

Research Paper

Investigation of Structural Parameters of InAs in Zincblende and Wurtzite Phase¹

Hamdollah Salehi ^{*2} and Soghra Bahrami Dehtooni³

Received: 2019.09.18

Revised: 2020.05.03

Accepted: 2020.07.29

Abstract

In this paper, we have calculated the InAs structural parameters such as lattice constant, bulk modulus and its derivative, stability and density state in zincblende and wurtzite phases. The calculations have been performed using pseudopotential method in the framework of density functional theory by Espresso package. The calculated structural parameters are in good agreement with experimental results. The results showed that zincblende phase is more stable than wurtzite phase and InAs in zincblende and wurtzite phases is a narrow gap semiconductor. Also, the results of the contribution of different orbitals show that in the conduction band, there is a strong overlap between p orbitals of In and As atoms and the orbital s of In, while at the top of the valence band, the overlap of p orbitals of In and As atoms is predominant.

Keyword: *InAs, Density Functional Theory, Quantum Espresso, Pseudopotential.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2020.17549.1082

² Associate Professor, *Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.* (Corresponding Author). Email: salehi_h@scu.ac.ir

³ M.Sc. Student, *Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.* Email: sbahrami12@yahoo.com

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران، دانشگاه الزهرا

سال دهم، پیاپی ۲۱، تابستان ۱۳۹۹

مقاله پژوهشی

بررسی پارامترهای ساختاری و ساختار نواری InAs در دو فاز بلنדרوی و ورتسایت^۱

حمداله صالحی^{۲*} و صغری بهرامی ده تونی^۳

تاریخ دریافت: ۱۳۹۸/۰۶/۲۷

تاریخ بازنگری: ۱۳۹۹/۰۲/۱۴

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۹/۰۴/۰۸

چکیده

در این مقاله، پارامترهای ساختاری از جمله ثابت‌های شبکه، مدول حجمی و مشتق آن، پایداری و ساختار نواری ترکیب InAs در دو فاز بلنדרوی و ورتسایت بررسی شده است. محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با روش شبه‌پتانسیل باریایسته توسط بسته نرم‌افزاری اسپرسو انجام شده است. نتایج به دست آمده و از جمله مقادیر ثابت شبکه محاسبه شده با نتایج تجربی در سازگاری خوبی هستند. نتایج بیان گر آن است که فاز بلنדרوی پایدارتر است و InAs در هر دو فاز، نیم‌رسانایی با شکاف کوچک است. همچنین، نتایج حاصل از مشارکت اربیتال‌های مختلف نشان می‌دهد که در نوار رسانش همپوشانی قوی بین اربیتال‌های p از اتم‌های In و As و اربیتال s از اتم In

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2020.17549.1082

^۲ دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران. (نویسنده مسئول).

salehi_h@scu.ac.ir

^۳ دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.

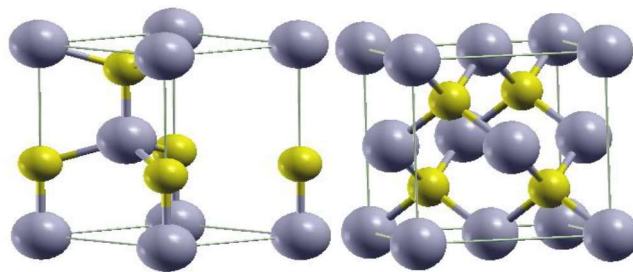
sbahrami12@yahoo.com

است، در حالی که در بالای نوار ظرفیت هم‌پوشانی اربیتال‌های p از اتم‌های In و As غالب است.

واژگان کلیدی: InAs، نظریه تابعی چگالی، کوانتوم اسپین، شبه پتانسیل.

