

Research Paper

The Effect of Hydrostatic Pressure on the Electronic and Optical Properties of GaAs¹

Sina Heydari² and Maryam Noorafshan^{* 3}

Received: 2022.03.10

Revised: 2022.08.14

Accepted: 2022.10.31

Abstract

In this research, the effect of hydrostatic pressure on the electronic structure and optical properties of GaAs compound has been investigated. The calculations have been done based on the density functional theory (DFT) using WIEN2K computational package. This computational package solves Kohn-Sham equations by the full-potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method self-consistently. The exchange-correlation potential is calculated by the Generalized gradient approximation (GGA) and a combination of modified Becke — Johnson plus local-density approximation (mBJ-LDA) functional. All the electronic and optical properties calculations have been done in the presence of spin-orbit interaction. In the case of electronic structure calculations, using the band structure calculations at different pressures, the pressure dependence of band gap energy is calculated. The results of calculations show that by increasing the pressure the band gap energy increases linearly. Regarding the optical properties, the effect of hydrostatic pressure on the real and imaginary parts of the dielectric function $\epsilon(\omega)$ is calculated. The results show that by increasing pressure the absorption edge and the major peaks in the imaginary part of the dielectric function are shifted towards higher energies whereas by decreasing the pressure they are shifted towards lower energies. The results also show that by increasing the pressure, the static dielectric function decreases linearly. Using the results of the real and imaginary dielectric function calculations, the optical gap and the static refractive index at different pressures are also calculated.

Keywords: *Density Functional Theory, Electronic Properties, Optical Properties, Hydrostatic Pressure, GaAs Compound.*

¹DOI: 10.22051/ijap.2022.39856.1271

² M. Sc. Graduated, Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Hormozgan, Bandarabbas, Iran. Email: sinaheydari2331@gmail.com

³ Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Hormozgan, Bandarabbas, Iran. (Corresponding Author). Email: noorafshan.maryam@yahoo.com.

تأثیر فشار هیدروستاتیکی بر ویژگی‌های اپتیکی و الکترونی گالیوم آرسناید^۱

سینا حیدری^۲ و مریم نورافشان^{۳*}

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۱۲/۱۹

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۱/۰۵/۲۳

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۰۸/۰۹

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال دوازدهم، پیاپی ۳۱، زمستان ۱۴۰۱

صص ۸۸ - ۱۰۵

چکیده:

در این پژوهش تأثیر فشار هیدروستاتیکی بر ویژگی‌های اپتیکی و الکترونی ترکیب گالیوم آرسناید مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از نرم افزار محاسباتی WIEN2K انجام شده است. این نرم افزار محاسباتی به صورت پتانسیل کامل با روش امواج تخت بهبود یافته خطی سازی شده معادلات کوهن-شم را به صورت خودسازگار حل می‌کند. انرژی تبادل همبستگی با استفاده از رهیافت‌های تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) و تقریب چگالی موضعی تغییر یافته بک-جانسون (mBJ-LDA) محاسبه شده است. همه محاسبات ساختار الکترونی و ویژگی‌های اپتیکی در حضور برهم کنش اسپین-مدار انجام شده است. در مورد ویژگی‌های الکترونی، ساختار نواری الکترونی در فشارهای مختلف محاسبه شده و سپس با استفاده از آن شکاف نواری انرژی به صورت تابعی از فشار به دست آمده است. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که با افزایش فشار، شکاف نواری به صورت خطی افزایش می‌یابد. در مورد ویژگی‌های اپتیکی، تأثیر فشار هیدروستاتیکی بر سهم‌های موهمومی و حقیقی تابع دی‌الکتریک مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که با افزایش فشار انرژی آستانه جذب و شاخص‌ترین قله‌ها در سهم موهمومی تابع دی‌الکتریک به طرف انرژی‌های بالاتر و با کاهش فشار به سمت انرژی‌های پایین‌تر جابه‌جا می‌شوند. همچنین نتایج محاسبات نشان می‌دهد که با افزایش فشار ثابت دی‌الکتریک استاتیکی به صورت خطی کاهش می‌یابد. همچنین، با استفاده از نتایج محاسبات مربوط به سهم‌های حقیقی و موهمومی تابع دی‌الکتریک، ضریب شکست استاتیکی و شکاف اپتیکی در فشارهای مختلف محاسبه شده است.

واژگان کلیدی: نظریه تابعی چگالی، ویژگی‌های اپتیکی، ویژگی‌های الکترونی، فشار هیدروستاتیکی، ترکیب گالیوم آرسناید.

¹ DOI: 10.22051/ijap.2022.39856.1271

² دانش‌آموخته کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه هرمزگان، بندرعباس، ایران. Email: sinaheydari2331@gmail.com

³ استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه هرمزگان، بندرعباس، ایران. (نویسنده مسئول) Email: noorafshan.maryam@yahoo.com



