

## Investigation of Structural and Electrical Properties of GaAs with Zinc-Blende Phase

Hamdollah Salehi<sup>1</sup>

Received: 2019.03.19

Accepted: 2020.01.25

### Abstract

In this paper, the electronic and band structure of GaAs in the zinc-blende phase are calculated making use of Full Potential Linear Augmented Plan Wave (FP-LAPW) method in the framework of density functional theory (DFT) by Wien2k software. The exchange and correlation potentials are calculated within the scheme of LDA, PBE and GGA approximations. The calculated band gap for GaAs with the best approximation PBE shows that there is a direct band gap at the  $\Gamma$  point, which is equal to 0.8eV; so, GaAs is semiconductor. The results show that the calculated electronic and structural properties of this composition, including lattice constant and compressibility derivative, are in good agreement with experimental and theoretical results obtained in others' works.

**Keywords:** *Semiconductor, Density Functional Theory, Lattice Constant, Bulk Module, GaAs,*

---

<sup>1</sup> Associate Professor. Department of physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. Email: salehi\_h@scu.ac.ir

دوفصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران، دانشگاه الزهرا

سال هشتم، پیاپی ۱۵، پاییز و زمستان ۱۳۹۷

## محاسبه ویژگی‌های الکترونی و ساختاری نوارهای انرژی بلور گالیم آرسنید در فاز بلندروی<sup>۱</sup>

حمدالله صالحی<sup>۲</sup>

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۱۲/۲۸

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۱۱/۰۵

### چکیده

در این مقاله ساختار الکترونی و ساختار نوارهای انرژی بلور GaAs در فاز بلندروی با استفاده از روش امواج تخت بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل FP-LAPW در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) و با تقریب‌های مختلف و استفاده از کد محاسباتی Wien2k انجام شده است. در این روش، برای محاسبه پتانسیل تبادل همبستگی از تقریب‌های LDA و شیب تعمیم یافته استفاده شده است. نتایج بیانگر آن است که خصوصیات الکترونی و ساختاری محاسبه شده این ترکیب از جمله ثابت شبکه و مدول حجمی و تراکم پذیری و مشتق مدول حجمی با استفاده از تقریب GGA نسبت به سایر تقریب‌ها سازگاری بهتری با نتایج تجربی و نظری به دست آمده از روش‌های دیگر دارد.

**واژگان کلیدی:** نیمرسانا، GGA، نظریه تابعی چگالی، مدول حجمی، ثابت شبکه.

<sup>۱</sup> DOI: 10.22051/jap.2020.25298.1123

<sup>۲</sup> دانشیار گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران، اهواز، ایران. (نویسنده مسئول): salehi\_h@scu.ac.ir