۱. مقدمه

نیم‌رساناهای گروه III-V در حال حاضر در بسیاری از سامانه‌های الکترونیکی از جمله یاخته‌های فوتوالکتروشیمیایی، ترانزیستورها، حسگرها، دیودهای نوری و یاخته‌های خورشیدی استفاده می‌شود. ترکیب InAs یکی از ترکیبات این گروه است، که طول‌موج آن در بازه ۱ تا ۴ میکرومتر است و برای آشکارسازهای مادون قرمز مناسب است [۱]. ساختارهای معمول بسیاری از ترکیبات این گروه به صورت دو فاز بلندروی (به صورت دو ساختار fcc که نسبت به یکدیگر به اندازه یک چهارم قطر اصلی جابجا شده‌اند، دارای گروه فضایی $F\bar{4}3m(T_d^2)$) و ورتسایت (دارای گروه فضایی $P6_3mc(C_{4v}^6)$) می‌باشد. یاخته قراردادی دو فاز در شکل‌های (۱) و (۲) نشان داده شده است. ترکیب InAs از دیدگاه طیف‌سنجی نوری و کاربردهای الکترونوری شامل لیزر، آشکارسازهای فوتونی و حسگرهای گازی، نیم‌رسانای جالبی با شکاف نواری باریک است. همچنین، به علت داشتن تحرک الکترونی زیاد، ماده‌ای مهم در الکترونیک سریع است [۲]. در سال‌های اخیر، مطالعات نظری فراوانی بر روی حالت‌های انبوهه و نانومتری InAs انجام شده است. اثر فشار بر خواص الکترونی ترکیبات گروه III-V بررسی شده است [۳]. خواص الکترونی InAs با روش FP-LAPW مطالعه شده است [۴]. علاوه بر این، می‌توان برای اطلاعات بیشتر و کارهای انجام شده بر روی این ترکیب به مراجع [۸۵] مراجعه کرد.



شکل ۲ ساختار ورتسایت

شکل ۱ ساختار بلندروی

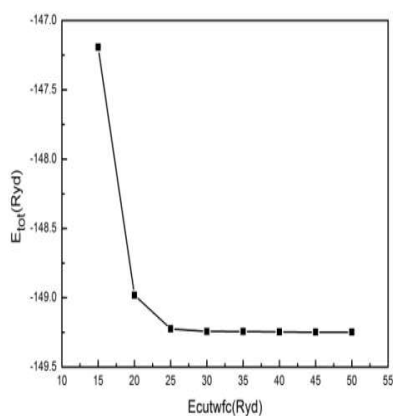
۲. توصیف روش

محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی [۹] با استفاده از روش شبه پتانسیل توسط بسته نرم‌افزاری Espresso [۱۰] انجام شده است. شبه پتانسیل‌های به کاررفته از نوع بارپایسته و تابع

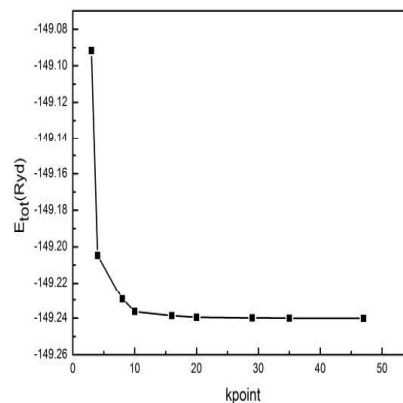
تبادلی همبستگی آن‌ها LDA است. در محاسبات خودسازگار، همگرایی را بر مبنای انرژی قرار دادیم و دقت همگرایی را 10^{-4} eV در نظر گرفته‌ایم. برای انجام محاسبات با تعداد زیادی نقاط k مجاز در منطقه اول بریلوئن روبرو هستیم که استفاده از همه این نقاط، حجم محاسبات را افزون می‌کند. لذا می‌توان با توجه به تقارن‌های مسئله، به جای حل مسئله در منطقه اول بریلوئن، آن را در منطقه اول بریلوئن کاسته بررسی کرد. برای این کار، ابتدا تعداد نقاط k بهینه‌سازی شد و نمودارهای مربوط به آن رسم شد. مقدار بهینه کمیت، مقداری است که به ازای مقادیر بیشتر از آن تغییرات انرژی حالت پایه محسوس نباشد. تعداد ۱۰۰۰ نقطه در هر دو فاز با روش مونخورست-پک در نظر گرفته شد که در فاز بلندروی یک توزیع $10 \times 10 \times 10$ و در فاز ورتسایت یک توزیع $12 \times 12 \times 6$ ایجاد شد. یکی از نمودارهای بهینه‌سازی تعداد k -point در شکل (۳) نشان داده شده است. همچنین، در این کار مقدار انرژی قطع را نیز بهینه‌سازی کردیم و یکی از نمودارهای مربوط به این بهینه‌سازی را در شکل (۴) نشان دادیم. مقدار بهینه انرژی قطع را ۳۰ ریبرگ در نظر گرفتیم. علاوه بر این، تفکیک الکترون‌های مغزه و ظرفیت در این کار برای اتم‌های In و As در جدول (۱) آمده است.

