Research Paper

Investigation of Optical properties of Gallium Phosphide in Two Phases of Zincblend and Cinnabar[1]

Hamdolla Salehi*[2] and Shiva Mokhavat [3]

Received: 2021.10.15
Revised: 2022.02.18
Accepted: 2022.02.28

Abstract

In this paper, the optical properties of GaP in different phases have been investigated. The calculations were performed by using pseudopotential in the framework of density functional theory and using the PWscf code. The pseudopotentials applied here are generated using norm-conserving conditions within GGA for the exchange-correlation function. The optical properties of the Zincblend and Cinnabar phases reveal the conformity between the band structure and the imaginary part of the dielectric function, and the band gap and optical gap are almost equal. The refractive index obtained from the real part of the dielectric function in Zincblend is 3.306 and in the Cinnabar phase is 4.235 and 3.808 in the x and z directions, respectively.

Keywords: *Gallium Phosphide, Density Functional Theory, Optical Properties, Quantum Espresso.*

[1] DOI: 10.22051/ijap.2023.38119.1244
[2] 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. Graduate, Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. Email: shiva_mokhavat@ymail.com

مقالهٔ پژوهشی

بررسی ویژگی‌های اپتیکی ترکیب گالیم فسفید در دو فاز بلندروی و سینابار[1]

حمداله صالحی*[2] و شیوا مخاوات[3]

فصلنامهٔ علمی فیزیک کاربردی ایران
دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه الزهرا
سال سیزدهم، پیاپی ۳۲، بهار ۱۴۰۲
صص ۲۱ - ۳۲

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۷/۲۳
تاریخ بازنگری: ۱۴۰۰/۱۱/۲۹
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۱۲/۰۹

چکیده:

در این مقاله ویژگی‌های اپتیکی ترکیب GaP در فازهای مختلف بررسی شده است. محاسبات با استفاده از روش شبه‌پتانسیل، در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسباتی $PWscf$ انجام شده است. پتانسیل‌های مورد استفاده با شرایط بار پایسته ساخته شده‌اند و تابع تبادلی- همبستگی آن‌ها از نوع GGA می‌باشد. نتایج بدست آمده از ویژگی‌های اپتیکی در دو فاز بلندروی و سینابار نشان‌دهنده هماهنگی ساختار نواری با سهم موهومی تابع دی‌الکتریک و هم چنین برابری تقریبی شکاف نواری با شکاف اپتیکی است. ضرائب شکست به دست آمده از سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در فاز بلندروی برابر ۳/۳۰۶ و در فاز سینابار به ترتیب در دو راستای xx و zz برابر با ۳/۸۰۸ و ۴/۲۳۵ می‌باشند.

واژگان کلیدی: *گالیم فسفید، نظریه تابعی چگالی، ویژگی‌های اپتیکی، کوانتوم‌اسپرسو.*

---

[1] DOI: 10.22051/ijap.2023.38119.1244

[2] استاد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران. (نویسنده مسئول) Email: salehi_h@scu.ac.ir

[3] دانش‌آموختهٔ کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران. Email: shiva_mokhavat@ymail.com

۱. مقدمه

گالیم فسفید یک نیم‌رسانا از گروه III-V می‌باشد [۱]. در سال‌های کنونی، III- فسفیدها (InP، GaP، AlP، BP) به دلیل ویژگی‌های فیزیکی بی‌نظیر مانند رسانش گرمایی بالا، چگالی پایین و شکاف نواری پهن توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند [۲]. به دلیل کاربرد در دستگاه‌های نورپردازی، این ترکیب یکی از مهم ترین نیم‌رساناهای گروه III-V است [۳]. گالیم فسفید ماده‌ای مناسب برای سامانه‌های اپتیکی است که در محدوده طیف مرئی MWIR[1] و LWIR[2] کار می کند. تعداد مواد در دسترس برای این کاربردها محدود است. این ترکیب در قدرت مکانیکی، مقاومت شیمیایی، رسانش گرمایی و سختی بر دیگر مواد هم‌خانواده‌اش برتری دارد [۴]. گالیم فسفید در دمای اتاق و در شرایط محیط در ساختارمکعبی مرکزسطحی بلندروی با گروه فضایی $F\bar{4}3m$(۲۱۶) متبلور می‌شود [۵]. در فشار کمی بالاتر از ۲۰GPa، فاز فشار پایین بلندروی GaP دستخوش یک گذار به فاز فلزی II می‌شود که در ابتدا تصور می‌شد دارای ساختار β-Sn مانند است، اگرچه ویژگی الگوی پراش آن با این تصور هماهنگی نداشت.

