

Research Paper

Calculation of Electronic Structure and Energy band of InP in Nanowire and Bulk and Using Pseudopotential¹

Hamdollah Salehi^{*2} and Hossein Tolabinejad³

Received: 2020.12.03

Revised: 2021.04.29

Accepted: 2021.06.15

Abstract

In this paper, electronic and structural properties such as lattice constant, energy band structure, and density of states of InP in bulk and nanowire are calculated. The calculations have been performed using the Pseudopotential method in the framework of density functional theory (DFT) with local density approximation (LDA), and generalized gradient approximation (GGA) by Quantum Espresso package. The results show a direct bandgap of 1.4 eV at the Γ point in the Brillouin zone and have not cut the Fermi level, with a good agreement with the available experimental results. Also, band structure in nanowires of about 1.49 eV was calculated, which shows an increased bulk state. The calculated results show good agreement with the available experimental results.

Keywords: *InP, Density Functional Theory (DFT), Pseudo-Potential, Compressibility, Band Structure, Nanowires.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2022.34219.1181

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

³ M. Sc. Graduated, Department of physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. Email: h-toulabi@scu.ac.ir



محاسبه ساختار الکترونی و نوارهای انرژی InP در حالت نانوسیم و انبوهه به روش شبه پتانسیل^۱

حمداله صالحی*^۲ و حسین طولابی نژاد^۳

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۰۹/۱۳

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۰/۰۲/۰۹

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۳/۲۵

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال دوازدهم، پیاپی ۳۰، پاییز ۱۴۰۱

صص ۶۲ - ۷۵

چکیده:

در این مقاله ویژگی‌های الکترونی و ساختاری از جمله ثابت‌های شبکه، ساختار نوارهای انرژی و چگالی حالت‌های *InP* در حالت انبوهه و نانوسیم محاسبه و مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریه تابعی چگالی (*DFT*) و با استفاده از نرم افزار کوانتوم اسپرسو با تقریب‌های چگالی موضعی (*LDA*) و تقریب گرادیان تعمیم یافته (*GGA*) صورت گرفته است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که نوارهای انرژی سطح فرمی را قطع نکرده و دارای یک شکاف انرژی به اندازه $1/4$ الکترون ولت در نقطه Γ در منطقه بریلوین می‌باشد که سازگاری خوبی با نتایج تجربی دارد. همچنین شکاف نواری در حالت نانوسیم‌ها حدود $1/49$ الکترون ولت به دست آمد که نسبت به شکاف نواری در حالت انبوهه افزایش یافته است. در نهایت، پارامترهای محاسبه شده سازگاری خوبی با دیگر نتایج دارد.

واژگان کلیدی: *InP*، نظریه تابعی چگالی، شبه پتانسیل، تراکم پذیری، ساختار نواری، نانوسیم.

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2022.34219.1181

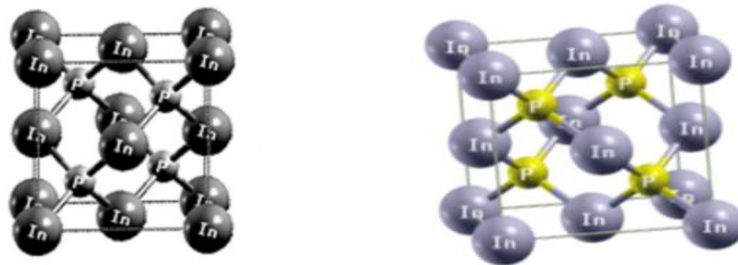
^۲ دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران. (نویسنده مسئول). Email: salehi_h@scu.ac.ir

^۳ دانش‌آموخته کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران. Email: h-toulabi@scu.ac.ir



۱. مقدمه

اینیدیوم فسفید یک ترکیب غیرآلی با فرمول InP می‌باشد. جرم ملکولی این ترکیب ۱۴۵٫۸۰ گرم بر مول و نقطه ذوب آن ۱۰۷۰ درجه سانتیگراد می‌باشد. این ترکیب در دمای ۳۰۰ کلوین در فاز مکعبی مرکز سطحی و دارای ساختار بلندیروی با گروه فضایی $F\bar{4}3m(216)$ می‌باشد که شکاف مستقیم ۱٫۳۴۴ الکترون ولت دارد [۱،۲]. ضریب شکست تجربی این ترکیب ۳٫۱ است [۳]. به دلیل ویژگی‌ها و کاربردهای فراوان این ماده در الکترونیک، الکترواپتیک، نانو فناوری و سایر رشته‌ها پژوهش‌های تجربی بسیاری بر روی آن انجام شده است. به دلیل سرعت بالای الکترون‌های این ترکیب در الکترونیک بسامد بالا، توان بالا و همچنین به دلیل شکاف نواری مستقیم آن برای ابزار اپتوالکترونیک چون دیودهای لیزری، لیزرهای مادون قرمز و سلول‌های خورشیدی آزمایشی برای ماهواره‌ها استفاده می‌شود. به تازگی پژوهش‌هایی بر روی ترکیبات اینیدیوم فسفید برای جایگزینی با سیلیکون در میکروچیپ‌ها صورت گرفته است [۳-۷]. در شکل (۱)، شماتیک بلور InP با استفاده از نرم افزار xcrsden رسم شده است [۸].



