

بررسی ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و نوری ایندیم نیتريد

حمدا.. صالحی*، نادیا نواصر

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

چکیده: در این مطالعه، ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و نوری ایندیم نیتريد در سه فاز بلندروی، ورتسایت و نمک طعام مورد بررسی قرار گرفت. محاسبه‌ها با استفاده از روش شبه پتانسیل، در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسبه‌ای کوانتوم-اسپرسو انجام شد. شبه پتانسیل‌های مورد استفاده در دو شرایط بار پایسته و بیش نرم ساخته شده و تابعی تبادل همبستگی آن‌ها از نوع LDA، GGA و PBE می‌باشد. نتیجه‌ها نشان می‌دهد که این ترکیب در فاز ورتسایت و بلندروی یک نیم رسانا با گاف نواری مستقیم و در فاز نمک طعام دارای گاف نواری غیرمستقیم است، که بیشترین سهم در نوار ظرفیت مربوط به اوربیتال s اتم نیتروژن و در نوار رسانش مربوط به اوربیتال‌های s و p اتم ایندیم است. نتیجه‌های به دست آمده از تراکم‌پذیری نشان می‌دهد که فاز ساختاری نمک طعام تراکم‌پذیری کمتری نسبت به دو فاز ساختاری دیگر دارد. هم چنین ویژگی‌های نوری ترکیب از جمله تابع دی‌الکتریک، ضریب شکست و تابع اتلاف محاسبه و نتیجه‌های به دست آمده با دیگر داده‌های موجود سازگاری دارد.

واژگان کلیدی: نظریه تابعی چگالی، ایندیم نیتريد، گاف نواری، ضریب شکست، تابع اتلاف.

KEYWORDS: density functional theory, InN, band gap, refractive index, electron energy loss Spectroscopy

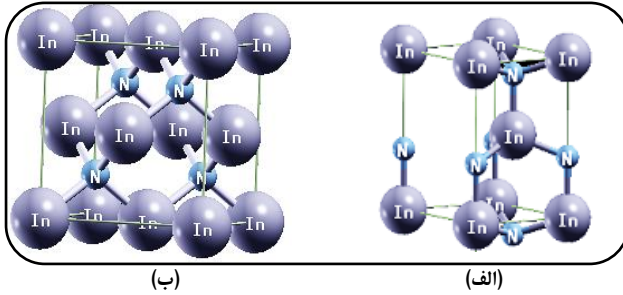
مقدمه

بلندروی، ورتسایت و نمک طعام مورد بررسی قرار گرفت. ولی پایدارترین ساختار ترمودینامیکی آن، ساختار ورتسایت می‌باشد [۲]. مطالعه‌های تجربی اولیه گاف نواری که توسط تانسلی و فولی در سال ۱۹۸۶ میلادی انجام شد گاف نواری مستقیم به اندازه ۱٫۹ الکترون‌ولت را نشان داد [۳]. تا سال ۲۰۰۴ میلادی، مقدار مشخصی برای گاف نواری بیان نشد. برای مدت‌ها تصور می‌شد که ایندیم نیتريد دارای گاف نواری به اندازه ۲ الکترون‌ولت است چرا که نمی‌توانستند لایه‌های این ترکیب را با کیفیت شفاف تولید کنند. ولی به تازگی رشد ایندیم نیتريد توسط لایه نشانی فاز بخار فلز-ماده آلی و رشد رو آراستی پرتو مولکولی انجام شده است که به حل موضوع گاف نواری آن کمک می‌کند و آن را نزدیک به

درسال‌های اخیر ایندیم نیتريد (InN) به عنوان نیم‌رسانای III-V، به علت داشتن گاف انرژی مستقیم در حدود ۰٫۷-۱٫۸ الکترون‌ولت و ویژگی‌های یگانه مانند جرم مؤثر کوچک، تحرک الکترونی بالا، ثابت پیزوالکتریک بالا، پایداری شیمیایی خوب، ترکیبی فعال در قطعه‌های الکتريکی و اپتوالکتریک مانند حسگرهای گرمایی، دیودهای گسیل نور و دیودهای لیزری که در بازه طیفی فرابنفش، آبی و سبز کار می‌کنند، شناخته شده است [۱]. ساختارهای معمول ایندیم نیتريد، ورتسایت و بلندروی هستند و در فشارهای بالا یک گذار از ساختار ورتسایت به سنگ نمک دارد. ایندیم نیتريد دارای سه ساختار ورتسایت، بلندروی و نمک طعام می‌باشد که در این مطالعه ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و نوری ایندیم نیتريد در هر سه فاز