مطالعات بیشتر توسط نلمز[3] و همکاران در سال ۱۹۹۷ نشان داد که یک ساختار Cmcm با تمام ویژگی‌های الگوی پراش GaP-II سازگار است. تا فشار ۵۰GPa تغییرات بیشتری مشاهده نشد. در سال ۱۹۹۷ موجیکا و همکاران اولین مطالعه نظری ساختار سینابار در ترکیبات III-V را انجام دادند [۶]. فاز سینابار با کاهش فشار از فاز فشار بالای Cmcm (GaP-II) بدست آمد، وقتی فشار بیشتر کاهش پیدا کند به ساختار بلندروی (GaP-I) تبدیل می‌شود. چون گذار مستقیم از ساختار بلندروی به ساختار سینابار دیده نشده است، این فاز ممکن است شبه‌پایدار باشد [۷]. فاز Cmcm یک ارتورومبیک قاعده مرکزدار است که دارای دو جفت A-B در هر سلول واحد است که A و B دو نوع اتمی هستند که ترکیب دوتایی را تشکیل می‌دهند. این فاز یک واپیچش از ساختار نمک طعام به سلول واحد ارتورومبیک است که به دلیل گروه فضایی‌اش، Cmcm نامیده شده است. ساختار سینابار (با گروه فضایی $P3_121$) متعلق به سامانه سه‌گوشی است و با دو ثابت شبکه a و c و دو پارامتر داخلی بدون بعد u_1 و u_2 بیان می‌شود. این ساختار در هیچ بازه فشاری پایدار نیست و تنها می‌تواند به صورت یک فاز شبه‌پایدار در ترکیبات GaP و GaAs وجود داشته باشد.

---

[1] Mid-Wavelength Infrared
[2] Long-Wavelength Infrared
[3] Nelmes

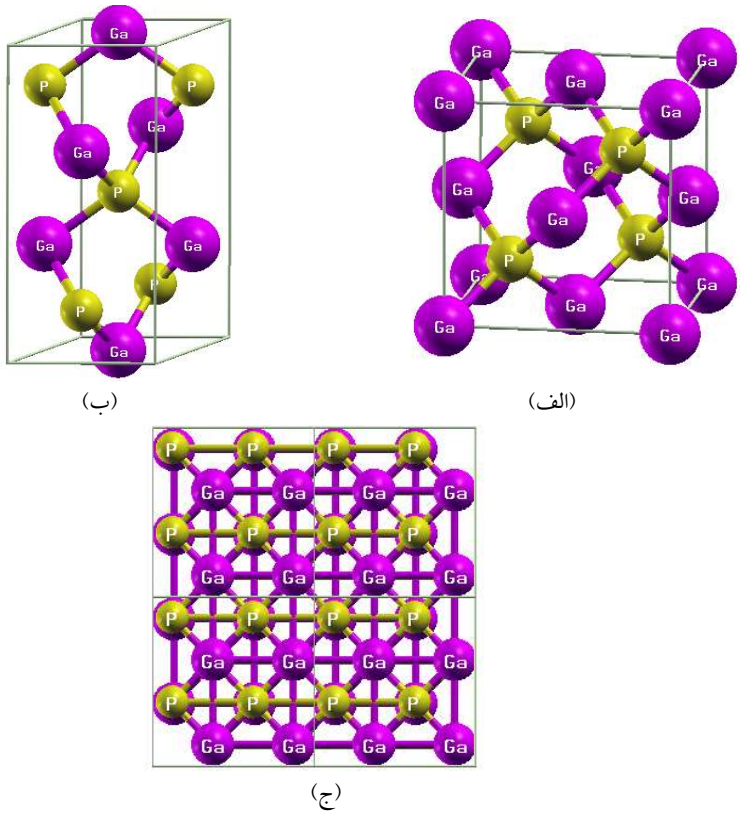
یکی از مهم‌ترین کاربردهای گالیم فسفید استفاده از آن در تولید دیودهای منتشر کننده نور (LED) است. رنگ نور پراکنده‌شده و کارآیی LEDها در درجه اول به ساختار نواری موادی که در ساخت آن‌ها به کار می‌رود بستگی دارد. بر این اساس GaP رنگ‌های قرمز، نارنجی و سبز تولید می‌کند [۸]. ضریب شکست بالای این ترکیب سبب داشتن شفافیت در محدوده VIS[1] می‌شود. هم چنین بالا بودن ضریب شکست می‌تواند در کاهش انحرافات هندسی مفید باشد. این ترکیب به عنوان ماده لنز برای نورهای مادون قرمز با قدرت بالا به کار می‌رود که در این زمینه با ZnS و ZnSe رقابت می‌کند [۹]. همچنین، دارا بودن جذب قوی در طول موج‌های کوتاه، این ترکیب را برای کاربردهای فرابنفش مفید ساخته است [۱۰]. در سال ۲۰۱۸ بلاسا و همکاران با استفاده از نظریه تابعی چگالی و با روش اوربیتال‌های مافین- تین خطی کامل و کد محاسباتی Vasp ویژگی‌های اپتیکی، ساختاری و کشسانی ترکیب گالیم فسفید در فاز بلند روی را مورد مطالعه و بررسی قرار دادند. همچنین، اثر ناخالصی بر روی ویژگی‌های ساختاری، چگالی حالت‌ها و ضرایب کشسانی را مورد بررسی قرار دادند و یک شکاف نواری غیرمستقیم به اندازه ۱/۵ الکترون‌ولت بدست آوردند [۱۱]. اثر ناخالصی بر روی ویژگی‌های اپتیکی این ترکیب نیز در منابع [۱۲،۱۳] مورد بررسی قرار گرفته است. افزون بر این، در سال ۲۰۲۰ جذب اپتیکی بر روی گالیم فسفید در فاز ورتسایت به صورت تجربی مورد بررسی قرار گرفت [۱۴]. اگرچه تاکنون هیچگونه کار نظری و تجربی بر روی ویژگی‌های ترکیب GaP در فاز سینابارو Cmcm گزارش نشده است. از این رو، هدف از این کار بررسی ویژگی‌های اپتیکی ترکیب GaP در فاز بلندروی و فازهای فشار بالا سینابار و Cmcm است.