شکل ۱ شماتیک بلور InP

از نانوسیم‌ها در ساخت مدارهای الکترونیکی در اندازه‌های کوچک استفاده می‌شود. ساختار شیمیایی نیم‌رساناها سبب ویژگی‌های جالب توجهی شده است. یکی از این نیم‌رساناها اینیدیوم فسفید می‌باشد. این ترکیب در ساختار ورتسایت با گروه فضایی $P63mc(186)$ به صورت نانوسیم در می‌آید.

۲. روش محاسبات

محاسبات با استفاده از نظریه تابعی چگالی و حل معادلات کوهن-شم با استفاده از پایه‌های موج تخت، با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام گرفت [۹]. از آن جا که در روش تابعی چگالی با روش موج تخت حجم محاسبات بالاست، شبه پتانسیلی که بتواند ویژگی‌های بلور را شرح دهد و حجم محاسبات را نیز کاهش دهد، بسیار با اهمیت است.

در این مطالعه برای ساخت شبه پتانسیل عناصر تشکیل دهنده این ترکیب از روش شبه پتانسیل بارپایسته استفاده می‌شود. الکترون‌های ظرفیت در این ترکیب برای اتم ایندیوم برابر $5s^2, 5p^1$ و برای اتم فسفر برابر $3s^2, 3p^3$ می‌باشند. ثابت شبکه‌ای که در این محاسبات برای حالت انبوهه در فاز بلندروی از آن استفاده شده است برابر با $11/09$ (a.u.) می‌باشد. همگرایی را بر مبنای انرژی قرار دادیم که با 8×10^{-7} ریدبرگ به همگرایی رسیدیم. برای رسیدن به این همگرایی 437 موج تخت تولید شده است. نمونه برداری از منطقه بریلوئن با یک توزیع $8 \times 8 \times 8$ و با روش مونخورست-پک صورت گرفت [۱۰].

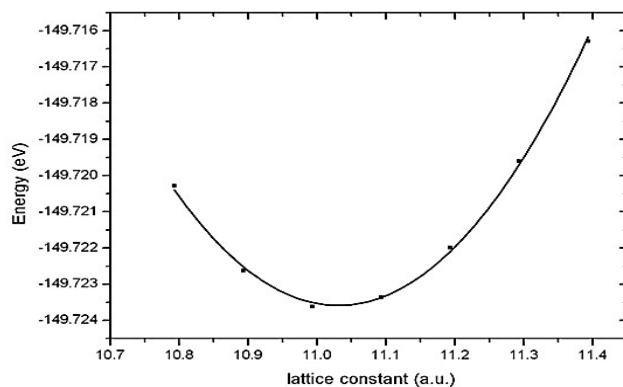
ثابت شبکه‌ای که برای حالت نانوسیم از آن استفاده شده است برابر با $a=b=0.4150$ nm و $c=0.6777$ nm می‌باشد. در این حالت نیز همگرایی بر مبنای انرژی است که با 8×10^{-8} ریدبرگ به همگرایی رسیدیم. برای رسیدن به این همگرایی 883 موج تخت تولید شده است. نمونه برداری از منطقه بریلوئن با یک توزیع $1 \times 1 \times 12$ و با روش مونخورست-پک صورت گرفته است [۱۰]. نانوسیم‌ها به روش بالا به پایین و با برش حالت انبوهه بلندروی در راستای [۱۱۱] و ورتسایت در راستای [۰۰۱] شبیه‌سازی شدند.

۳. نتایج و بحث

ساختار ایندیوم فسفید با گروه فضایی $F\bar{4}3m$ (216) دارای دو اتم در سلول واحد است. برای انجام محاسبات مربوط به ایندیوم فسفید از شبه پتانسیل بارپایسته استفاده شده است [۹]. همچنین برای اتم In حالت‌های s, p, d و برای اتم P حالت‌های s, p به عنوان حالت‌های ظرفیت در نظر گرفته شد. یکی از پارامترهای مهم در این محاسبات، ثابت شبکه است که با توجه به مقادیر تجربی آن، جهت تأیید دوباره آن را محاسبه می‌کنیم. در این محاسبات انرژی قطع، برابر 18 ریدبرگ انتخاب شد. پارامترهای شبکه بلور ایندیوم فسفید با استفاده از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو محاسبه شد و مقادیر محاسبه شده همراه با نتایج تجربی و نظری به دست آمده از دیگر روش‌ها در جدول (۱) آمده است. در محاسبه این پارامترها از معادله حالت مورناگون استفاده شده است [۱۱]. در شکل (۲) نمودار



انرژی بر حسب پارامتر شبکه رسم شده است. با توجه به شکل (۲)، مقدار کمینه آن به عنوان ثابت شبکه انتخاب می شود که حدود $a_0 = 11/02 \text{ a.u.}$ یا $(5/83 \text{ \AA}^0)$ است.