## ۱. مقدمه

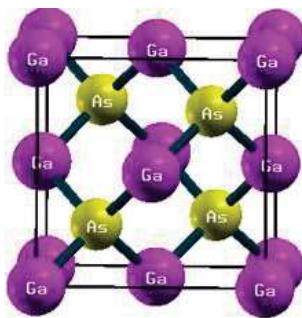
بررسی مواد نیم‌رسانا در اوایل قرن نوزدهم آغاز شد و مطالعات بر نیم‌رساناهای عنصری و مرکب به طور گسترده ادامه یافت. یکی از نیم‌رساناهای مرکب که بسیار مد توجه قرار گرفت گالیم آرسنید بود که امروزه نیز کاربرد زیادی در الکترونیک دارد [۱، ۲]. گالیم آرسنید جزو نیم‌رساناهای مرکب بوده و دارای فازها یا ساختارهای بلوری مختلفی مانند بلندروی و وورتسایت است. در این مقاله، ساختار گالیم آرسنید در فاز بلندروی بررسی شده است. گالیم آرسنید ترکیب شیمیایی از آرسنیک در گروه ۷ جدول مندلیف با عدد اتمی ۳۳ و گالیم در گروه III جدول با عدد اتمی ۳۱ است. نیم‌رساناهای مرکب به فرمول شیمیایی AB که در آن، A عنصری سه‌ظرفیتی و B عنصری پنج‌ظرفیتی است، ترکیبات ۷-III می‌نامند و گالیم آرسنید نیز یکی از این ترکیبات است [۳]. گالیم آرسنید بعد از سیلیکن یکی از مهم‌ترین نیم‌رساناها محسوب می‌شود. حتی برخی خصوصیات الکترونیکی گالیم آرسنید باعث برتری آن بر Si شده است [۱]. گالیم آرسنید در دیودهای لیزری و سلول‌های خورشیدی و دیودهای فروسرخ استفاده می‌شود. این نیم‌رسانا در بسامدهای بالا پارازیت کمتری در مقایسه با قطعات ساخته از سیلیکن دارد. ولتاژ شکست گالیم آرسنید نسبت به سیلیکن بیشتر است. یکی از مهم‌ترین خصوصیات گالیم آرسنید شکاف انرژی مستقیم آن است. در نیم‌رساناهایی با شکاف انرژی مستقیم، الکترون‌ها در کمینه نوار رسانش می‌توانند به طور مستقیم با حفره‌ها در بیشینه نوار ظرفیت ترکیب شوند و پایستگی تکانه همچنان حفظ شود [۳، ۴]. زمانی که الکترون با حفره ترکیب می‌شود یعنی الکترون به نوار ظرفیت می‌رود، انرژی آزادشده به شکل فوتون نوری انتشار می‌یابد. این ویژگی سبب می‌شود نیم‌رساناهایی با شکاف انرژی مستقیم به عنوان منتشرکننده‌های نوری استفاده شود. ترکیب گالیم آرسنید به دلیل داشتن خواص منحصربه‌فردی مثل شکاف نواری مستقیم و تحرک پذیری عالی الکترونی و سرعت الکترون‌ها کاربرد گسترده‌ای در وسایل اپتوالکترونیک و الکترونیک دارد. ویژگی‌هایی مانند مقاومت بیشتر در برابر تابش، عملیات سریع در پیوندگاه‌ها با مقدار کم انرژی و پتانسیل تبدیل سیگنال‌های الکتریکی به سیگنال‌های اپتیکی و ثابت دی‌الکتریک کوچک، سبب شده است این نیم‌رسانا به نسبت نیم‌رساناهای دیگر مورد توجه ویژه قرار گیرد. همچنین، چندین گزارش تجربی درباره شکاف نواری آن در دمای اتاق از ۱٫۲ تا ۱٫۷ الکترون‌ولت مقادیر نظری بین ۰٫۲۰۶ تا ۰٫۴۶۳ الکترون‌ولت با کدهای محاسباتی Castep و Siesta گزارش شده است [۱، ۷]. گالیم آرسنید در فشارهای مختلف ساختارهای بلوری متفاوتی دارد. این فازها با استفاده از پراش پرتو X با منبع سیکلوترونی تا فشار ۸۰ GPa مطالعه شده است [۸]. در فشار عادی، گالیم آرسنید فاز بلندروی دارد.

## ۲. روش محاسبات

ساختار بلندروی را می توان دو شبکه درهم رفته fcc تعبیر کرد. اتم نوع اول در یک شبکه fcc و اتم دیگر نیز در شبکه fcc مشابهی در  $(1/4)(aaa)$  از اتم نوع اول قرار دارد که در آن،  $a = 0.35$  است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب DFT و با تقریب های مختلف و نرم افزار Wien2k انجام شده است [۹-۱۳]. در این بسته محاسباتی، معادلات کوهن-شم به روش خودسازگار حل شده و ویژه مقادیر و ویژه توابع همگرا به دست می آیند. برای جداسازی حالت های ظرفیت از مغزه، انرژی مرز جدایی بین الکترون های ظرفیت و مغزه برابر با  $-7$  ریذبرگ در نظر گرفته شد، که با توجه به این انرژی جداسازی، تفکیک الکترون های ظرفیت و مغزه برای عناصر تشکیل دهنده ترکیب در جدول (۱) آورده شده است. همگرایی را بر مبنای انرژی قرار دادیم، که با  $8$  چرخه و با اختلاف انرژی از مرتبه  $10^{-6}$  ریذبرگ به همگرایی رسیدیم. ثابت شبکه که به صورت تجربی اندازه گرفته شده برابر با  $5.653/\text{\AA}$  است [۸]، که در محاسبات از آن استفاده شده است. برای رسیدن به پارامتر همگرایی مناسب، تعداد نقاط مختلفی را در نظر گرفتیم، که در نهایت در فاز بلندروی تعداد نقاط در نظر گرفته  $1400$  نقطه بود. پارامتر همگرایی  $RK_{max}$  را  $7$  انتخاب کردیم که این پارامتر تعداد پایه ها را در محاسبات تنظیم می کند و  $G_{max}=14$  می باشد. شعاع کره های مافین-تین را به صورت  $R_{MT}(As) = 2au$  و  $R_{MT}(Ga) = 2au$  در نظر می گیریم. برای نمونه، ساختار بلوری ترکیب گالیم آرسنید در فاز بلندروی رسم شده توسط نرم افزار Xcrysden در شکل (۱) آورده شده است.