جدول ۱ تفکیک الکترون‌های مغزه و ظرفیت

اتم	الکترون‌های مغزه	الکترون‌های ظرفیت
In	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^{10}, 4p^6$	$4d^{10}, 5s^2, 5p^1$
As	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}$	$4s^2, 4p^3$



شکل ۴ نمودار بهینه‌سازی انرژی قطع



شکل ۳ نمودار بهینه‌سازی k -point در فاز بلندروی

۴۲ / بررسی پارامترهای ساختاری و ساختار نواری InAs در دو فاز بلندی و ورتسایت

پارامترهای ساختاری به کاررفته در این محاسبات در جدول (۲) آمده است.

جدول ۲ پارامترهای ساختاری [۳].

پارامتر u	ثابت شبکه c (Å)	ثابت شبکه a (Å)	فاز
-	-	۶,۰۵	بلندی
۰,۳۷۵	۶,۹۹	۴,۲۸	ورتسایت

۳. نتایج

الف. پارامترهای ساختاری

یکی از پارامترهای مهم در محاسبات، ثابت شبکه است. برای این منظور انرژی حالت پایه بلور محاسبه و سپس این انرژی با تغییرات جزئی در حوالی حجم تعادلی وردش داده می شود. تغییرات انرژی برحسب حجم از طریق معادله حالت مورناکان به صورت زیر داده می شود [۱۱]:

$$E(V) = E_0 + \frac{BV_0}{B'} \left[\frac{V}{V_0} + \frac{(V/V_0)^{1-B'} - B'}{B'-1} \right] \quad (1)$$

که در آن، V_0 حجم یاخته اولیه، E_0 انرژی حالت پایه در دما و فشار صفر، B مدول حجمی و B' مشتق آن است. در ادامه، کمیات دیگری از جمله ثابت های شبکه و مدول حجمی و مشتق آن محاسبه می شود. نتایج این محاسبات برای هر دو فاز به ترتیب در جدول های (۳) و (۴) آمده است.

جدول ۳ ثابت شبکه و مدول جمعی و مشتق مدول حجمی فاز بلندی

	ثابت شبکه a (Å)	B'	مدول حجمی (GPa)
نتایج کار حاضر	۶,۰۵۹	۴,۷۸	۵۹,۲
LDA(PWscf) [۳]	۵,۸۰	۴,۵۵	۶۱,۷
LDA (VASP) [۱۲]	۶,۰۵۹	-----	۶۰,۲
تجربی [۳]	۶,۰۵۴	-----	۵۸