شکل ۲ نمودار تغییرات انرژی بر حسب پارامتر شبکه.

جدول ۱ پارامترهای ساختاری محاسبه شده در کار حاضر و مقایسه آن با نتایج دیگران.

کمیت های محاسبه شده	نتایج کار حاضر	کار دیگران	
		نتایج تجربی	نتایج نظری
$a_0 (\text{\AA}^0)$	۵/۸۳	۵/۸۷ [۱۲؛۱۳]	۵/۹۶ [۱۴]
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۰/۶	-	۱/۶
$V_0 (\text{\AA}^0)^3$	۴۹/۵۹	۵۰/۴۶ [۱۵]	۵۳/۰۱ [۱۴]
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۱/۶	-	۵/۱
B (GPa)	۷۱/۲	۷۱ [۱۶؛۱۷]	[۱۶] ۵۹/۱۶ [۹]، ۷۱/۶
$B \phi$	۴/۷۶	۴/۶۷ [۱۵]	[۱۶]، ۴/۸ [۱۹] ۴/۲۹
کمینه انرژی	۱۴۹/۷۳	-	-
$k_v \cdot 10^3 (\text{Gpa})^{-1}$	۱۴/۰۵	۱۴/۰۸ [۱۶]	[۱۶]، ۹/۶۹ [۹] ۱۳/۱۶
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۰/۲۴	-	۰/۸۵، ۲۲/۰۳
$K_a (\text{Gpa})^{-1}$	۴/۵۶	-	-

از این جدول مشخص می‌شود که محاسبات انجام شده با روش شبه پتانسیل سازگاری خوبی با داده‌های تجربی دارد و این بیانگر انتخاب بهینه شبه پتانسیل برای ترکیب بالا می‌باشد. تراکم پذیری به صورت عکس مدول حجمی تعریف می‌شود و مدول حجمی معیاری از سختی بلور یا انرژی لازم برای ایجاد یک تغییر شکل معین در آن است و از رابطه زیر به دست می‌آید [۱۸]:

$$B = -V \frac{dP}{dV} \quad (1)$$

که در آن V حجم بلور و P فشار وارد بر آن است. از آنجا که محاسبات در دمای صفر انجام می‌گیرد، آنتروپی ثابت است. بنابراین داریم:

$$B = \frac{d^2U}{dV^2} \quad (2)$$

هر چه این کمیت بیشتر باشد، بلور سخت‌تر است و ویژگی تراکم پذیری آن کمتر است و انتظار می‌رود که اتم‌ها در فاصله دورتری از هم قرار گیرند. مقدار تراکم پذیری حجمی $^{-1}(\text{Gpa}) \times 10^{-3} \times 14/05$ به دست آمد که در توافق خوبی با مقدار تجربی محاسبه شده $^{-1}(\text{Gpa}) \times 10^{-3} \times 14/08$ می‌باشد [۱۶]. اکنون تراکم پذیری خطی در راستای محور a را محاسبه می‌کنیم. تراکم پذیری خطی با رابطه زیر داده می‌شود [۱۹].

$$k_r = \frac{V_0}{B} \frac{d \ln(r)}{dV} \quad (3)$$

در این رابطه، r نمایانگر پارامترهای شبکه می‌باشد. مقدار تراکم پذیری خطی در راستای محور a محاسبه شده است. تراکم پذیری خطی در راستای محور a ، $^{-1}(\text{Gpa}) \times 10^{-3} \times 4/56$ است که چون مقدار تجربی در مورد آن موجود نیست قابل مقایسه نمی‌باشد اما با توجه به ساختار مکعبی ترکیب و تراکم پذیری حجمی آن، مقدار به دست آمده، مقدار خوبی است. مشاهده می‌شود که مدول حجمی محاسبه شده و تراکم پذیری در این پژوهش سازگاری خوبی با داده‌های تجربی دارد. پارامترهای ساختاری محاسبه شده در کار حاضر و مقایسه آن با نتایج دیگران در جدول (۱) نشان داده شده است.