**جدول ۱** عدد اتمی و تفکیک الکترون های مغزه و ظرفیت برای عناصر تشکیل دهنده ترکیب گالیم آرسنید.

اتم	عدد اتمی	الکترون های مغزه	الکترون های ظرفیت
گالیم	۳۱	$1s^2/2s^2/2p^6/3s^2/3p^6/3d^{10}$	$4s^2/4p^1$
ارسنیک	۳۳	$1s^2/2s^2/2p^6/3s^2/3p^6/3d^{10}$	$4s^2/4p^3$

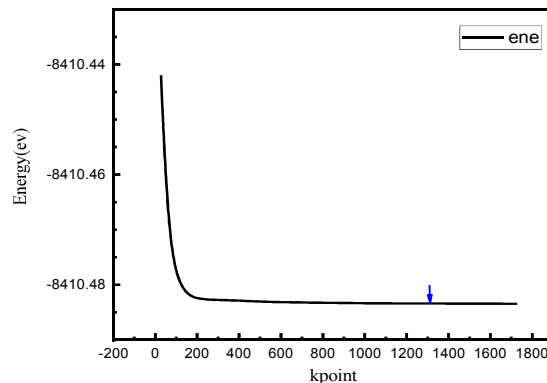


شکل ۱ ساختار بلوری ترکیب گالیم آرسنید در فاز بلندروی.

### ۳. نتایج

#### الف. خواص ساختاری ترکیب

یکی از ملزومات مهم در محاسبات ابتدایه ساکن، بهینه‌سازی پارامترهای ورودی است. پارامترهای ورودی، شامل انرژی قطع تابع موج و تعداد نقاط  $k$  منطقه وارون، به منظور کاهش حجم محاسبات و دستیابی به دقت کافی، در ابتدا بهینه شده و سپس در محاسبات مربوط به ویژگی‌های ساختاری و الکترونی و غیره به کار گرفته می‌شود. همان‌گونه که می‌دانیم، در هر جامد تناوبی با تعداد زیادی الکترون سر و کار داریم و قضیه بلوخ این امکان را فراهم می‌کند که به جای حل معادلات تک‌الکترونی کوهن-شم برای تعداد زیادی الکترون، این محاسبات را برای تعداد محدودی الکترون در منطقه اول بریلوئن انجام دهیم. در منطقه اول بریلوئن؟ با تعداد زیادی  $k$  مجاز مواجه هستیم. با توجه به اینکه توابع موج الکترونی برای نواحی  $k$  نزدیک به هم مشابهند، برای یک ناحیه از فضای  $k$  می‌توان توابع موج را یکسان در نظر گرفت و محاسبات را برای تعداد کم‌تری از نقاط  $k$ ، در منطقه اول بریلوئن کاسته انجام داد. این همان تقریب نمونه‌گیری نقاط  $k$  است. برای بهینه‌سازی تعداد نقاط  $k$ ، به ازای مقدار بهینه انرژی قطع تابع موج و نیز مقادیر مختلف نقاط  $k$  در منطقه اول، اجراهای خودسازگار انجام داده و انرژی کل یاخته واحد را به ازای تعداد نقاط  $k$  محاسبه می‌کنیم. سپس نمودار انرژی کل یاخته واحد را بر حسب تعداد نقاط  $k$  رسم می‌کنیم. این نمودار برای ترکیب گالیم آرسنید در تقریب GGA در شکل (۲) آورده شده است. با توجه به نمودار، مقدار بهینه، مقداری است که به ازای آن انرژی کل تغییراتش ناچیز و منحنی همگرا شود که به روش مونیخ‌ورست-پیک نقاط با مش بندی  $11 \times 11 \times 11$  در فضای وارون بهینه‌سازی شده‌اند.

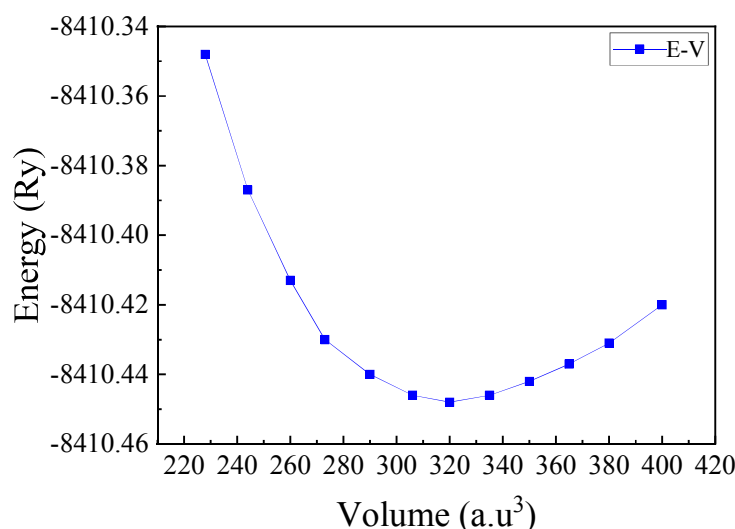


شکل ۲ نمودار بهینه‌سازی تعداد نقاط  $k$  برای ترکیب گالیم آرسنید.