۱. مقدمه

مطالعه ویژگی‌های فیزیکی نیمرساناهای گروه III-V به دلیل کاربردهای فراوان در طراحی وسایل اپتوالکترونی همواره مورد توجه پژوهشگران بوده است. گالیوم آرسناید یک ماده نیمرسانا با شکاف نواری مستقیم از نیمرساناهای گروه III-V است. گالیوم آرسناید به دلیل داشتن شکاف نواری پهن و مستقیم یک ماده مهم در طراحی وسایل اپتوالکترونی چون لیزرها، دیودها، آشکارسازهای نوری و سلول‌های خورشیدی است [۱]. در سلول‌های خورشیدی شکاف نواری پهن و مستقیم گالیوم آرسناید، امکان جذب بهتر فوتون و تولید جفت الکترون-حفره را فراهم می‌کند [۲]. سلول‌های خورشیدی گالیوم آرسناید به دلیل ویژگی‌های منحصر بفرد عملکرد بهتری نسبت به سلول‌های خورشیدی معمولی مبتنی بر سیلیکون دارند. از مزایای گالیوم آرسناید به عنوان ماده ای برای کاربرد در سلول‌های خورشیدی می‌توان به ضریب دمایی پایین، عملکرد خوب در نور با شدت کم، بازدهی بالا، مقاومت در برابر رطوبت و تابش اشعه ماوراءبنفش و همچنین انعطاف پذیری و سبک وزن بودن آن اشاره نمود [۳]. بهبود عملکرد سلول‌های خورشیدی با طراحی مواد با شکاف نواری و ویژگی‌های اپتیکی مناسب امکان‌پذیر است [۴-۶]. در علم مواد از جمله مهم‌ترین روش‌ها برای طراحی مواد با شکاف نواری و ویژگی‌های اپتیکی مناسب، اعمال فشار هیدروستاتیکی و ساخت آلیاژ می‌باشد. به عنوان مثال؛ آلیاژهای $GaAs_{1-x}N_x$ که امروزه یکی از مهم‌ترین مواد در طراحی سلول‌های خورشیدی با بازدهی بالا می‌باشند، با جانشین کردن کسر مناسبی از آرسناید (As) در گالیوم آرسناید با نیتروژن (N) جهت ساخت آلیاژ با غلظت مورد نظر بدست می‌آیند [۸،۷]. این آلیاژها دارای ویژگی‌های اپتیکی و الکترونی متفاوت در مقایسه با ترکیب گالیوم آرسناید می‌باشند [۹]. به عنوان مثالی دیگر می‌توان به آلیاژهای $GaAs_{1-x}Sb_x$ اشاره نمود که در طراحی وسایل اپتوالکترونی کاربرد دارند و برای ساخت آلیاژ با غلظت مورد نظر کسر مناسبی از آرسناید (As) در گالیوم آرسناید با آنتیموان (Sb) جایگزین می‌شود. این آلیاژها نیز دارای ویژگی‌های اپتیکی و الکترونی متفاوت در مقایسه با ترکیب گالیوم آرسناید می‌باشند [۱۰]. همان طور که گفته شد اعمال فشار هیدروستاتیکی نیز می‌تواند سبب تغییر ویژگی‌های اپتیکی و الکترونی بلورها شود. به عنوان مثال؛ اعمال فشار هیدروستاتیکی بر چاه‌های کوانتومی چندگانه گالیوم آرسناید [۱۱،۱۲]، انبوهه نیمرسانای ایندیم آرسناید (InAs) [۱۳]، آلیاژهای ZnS_xSe_{1-x} [۱۴] و نیمرساناهای گروه III-V که شامل آنتیموان می‌باشند [۱۵]، منجر به تغییر ویژگی‌های اپتیکی و الکترونی می‌شود. با توجه به این که بر اساس مقالات منتشر شده، تأثیر فشار هیدروستاتیکی بر ویژگی‌های اپتیکی و الکترونی

ترکیب گالیوم آرسناید تاکنون مورد بررسی قرار نگرفته است، در این پژوهش به بررسی تأثیر فشار هیدروستاتیکی بر ویژگی‌های اپتیکی و الکترونی ترکیب گالیوم آرسناید خواهیم پرداخت و نتایج بدست آمده از آن به عنوان پیشنهادی برای بهبود عملکرد سلول‌های خورشیدی ساخته شده بر پایه گالیوم آرسناید ارائه خواهد شد.

۲. روش انجام محاسبات

امروزه نظریه تابعی چگالی یکی از روش‌های دقیق و پر کاربرد برای مطالعه ویژگی‌های فیزیکی مواد می‌باشد. محاسبات این مقاله برای حل هامیلتونی جامد بلوری بر پایه نظریه تابعی چگالی [۱۶] و با استفاده از نرم افزار محاسباتی WIEN2k انجام گرفته است [۱۷]. این کد محاسباتی به صورت پتانسیل کامل با روش امواج تخت بهبود یافته خطی‌سازی شده به حل معادلات تک ذره کوهن-شم به صورت خودسازگار می‌پردازد [۱۸]. برای حل خودسازگار معادلات تک ذره کوهن-شم در روش امواج تخت بهبود یافته خطی‌سازی شده تقریب مافین-تین همان‌گونه که اسلیتر [۱۹،۲۰] پیشنهاد کرد، به کار برده می‌شود. در تقریب مافین-تین، یاخته بسیط به دو ناحیه (۱) فضای مافین-تین شامل کره‌های بدون همپوشانی به مراکز اتم‌های موجود در یاخته بسیط معروف به کره‌های مافین-تین (MT) و (۲) فضای باقیمانده بین کره‌ها معروف به ناحیه بین جایگاهی (I) تقسیم می‌شود. در این روش پتانسیل داخل کره‌های مافین-تین که الکترون‌ها نزدیک به هسته‌ها قرار دارند تقارن کروی دارد و در ناحیه بین جایگاهی پتانسیل هموار می‌باشد. از این رو، در روش امواج تخت بهبود یافته خطی‌سازی شده، توابع پایه خارج از کره‌های مافین-تین به صورت امواج تخت و درون کره‌های مافین-تین به صورت حاصل ضرب هماهنگ‌های کروی در جواب‌های معادله شرودینگر شعاعی در نظر گرفته می‌شوند.

در این پژوهش، برای محاسبه ویژگی‌های ساختاری انرژی تبادلی همبستگی از تقریب شیب تعمیم‌یافته^۱ استفاده شده است [۲۱]. در تقریب شیب تعمیم‌یافته که یکی از روش‌های مناسب در محاسبه ویژگی‌های فیزیکی بلورها از جمله ویژگی‌های ساختاری است، افزون بر چگالی، از شیب چگالی در نقطه مورد نظر نیز استفاده می‌شود. تقریب شیب تعمیم‌یافته، تقریب مناسبی برای محاسبات ویژگی‌های فیزیکی بلورها از جمله ویژگی‌های ساختاری است و نتایج بدست آمده از این تقریب در هماهنگی خوبی با نتایج تجربی قرار دارد. اگرچه استفاده از این روش در محاسبه

^۱ Generalized Gradient Approximation (GGA)