* عهده‌دار مکاتبات

+Email: salehi_h@scu.ac.ir



شکل ۱ - سلول واحد ایندیم نیتريد در فاز (الف) ورتسایت و (ب) بلندروی

و چگالی موضعی (LDA) استفاده شد. پارامترهای اولیه شبکه بلوری از داده‌های تجربی به صورت $a=3/55$ ، $c=5/71$ آنگستروم استفاده شد [۱۴]. پس از انجام آزمون‌های همگرایی لازم، انرژی قطع موج ۹۰ ریبرگ و مش یکنواخت $8 \times 8 \times 5$ برای انجام محاسبات در نظر گرفته شد.

نتیجه‌ها و بحث

ویژگی‌های ساختاری

مدول حجمی معیاری از سختی بلور است، به بیان دیگر مدول حجمی تمایل اجسام به تغییر شکل در همه جهت‌ها را زمانی که نیروی ثابت در همه جهت‌ها وارد می‌شود بیان می‌کنند. چنانچه فشار در واحد حجم به اندازه dP افزایش یابد حجم موردنظر به اندازه dV کاهش می‌یابد. از نسبت این دو عبارت، می‌توان مدول حجمی را به صورت زیر نوشت [۱۵].

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

هرچه این کمیت بیشتر باشد بلور سخت‌تر و خاصیت تراکم‌پذیری آن کمتر است و در نتیجه انتظار داریم اتم‌ها در فاصله دورتری از هم قرار داشته باشند. ثابت شبکه تعادلی و مدول حجمی (B) با به کارگیری معادله مورناگون در منحنی انرژی بر حسب حجم به دست آمده است. نتیجه‌های به دست آمده از ثابت‌های شبکه، مدول حجمی، مشتق آن و تراکم‌پذیری در ساختار ورتسایت و بلندروی در جدول ۱ همراه با دیگر داده‌های موجود آورده شده است. همان‌گونه که دیده می‌شود مقدار مدول حجمی در تقریب LDA نسبت به تقریب GGA بزرگ‌تر است که دور از انتظار نمی‌باشد، زیرا مقدارهای ثابت‌های شبکه در تقریب LDA نسبت به GGA کوچک‌تر هستند. بنابراین در این تقریب بلور سخت‌تر است و از آن جا که

۰٫۷ الکترون‌ولت و در ناحیه فروسرخ قرار می‌دهد. آلیاژ کردن ایندیم نیتريد امکان تولید نور با هر رنگی را فراهم می‌کند. بدین روش می‌توان ابزارهای الکترونی نوری که در دامنه کامل طیف مرئی کار می‌کنند را تولید کرد [۴]. محاسبه ویژگی‌های کشسانی در اثر فشار در سال ۲۰۰۴ میلادی توسط کانن^۱ و همکاران با استفاده از روش امواج تخت بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل با اوربیتال‌های جای‌گزیده^۲ و کد محاسبه‌ای Wien2k صورت گرفته است [۵].

بچست و همکاران در سال ۲۰۰۶ میلادی نیز فاز ورتسایت این ترکیب را بررسی و گاف نواری را با استفاده از روش LDA+SIC حدود ۱٫۷ الکترون‌ولت به دست آوردند [۶]. در سال ۲۰۰۸ میلادی ویژگی‌های الکترونی و جرم مؤثر الکترونی ایندیم نیتريد تحت فشار، مورد مطالعه قرار گرفت و مشخص شد که با افزایش فشار، گاف نواری و جرم مؤثر الکترونی ایندیم نیتريد افزایش می‌یابد [۷]. در سال ۲۰۱۲ میلادی جانوتی و همکاران با استفاده از تقریب هیبریدی HSE ساختار نواری ایندیم نیتريد را با کد محاسبه‌ای Vasp محاسبه کردند و گاف نواری ۰٫۶ الکترون‌ولت را به دست آوردند [۸]. افزون بر بررسی ویژگی‌های ترکیب در حالت انبوه؛ ویژگی‌های آن نیز در حالت نانو نیز مورد بررسی قرار گرفته است که می‌توان به کارهای Hussain و همکاران در سال ۲۰۱۵ میلادی [۹]؛ Dan و همکاران در سال ۲۰۱۷ میلادی [۱۰]، Giovanne و همکاران در سال ۲۰۱۹ میلادی اشاره نمود [۱۱]. شکل (۱) فاز ساختاری نمک طعام این ترکیب را نشان می‌دهد که با نرم‌افزار xcrysden رسم شده‌اند.