در محاسبات به روش نظریه تابعی چگالی علی‌رغم اینکه اطلاعات ورودی ممکن است بر نتایج تجربی یا نظری استوار باشند، با مقایسه انرژی مربوط به حجم‌های مختلف یاخته واحد، می‌توان پایدارترین حالت (کمترین انرژی) را شناسایی و به دنبال آن به پارامترهای ساختاری بهینه دست یافت. برای محاسبه خواص ساختاری ترکیب گالیم آرسنید، پس از انجام محاسبات خودسازگار، انرژی یاخته واحد ترکیب را به ازای حجم‌های مختلف حول حجم تعادلیش وردش دادیم و محاسبات را بر اساس تقریب‌های مختلف انجام دادیم. یکی از این نمودارها در شکل (۳) آورده شده است. تغییرات انرژی بر حسب حجم از طریق معادله مورناگون به دست می‌آید [۱۴]. معادله حالت مورناگون به صورت زیر است،

$$E(v) = \frac{B_0 V}{B_0^{\phi}} \left( 1 - \frac{B_0^{\phi} \frac{V_0}{V} + \left(\frac{V_0}{V}\right)^{B_0^{\phi}}}{B_0^{\phi} - 1} \right) + E_0 \quad (1)$$

در این معادله،  $B_0$  مدول حجمی و  $B_0^{\phi}$  مشتق آن و  $E_0$  انرژی حالت پایه در دما و فشار صفر است. در این محاسبات، ابتدا وابستگی انرژی به حجم محاسبه شد و سپس با به کار بردن معادله حالت مورناگون برای این ساختار، ثابت شبکه و مدول حجمی و مشتق آن نسبت به فشار و تراکم‌پذیری محاسبه شد، که نتایج حاصل در جدول (۲) آورده شده است.



شکل ۳ نمودار انرژی بر حسب حجم گالیم آرسنید در فاز بلندروی با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته.

## جدول ۲ پارامترهای ساختاری محاسبه شده در این کار و مقایسه آن با نتایج دیگران

در بلور GaAs در فاز بلند روی.

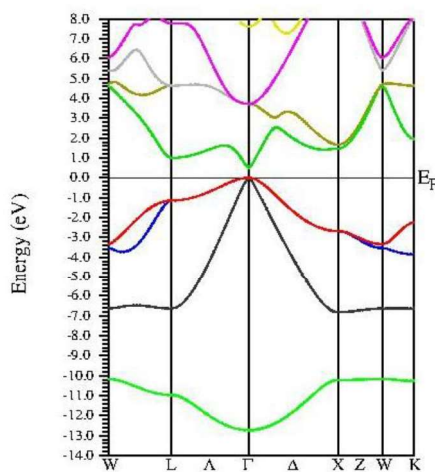
کمیت‌های محاسبه شده	GGA96	PBA-GGA	LDA	LSDA	تجربی [۱۵،۶]	نظری [۱۶،۷]
$a$ (Å)	۵/۷۴	۵/۷۴۴۲	۵/۶	۵/۶۱	۵/۶۵۳	۵/۷۹
$B$ (Gpa)	۶۰/۹۲۲۴	۶۰/۸۲۷۳	۷۲/۷۲۷۴	۷۲/۰۰۰۱	۷۵	۶۸
$B\epsilon$	۴/۲۷۱۷	۴/۲۶۸۹	۴/۶۰۶۹	۴/۶۰۶۹	-	-
$V_0$	۳۱۹/۶۰۴۸	۳۱۹/۷۶۶۵	۳۱۱/۸۱	۳۱۱/۸۱	۳۱۴/۷۶۱	۳۲۲/۳۸۹
$K$ (m <sup>2</sup> /N)	$۰/۰۱۶۴۱ \cdot 10^{-14}$	$۰/۰۱۶۴۴ \cdot 10^{-14}$	$۰/۰۱۳۷۵ \cdot 10^{-14}$	$۰/۰۱۳۸۹ \cdot 10^{-14}$	$۰/۰۱۳۳۳ \cdot 10^{-14}$	$۰/۰۱۴۷۱ \cdot 10^{-14}$
$E_g$ (Ry)	-۸۴۱۰/۴۴۷۹۱۹	-۸۴۱۰/۴۴۸۶۳۲	-۸۳۸/۸۰۸۸۷۵	-۸۳۸/۸۰۸۸۷۵	-	-