ساختار نواری نیمرساناها منجر به مقدار شکاف نواری بسیار کوچک در مقایسه با مقدار شکاف نواری تجربی می‌شود. برای از بین بردن این مشکل، تقریب چگالی موضعی تغییر یافته بک-جانسون^۱ [۲۲]، که یک تصحیح را به تقریب LDA وارد می‌کند، پیشنهاد شده است که نتایج شکاف نواری محاسبه شده با استفاده از آن با نتایج تجربی هماهنگی خوبی دارد. با توجه به این که در محاسبات ویژگی‌های اپتیکی از نتایج محاسبات ساختار نواری استفاده می‌شود، ویژگی‌های اپتیکی محاسبه شده با استفاده از تقریب چگالی موضعی تغییر یافته بک-جانسون نیز هماهنگی بهتری با نتایج تجربی دارد. از این رو در کار حاضر برای محاسبه ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی گالیوم آرسناید انرژی تبادل همبستگی از تقریب چگالی موضعی تغییر یافته بک-جانسون استفاده شده است. شعاع کره‌های مافین-تین برای اتم‌های گالیوم (Ga) و آرسناید (As) با در نظر گرفتن شرط نبود همپوشانی کره‌ها به ترتیب $1/9$ و $1/8$ بوهر انتخاب شدند. بردار موج قطع در بسط توابع موج بر حسب امواج تخت خارج از کره‌های مافین-تین ۹ و بردار قطع بسط فوریه چگالی بار و پتانسیل خارج از کره‌های مافین-تین $(Ry)^{1/2}$ انتخاب شده است. بهینه تعداد نقاط k در فضای وارون برای محاسبات ساختار الکترونی ۳۰۰۰ نقطه، معادل با ۱۰۴ نقطه کاهش پذیر و در محاسبات اپتیکی ۱۰۰۰۰ نقطه، معادل با ۲۸۶ نقطه کاهش پذیر انتخاب شده است. این پارامترها با استفاده از همگرایی انرژی به دست آمده است. محاسبات ساختار الکترونی و ویژگی‌های اپتیکی در حضور برهم کنش اسپین-مدار انجام شده است.

۳. نتایج و بحث

۱.۳ ویژگی‌های ساختاری

ترکیب گالیوم آرسناید دارای ساختار بلند روی (ZB) و گروه فضایی F-43m است [۲۳]. به منظور بررسی ویژگی‌های ساختاری ترکیب گالیوم آرسناید، ثابت شبکه تعادلی و مدول حجمی این ترکیب محاسبه شده است. به این منظور، انرژی کل ترکیب گالیوم آرسناید در تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) به ازای حجم‌های مختلف محاسبه و نتایج بدست آمده از این محاسبات با استفاده از معادله حالت مورناگان [۲۵] برازش شد. با استفاده از کمینه نمودار انرژی بر حسب حجم، ثابت شبکه تعادلی و مدول حجمی این ترکیب محاسبه و نتایج در جدول (۱) با مقدار تجربی و نتایج

¹ Modified Becke- Johnson (mBJ-LDA)

محاسباتی موجود مقایسه شده است. همان طور که داده‌های جدول (۱) نشان می‌دهند، ثابت شبکه و مدول حجمی محاسباتی هماهنگی قابل قبولی با نتایج تجربی و محاسباتی موجود دارند.

جدول ۱ مقایسه مقادیر محاسبه شده ثابت شبکه تعادلی و مدول حجمی ترکیب گالیوم آرسناید با نتایج تجربی و محاسباتی موجود.

	ثابت شبکه (A^0)	مدول حجمی (GPa)	مشق مدول حجمی
مطالعه کنونی	۵/۷۸	۷۰/۶۹	۴/۷۸
محاسبات دیگران	۵/۶۷ [۹]	۸۱/۹۷ [۹]	---
	۵/۷۵ [۱۰]	۶۰/۵۵ [۱۰]	---
تجربی	۵/۷۳ [۲۳]	۷۵/۵۰ [۲۴]	---
درصد خطا در مقایسه با مقدار تجربی	% ۰/۸۰	% ۶	---

مدول حجمی معیاری است از سختی بلور، به این معنا که هر چه مدول حجمی یک بلور بیشتر باشد، آن بلور تراکم‌پذیری کمتری خواهد داشت. برای بررسی تأثیر فشار هیدروستاتیکی بر تراکم‌پذیری ترکیب گالیوم آرسناید، مدول حجمی این ترکیب در فشارهای مختلف محاسبه و نتایج بدست آمده از محاسبات در جدول (۲) بیان شده است. همان طور که داده‌های جدول (۲) نشان می‌دهند با افزایش فشار مدول حجمی افزایش می‌یابد. از این رو می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش فشار، تراکم‌پذیری ترکیب گالیوم آرسناید کاهش می‌یابد.

جدول ۲ مدول حجمی محاسبه شده گالیوم آرسناید در فشارهای مختلف در رهیافت تقریب شیب تعمیم یافته (GGA).

فشار (GPa)	مدول حجمی (GPa)	مشق مدول حجمی
۰	۷۰/۶۹	۴/۷۸
۱/۸۴	۷۱/۲۳	۴/۹۴
۲/۹۴	۷۲/۹۲	۴/۶۵
۳/۸۱	۷۴/۵۴	۴/۳۲
-۰/۱	۶۴/۲۱	۴/۲۱
-۱/۸۵	۶۱/۷۶	۴/۱۱
-۲/۹۴	۵۷/۴۵	۴/۴۳



۲.۳ تأثیر فشار هیدروستاتیکی بر ویژگی‌های اپتیکی و الکترونی گالیوم آرسناید

۱.۲.۳ تأثیر فشار هیدروستاتیکی بر ویژگی‌های الکترونی

همان طور که در مقدمه گفته شد گالیوم آرسناید یک ماده نیمرسانا با شکاف نواری مستقیم است. ساختار نواری الکترونی یک جسم جامد بیان کننده گستره‌های انرژی نوارهای مجاز و شکاف‌های نواری است و با رسم ویژه مقادیر الکترون‌های جسم جامد بر حسب بردار موج k به دست می‌آید. به منظور بررسی ویژگی‌های الکترونی گالیوم آرسناید ساختار نواری الکترونی این ترکیب در فشار صفر با استفاده از رهیافت (mBJ-LDA) محاسبه شد که نتایج بدست آمده از این محاسبات در شکل ۱-الف آمده است. ساختار نواری محاسبه شده نشان می‌دهد که گالیوم آرسناید یک ماده نیمرسانا با شکاف نواری مستقیم است. با استفاده از نمودار ساختار نواری، شکاف نواری گالیوم آرسناید محاسبه و مقدار آن در مقایسه با شکاف نواری تجربی و نتایج محاسباتی موجود در جدول (۳) بیان شده است. همان طور که داده‌های جدول (۳) نشان می‌دهند، این نتایج هماهنگی قابل قبولی با نتایج تجربی و محاسباتی موجود دارد.