بخش نظری

روش‌های محاسبه

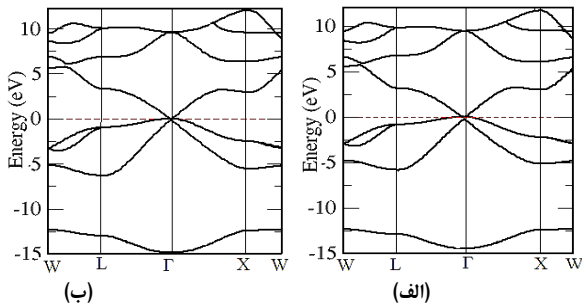
محاسبه‌های ساختار الکترونی با استفاده از روش ابتدا به ساکن درچارچوب نظریه تابعی چگالی توسط کد کوانتوم اسپرسو باشبه‌پتانسیل در پایه موج تخت انجام شدند [۱۲]. در این بسته محاسبه‌ای معادله‌های تک‌ذره‌ای کوهن - شم با استفاده از روش شبه‌پتانسیل و بسط توابع موج الکترون‌های ظرفیت بر حسب امواج تخت حل می‌شود [۱۳]. از آن جا که در روش تابعی چگالی با استفاده از موج تخت، حجم محاسبه‌ها بالاست، بنابراین انتخاب شبه‌پتانسیلی که بتواند ویژگی‌های بلور را توصیف کند و حجم محاسبه‌ها را کاهش دهد، از اهمیت بسیاری برخوردار است. در این جا از شبه‌پتانسیل‌های بارپایسته با تقریب‌های شیب تعمیم یافته (GGA)

(۱) Kanoun

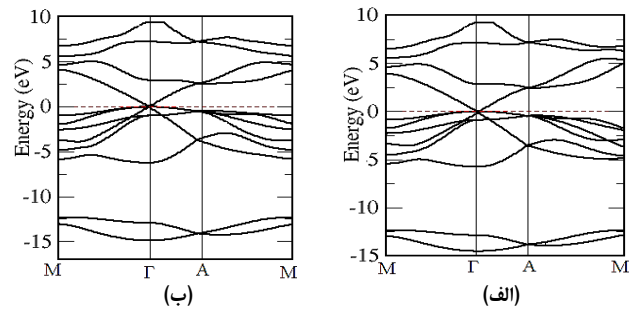
(۲) Full potential augmented plane-wave plus local orbitals method (FP-LAPW+LO)

جدول ۱ - مقادیر محاسبه شده برای پارامترهای ساختاری، مدول حجمی و مشتق آن، در این کار همراه با نتیجه‌های دیگران