جدول ۴ ثابت شبکه و مدول حجمی و مشتق مدول حجمی فاز ورتسایت

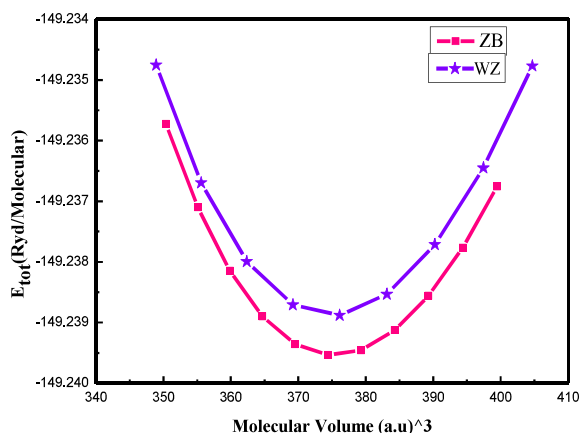
	ثابت شبکه a (Å)	ثابت شبکه c (Å)	B (Gpa)	B'
نتایج کار حاضر	۴,۲۷	۷,۰۱	۵۸,۹	۴,۷۷
LDA (PWscf) [۳]	۴,۱۱	۶,۷۱	۶۰,۹۸	۴,۵۷
تجربی [۴]	۴,۲۸	۶,۹۹	-	-

ب. بررسی پایداری فاز بلندروی و ورتسایت

پایداری فازهای بلندروی و وورتسایت بلور ایندیوم زرنیخ با مقایسه انرژی همدوسی، بررسی شد. انرژی همدوسی عبارت است از تفاوت انرژی کل بلور و انرژی کل اتم‌ها یا ملکول‌های تشکیل دهنده آن هنگامی که آزادند و آن را با E_c نشان می‌دهیم. زمانی یک بلور پایدار است که مقدار انرژی کل آن از انرژی اجزای تشکیل دهنده کم‌تر باشد و داده می‌شود با:

$$E_c = (\sum_i n_i E_i - E_{tot}) / \sum_i n_i \quad (2)$$

که در آن، E_{tot} انرژی کل یاخته واحد، E_i انرژی اتم i و n_i تعداد هر نوع اتم i در یاخته واحد است [۱۳]. برای محاسبه انرژی اتم‌های آزاد، هر یک از اتم‌های In و As را در یک شبکه fcc با ثابت شبکه ۲۵ بوهر قرار دادیم. با انجام محاسبات مقدار انرژی همدوسی برای ساختارهای ورتسایت و بلندروی به ترتیب ۴٫۲۹ الکترون‌ولت و ۴٫۳۰ الکترون‌ولت به دست آمد. اختلاف انرژی همدوسی حدود ۱۰ meV است که نشان می‌دهد بلور ایندیوم زرنیخ در فاز بلندروی پایدارتر است. همچنین، برای تأیید محاسبات انرژی همدوسی، نمودار انرژی بر حسب حجم برای هر دو فاز رسم شد و با توجه به نمودار (۵)، چون نمودار بلندروی پایین‌تر از ورتسایت قرار دارد، فاز بلندروی پایدارتر است.



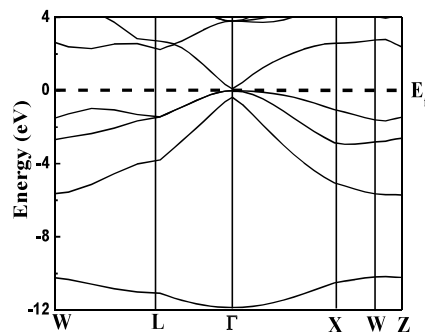
شکل ۵: نمودار انرژی بر حسب حجم واحد ملکول InAs در دو فاز بلندروی و ورتسایت