همانطور که در جدول (۲) مشاهده می‌شود، نتایج روش PBE-GGA سازگاری خوبی بین نتایج تجربی و نظری را بیان می‌کند پارامترهای ساختاری در حالتی که اسپین هم در نظر گرفته شده است با حالتی که اسپین در نظر گرفته نشده است تفاوتی ندارد که بیانگر این است که اسپین در خواص ساختاری ترکیب تأثیری ندارد به دلیل اینکه مطابق با جدول (۱) ارییتال  $d$  جزو الکترون‌های مغزه بوده و تأثیری در محاسبات ندارد. با مشاهده مقادیر به دست آمده برای ثابت شبکه در فاز بلندروی با استفاده از تقریب‌های شیب تعمیم یافته و چگالی موضعی نتیجه می‌گیریم که تقریب شیب تعمیم یافته مقدار پارامتر شبکه را اندکی بیش از مقدار تجربی و تقریب چگالی موضعی اندکی کمتر از آن به دست می‌دهد. به نظر می‌رسد که در تقریب چگالی موضعی یک فشار مثبت به دستگاه وارد می‌شود، در صورتی که در تقریب شیب تعمیم یافته، مقداری فشار منفی به دستگاه وارد می‌شود. از طرفی با مقایسه نتایج مشاهده می‌شود که مدول حجمی در تقریب GGA کوچکتر و در تقریب LDA بزرگتر است، که این نتایج ناشی از همان فشارهای اعمالی به دستگاه در دو تقریب مذکور است. همان طور که قبلاً بیان شد، مدول حجمی عکس تراکم پذیری است و بیانگر استحکام بلور است. هر چه مدول حجمی بیشتر باشد استحکام بلور نیز بیشتر است و می‌توان چنین نتیجه گرفت که اعمال فشار مثبت در تقریب چگالی موضعی سبب بزرگ تر شدن مدول حجمی می‌شود و اعمال فشار منفی در تقریب شیب تعمیم یافته باعث کوچک تر شدن مدول حجمی می‌شود و مشاهده می‌شود که در نظر گرفتن برهمکنش اسپین تأثیری در محاسبات ندارد و دلیل این را شاید بتوان به مقادیر عدد اتمی اتم‌های آرسنیک و گالیم نسبت داد.

## ب. ساختار نوارهای انرژی

در بلورها ترازهای انرژی به صورت ساختار نواری شکل می‌گیرند و همچنین نواحی ممنوعی نیز وجود دارد که در آن‌ها نوار انرژی تشکیل نمی‌شود. این نوار ممنوع «شکاف نواری» نامیده می‌شود. اهمیت محاسبه ساختار نواری در نتایج حاصل از آن نهفته است. با محاسبه ساختار

نوارهای انرژی هر ماده می‌توان خواصی از ماده نظیر رسانا یا نیمرسانا یا عایق بودن ترکیب را پیش‌بینی کرد، یا حتی به نوع شکاف از لحاظ مستقیم یا غیرمستقیم بودن آن پی برد. علاوه بر این، می‌توان اتم‌ها و اربیتال‌هایی را که نقش اساسی تری در گذارهای احتمالی سامانه دارند، شناسایی کرد. ساختار نوارهای انرژی GaAs برای فاز بلندروی در راستای خطوط پرتقارن در تقریب‌های مختلف محاسبه و برای نمونه یکی از آن‌ها در بازه ۱۴- تا ۸ الکترون‌ولت در شکل (۴) رسم شده است. در این شکل، شکاف نواری مستقیم در نقطه  $\Gamma$  به اندازه ۰٫۸ الکترون‌ولت است که نسبت به مقادیر نظری دیگران که بین ۰٫۲۰۵ الکترون‌ولت تا حدود ۰٫۵ الکترون‌ولت است [۶، ۷] بهبود یافته اما با مقدار تجربی تفاوت دارد که این تفاوت را باید در خود نظریه تابعی چگالی و اعمال تقریب برای محاسبه پتانسیل تبدیلی همبستگی جستجو کرد. در همه این شکل‌ها نیز انرژی فرمی به عنوان مبدأ مقیاس انتخاب شده و مقیاس انرژی بر حسب الکترون‌ولت است. شکل (۴) نمایش دهنده ساختار نواری بلور گالیم آرسنید در فاز بلندروی است. با توجه به این نمودار، نیمرسانا بودن این بلور و وجود شکاف انرژی در تراز فرمی تحت شرایط عادی کاملاً مشهود است و این شکاف نواری مستقیم که گذار بین نوار ظرفیت و رسانش است تنها ناشی از یک تغییر در انرژی است و نه تغییر در تکانه. وجود شکاف مستقیم در این ترکیب آن را برای استفاده در دیودهای گسیل نوری و لیزرهای نیمرسانا مفید کرده است. همچنین، مقدار جابه‌جایی انرژی (انرژی فرمی) در ساختار نواری شکل (۴) با تقریب PBE-GGA برابر  $0,3674082372$  ریدبرگ است. در جدول (۳)، شکاف انرژی گالیم آرسنید در تقریب‌های مختلف برای فاز بلندروی محاسبه و با نتایج نظری دیگران مقایسه شده است.