۲. روش انجام محاسبات

محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی Quantum-Espresso انجام شده است. این کد در سال ۲۰۰۱ توسط بارونی[2] و همکاران تحت عنوان موج تخت معرفی شد. متن اصلی این برنامه به زبان برنامه‌نویسی فرترن ۹۵ نوشته شده است و بخش گرافیکی کاربر (Gui) نرم‌افزار بر پایه زبان c ایجاد شده است. در این بسته محاسباتی معادلات تک‌ذره‌ای کوهن- شم با استفاده از روش شبه‌پتانسیل و بسط توابع موج الکترون‌های ظرفیت بر حسب امواج تخت حل می‌گردد. شبه‌پتانسیل‌های مورد استفاده به روش بارپایسته ساخته شده و تابعی تبادلی- همبستگی

[1] Visible Infrard System
[2] Baroni

آن‌ها از نوع GGA است. در روش شبه‌پتانسیل، انتخاب شبه‌پتانسیل مناسب از جهت توافق بهتر نتایج بدست آمده با نتایج تجربی و نیز کاهش حجم محاسبات از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. از این رو، در نتیجه بهینه‌سازی شبه‌پتانسیل مورد استفاده، برای توصیف برهم کنش‌های الکترون- یون از شبه‌پتانسیل‌های نوع بار پایسته استفاده شد. در شبه‌پتانسیل‌های به کار گرفته شده، حالت‌های 4s و 4p اتم گالیم و حالت‌های 3s و 3p اتم فسفر به عنوان حالت‌های ظرفیت در نظر گرفته شده‌اند. در محاسبات خود- سازگار دقت محاسبات 10^{-6}Ry در نظر گرفته شد. با این دقت در هر دو تقریب در فاز بلندروی با ۴ چرخه، در فاز سینابار با ۶ چرخه و در فاز Cmcm با ۵ چرخه به همگرایی رسید. همچنین، مقادیر بهینه انرژی قطع محاسبه شده برای هر سه فاز بلندروی، سینابار و Cmcm در دو تقریب LDA و GGA به ترتیب برابر ۳۵ و ۴۰ ریدبرگ می‌باشد. ساختار بلوری ترکیب GaP در هر سه فاز بلندروی، سینابار و Cmcm با استفاده از نرم‌افزار xcrysden رسم و در شکل (۱) نمایش داده شده است. افزون بر این مقادیر بهینه k در جدول (۱) آمده است.



(ب) (الف)

(ج)

شکل ۱ ساختار بلوری ترکیب گالیم فسفید در فازهای (الف) بلندروی، (ب) سینابار و(ج) Cmcm.

جدول ۱ نقاط k بهینه محاسبه‌شده برای سه فاز بلندروی، سینابار و Cmcm در دو تقریب GGA و LDA.