ج. ساختار نواری

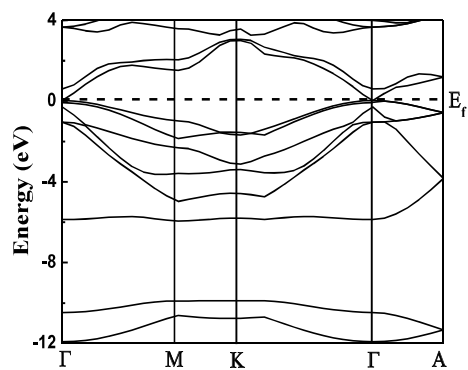
از ساختار نواری می‌توان ماهیت بلور از جمله فلز یا غیر فلز بودن ماده، اندازه شکاف در صورت وجود و همچنین مستقیم یا غیر مستقیم بودن شکاف را تشخیص داد. علاوه بر آن می‌توان اتم‌ها و

اریتال‌هایی را که نقش اساسی تری در گذارهای احتمالی سامانه دارند را شناسایی نمود. چگالی حالت‌ها و ساختار نواری از حل معادلات کوهن-شم و محاسبه ویژه مقادیر انرژی در نقاطی از منطقه اول بریلوئن به دست می‌آیند. ساختار نواری در نقاطی با تقارن بالا محاسبه شد که در شکل‌های (۶) و (۷) این نقاط برای فازهای بلندی و ورتسایت نشان داده شده است. همچنین چگالی حالت‌های کلی و جزئی بلور ایندیوم زرنیک برای دو فاز ZB و WZ رسم شده است (شکل‌های ۸ تا ۹) و مقدار شکاف به دست آمده از محاسبات و مقادیر تجربی و نظری دیگران در جدول (۵) آورده شده است. نمودار چگالی حالت‌های کل و چگالی حالت هر اریتال اتمی در ساختار بلندی در شکل (۸) نشان داده شده است. همچنین چگالی حالت‌های کل و چگالی حالت هر اریتال اتمی در ساختار ورتسایت در شکل (۹) نشان داده شده است.

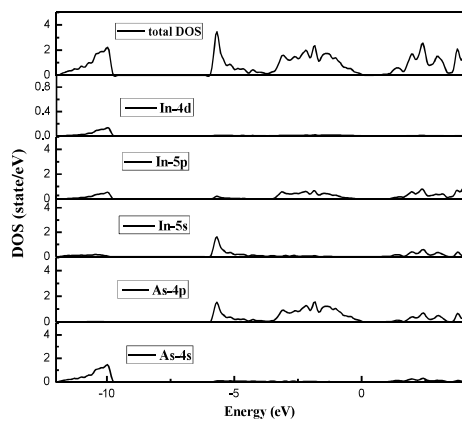
چگالی حالت‌های کل شامل سه دسته نوار انرژی است. نوار ظرفیت که در زیر تراز فرمی قرار دارد، شامل دو زیرتراز است. به اختصار، پایین‌ترین نوار ظرفیت را VB1 و بالاترین نوار ظرفیت را VB2 و نوار رسانش را CB می‌نامیم. نوار CB بیشتر شامل هم‌پوشانی اریتال‌های p اتم‌های In و As و اریتال s از اتم In است. هم‌پوشانی اریتال‌های s اتم In و p اتم In و تا حدودی اریتال d اتم In نوار VB1 را تشکیل داده‌اند. در بالای نوار VB2 هم‌پوشانی اریتال‌های p اتم In و As غالب است و با دور شدن از تراز فرمی تأثیر اریتال p اتم In کم‌رنگ شده و اریتال s اتم In جایگزین آن می‌شود. شکاف نواری محاسبه شده در کار حاضر از مقدار تجربی کوچک‌تر است و با نتایج نظری دیگران هم‌خوانی دارد. نظریه تابعی چگالی مقدار شکاف نواری را کوچک‌تر از مقادیر تجربی محاسبه می‌کند. برای رفع این مشکل تقریب‌های جدیدی برای تابع تبدیلی همبستگی وارد این نظریه شده است، که مقدار شکاف را نزدیک به مقدار تجربی به دست می‌آورد.