جدول ۳ مقایسه مقدار شکاف نواری محاسبه شده گالیوم آرسناید با نتایج محاسباتی و تجربی موجود.

شکاف نواری (الکترون ولت)

مطالعه حاضر	۱/۶۳
محاسبات دیگران	۱/۴۸ [۹] ۱/۵۵ [۱۰]
تجربی	۱/۴۲ [۲۴]
درصد خطا در مقایسه با مقدار تجربی	٪ ۱۴

برای بررسی تأثیر فشار هیدروستاتیکی بر ویژگی‌های الکترونی گالیوم آرسناید، ساختار نواری الکترونی این ترکیب در فشارهای مختلف، شامل فشارهای مثبت و منفی در تقریب (mBJ-LDA) محاسبه شد و نتایج بدست آمده از این محاسبات در شکل‌های ۱-ب تا ۱-ی آمده است. نتایج بدست آمده از مقایسه ساختار نواری در فشارهای مختلف را می‌توان به صورت زیر خلاصه کرد:

- گالیوم آرسناید در تمام فشارهای اعمال شده یک ماده نیمرسانا با شکاف نواری مستقیم است اما شکاف نواری با اعمال فشار تغییر می‌کند.

- با افزایش فشار شکاف نواری انرژی با بالا رفتن کمینه انرژی نوار رسانش افزایش می‌یابد.
- با کاهش فشار شکاف نواری انرژی با پایین آمدن کمینه انرژی نوار رسانش کاهش می‌یابد.

مقادیر شکاف نواری انرژی در فشارهای مختلف که با استفاده از ساختار نواری محاسبه شده است در جدول (۴) فهرست شده است. شکاف نواری انرژی محاسبه شده به صورت تابعی از فشار در شکل (۲) رسم شده است. شکاف نواری انرژی محاسبه شده با استفاده از معادله درجه دو با رابطه (۱) برازش داده شده است:

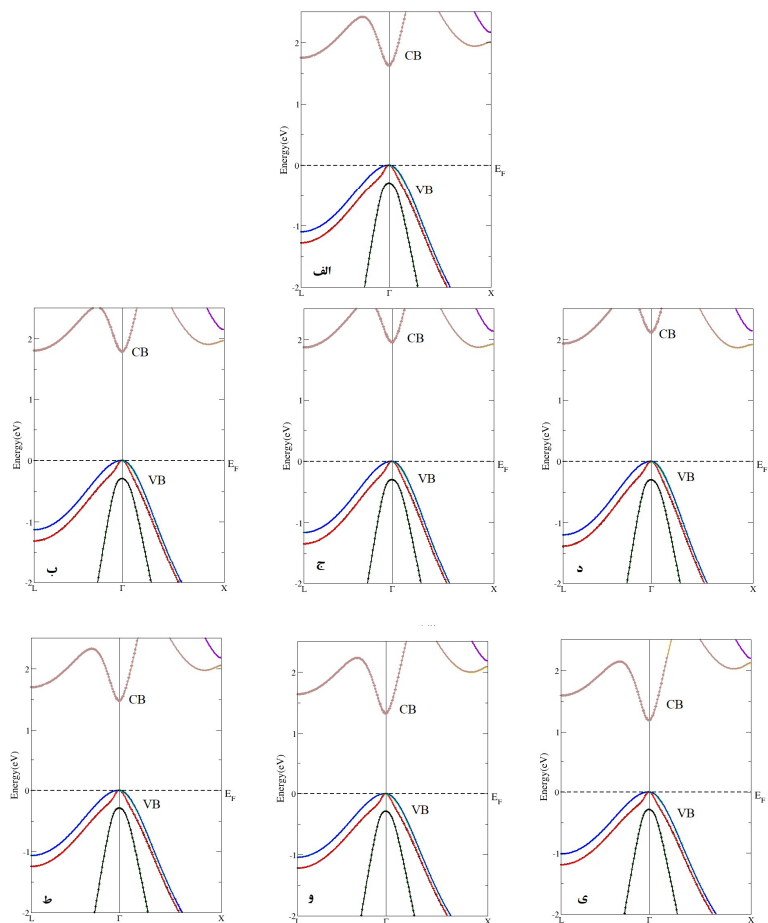
$$E_g(P) = 1.58 + 0.13P - 0.0002P^2 \quad (1)$$

با توجه به رابطه (۱)، ضریب جمله درجه دوم کمابیش صفر است. از این رو، می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش فشار شکاف نواری انرژی به صورت خطی افزایش می‌یابد.

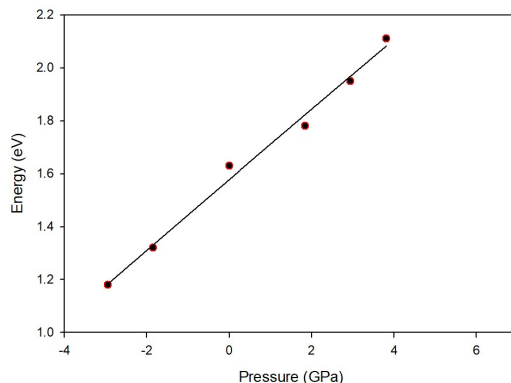
جدول ۴ شکاف نواری انرژی محاسبه شده گالیوم آرسناید در فشارهای مختلف در رهیافت (mBJ-LDA).

P(GPa)	E _g (eV)
۰	۱/۶۳
۱/۸۴	۱/۷۸
۲/۹۴	۱/۹۵
۳/۸۱	۲/۱۱
-۰/۱	۱/۴۸
-۱/۸۵	۱/۳۲
-۲/۹۴	۱/۱۸





شکل ۱ ساختار نواری محاسبه شده گالیوم آرسناید در فشارهای مختلف در رهیافت (mBJ-LDA) نشان CB نشان دهنده نوار رسانش و VB نشان دهنده نوار ظرفیت می باشد. (الف) 0 Gpa، (ب) 1.84 Gpa، (ج) 2.94 Gpa، (د) 3.81 Gpa (ط) -0.1 Gpa، (و) -1.85 Gpa، (ی) -2.94 Gpa



شکل ۲ نمودار شکاف نواری انرژی محاسبه شده گالیوم آرسناید برحسب فشار در رهیافت (mBJ-LDA).