فازها	GGA		LDA	
	تعداد نقاط	مش بندی	تعداد نقاط	مش بندی
بلندروی	۲۰	۷×۷×۷	۱۶	۶×۶×۶
سینابار	۷۵	۷×۷×۵	۶۰	۶×۶×۴
Cmcm	۱۷۲	۷×۷×۷	۱۱۲	۶×۶×۶

۳. بحث و بررسی

۱.۳. بررسی تابع دی‌الکتریک

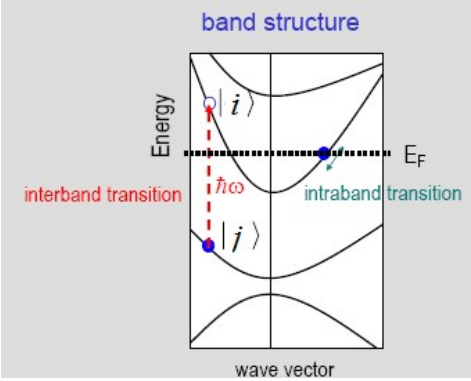
ویژگی‌های اپتیکی مواد زمینه‌ای مناسب برای مطالعه ساختارنواری، برانگیختگی‌ها و نوسانات شبکه در اختیار قرار می‌دهد. برای دست‌یابی به ویژگی‌های اپتیکی یک جامد باید رفتار کمیت‌های اپتیکی مختلف برحسب انرژی تابش مورد بررسی قرار گیرد. یکی از مهم‌ترین کمیت‌های اپتیکی، تابع دی‌الکتریک مختلط است. این تابع نقطه شروع مناسبی برای دست‌یابی به سایر ویژگی‌های اپتیکی است. تابع دی‌الکتریک تانسوری از مرتبه دو است که حداکثر دارای ۹ مؤلفه می‌باشد. این تابع از دو سهم حقیقی $\varepsilon_1(\omega)$ و موهومی $\varepsilon_2(\omega)$ تشکیل شده است و با رابطه زیر داده می‌شود [۱۵].

$$\varepsilon(\omega)=\varepsilon_1(\omega)+i\varepsilon_2(\omega) \quad (۱)$$

تابع دی‌الکتریک دارای دو سهم گذار درون نواری و بین نواری است. با فرود فوتون‌های کم انرژی، در محدوده کمتر از شکاف نواری، الکترون تنها در همان نواری که قرار دارد به سمت انرژی‌های بالاتر جابه‌جا می‌شود که این امر در سهم موهومی تابع دی‌الکتریک انعکاس می‌یابد. با اعمال فوتون‌هایی با انرژی بیشتر از شکاف، گذارهای بین نواری رخ می‌دهد. در شکل (۲) گذارهای درون نواری و بین نواری نشان داده شده‌اند. گذارهای بین نواری خود به دو قسمت گذارهای مستقیم و غیرمستقیم تقسیم می‌شوند [۱۶]. در گذارهای بین نواری با توجه به گسسته بودن انرژی بین نوارهای مختلف باید از روابط کوانتومی تبعیت نمود، در نتیجه تابع دی‌الکتریک به صورت زیر تعریف می‌گردد [۱۷].

$$\varepsilon_2(\omega)=\frac{4\pi e^2}{m^2\omega^2}\sum\int\langle i|M|j\rangle^2 f_i(1-f_i)\times\delta(E_f-E_i-\omega)d^3k \quad (۲)$$

که در آن M ماتریس دو قطبی، i و j به ترتیب حالت‌های اولیه و نهایی، f_i تابع توزیع فرمی برای حالت iام و E_i انرژی الکترون در حالت iام است.



شکل ۲ نمایش گذارهای بین نواری و درون نواری [۱۶].

سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک را می‌توان با استفاده از سهم موهومی آن و با استفاده از روابط کرامرز -کرونیگ برای همه بسامدها بدست آورد [۱۸].

$$\varepsilon_1(\omega)=1+\frac{2}{\pi}P\int_0^{\infty}\frac{\omega'\varepsilon_2(\omega)d\,\omega'}{(\omega'^2-\omega^2)} \qquad (۳)$$

که در این رابطه P مقدار اصلی انتگرال می‌باشد. حد بسامد صفر سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. جذر $\varepsilon_1(0)$ ضریب شکست استاتیک را نتیجه می‌دهد.