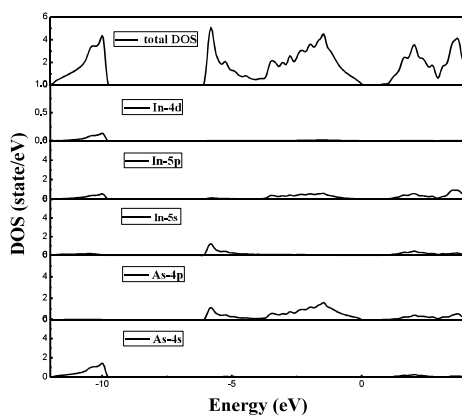
شکل ۶ نمودار ساختار نواری فاز بلندی



شکل ۷ نمودار ساختار نواری فاز ورتسایت



شکل ۸ چگالی حالت‌های کل و چگالی حالت هر اربیتال اتمی در ساختار بلندروی

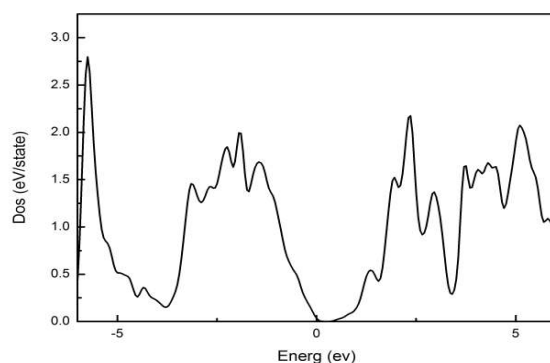


شکل ۹ چگالی حالت‌های کل و چگالی حالت هر اربیتال اتمی در ساختار ورتسایت

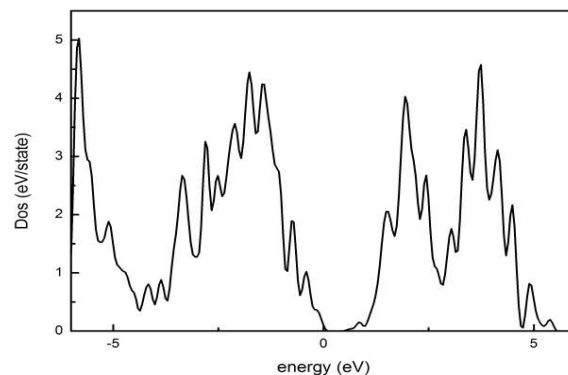
جدول ۵ شکاف نواری ترکیب ایندیوم آرسناید

روش	شکاف نواری فاز بلندیروی (eV)	شکاف نواری فاز ورتسایت (eV)
کار حاضر	۰	۰
[۴]LDA (Wien2k)	۰/۳۹۵	۰/۴۴۴
[۱۵]GW	۰/۳۱۰	-----
[۱۴]LDA (VASP)	-----	۰
[۱۶]LDA (FP-LAPW)	۰	-----
تجربی	۰/۴۱۵[۴]	۰/۶۶۰[۱۴]

همچنین چگالی حالت‌های کل InAs برحسب انرژی در گستره ۶- الکترون‌ولت تا ۶ الکترون‌ولت در شکل‌های (۱۰) و (۱۱) رسم شده است. در نظر گرفتن اسپین تفاوت چندانی در محاسبات ایجاد نکرد. انرژی صفر نشان‌دهنده تراز فرمی است. این نمودارها نشان‌دهنده خاصیت نیم‌رسانایی بلور InAs است، که با نمودار ساختار نواری سازگاری دارد.