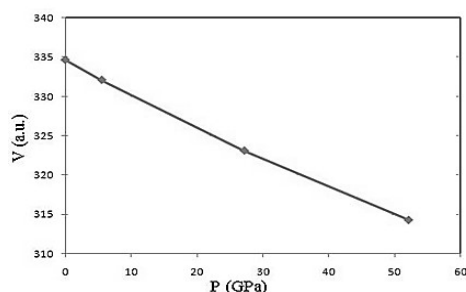


۱.۳ بررسی تأثیر فشار

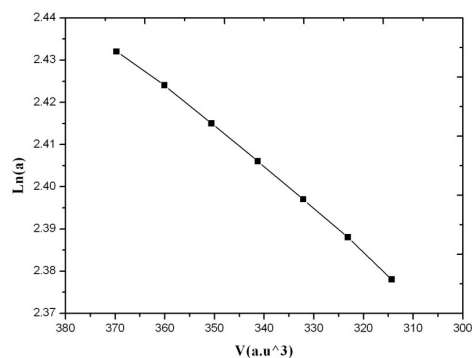
برای بررسی تأثیر فشار روی ساختار InP مکعبی، وابستگی حجم به فشار را از معادله حالت مورناگون به دست می‌آوریم. برای این کار از معادله مورناگون نسبت به حجم مشتق و سپس با توجه به رابطه ترمودینامیکی $dE = -PdV$ وابستگی حجم به فشار به صورت زیر به دست می‌آید [۲۰]:

$$V(p) = V_0[(B'/B)P + 1]^{-1/B} \quad (۴)$$

مقادیر اولیه V_0 ، B و B' را با توجه به جدول (۱) در معادله (۳) جایگذاری می‌کنیم. نمودار وابستگی حجم به فشار در بازه صفر تا ۶۰ گیگاپاسکال در شکل (۳) نشان داده شده است. همچنین تغییرات پارامتر شبکه بر حسب فشار محاسبه و در شکل (۴) نشان داده شده است. در این شکل a_0 پارامتر شبکه در فشار صفر است.



شکل ۳ نمودار تغییرات حجم سلول واحد ترکیب InP بر حسب فشار.

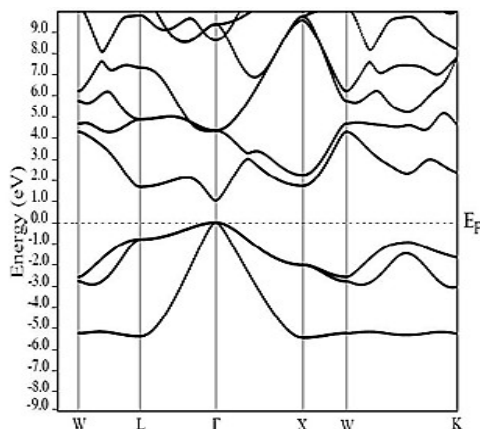


شکل ۴ نمودار تغییرات پارامتر شبکه InP بر حسب حجم سلول واحد.

نمودارهای (۳) و (۴) بیانگر این است که با افزایش فشار، حجم سلول واحد و پارامتر شبکه کاهش می‌یابد که این با حقیقت موجود سازگاری دارد. تغییرات کم حجم در بازه مورد بررسی نشان دهنده تراکم پذیری کم این ترکیب و در نتیجه سختی زیاد آن می‌باشد و انتظار می‌رود که اتم‌ها در فاصله دورتری از هم قرار گیرند که در توافق با نتایج دیگران می‌باشد. سختی این ترکیب از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. یکی از پارامترهایی که در استفاده این ترکیب در وسایل اپتوالکتریکی و الکترونی در نظر گرفته می‌شود سختی آن می‌باشد.

۲.۳ ساختار نوارهای انرژی

از ساختار نواری می‌توان اطلاعاتی در مورد ماهیت بلور از لحاظ فلزی یا غیرفلزی بودن، اندازه شکاف انرژی در صورت وجود و نوع آن از لحاظ مستقیم یا غیرمستقیم بودن و ویژگی‌های دیگر را می‌توان به دست آورد. ساختار نواری InP در راستای خطوط تقارنی مختلف در شکل (۵) رسم شده است. در این محاسبات از ۳۲۰ نقطه استفاده شده است که با روش خودسازگار به همگرایی رسیده است. همگرایی را بر مبنای انرژی قرار دادیم که با ۸ چرخه و با اختلاف انرژی از مرتبه $10^{-7} \times 2$ ریدبرگ به همگرایی رسیدیم. در این شکل انرژی فرمی به عنوان مبدأ مختصات و مقیاس انرژی بر حسب الکترون ولت می‌باشد. همان طور که از شکل (۵) پیداست نوارهای انرژی، تراز فرمی راقطع نکرده‌اند و دارای یک شکاف مستقیم در نقطه Γ به اندازه ۱٫۴ الکترون ولت است.



شکل ۵ ساختار نوارهای انرژی ترکیب InP.



نتایج به دست آمده با دیگر نتایج جهت مقایسه در جدول (۲) آورده شده است. آن چه در این جدول مشهود است این است که محاسبات با استفاده از شبه پتانسیل به نتایج تجربی نزدیک تر است.