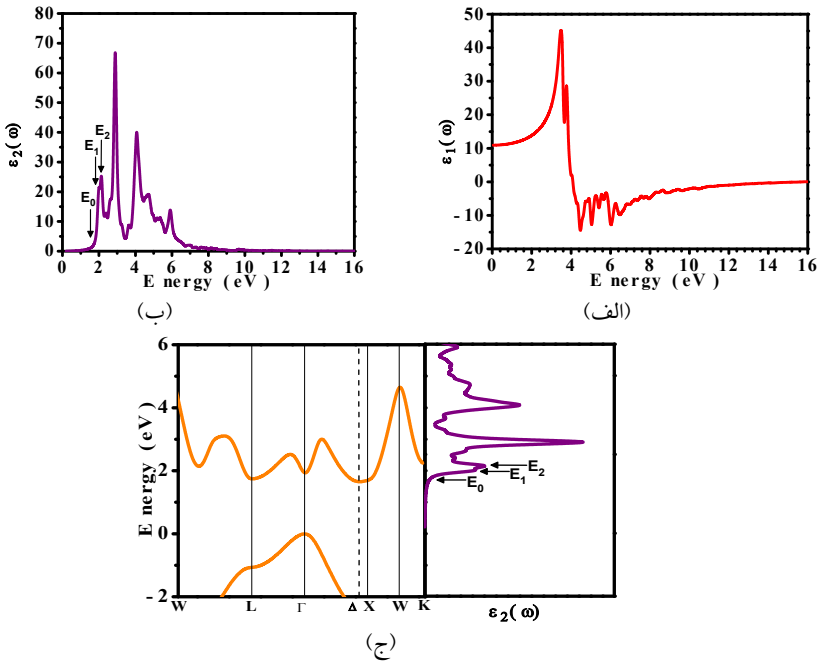
$$n_\circ=\sqrt{\varepsilon_1(0)} \qquad (۴)$$

در فاز بلندروی به دلیل وجود تقارن مکعبی، مؤلفه‌های تانسور تابع دی‌الکتریک مساوی هستند، یعنی $\varepsilon_{xx}(\omega)=\varepsilon_{yy}(\omega)=\varepsilon_{zz}(\omega)$. از این رو، تنها محاسبه یک مؤلفه از این تابع کافی است. تانسور دی‌الکتریک به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\varepsilon_{cubic}=\begin{pmatrix}\varepsilon_{xx} & 0 & 0\\ 0 & \varepsilon_{xx} & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon_{xx}\end{pmatrix} \qquad (۵)$$

نمودار سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک و هم چنین تطابق نمودار سهم موهومی با ساختار نواری در شکل (۳) رسم شده است. از نمودار سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک واضح است که ضریب شکست ترکیب GaP در فاز بلندروی ۳/۳۰۶ است (با توجه به رابطه (۴)). در جدول (۲) ضریب شکست محاسبه شده در فاز بلندروی در کار حاضر با نتایج دیگران مقایسه شده است.

از نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک درمی‌یابیم که سهم موهومی تا قبل از انرژی E_0=۱/۶۵eV دارای تغییراتی آرام است که ناشی از جذب فوتون‌های کم انرژی بوده و منجر به گذارهای درون نواری می‌گردد. بعد از این انرژی سهم موهومی به صورت ناگهانی افزایش می‌یابد و این امر بیانگر جذبی است که به دنبال آن گذارهای میان نواری رخ می‌دهد. سه نقطه اصلی در نمودار با نام‌های E_0، E_1 و E_2 نشان داده شده‌اند. E_0 انرژی لازم برای عبور از شکاف را نشان می‌دهد که بیانگر شکاف اپتیکی بلور است و دو نقطه E_1 و E_2 انرژی مورد نیاز برای گذارهای احتمالی بعدی را نشان می‌دهند. برای نشان دادن همسانی این نقاط با گذارهای احتمالی، در شکل (۳-ج) نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک در کنار نمودار ساختار نواری رسم شده است. نقطه E_0 بیانگر گذاری در راستای غیرمستقیم $\Delta_{min}\leftarrow\Gamma$ می‌باشد. نقطه‌های E_1 و E_2 به ترتیب بیانگر گذارهای احتمالی در راستاهای $L\leftarrow\Gamma$ و $\Gamma\leftarrow\Gamma$ است. هم چنین در ناحیه‌ای که $\varepsilon_1(\omega)$ منفی است، امواج منتشر نمی‌شوند و فرآیندهای جذب و اتلاف صورت می‌گیرد. شکاف اپتیکی در این شکل، شکاف نواری به دست آمده از ساختار نواری و چگالی حالت‌ها را تأیید می‌کند.