کار تجربی	کار نظری دیگران	LDA	GGA	کمیت‌های محاسبه شده	فاز ساختاری
[۱۶]۳،۵۴	۳،۵۲[۱۷]، ۳،۵۵[۱۲]	۳،۵۲	۳،۴۵	$a(A^\circ)$ ثابت شبکه	فاز ورتسایت
-	۰،۲۸، ۰،۵۶	۰،۵۶	۲،۵۴	درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	
۵،۷۱	۰،۳۵[۱۲]، ۰،۵۲[۱۷]	۵،۶۷	۵،۵۵	ثابت شبکه $c(A^\circ)$	
-	۵،۶۸، ۵،۷۳	۰،۷۰	۲،۸۰	درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	
[۱۴۸]۱۲۵	[۱۸]۱۲۱/۱۴۶، ۵۸/۲۰	۱۷۲/۳	۱۴۰/۷	B(GPa)	
-	۱۶/۹۶، ۳/۲	۳۷،۸۴	۱۲،۵۶	درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	
-	۴،۳۰، ۴،۴۰	۶،۱۸	۴،۷۳	B_0'	
-	-	۰،۰۰۵	۰،۰۰۷	$K(GPa)^{-1}$	
۴،۹۸	۵،۹۶[۱۷]، ۴،۹۴[۱۲]	۴،۷۰	۴،۶۰	ثابت شبکه $a(A^\circ)$	فاز بلندروی
-	۱۹،۶۷، ۰،۸۰	۵،۶۲	۷،۶۳	درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	
۱۳۷	۱۴۷،۲۴، ۱۲۲،۱۰	۱۶۹،۲	۱۴۳،۴	B(GPa)	
-	۰،۱۶، ۱۶،۹۳	۱۵،۱۰	۲،۴۴	درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	
-	۴،۳۷، ۴،۶۴	۴،۰۷	۴،۰۱	B_0'	
-	-	۰،۰۰۵	۰،۰۰۶	$K(GPa)^{-1}$	



شکل ۳ - نمودار ساختار نواری در ساختار بلندروی با استفاده از تقریب GGA (الف) و LDA (ب)



شکل ۴ - نمودار ساختار نواری ایندیم نیتريد در ساختار ورتسایت با استفاده از تقریب GGA (الف) و LDA (ب)

با نقطه چین نشان داده شده است. شکل‌های ۲ و ۳ ساختار نواری ترکیب با استفاده از تقریب‌های GGA و LDA رسم شده است و همان‌گونه که دیده می‌شود نوارها تراز فرمی را قطع نموده و هیچ گافی دیده نمی‌شود. ولی در شکل ۴ با استفاده از تقریب PBE گاف نواری مستقیم در نقطه Γ دیده می‌شود که مقدار این گاف برای فاز وورتسایت $1/8$ الکترون‌ولت و برای فاز بلندروی $3/8$ الکترون‌ولت می‌باشد. وجود گاف تأییدی بر ویژگی نیم‌رسانایی ترکیب ایندیم نیتريد دارد. تطابق آن با نتیجه‌های تجربی در بیش‌تر کارهای پژوهشی مورد توجه می‌باشد. در جدول ۲، گاف نواری به دست آمده برای این ترکیب در فاز ورتسایت و بلندروی با تقریب‌های گوناگون همراه با دیگر نتیجه‌ها برای مقایسه آورده شده است. آن چه از این جدول دیده می‌شود این است که نتیجه‌های به دست آمده از تقریب PBE نسبت به کارهای دیگران؛ با نتیجه‌های تجربی سازگاری بهتری دارد. ولی آن چه باعث تفاوت

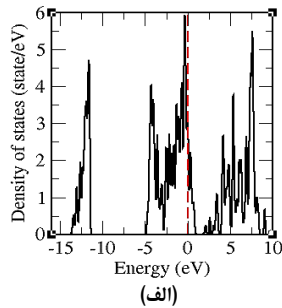
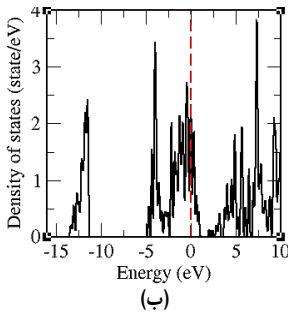
مدول حجمی معیاری از سختی بلور است مقدار بیش‌تری دارد. نتیجه‌های مدول حجمی نشان می‌دهد که فاز بلندروی سخت‌تر از فاز ورتسایت است.