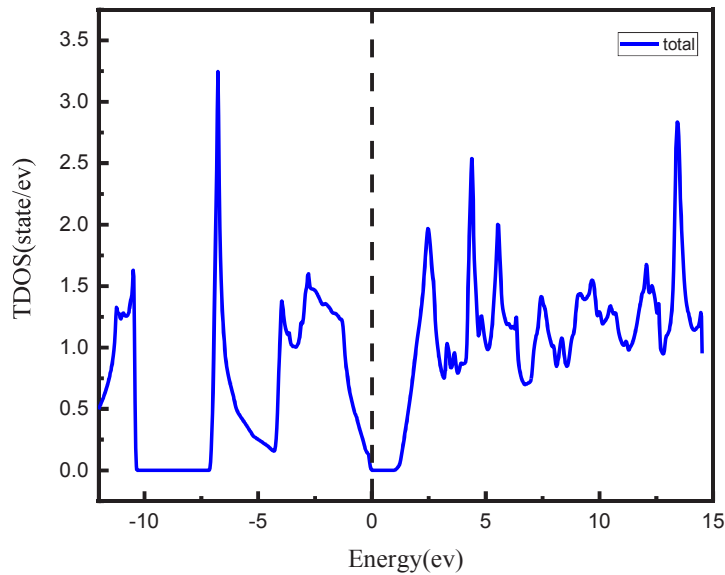
شکل ۴ ساختار نواری گالیم آرسنید در فاز بلندروی.



**جدول ۳** محاسبه شکاف نوارهای انرژی در این کار و مقایسه با کارهای دیگران.

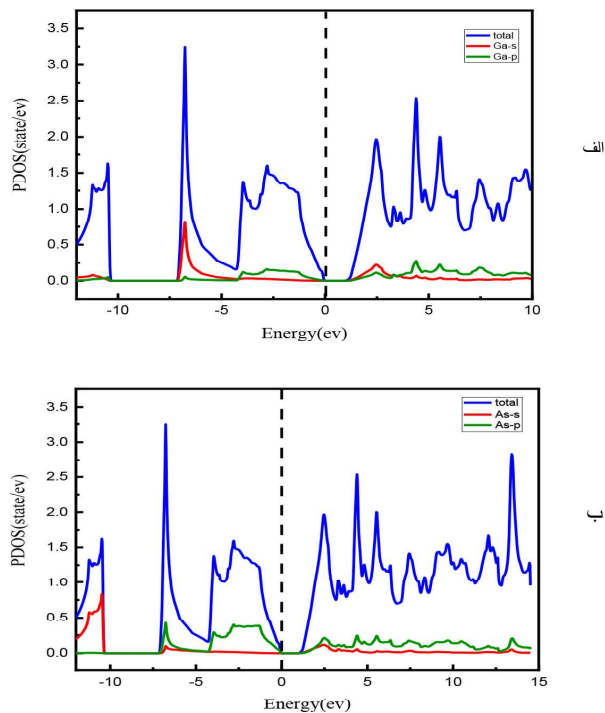
کار حاضر				کار دیگران
شکاف انرژی	GGA96	PBE-GGA	LDA	[۶،۷،۱۷،۱۸]
$G(eV)$	۰،۶۵	۰،۸	۰،۵	۱،۴۲-۰،۲۰۵