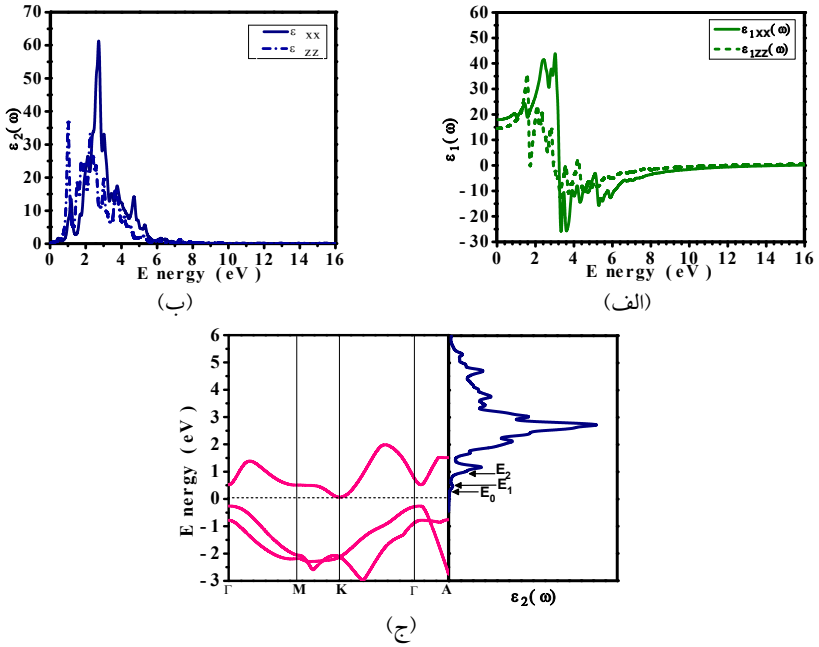
شکل ۳ (الف) نمودار سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک، (ب) نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک و(ج) تطابق سهم موهومی تابع دی‌الکتریک با ساختار نواری در فاز بلندروی.

جدول ۲ ضریب شکست محاسبه شده در فاز بلندروی در تقریب GGA و مقایسه با نتایج دیگران.

کمیت‌های محاسبه شده	کار حاضر (GGA)	کار نظری Wien2k-) (GGA (۱۹)	کار نظری (Vasp-GGA) (۲۰)	کار تجربی(۹)
ضریب شکست	۳/۳۰۶	۲/۹۱۹	۳/۰۷۰	۳/۱۶۰
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۴/۶۲۰	۷/۶۲۶	۲/۸۴۸	----

جدول ۳ ضریب شکست‌های محاسبه شده در دو راستای xx و zz در فاز سینابار در تقریب GGA.

کمیت‌های محاسبه شده	کار حاضر (GGA)	کار نظری	کار تجربی
ضریب شکست n_{xx}	۳/۸۰۸	----	----
ضریب شکست n_{zz}	۴/۲۳۵	----	----



شکل ۴ (الف) نمودار سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک، (ب) نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک و(ج) تطابق سهم موهومی تابع دی‌الکتریک با ساختار نواری در فاز سینابار.

فاز سینابار در مقایسه با فاز بلندروی تقارن کمتری دارد. مؤلفه‌های اصلی تانسور دی‌الکتریک درراستاهای مختلف با یکدیگر مساوی نیستند و به شکل $\varepsilon_{xx}(\omega) = \varepsilon_{yy}(\omega) \neq \varepsilon_{zz}(\omega)$ می‌باشند. تانسور دی‌الکتریک در این فاز به صورت زیر است:

$$\varepsilon_{cubic} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{xx} \end{pmatrix} \quad (۶)$$

در شکل (۴) نمودار سهم حقیقی و سهم موهومی تابع دی‌الکتریک و هم چنین تطابق سهم موهومی با ساختار نواری در فاز سینابار نمایش شده است. محاسبات مربوط به سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک ضریب شکست این ترکیب در فاز سینابار را در راستای x برابر با ۴/۲۳۵ و در راستای z برابر با ۳/۸۰۸ نتیجه می‌دهد که در جدول (۳) این نتایج آمده است و چون داده‌ای وجود نداشته است، امکان مقایسه وجود ندارد. سه نقطه اصلی در نمودار با نام‌های E_0، E_1و E_2 نشان داده شده‌اند. E_0 انرژی لازم برای عبور از شکاف را نشان می‌دهد که بیانگر شکاف اپتیکی بلور است و دو نقطه E_1 و E_2 انرژی مورد نیاز برای گذارهای احتمالی بعدی را نشان می‌دهند.

از همسانی نمودار سهم موهومی با ساختار نواری درمی‌یابیم که نقطه E_0 بیانگر گذاری در راستای غیرمستقیم $\Gamma \leftarrow K$ است. نقطه‌های E_1 و E_2 بیانگر گذارهای احتمالی به ترتیب در راستاهای $\Gamma \leftarrow M$ و $\Gamma \leftarrow \Gamma$ هستند. شکاف اپتیکی در این شکل، شکاف نواری بدست آمده از ساختار نواری و چگالی حالت‌ها را تأیید می‌کند. از نمودار سهم موهومی واضح است که تا پیش از انرژی E_0=۰/۳eV سهم موهومی دارای تغییراتی آرام است واین تغییرات آرام مربوط به گذارهای درون نواری است. بعد از این انرژی سهم موهومی به صورت ناگهانی افزایش می‌یابد که این مربوط به گذارهای بین نواری است.