۲.۲.۳ تأثیر فشار هیدروستاتیکی بر ویژگی‌های اپتیکی

ویژگی‌های اپتیکی مواد با محاسبه تابع دی‌الکتریک مختلط وابسته به بسامد، $\varepsilon(\omega)$ ، توصیف می‌شود:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (۲)$$

که در آن $\varepsilon_1(\omega)$ و $\varepsilon_2(\omega)$ به ترتیب سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک است [۲۶]. این تابع که برای بیان پاسخ اپتیکی بلور به میدان الکترومغناطیسی به کار برده می‌شود، دارای دو سهم گذار درون نواری و بین نواری است. گذارهای درون نواری مربوط به سهم الکترون‌های آزاد است و از این رو تنها در مواد رسانا چون فلزات و شبه فلزات دارای اهمیت می‌باشد [۲۶، ۲۷]. گالیوم آرسناید یک ماده نیمرسانا است، از این رو بایستی تنها سهم گذار بین نواری را در نظر گرفت. سهم گذار بین نواری شامل گذارهای مسقیم و غیرمستقیم است. در این پژوهش تنها سهم گذارهای بین نواری مربوط به انتقال‌های مستقیم که شامل یک جمع بندی روی تمام انتقال‌های ممکن از حالت‌های پر شده نوار ظرفیت به حالت‌های پر نشده نوار رسانش می‌باشند با استفاده از تقریب فاز کاتوره‌ای^۱ محاسبه شده‌اند [۲۷]. باور اصلی در تقریب فاز تصادفی که یک نظریه کاملاً کوانتومی است بر این است که اختلال خارجی یک توزیع بار جدید را در سامانه ایجاد می‌کند و انرژی پتانسیل القایی ناشی از آن‌ها انرژی پتانسیل خارجی اولیه را استتار می‌کنند. بنابراین تابع دی‌الکتریک با استفاده از یک انرژی پتانسیل کل که افزون بر انرژی پتانسیل خارجی شامل پتانسیل القایی نیز

¹ Random Phase Approximation (RPA)



می باشد، محاسبه می گردد. گذارهای بین نواری غیرمستقیم ناشی از پراکندگی های فونونی هستند و تنها سهم کوچکی (در حدود میلی الکترون ولت) در تابع دی الکترونیک خواهند داشت، از این رو، از این سهم ناچیز در محاسبات صرف نظر شده است. به عنوان نمونه ای برای نشان دادن سهم ناچیز گذارهای غیرمستقیم در ویژگی های اپتیکی، می توان به مقاله اریکسون و همکارانش اشاره نمود [۲۸]. رابطه تابع دی الکترونیک با در نظر گرفتن سهم گذارهای مستقیم اپتیکی به صورت زیر می باشد [۲۶]:

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{ve^2}{2\pi\hbar m^2 \omega^2} \int d^3k \sum_{c,v} |c_k \langle p | v_k \rangle|^2 \delta(E_{ck} - E_{vk} - \hbar\omega) \quad (3)$$

که $\hbar\omega$ انرژی فوتون فرودی، p عملگر تکانه، $|c_k\rangle$ و $|v_k\rangle$ حالت های نواری رسانش و ظرفیت با بردار موج k و E_{ck} و E_{vk} به ترتیب ویژه مقادیر متناظر با این حالت ها هستند. سهم حقیقی تابع دی الکترونیک نیز با استفاده از رابطه کرامرز-کرونینگ محاسبه می شود [۲۶]:

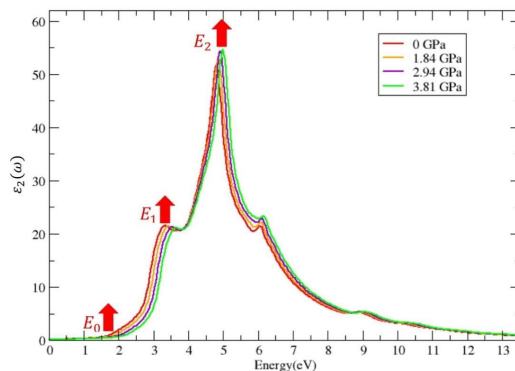
$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\varepsilon_2(\omega') \omega' d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (4)$$

با دانستن سهم های حقیقی و موهومی تابع دی الکترونیک، امکان دستیابی به سایر کمیت های اپتیکی وجود دارد [۲۹]. تانسور دی الکترونیک یک تانسور تقارنی مرتبه دوم است که در حالت کلی دارای شش مولفه جداگانه می باشد. بعضی از مولفه های این تانسور بسته به تقارن های بلوری می توانند صفر باشند. ترکیب گالیوم آرسناید دارای تقارن مکعبی است و از این رو، تنها باید یک مولفه تانسور محاسبه شود. برای بررسی تأثیر فشار هیدروستاتیکی بر ویژگی های اپتیکی گالیوم آرسناید سهم موهومی و حقیقی تابع دی الکترونیک در فشارهای مختلف محاسبه شده و نتایج بدست آمده از این محاسبات به ترتیب در شکل های ۳ تا ۶ نشان داده شده است.

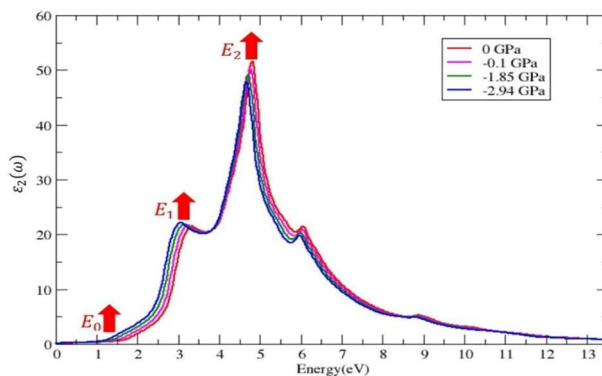
در نمودار سهم موهومی تابع دی الکترونیک بر سه نقطه اصلی انرژی که با E_0 ، E_1 و E_2 نشان داده شده است، تمرکز شود. نقطه E_0 متناظر با آستانه جذب اپتیکی است و برابر با گذار مستقیم الکترون از بالاترین نواری ظرفیت به پایین ترین نواری رسانش در نقطه گاما (Γ) در مرکز اولین منطقه بریلوئن می باشد. قله های E_1 و E_2 به ترتیب ناشی از گذار از بالاترین نواری ظرفیت به پایین ترین نواری رسانش در نزدیکی نقطه های L و X منطقه بریلوئن می باشد. همان طور که از شکل های ۳ و ۴ دیده می شود، اگرچه با اعمال فشار موقعیت نقطه های E_0 ، E_1 و E_2 تغییر می کند، اما شکل کلی نمودارها مشابه با نمودار در فشار صفر می باشد. از مقایسه نمودارهای سهم موهومی تابع دی الکترونیک در فشارهای مختلف نتایج زیر بدست می آید:

۱- با افزایش فشار E_0 به سمت انرژی‌های بالاتر و با کاهش فشار به سمت انرژی‌های پایین‌تر جابه‌جا می‌شود که در هماهنگی با شکاف‌های نواری انرژی است که در فشارهای مختلف با استفاده از ساختار نواری الکترونی محاسبه شده است.

۲- با افزایش فشار مکان قله‌های E_1 و E_2 به طرف انرژی‌های بالاتر و با کاهش فشار به طرف انرژی‌های پایین‌تر جابه‌جا می‌شود که برابر با محاسبات ساختار الکترونی است.

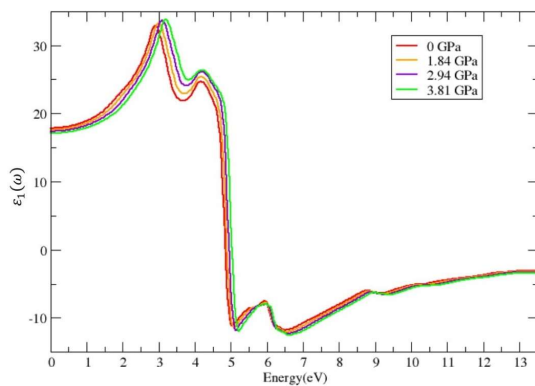


شکل ۳ مقایسه بین سهم موهمی تابع دی‌الکتریک در فشارهای مثبت و فشار صفر در رهیافت (mBJ-LDA).

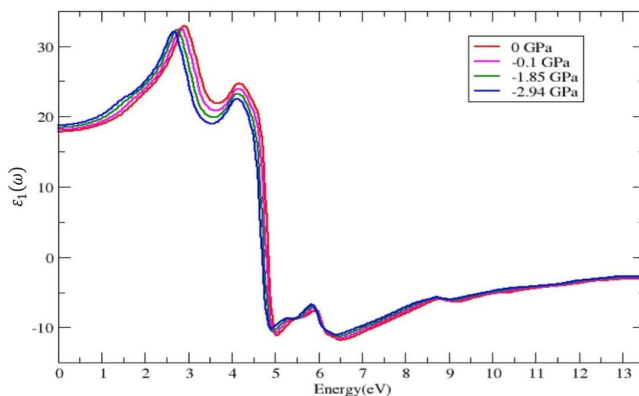


شکل ۴ مقایسه بین سهم موهمی تابع دی‌الکتریک در فشارهای منفی و فشار صفر در رهیافت (mBJ-LDA).





شکل ۵ مقایسه بین سهم حقیقی تابع دی الکتریک در فشارهای مثبت و فشار صفر در رهیافت (mBJ-LDA).



شکل ۶ مقایسه بین سهم حقیقی تابع دی الکتریک در فشارهای منفی و فشار صفر در رهیافت (mBJ-LDA).

با استفاده از نمودار قسمت موهومی تابع دی الکتریک، شکاف اپتیکی گالیوم آرسناید در فشارهای مختلف محاسبه و مقادیر آن در جدول (۵) داده شده است. داده‌های جدول (۵) نشان می‌دهند که با افزایش فشار شکاف اپتیکی گالیوم آرسناید افزایش و با کاهش فشار کاهش می‌یابد. همان طور که انتظار می‌رود شکاف اپتیکی محاسبه شده در هماهنگی بسیار خوبی با شکاف نواری محاسبه شده قرار دارد.

جدول ۵ شکاف اپتیکی محاسبه شده گالیوم آرسناید در فشارهای مختلف در رهیافت (mBJ-LDA).

فشار (GPa)	شکاف اپتیکی (eV)
۰	۱/۶۲
۱/۸۴	۱/۷۸
۲/۹۴	۱/۹۷
۳/۸۱	۲/۱۱
-۰/۱	۱/۴۶
-۱/۸۵	۱/۳۳
-۲/۹۴	۱/۱۸

در نمودار $\epsilon_1(\omega)$ پس از مشاهده چندین قله، شاهد صفر شدن سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک هستیم. این مقادیر صفر (ریشه‌های تابع $\epsilon_1(\omega)$) دارای مفهوم فیزیکی هستند و یک شرط لازم برای نوسانات پلاسمونی به شمار می‌رود و تفسیر دقیق آن به همراه طیف اتلاف انرژی الکترون صورت می‌گیرد. همان طور که نمودار نشان می‌دهد در تمام فشارها بعد از انرژی حدود ۴/۴ الکترون ولت، $\epsilon_1(\omega)$ منفی می‌شود. $\epsilon_1(\omega)$ منفی به این معناست که انتشار موج الکترومغناطیسی در ترکیب گالیوم آرسناید در این محدوده انرژی کمابیش صفر است. این نواحی که آن‌ها را نواحی غیرمجاز می‌نامند، بلور شفافیت خود را از دست می‌دهد و جذب و اتلاف انرژی را خواهیم داشت.