همان‌طور که گفتیم توزیع الکترون در طیف انرژی به وسیله چگالی حالت‌ها توصیف می‌شود و یکی از کمیت‌های مهم برای بررسی ویژگی‌های الکترونی مواد محسوب می‌شود. چگالی حالت‌های الکترونی در نوار برابر است با: تعداد حالت‌های الکترونی در بازه معینی از انرژی. این تابع در فرآیندهای الکترونی به‌ویژه در پدیده‌های تراپردی بسیار مهم است. با استفاده از چگالی حالت‌های بلور می‌توان از منظری دیگر، به مقدار شکاف نواری دست یافت یا مشارکت اتم‌ها و هر یک از اربیتال‌های آن‌ها را در ایجاد توزیع الکترونی مذکور بررسی کرد. نمودار چگالی حالت‌های کل بر حسب انرژی در بازه ۱۱- تا ۱۵ الکترون‌ولت در شکل (۵) رسم شده است. در نمودار چگالی حالت‌ها، مقیاس انرژی صفر نشان‌دهنده مکان تراز فرمی است که با خط عمود نشان داده شده است. صفر این نمودارها همواره بر روی انرژی فرمی منطبق است. این شکل به خوبی وجود شکاف انرژی را نشان می‌دهد و نشان‌دهنده خاصیت نیم‌رسانایی ترکیب است. مطابق شکل (۵) برای این ترکیب، اولین قله در انرژی حدوداً ۱۱- تا ۱۰- الکترون‌ولت است و با توجه به چگالی حالت‌های جزئی این ترکیب، این قله مربوط به اربیتال ۳s و ۳p اتم گالیم و آرسنیک است. در واقع، این حالت پایین‌ترین نوار انرژی را در شکل (۵) نشان می‌دهد. قله بعدی در این شکل در میانه نوار ظرفیت و در بازه ۶- الکترون‌ولت و با چگالی حالت‌های بیش از  $3.25 \text{ state}/eV$  است. قله بعدی در زیر انرژی فرمی و در بازه ۲،۵- الکترون‌ولت و با چگالی حالت‌های بیش از  $1.5 \text{ state}/eV$  است که مطابق با چگالی حالت‌های جزئی این ترکیب، این مشارکت ناشی از اربیتال‌های ۳p اتم گالیم و آرسنیک است و مربوط به دو نوار انرژی بعدی در شکل (۴) است. با وجود این، چگالی حالت‌ها زیر انرژی فرمی به‌طور عمده، ناشی از اربیتال‌های ۳s و ۳p اتم گالیم و آرسنیک است. ساختار بعدی در بالای انرژی فرمی در شکل (۵) با توجه به چگالی حالت‌های جزئی این ترکیب، عمدتاً مربوط به اربیتال ۳p اتم گالیم و آرسنیک است، اگرچه اربیتال ۳s هر دو اتم نیز مشارکت ناچیزی دارند.



شکل ۵ نمودار چگالی حالت‌های کل در بلور گالیم آرسنید در فاز بلندروی.

برای بررسی دقیق‌تر چگونگی مشارکت اربیتال‌های مختلف این ترکیب در ساختار نواری‌های انرژی، چگالی حالت‌های کلی همراه با چگالی حالت‌های جزئی (یعنی مشارکت هر اربیتال در چگالی حالت‌ها) به صورت جداگانه در شکل (۶) در تقریب شیب تعمیم‌یافته نشان داده شده است که قله‌های موجود در شکل (۵) را تأیید می‌کند. به نظر می‌رسد با توجه به تراکم چگالی حالت‌ها در این نمونه (همپوشانی آن‌ها) می‌توان گفت احتمال تشکیل پیوند برای این فاز زیاد است، که عمده مشارکت در نوار رسانش مربوط به اربیتال  $p$  اتم آرسنیک و تا حدودی اربیتال  $p$  اتم گالیم است، اما اربیتال  $p$  اتم آرسنیک مشارکت عمده‌ای در بالای نوار ظرفیت دارد. چگالی حالت‌ها در سطح فرمی  $N(E_f)$  صفر است که این تأییدکننده شکل (۴) است. در شکل‌های (۶) چگالی حالت‌های جزئی (سهام‌های اربیتالی) بر حسب انرژی رسم شده است. در این شکل‌ها نیز شکاف انرژی به خوبی نمایان است. همان‌طور که از شکل مشخص است برای اربیتال  $p$  اتم آرسنیک چگالی حالت‌ها بیش از  $0.32 \text{ state/eV}$  و برای اتم گالیم کمتر از این مقدار است.



شکل ۶ نمودار چگالی حالت‌های کلی و جزئی برای اربیتال s و p اتم (الف) گالیم (ب) آرسنیک در بلور گالیم آرسنید در فاز بلندروی.

#### ۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله، ویژگی‌های ساختاری و الکترونی بلور GaAs با استفاده از روش FP-LAPW بررسی شد. ویژگی‌های ساختاری و الکترونی در تقریب‌های LDA و GGA و PBE-GGA محاسبه شد. در هر سه تقریب، نتایج حاصل از محاسبه ثابت شبکه تعادلی و مدول حجمی، برای GaAs با داده‌های تجربی و نظری موجود کاملاً سازگار است. همچنین، شکاف نواری محاسبه‌شده در این کار، در تقریب PBE-GGA برابر ۰٫۸ الکترون‌ولت است، که نسبت به تقریب‌های دیگر در این کار و کار نظری دیگران به مقدار تجربی نزدیکتر است. علاوه بر این، به دلیل پر بودن اربیتال  $d$  و اینکه این اربیتال جزو الکترون‌های مغزه قرار می‌گیرد ترکیب فاقد خاصیت مغناطیسی بوده و محاسبات با تقریب‌های مختلف با حضور اسپین و غیاب اسپین انجام شد. آنچه محقق شد آن است که در نظر گرفتن اسپین در خواص ساختاری ترکیب تأثیری ندارد. همچنین، نتایج به‌دست‌آمده در تقریب PBE-GGA سازگاری بهتری با نتایج نظری و تجربی به‌دست‌آمده از روش‌های دیگر دارد.

## مراجع

- [1] Christensen N.E., "Electronic structure of GaAs under strain", *Physical Review*, **B30**, 5753-5765 (1984).
- [2] Ivanova L. *et al.* "Direct measurement and analysis of the conduction band density of state in diluted GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> alloys" *Physical Review*, **B82**, 161201 (2010).
- [3] Welker H. and Naturforsch Z., Vol.7, 744-749 (1952).
- [4] Salehi H. and Karimzadeh E. Calculation of electronic structure of GaAs crystal by using first principle. Proceeding of 15<sup>th</sup> Seminar on Crystallography and Mineralogy, Iran, 2010. (in Persian)
- [5] Dong Y. *et al.* "Band offsets of InGa/GaAs Hetrojunction by scanning tunneling spectroscopy", *Journal of applied physics*, 103, 073704 (2008).
- [6] Anua N.N. *et al.*, "Non-local exchange correlation functionals impact on the structural, electronic and optical properties of III-V arsenides", *Semicond. Sci. Technol.* **28** (2013).
- [7] Owolabi J.A., Onimisi M.Y., Abdu S.G. and Olowomofe G.O., "Determination of band structure of GaAs and AlAs using DFT", *Computational Chemistry* **4**, 73-82 (2016).
- [8] Richard S., Aniel F. and Fishman G., "Energy band structure of Ge, Si, and GaAs", *Physical Review*, B71, 169901E (2005).
- [9] Perdew J.P., Chevary J.A., Vosko S. H., Jackson Koblar A., Pederson Mark R., Singh D. J., and Fiolhais Carlos, "Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation", *Physical Review*, B46, 6671-6687 (1992).
- [10] Blaha P. and Schwarz K., *Wien2k*, Vienna university of technology, Austria (2015).
- [11] Perdew J.P. and Wang Y., "Accurate and simple density functional for the electronic exchange energy: Generalized gradient approximation", *Physical Review*, B33, 8800 (1986).
- [12] Kohn W. and Sham L., *Physical Review*, A46, 1002 (1934).
- [13] Perdew J.P. and Zunger A., "Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems", *Physical Review*, B23, 5048-5079 (1981).
- [14] Prassides K.Y., Iwasa T. *et al.*, cond-mat/0102507 v128 feb (2001).
- [15] Miotto R. and Srivastava G. and Ferraz A. C., "Role of generalized-gradient approximation in structural and electronic properties of bulk and surface of  $\beta$ -GaN and GaAs", *Physical Review*, B59, 3008 (1999).
- [16] Dalcoso A., Pasquarell A., Baldere Schi A. and Cas R., "Generalized-gradient approximations to density-functional theory: A comparative study for atoms and solids", *Physical Review*, B53, 1180 (1996).
- [17] Levinshtein M.E. and Rumyantsev S.L., *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, Vol.1, M. Levinshtein, S. Rumyantsev and M. Shur, ed., 77-103 (World Scientific, London, 1996).
- [18] Dargys A. and Kundrotas J., *Handbook on Physical Properties of Ge, Si, GaAs and InP*, Vilnius (Science and Encyclopedia Publishers, 1994).