جدول ۲ مقایسه شکاف نواری انبوهه به دست آمده در کار حاضر با نتایج دیگران.

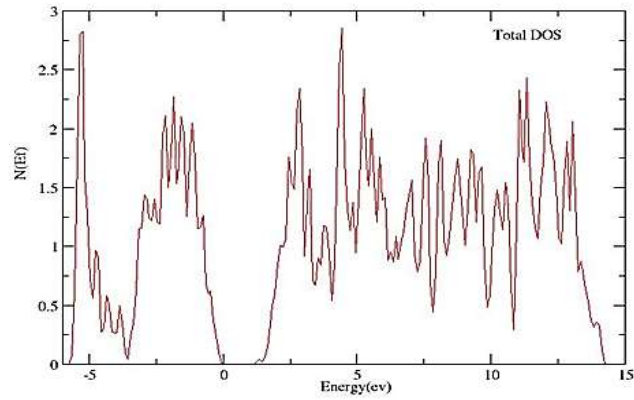
کمیت‌های محاسبه شده	کار حاضر	کار دیگران	
		نظری	تجربی
$E_g(eV)$	۱/۴	[۱۵] ۰/۴۸ [۱۴] ۰/۶۷	[۲۳] ۱/۳۵ [۲۱] ۱/۳۴۴ [۲۲], ۱/۲۷
نوع شکاف در نقطه Γ	مستقیم	مستقیم	مستقیم
درصد خطا	۴/۱*	۵۰/۶۴، ۱/۲	-

* در بیشتر منابع مقدار تجربی شکاف نواری $1/34 eV$ به دست آمده است و کار حاضر با این مقدار مقایسه شده است.

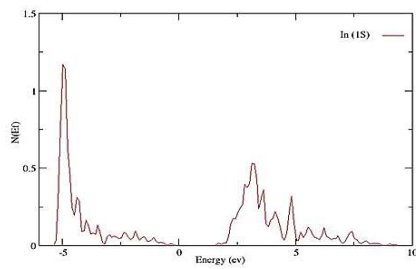
۳.۳ چگالی حالت‌ها

توزیع الکترون در طیف انرژی با استفاده از چگالی حالت‌ها بیان می‌شود. نمودار چگالی حالت‌های InP بر حسب انرژی در گستره $10-15$ الکترون ولت در شکل (۶) رسم شده است. در نمودار چگالی حالت‌ها، مقیاس انرژی صفر نشان دهنده مکان تراز فرمی است. بیشینه چگالی حالت‌های کلی در حدود $2/7 states/eV \cdot Cell$ می‌باشد.

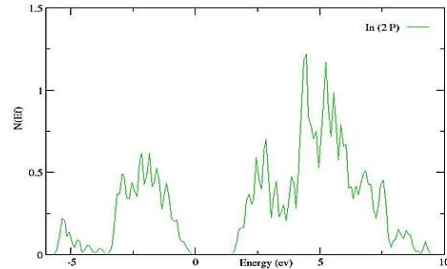
برای بررسی چگونگی مشارکت اوربیتال‌های مختلف در نوارهای رسانش و ظرفیت، چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اوربیتال‌های s و p اتم‌های In و P در شکل‌های (۷) رسم شده است. با توجه به شکل (۷)، بیشتر مشارکت اوربیتال p و s اتم In در انتهای نوار رسانش است و مشارکت قابل ملاحظه‌ای هم در نوار ظرفیت دارند که مشارکت اوربیتال s اتم In در انتهای نوار ظرفیت بیشتر از اوربیتال $2p$ آن است. همچنین شکل‌های (۷ ج و د) بیانگر مشارکت اوربیتال‌های p و s اتم P است که بیشتر مشارکت اوربیتال p اتم فسفر در نوار ظرفیت و اوربیتال s آن در نوار رسانش است. گرچه هر دو اوربیتال به ترتیب مشارکت قابل ملاحظه‌ای هم در نوار رسانش و هم در نوار ظرفیت دارند. لازم به توجه است که مشارکت اوربیتال‌های p اتم فسفر در نوار ظرفیت بیشتر از اوربیتال‌های p اتم In است که بیانگر هیبریدشدگی این دو اوربیتال و برقراری یک پیوند کووالانسی است.



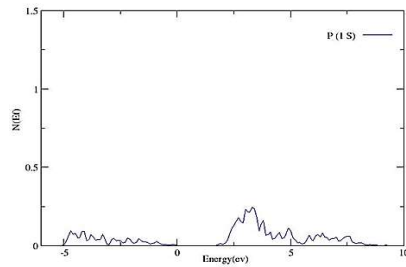
شکل ۶ چگالی حالت های کلی InP.