یکی از مهمترین کمیت‌ها در بررسی طیف سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک مواد نیم‌رسانا، ثابت دی‌الکتریک استاتیک، $\epsilon_1(0)$ ، (سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در فرکانس صفر) است که بیان‌کننده استتار الکتروستاتیکی، برهم‌کنش‌های الکترون-الکترون، الکترون-شبکه و الکترون ناخالصی در بلورها می‌باشد. مقادیر ثابت دی‌الکتریک استاتیک در فشارهای مختلف محاسبه و نتایج در جدول (۶) آورده شده است. همان طور که از شکل‌های (۵) و (۶) و داده‌های جدول (۶) دیده می‌شود با افزایش فشار مقدار ثابت دی‌الکتریک استاتیک کاهش می‌یابد. افزون بر این، بر اساس نتایج داده شده در بخش (۱.۲.۳) با افزایش فشار شکاف نواری افزایش و با کاهش فشار شکاف

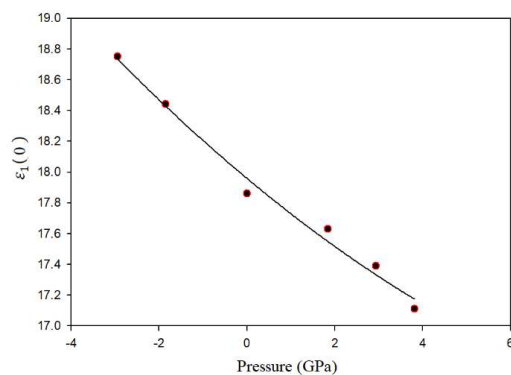


نواری کاهش می‌یابد. این نتیجه در هماهنگی با مدل پن^۱ می‌باشد [۳۰]. بر اساس مدل پن، رابطه شکاف نواری و ثابت دی‌الکتریک استاتیک با رابطه (۵) داده می‌شود:

$$\varepsilon_1(0) \approx \left[\frac{\hbar\omega_p}{E_g} \right]^2 \quad (5)$$

جدول ۶ مقادیر محاسبه شده ثابت دی‌الکتریک استاتیک در فشارهای مختلف در رهیافت (mBJ-LDA).

P(GPa)	$\varepsilon_1(0)$
۰	۱۷/۸۶
۱/۸۴	۱۷/۶۳
۲/۹۴	۱۷/۳۹
۳/۸۱	۱۷/۱۱
-۰/۱	۱۸/۱۱
-۱/۸۵	۱۸/۴۴
-۲/۹۴	۱۸/۷۵



شکل ۷ نمودار ثابت دی‌الکتریک استاتیک محاسبه شده گالیوم آرسناید برحسب فشار در رهیافت (mBJ-LDA).

¹ Penn model

بنابراین با توجه به نتایج به دست آمده می‌توان نتیجه گرفت که در بسامدهای نزدیک به صفر با کاهش فشار، رسانندگی اپتیکی افزایش می‌یابد. ثابت دی‌الکتریک استاتیک محاسبه شده به صورت تابعی از فشار در شکل (۷) رسم شده است. ثابت دی‌الکتریک استاتیک محاسبه شده با استفاده از معادله درجه دو با رابطه (۶) برازش داده شده است:

$$\varepsilon_1(0) = 17.96 - 0.24P + 0.001P^2 \quad (6)$$

رابطه (۶) نشان می‌دهد که ضریب جمله درجه دوم کمابیش برابر با صفر است و از این رو، می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش فشار ثابت دی‌الکتریک استاتیک به صورت خطی کاهش می‌یابد. به منظور مطالعه بیشتر ویژگی‌های اپتیکی گالیوم آرسناید، ضریب شکست استاتیک گالیوم آرسناید در رهیافت (mBJ-LDA) محاسبه و مقدار آن با مقدار تجربی در جدول (۷) مقایسه شده است.

جدول ۷ مقایسه ضریب شکست استاتیک محاسبه شده گالیوم آرسناید در تقریب (mBJ-LDA) با ضریب شکست استاتیک تجربی.

مقدار تجربی	ضریب شکست استاتیک محاسبه شده	ضریب شکست استاتیک تجربی [۳۱]
۱۱٪	۴/۲۲	۳/۸۰

جدول ۸ مقادیر محاسبه شده ضریب شکست استاتیک در فشارهای مختلف در رهیافت (mBJ-LDA).

فشار (GPa)	ضریب شکست استاتیک
۰	۴/۲۲
۱/۸۴	۴/۱۹
۲/۹۴	۴/۱۷
۳/۸۱	۴/۱۳
-۰/۱	۴/۲۵
-۱/۸۵	۴/۲۹
-۲/۹۴	۴/۳۳



برای بررسی تأثیر فشار هیدروستاتیکی بر ضریب شکست استاتیک گالیوم آرسناید، ضریب شکست استاتیک این ترکیب در فشارهای مختلف محاسبه شده و نتایج حاصل از آن در جدول (۸) نشان داده شده است. همان طور که داده‌های جدول (۸) نشان می‌دهند، ضریب شکست استاتیک با افزایش فشار کاهش می‌یابد.

۴. نتیجه‌گیری

در این پژوهش با به کارگیری روش امواج تخت بهبود یافته خطی سازی شده و در چارچوب نظریه تابعی چگالی، ویژگی‌های اپتیکی و الکترونی گالیوم آرسناید در فشار هیدروستاتیکی بررسی شد. محاسبات ساختار الکترونی نشان داد که با افزایش فشار شکاف نواری افزایش و با کاهش فشار شکاف نواری کاهش می‌یابد. نتایج محاسبات هم چنین نشان داد که با افزایش فشار شکاف نواری به صورت خطی افزایش می‌یابد. در محاسبات اپتیکی، سهم موهومی و حقیقی تابع دی‌الکتریک در فشارهای مختلف محاسبه شد. نتایج محاسبات نشان داد که با افزایش فشار انرژی آستانه جذب و شاخص ترین قله‌ها در سهم موهومی تابع دی‌الکتریک به طرف انرژی‌های بالاتر و با کاهش فشار به سمت انرژی‌های پایین تر جابه‌جا می‌شوند. همچنین نتایج محاسبات نشان داد که با افزایش فشار ثابت دی‌الکتریک استاتیک به صورت خطی کاهش می‌یابد. با استفاده از نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک شکاف اپتیکی گالیوم آرسناید در فشارهای مختلف محاسبه گردید. نتایج محاسبات نشان داد که با افزایش فشار، شکاف اپتیکی افزایش و با کاهش فشار، کاهش می‌یابد. تأثیر فشار هیدروستاتیکی بر ضریب شکست استاتیک گالیوم آرسناید نیز مورد بررسی قرار گرفت. نتایج محاسبات نشان داد که با افزایش فشار ضریب شکست استاتیک گالیوم آرسناید کاهش می‌یابد.