شکل ۱۰ نمایش چگالی حالت‌های کل در فاز ورتسایت



شکل ۱۱ نمایش چگالی حالت‌های کل در فاز بلندیروی

۴. نتیجه گیری

در این مقاله، خواص ساختاری و الکترونی بلور InAs توسط روش شبه پتانسیل بارپایسته با تقریب LDA بررسی شد. نتایج بیانگر آن است که مقادیر ثابت شبکه محاسبه شده برای حالت انبوه سازگاری خوبی با نتایج تجربی دارد و مقدار شکاف نواری محاسبه شده در هر دو فاز از مقدار تجربی کوچکتر به دست آمد، که بیانگر نیم رسانا بودن InAs و پایدارتر بودن فاز بلندروی است. همچنین، نتایج حاصل از مشارکت اربیتال های مختلف در اطراف تراز فرمی بیانگر مشارکت عمده اربیتال های p اتم های In و As است.

۵. تقدیر و تشکر

این تحقیق توسط دانشگاه شهید چمران اهواز؛ ایران [SCU.SP98.490] پشتیبانی شد.

منابع

- [1] Umar M. F. and Othman A. P., "Density of states calculation for Indium-Arsenide zincblende based on density functional theory", *KMITL Sci. Tech. J.*, Vol. 9, No. 2 (2009).
- [2] Mohammad R., PhD. Theses, "The electronic band structure of III (In, Al, Ga)-V (N, As, Sb) compounds and ternary alloys", Middle East Technical University (2005).
- [3] Wang S. Q. and Ye H. Q., "A plane-wave pseudopotential study on III-V zincblende and wurtzite semiconductors under pressure", *J. Phys.: Condens. Matter* 14, 9579-9587 (2002).
- [4] Zanolli Z. and Barth U. V., "All-electron study of InAs and GaAs wurtzite structural and electronic properties", arXiv:cond-mat/0610066v2 (2007).
- [5] Mohammad R., Katrcog S and El-Hasan M. "The electronic band structure of InN, InAs and InSb compounds", *J. Mater. Sci.* 43, 2935-2946(2008).
- [6] Cakan A., Sevik C. and Bulutay C., "Strained band edge characteristics from hybrid density functional theory and empirical pseudopotentials: GaAs, GaSb, InAs and InSb", arXiv:1605.06807v1 [cond-mat.mtrl-sci] (2016).
- [7] Garwood T. , Modine N. A. and Krishna S., "Electronic structure modeling of InAs/GaSb superlattices with hybrid density functional theory", *Infrared Physics & Technology*, Vol 81, 27-31(2017).
- [8] Caid M., Rached D., Cheref O., Righi H., Rached H., Benalia S., Merabet M. and Djoudi L., "Full potential study of the structural, electronic and optical properties of (InAs)_m/(GaSb)_n superlattices", *Computational Condensed Matter*, Vol 21, e00394(2019).
- [9] Oppl M., "DFT-Density Functional Theory", (2002).
- [10] <http://www.quantum-espresso.org>.
- [11] Murnaghan F. D., "The compressibility of media under extreme pressure", *Proc. Nat. Acad. Sci.* 30, 244 (1994).
- [12] Santos C. L. D. and Piquini P., "Diameter dependence of mechanical, electronic, and structural properties of InAs and InP nanowires: A first-principles study", *Phys. Rev. B* 81, 075408 (2010).
- [13] Akiyama T., Nakamura K. and Ito T., "Structural stability and electronic structures of InP nanowires: Role of surface dangling bonds", *Phys. Rev. B* 73, 235308 (2006).

- [14]** Shu H., Chen X., Zhao H., Zhou X., and Lu W., "Structural Stability and Electronic Properties of InAs Nanowires and Nanotubes: Effects of Surface and Size", *J. Phys. Chem. C* 114, 17514–17518 (2010).
- [15]** Remediakis I. N. and Kaxiras E., "Band-structure calculations for semiconductors within generalized density functional theory", *Phys. Rev. B* 59, 5536 (1999).
- [16]** Ahmed R., Hashemifar S. J., Akbarzadeh H., Ahmed M. and Aleem F., "Ab initio study of structural and electronic properties of III-arsenide binary compounds", *Computational Materials Science* 39, 580–586 (2007).