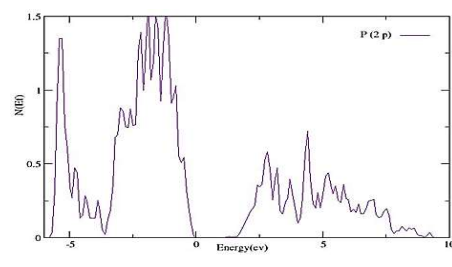
(ب)



(الف)



(د)



(ج)

شکل ۷ چگالی حالت های جزئی اوربیتال p الف: اتم In ج: اتم P، اوربیتال s ب: اتم In د: اتم P.

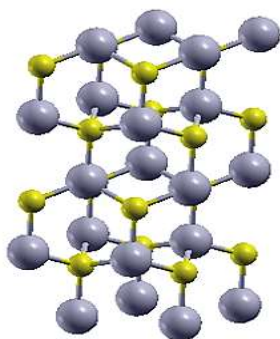


لازم به یادآوری است که در شکل (۷) مقیاس انرژی صفر نشان دهنده تراز فرمی است. چگالی حالت‌های کلی در سطح فرمی $N(E_f)$ صفر است که تأییدی بر شکل (۵) می‌باشد.

۴.۳ ساختار نوارهای انرژی در حالت نانو

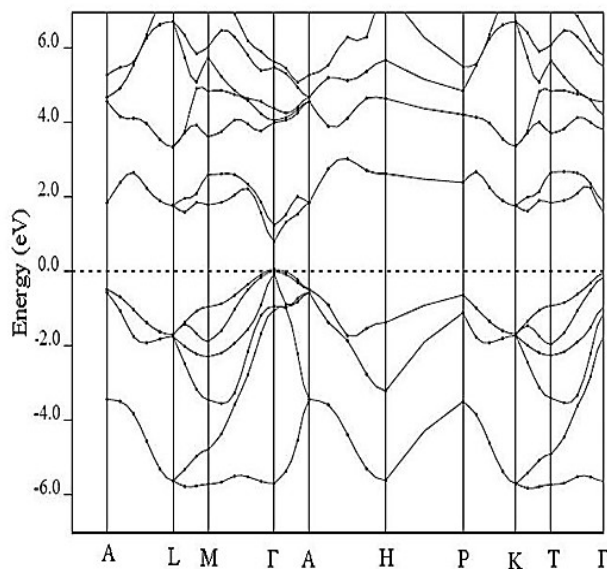
ساختار InP با گروه فضایی $P63mc(186)$ دارای دو اتم در سلول واحد است برای انجام محاسبات مربوط به InP از شبه پتانسیل بارپایسته استفاده شد. برای اتم In حالت‌های s، p و d و برای اتم P حالت‌های s و p را به عنوان حالت‌های ظرفیت در نظر گرفته شد. همچنین در این محاسبات انرژی قطع برابر ۱۸ ریذبرگ انتخاب شد. در این محاسبات از ۶۶۰ نقطه استفاده شده است که با روش خودسازگار به همگرایی رسیده است. در اینجا همگرایی بر مبنای انرژی قرار دارد که با ۸ چرخه و با اختلاف انرژی از مرتبه $10^{-8} \times 9/8$ ریذبرگ به همگرایی رسیده است. در این محاسبات انرژی فرمی به عنوان مبدأ مختصات و مقیاس انرژی بر حسب الکترون ولت می‌باشد. این ترکیب در حالت نانوسیم در نقطه Γ دارای شکاف مستقیم است.

شکاف نواری در این حالت برابر ۱٫۶۴۵ الکترون ولت است. در اینجا مقدار ۱/۴۹ الکترون ولت را بدست آمد. شکاف نواری بدست آمده از مقداری که با استفاده از اندازه گیری طیف فوتونی است کمتر می‌باشد و این ناشی از حضور نقص است اما سازگاری خوبی با مقاله [۲۴] دارد. از طرفی درک ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی نانو ساختار که در شکل (۸) رسم شده است، بر مبنای شناخت ویژگی‌های الکترونی انبوهه است، از این رو در این قسمت ساختار نواری انبوهه را رسم و محاسبه شد.



شکل ۸ ساختار نانوسیم InP.

شکل (۹) ساختار اتمی برای نانوسیم InP در جهت [۱۱۱] را نشان می دهد. همچنین شکاف نواری حدود ۱٫۴۹ الکترون ولت به دست آمد که نسبت به شکاف نواری در حالت انبوهه افزایش یافته است. در جدول (۴) مقادیر شکاف نواری کار حاضر با داده های بدست آمده در پژوهش های دیگر جهت مقایسه آمده است و چگالی حالت های نانوسیم InP و چگالی ابر الکترونی آن در شکل های (۱۰) و (۱۱) نشان داده شده است. از این جدول مشاهده می شود که شکاف نواری بدست آمده در این روش سازگاری بهتری با نتایج تجربی نسبت به دیگر روش ها دارد و اختلافی در حدود ۹٫۴۲ درصد با مقدار تجربی دارد. بررسی شکاف نواری نشان می دهد که مقدار این پارامتر در نانوسیم ها از حالت انبوهه بزرگ تر است. اگرچه با افزایش قطر نانوسیم ها، شکاف نواری کاهش می یابد. دلیل این امر می تواند ناشی از غالب بودن آثار سطحی در قطرهای کوچک باشد. انتظار می رود در قطرهای بزرگ تر، نمودار شکاف نواری بر حسب قطر نانوسیم ها روندی کاهشی داشته باشد. قطر نانوسیم های مورد مطالعه در این کار، کوچک تر از ۲ نانومتر است.