منابع

- [1] Yoon J., Jo S., Chun I.S., Jung I., Kim H.S., Meitl M., and Rogers J.A., GaAs photovoltaics and optoelectronics using releasable multilayer epitaxial assemblies, *Nature*, **465**, 329-333, 2010.
- [2] Nelson J., Imperial College Press, The physics of solar cells, **1**, 9-15 2003.
- [3] Liou J., Wong W., Comparison and optimization of the performance of Si and GaAs solar cells, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, **28**, 9-28, 1992.
- [4] Brivio F., Walker A.B., and Walsh A., Structural and electronic properties of hybrid perovskites for high-efficiency thin-film photovoltaics from first-principles, *Apl Materials*, **1**, 1-5, 2013.
- [5] Qiu J., Qiu Y., Yan K., Zhong M., Mu C., Yan H., and Yang S., All-solid-state hybrid solar cells based on a new organometal halide perovskite sensitizer and one-dimensional TiO₂ nanowire arrays, *Nanoscale*, **5**, 3245-3248, 2013.



- [6] Eperon G.E., Stranks S.D., Menelaou C., Johnston M.B., Herz L.M., and Snaith H.J., Formamidinium lead trihalide: A broadly tunable perovskite for efficient planar heterojunction solar cells, *Energy and Environmental Science*, **7**, 982–988, 2014.
- [7] Ameer K., Mazari H., Benseddik N., Benamara Z., Benyahya N., and Boumesjed A., Optimization of a GaAsN Ternary Alloy Based Solar Cell for High Efficiency, *Parameters*, **8**, 114–119, 2018.
- [8] Boubakeur M., Aissat A., and Vilcot J.P., Study of GaAs_{1-x}N_x/GaAs Quantum Dot Structure for Solar Cell Applications, in *Proceedings of 2019 7th International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC)*, **1**, 1-5, 2019.
- [9] Noorafshan M., Density functional study of electronic, elastic and optical properties of GaAs_{1-x}N_x (x= 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1) alloys, *Computational Condensed Matter*, **31**, 1-9, 2022.
- [10] Gagui S., Ghemid S., Meradji H., Zaidi B., Amimour B., Tahir, S.A., and Kushwaha A.K., Ab-initio study on the phase transition, elastic, optoelectronic, and thermodynamic properties of GaAs_{1-x}Sb_x, *Optik*, **219**, 1-19, 2020.
- [11] Ospina D.A., Mora-Ramos M.E., and Duque C.A., Effects of hydrostatic pressure and electric field on the electron-related optical properties in GaAs multiple quantum well, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, **17**, 1247–1254, 2017.
- [12] You J.F., Zhao Q., Zhang Z.H., Yuan J.H., Guo K.X., and Feddi E., The effect of temperature, hydrostatic pressure and magnetic field on the nonlinear optical properties of AlGaAs/GaAs semi-parabolic quantum well, *International Journal of Modern Physics B*, **33**, 1-12, 2019.
- [13] Noorafshan M., Effect of hydrostatic pressure on electronic structure and optical properties of InAs: A first principle study, *Acta Physica Polonica A*, **137**, 1153–1157, 2020.
- [14] Nourbakhsh Z., First principles study of the structural, electronic and optical properties of ZnS_xSe_{1-x} alloys, *Physica B: Condensed Matter*, **405**, 4173–4187, 2010.
- [15] Salehi H., Bادهیان H.A., and Farbod M., First principle study of the physical properties of semiconducting binary antimonide compounds under hydrostatic pressures, *Materials science in semiconductor processing*, **26**, 477–490, 2014.
- [16] Hohenberg P., and Kohn W.J.P.R., Density functional theory (DFT), *Physical Review*, **136**, B864-B871, 1964.
- [17] Blaha P., Schwarz K., Sorantin P., and Trickey S.B., Full-potential, linearized augmented plane wave programs for crystalline systems, *Computer Physics Communications*, **59**, 399–415, 1990.
- [18] Kohn W., and Sham L.J., Self-consistent equations including exchange and correlation effects, *Physical Review*, **140**, A1133-A1138, 1965.
- [19] Slater J.C., Wave functions in a periodic potential, *Physical Review*, **51**, 846–851, 1937.
- [20] Slater J.C., Suggestions from Solid-State Theory Regarding Molecular Calculations, *The Journal of Chemical Physics*, **43**(10), S228-S228, 1965.
- [21] Perdew J.P., Burke K., and Ernzerhof M., Generalized gradient approximation made simple, *Physical Review Letters*, **77**(18), 3865-3868, 1996.
- [22] Tran F., and Blaha P., Accurate band gaps of semiconductors and insulators with a semilocal exchange-correlation potential, *Physical Review Letters*, **102**, 1-4, 2009.
- [23] Adachi S., GaAs and related materials: bulk semiconducting and superlattice properties, *World Scientific*, **1**, 1-6, 1994.
- [24] Adachi S., GaAs, AlAs, and Al_xGa_{1-x}As: Material parameters for use in research and device applications, *Journal of Applied Physics*, **58**(3), R1-R29, 1985.
- [25] Murnaghan F.D., The Compressibility of Media under Extreme Pressures, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **30**, 244–247, 1944.



- [26] Ambrosch-Draxl C., and Sofo J.O., Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented planewave method, *Computer Physics Communications*, **175**, 1–14, 2006.
- [27] Smith N.V., Photoelectron energy spectra and the band structures of the noble metals, *Physical Review B*, **3**, 1862–1878, 1971.
- [28] Ravindran P., Delin A., Ahuja R., Johansson B., Auluck S., Wills J.M., and Eriksson O., Optical properties of monoclinic Sn from relativistic first-principles theory, *Physical Review B*, **56**, 6851–6861, 1997.
- [29] Wooten F., *Optical Properties of Solids*, Academic Press, New York and London, **28**(9), 803-804, 1973.
- [30] Penn D.R., Wave-number-dependent dielectric function of semiconductors, *Physical Review*, **128**, 2093–2097, 1962
- [31] Marple D.T. F., Refractive index of GaAs, *Journal of Applied Physics*, **35**, 1241–1242, 1964.

© 2022 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/>).