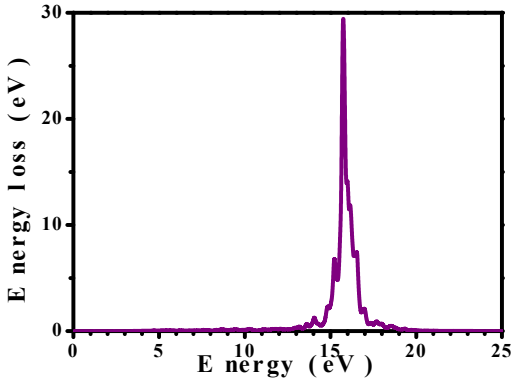
۲.۳. تابع اتلاف انرژی (eels)

تابع اتلاف به معنای سهم موهومی معکوس تابع دی‌الکتریک مختلط است. اسپکتروسکوپی اتلاف انرژی الکترون روش قدرتمندی در تجزیه و تحلیل حالت‌های تحریک شده بالای تراز فرمی یا جداسازی جزئی کمتر از نانومتر است. این طیف دربردارنده تحریک دسته‌جمعی الکترون‌های ظرفیت (پلاسمون‌ها) به داخل حالت‌های اشغال شده در نوار رسانش است. رابطه بین تابع دی‌الکتریک و تابع اتلاف انرژی به صورت زیر است:

$$L(\omega)=-\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\omega)}\right]=\frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega)+\varepsilon_2^2(\omega)} \quad (۷)$$

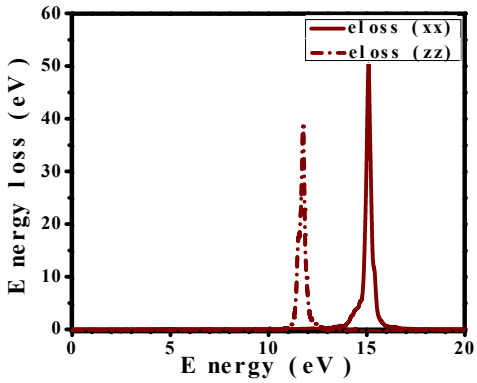
تابع اتلاف متناسب با احتمال اتلاف انرژی در واحد طول برای یک الکترون در حال عبور از محیط است. شاخص‌ترین قلّه در نمودار تابع اتلاف به عنوان قلّه‌ی پلاسمونی شناخته می‌شود که بیانگر برانگیختگی‌های جمعی چگالی بار در محیط است. در یک بلور امکان وجود چند قلّه پلاسمونی وجود دارد. قلّه پلاسمونی مربوط به نوسان پلاسما است و بسامد هم‌سو با آن بسامد پلاسما نامیده می‌شود. بسامد پلاسما هم‌سو بر بسامدهایی است که $\varepsilon_1(\omega)$ در آن منفی است. در این انرژی‌های بزرگ $\varepsilon_2(\omega)$ کوچک است و بنابراین دامنه اتلاف انرژی بزرگ است.

در شکل (۵) نمودار تابع اتلاف انرژی در بازه صفر تا ۲۵ الکترون‌ولت رسم شده است. با توجه به این شکل بیشینه تابع اتلاف در ۱۵/۷۵۰eV قرار گرفته که این بیشینه متناظر با پلاسمون حجمی است. وجود قلّه پلاسمونی در این نقطه چندان هم دور از انتظار نیست، چراکه در این نقطه سهم حقیقی منفی است و سهم موهومی تابع دی‌الکتریک بسیار ناچیز است.



شکل۵ نمودار تابع اتلاف ترکیب گالیم فسفید در فاز بلندروی.

در شکل (۶) نمودار تابع اتلاف انرژی فاز سینابار در بازه صفر تا ۲۵ الکترون ولت و در دو راستای x و z رسم شده است. بلندترین قلّه در منحنی تابع اتلاف در راستای x در انرژی ۱۵/۱eV و در راستای z در انرژی ۱۱/۸eV قرار گرفته است. با توجه به شکل‌های (۳)و (۴) در این انرژی‌ها $\varepsilon_1(\omega)$ مقادیر منفی و $\varepsilon_2(\omega)$ مقادیر کوچکی دارند.



شکل۶ نمودار تابع اتلاف انرژی ترکیب گالیم‌فسفید در فاز سینابار.

۴. نتیجه‌گیری

محاسبات با استفاده از روش شبه‌پتانسیل در چارچوب نظریه تابعی چگالی اختلالی وبا تقریب شیب تعمیم‌یافته انجام شده است. نتایج بدست آمده از بررسی ترکیب GaP در فاز بلندروی و مقایسه با نتایج تجربی بیانگر آن است که محاسبات با شبه‌پتانسیل بارپایسته و تقریب شیب تعمیم‌یافته در چارچوب نظریه تابعی چگالی سازگاری خوبی با نتایج تجربی دارد. نتایج بدست آمده از پارامترهای اپتیکی این ترکیب نشان دهنده این است که شکاف اپتیکی برابری تقریبی با شکاف نواری دارد. بررسی سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک ضرائب شکست را در فاز بلندروی ۳/۳۰۶ و در فاز سینابار به ترتیب در دو راستای X و Z، ۳/۸۰۸ و ۴/۲۳۵ نتیجه می‌دهد.