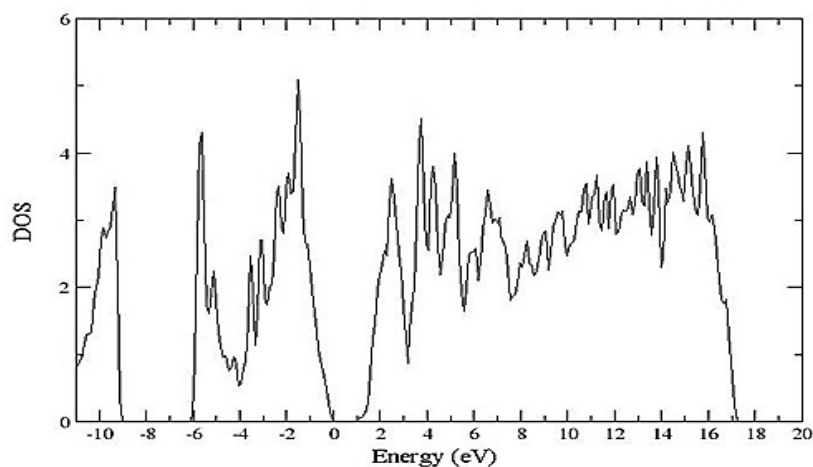
شکل ۹ ساختار نواری نانوسیم InP.



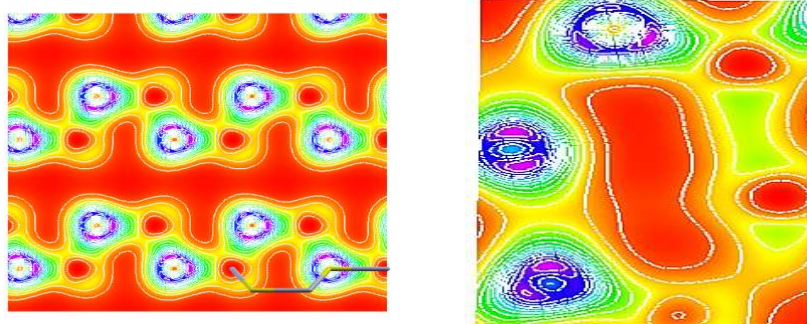
جدول ۴ مقایسه شکاف نواری نانوسیم InP به دست آمده در کار حاضر با نتایج دیگران.

کمیت‌های محاسبه شده	کار حاضر	کار دیگران	
		نظری	تجربی
E_g (eV)	۱/۴۹	۱/۴۷ [۲۵]	۱/۶۵ [۲۴]
نوع شکاف در نقطه Γ	مستقیم	مستقیم	مستقیم
درصد خطا با مقدار تجربی	۹/۴۲	۱۰/۳۹	-

نمودار چگالی حالت‌های نانوسیم InP بر حسب انرژی در گستره 12eV تا 18eV در شکل (۱۰) رسم شده است. در نمودار چگالی حالت‌ها، مقیاس انرژی صفر نشان دهنده مکان تراز فرمی است. همچنین توزیع چگالی بار در صفحه (۱۱۰) و (۱۰۰) در شکل (۱۱) رسم شده است. توزیع چگالی بار در صفحات نشان داده شده تراکم بار زیادی را در اطراف اتم‌های In و P نشان می‌دهد. در نتیجه در حالت نانوسیم InP پیوند کووالانسی قوی تری نسبت به حالت انبوهه InP وجود دارد.



شکل ۱۰ چگالی حالت‌های نانوسیم InP.



(ب)

(الف)

شکل ۱۱ توزیع چگالی بار در صفحه (الف) (۱۱۰) و (ب) (۱۰۰).

۴. نتیجه گیری

در این مقاله سعی شد که با ساخت شبه پتانسیل مناسب برای InP، ویژگی‌های ساختاری و الکترونی این ترکیب مورد بررسی قرار گیرد. محاسبات انجام شده با این روش، سازگاری خوبی با دیگر داده‌ها دارد. همچنین شکاف نواری $1/4 \text{ eV}$ را در نقطه Γ برای حالت انبوهه بدست آمد که سازگاری بسیار خوبی با نتایج تجربی داشت. افزون بر این، شکاف نواری در حالت نانوسیم حدود $1/49 \text{ eV}$ بدست آمد که با دیگر نتایج موجود سازگاری خوبی دارد.

