vosko, *Physical Review B* **47** (1993) 13164.
32. F Tran, P Blaha, and K Schwarz, *Journal of Physics: Condensed Matter* **19** (2007) 196208.
33. I Bhat, Wide Bandgap Semiconductor Power Devices (2019) 43.
34. J Heyd, G E Scuseria, and M Ernzerhof, *The Journal of Chemical Physics* **118** (2003) 8207.
35. F Murnaghan, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **30** (1944) 244.
36. C Filippi, D J Singh, and C J Umrigar, *Physical Review B* **50** (1994) 14947.
37. S Hussain, S Dalui, R Roy, and A Pal, *Journal of Physics D: Applied Physics*, **39** (2006) 2053.
38. S Adachi, Properties of Semiconductor Alloys: Group- IV, III- V and II- VI Semiconductors **28**: John Wiley & Sons (2009).
39. R Ahmed, S J Hashemifar, H Rashid, and H Akbarzadeh, *Communications in Theoretical Physics* **52** (2009) 527.
40. O Madelung, Semiconductors: Data Handbook: Springer Science & Business Media (2012).
41. G B Akyüz, A Tunali, S Gulebaglan, and N Yurdasan, *Chinese Physics B* **25** (2015) 027101.
42. D Koller, F Tran, and P Blaha, *Physical Review B* **85** (2012) 155109.
43. M I Ziane, Z Bensaad, B Labdelli, and H Bennacer, *Sensors & Transducers* **27** (2014) 374.
44. O Madelung, *New series* (1982) 571.
45. I Vurgaftman, J á Meyer, and L á Ram- Mohan, *Journal of Applied Physics* **89** (2001) 5815.
46. A Owens and A Peacock, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **531** (2004) 18.
47. Y- S Kim, M Marsman, G Kresse, F Tran, and P Blaha, *Physical Review B* **82** (2010) 205212.
48. Y Wang, H Yin, R Cao, F Zahid, Y Zhu, L Liu, J Wang, and H Guo, *Physical Review B* **87** (2013) 235203.
1. A Assali, M h Bouslama, A Reshak, S Zerroug, and H Abid, *Optik* **135** (2017) 57.
2. M Hadjab, S Berrah, H Abid, M I Ziane, H Bennacer, and B G Yalcin, *Optik* **127** (2016) 9280.
3. M Othman, E Kasap, and N Korozlu, *Journal of Alloys and Compounds* **496** (2010) 226.
4. M Ferhat and A Zaoui, *Physical Review B* **73** (2006) 115107.
5. A H Reshak, H Kamarudin, S Auluck, and I Kityk, *Journal of Solid State Chemistry* **186** (2012) 47.
6. S Z Karazhanov and L L Y Voon, *Semiconductors* **39** (2005) 161.
7. R Ahmed, S J Hashemifar, H Akbarzadeh, and M Ahmed, *Computational Materials Science* **39** (2007) 580.
8. P Hohenberg and W Kohn, *Physical Review* **136** (1964) B864.
9. S Mankefors and S Svensson, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **12** (2000) 1223.
10. S Gulebaglan, E Dogan, M Aycibin, M Secuk, B Erdinc, and H Akkus, *Open Physics* **11** (2013) 1680.
11. Y Yao, D König, and M Green, *Solar Energy Materials and Solar Cells* **111** (2013) 123.
12. M Aslan, B G Yalçın, and M Üstündağ, *Journal of Alloys and Compounds* **519** (2012) 55.
13. Z Feng, H Hu, S Cui, W Wang, and C Lu, *Open Physics* **7** (2009) 786.
۱۴. ح تشکری، ف کنجوری و ع نجاتی، مجله پژوهش فیزیک ایران ۴، ۱۴ (۱۳۹۳) ۲۲۱.
۱۵. ح بادهیان، ح صالحی و م فرید، مجله پژوهش فیزیک ایران ۱۵، ۱ (۱۳۹۴) ۱.
۱۶. ر فتحی و ط مولاروی، مجله پژوهش فیزیک ایران ۱۶، ۱ (۱۳۹۵) ۳۵.
17. J P Perdew, *Physical Review B* **33** (1986) 8822.
18. H Mazouz, A Belabbes, A Zaoui, and M Ferhat, *Superlattices and Microstructures* **48** (2010) 560.
19. L Shi, Y Duan, and L Qin, *Computational Materials Science* **50** (2010) 203.
20. Z Wu and R E Cohen, *Physical Review B* **73** (2006) 235116.
21. Y Zhao and D G Truhlar, *The Journal of Chemical Physics* **128** (2008) 184109.
22. F Tran and P Blaha, *Physical Review Letters* **102** (2009) 226401.
23. F E H Hassan, A Postnikov, and O Pagès, *Journal of Alloys and Compounds* **504** (2010) 559.
24. M I Ziane, Z Bensaad, T Ouahrani, and H Bennacer, *Materials Science in Semiconductor Processing* **30** (2015) 181.
25. M Van Schilfgaarde, A B Chen, S Krishnamurthy,