۵. تقدیر و تشکر

نویسندگان از دانشگاه شهید چمران اهواز به دلیل حمایت‌های همه‌جانبه تشکر می‌کنند. این تحقیق توسط دانشگاه شهید چمران اهواز، ایران [SCU.SP400.490] پشتیبانی شد.

منابع

[1] Arbouche. O, Belgoumène. B, Soudini. B, Azzaz. Y, Bendaoud. H, and Amara. K, "First-principles study on structural properties and phase stability of III-phosphide (BP, GaP, AlP and InP)," Computational Materials Science, **47**, 685-692, 2010.

[2] Car. R, and Parrinello. M, "Unified Aproach for Molecular Dynamics and Density Functional Theory," Phys. Rev. Lett. **55**, 2471-2474,1985.

[3] Li. L, Jian-Jun.W, Xin-You.A, Xue-Min.W, Hui-Na. L, and Wei-Dong.W, "Investigations of phase transition, elastic and thermodynamic properties of GaP by using the density functional theory, " Chinese Physics. B, **20**, 106201, 2011.

[4] Adachi.S, "properties of Group-IV, III-V and II-VI semiconductors, " Wiley series in materials for electronic and optoelectronic application, **15**, 2005.
[5] Born.M, and Oppenheimer. R. J, "Max Born and his legacy to condensed matter physics," Ann. Phys, **84** ,547,1927.
[6] Marica. R. S, and Stuart. P. B, "Solid State Physics," Gordon and Breach Science Publishers, 2000.
[7] Oppel. M, "DFT–Density functional theory," 2002.
[8] Ding. V, "FP-LMTO PLW- Calculations of Electronic Band Structure for LED Materials: Gallium Phosphide, Zinc Selenide, and Boron Nitride," Valerie Ding, Summa Academy North Beaverton, Oregon
[9] Vaclavik. J, and Vapenka. D, "Gallium Phosphide as a material for visible and infrared optics, " in: EPJ Web of Conferences, EDP Sciences, 00028 ,2013.
[10] Wang. B. P, Zhang. Z. C, and Zhang. N, "Fabrication and optical properties of gallium phosphide nanoparticulate thin film," Solid State Sciences, **12**, 1188-1191 ,2010.
[11] Belacel. R, Djoudi. L and et al, "Investigation on structural, electronic, optical and elastic properties of thallium phosphide and gallium phosphide binary compounds and their ternary alloys and superlattices," Computational Condensed Matter16, e00344, 2018.
[12] Shakil. M , and et al, "Theoretical study of structural,electronic and optical properties of $In_xGa_{1-x}N$ alloys," optic, 2018.
[13] Benalia, S., M. Merabet, D. Rached, Y. Al-Douri, B. Abidri, R. Khenata, and M. Labair. "Band gap behavior of scandium aluminum phosphide and scandium gallium phosphide ternary alloys and superlattices," Materials Science in Semiconductor Processing 31, 493-500, 2015.
[14] Bruno. C, Silva. D, Odilon. D. D , Hélio. T, Mauricio. M, and et al, "Optical Absorption Exhibits Pseudo-Direct Band Gap of Wurtzite Gallium Phosphide," *Scientific Reports*10, 7904-11, 2020.
[15] Dresselhaus. M, "Optical properties of solids," Proceedings of the International School of Physics ,1966.
[16] Javdani. Z, "Investigation of magnetic and structural propertice of Mono Ferrite Strontium using density functional theory," MSC Theses, ShahidChamran University of Ahvaz, 2013.
[17] Koch. S. S. W., "Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors," World scientific, 1994.
[18] Toulabi N., "Investigation of electeronia and dynamic of InP by using pseudopotential method," MSC Theses, ShahidChamran University of Ahvaz, 2010.
[19] Ousaf. M, Saeed. M, Ahmed. R, Alsardia. M, Isa. A. R. M., and Shaari. A, "An Improved Study of Electronic Band Structure and Optical Parameters of X-Phosphides (X= B, Al, Ga, In)." by Modified Becke—Johnson Potential," Communications in Theoretical Physics, **58**, 777, 2012.
[20] Jiao. Z. Y, Ma.S.H, and Guo. Y. L, "Simulation of optical function for phosphide crystals following the DFT band structure calculations," Computational and Theoretical Chemistry, **970**, 79-84, 2011.

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/).