۵. تقدیر و تشکر

این پژوهش توسط دانشگاه شهید چمران اهواز، ایران [SCU.SP99.490] پشتیبانی شد.

منابع

- [1] De. A. and Pryor. C. E, Predicted band structures of III-V semiconductors in wurtzite phase, *Phys. Rev. B* **84**, 239907, 2011.
- [2] Souza. P. L, Ribas. T, Bellini. P. R, and Mendes W m. J. V., Electron and γ irradiation effects in InP assessed by photoluminescence, *Journal of Applied Physics* **79**, 3482, 1996.
- [3] <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/InP.html>, 1996.
- [4] Werking. J. D, Bolognesi. C. R, Chang. L. D, Nguyen. C, Hu. E. L, and Kroemer. H., High-transconductance InAs/AlSb heterojunction field-effect transistors with delta-doped AlSb upper barriers, *IEEE Electron Dev. Lett* **13**, 164, 1992.
- [5] Soderstrom. J. R, Chow. D.H, and McGill. T.C., New negative differential resistance device based on resonant interband tunneling, *Appl Phys Lett* **55**, 1094, 1989.
- [6] Rino. J. P, and Branicio. P. *Phys Status Solidi (b)* **244**, 239-243, 2006.
- [7] Yamamoto. A, Yamaguchi. M, and Uemora. C, High conversion efficiency and high radiation resistance InP homojunction solar cells, *Apple. Phys. Lett.* **44**, 611, 1984.



- [8] <http://www.xcrysden.org>, 2003.
- [9] <http://www.quantum-esspresso.org>, 2021.
- [10] Monkhorst, H. J., & Pack, J. D., Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*, **13 (12)**, 5188, 1976.
- [11] Murnaghan, F. D., The compressibility of media under extreme pressures. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **30(9)**, 244-247, 1944.
- [12] Madelung, O., Landolt-Bornstein: Numerical data and functional relationships in science and technology. *New series group III*, **22**, 63-117, 1987.
- [13] Huang, M. Z, and Ching, W. Y., Calculation of optical excitations in cubic semiconductors. I. Electronic structure and linear response, *Phys.Rev.B* **47**, 9449-9463, 1993.
- [14] Satyam. S, Parashari. S, Kumar. S and Auluck. S, Pressure induced, electronic and optical properties of zincblende InP. *solid - state Electronics* **52**, 749-755, 2005.
- [15] Gorczyca. I, Christensen. N. E, and Alouani. M. Indium phosphide (InP) lattice parameters, thermal expansion, *Phys Rev B* **39**, 7705 -7712, 1982.
- [16] Wei, S. H., & Zunger, A., Predicted band-gap pressure coefficients of all diamond and zinc-blende semiconductors: Chemical trends. *Physical Review B*, **60(8)**, 5404, 1999.
- [17] Zhang, S. B., and Marvin L. Cohen. High-pressure phases of III-V zinc-blende semiconductors. *Physical Review B* **35(14)**, 7604, 1987.
- [18] Birch, F., Finite elastic strain of cubic crystals. *Physical Review*, **71(11)**, 809, 1947.
- [19] Prassides, K., Iwasa, Y., Ito, T., Chi, D. H., Uehara, K., Nishibori, E., ... & Akimitsu, J., Compressibility of the MgB₂ superconductor. *Physical Review B*, **64(1)**, 012509, 2001.
- [20] Salehi, H., Sr-Doping Effect on the Electronic Structure of BaTiO₃ Ceramic. *Indian Journal of Physics*, **80**, 1195-1200, 2006.
- [21] Lide, D. R., & Frederiske, H. R., Handbook of Chemistry and Physics, 80th edn, Section 8, 1999.
- [22] Sahr. U, Grant. I, and Muller. G, Conf. proc., 13thInt.Conf. on Indium Phosphid and Related Materials, IEEE, Nara, Japan, ISBN:0-7803-6700-6,533-536, 2001.
- [23] Adachi, S., Band gaps and refractive indices of AlGaAsSb, GaInAsSb, and InPAsSb: Key properties for a variety of the 2-4- μ m optoelectronic device applications. *Journal of applied physics*, **61(10)**, 4869-4876, 1987.
- [24] Trägårdh, J., Persson, A. I., Wagner, J. B., Hessman, D., & Samuelson, L., Measurements of the band gap of wurtzite InAs 1-x P x nanowires using photocurrent spectroscopy. *Journal of applied physics*, **101(12)**, 123701, 2007.
- [25] De, A., & Pryor, C. E., Predicted band structures of III-V semiconductors in the wurtzite phase. *Physical Review B*, **81(15)**, 155210, 2010.

© 2020 Alzahra University, Tehran, Iran. This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