ویژگی‌های الکترونی ساختار نواری

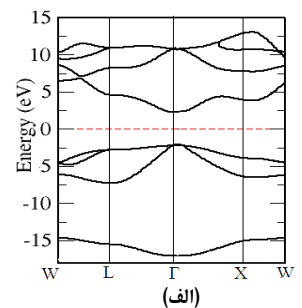
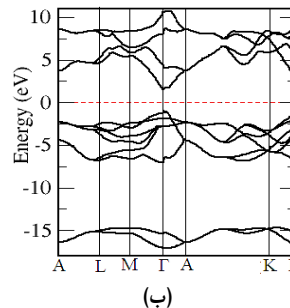
از ساختار نواری می‌توان اطلاعاتی در مورد ماهیت بلور از نظر رسانا یا نارسانا بودن، اندازه گاف انرژی در صورت وجود و نوع آن را به دست آورد. گاف نواری یکی از سودمندترین جنبه‌های ساختار نواری است و به مقدار زیادی روی ویژگی‌های نوری و الکترونیکی تأثیر می‌گذارد. نمودارهای ساختار نواری به همراه چگالی حالت‌های الکترونی کلی در بازه انرژی ۱۵- تا ۱۰ الکترون‌ولت رسم شده‌اند. در همه نمودارها تراز فرمی بر روی انرژی صفر قرار دارد که نمودارها

جدول ۲ - گاف نواری محاسبه شده برای ترکیب ایندیم نیتريد در دو فاز ورتسایت و بلندروی (بر حسب الکترون ولت) و مقایسه با نتیجه‌های دیگران

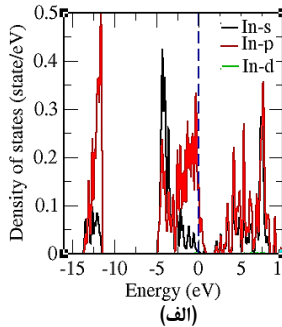
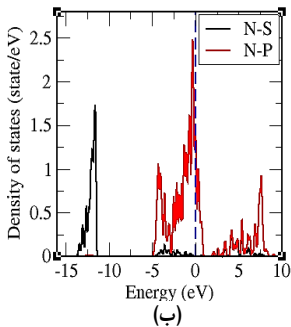
کار تجربی [۱۴]	کار نظری دیگران	تقریب PBE ₀	تقریب GGA	تقریب LDA	کمیت محاسبه شده	فاز
۰/۷ - ۱/۸۹	[۱۲] ۰/۸۲، [۱۷] ۱/۷	۱/۸	۰	۰	گاف نواری در نقطه Γ	ورتسایت
۰/۷ - ۰/۹	[۱۲] ۰/۵۹، [۱۳] ۱/۳۱	۳/۸	۰	۰	گاف نواری در نقطه Γ	بلندروی



شکل ۵ - نمودار چگالی حالت‌های کلی برای ترکیب ایندیم نیتريد در ساختار (الف) ورتسایت و (ب) بلندروی با استفاده از تقریب GGA



شکل ۴ - نمودار ساختار نواری با استفاده از تقریب PBE₀ برای ساختار (الف) بلندروی و (ب) ورتسایت



شکل ۶ - نمودار چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اوربیتال‌های اتم‌های (الف) ایندیوم و (ب) نیتروژن در ساختار ورتسایت

و بلندروی در تقریب های LDA و GGA گاف دیده نمی‌شود، که دور از انتظار نمی‌باشد.

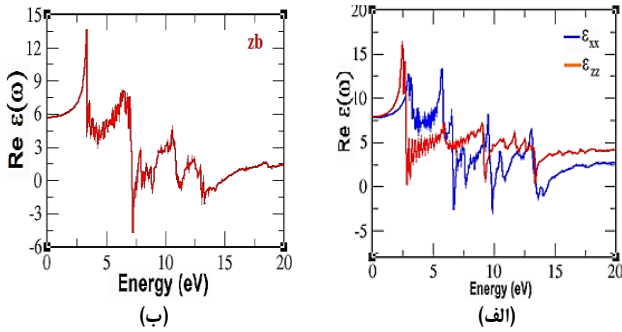
برای بررسی چگونگی مشارکت اوربیتال‌های گوناگون در نوارهای رسانش و ظرفیت در شکل ۶ طیف چگالی حالت‌های جزئی بر حسب انرژی در ساختار ورتسایت با استفاده از تقریب GGA در گستره انرژی ۱۵- تا ۱۰ الکترون ولت رسم شده است. در این شکل‌ها صفر انرژی، مقیاس تراز فرمی است و با نقطه‌چین نشان داده شده است. در شکل ۷ نیز چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اوربیتال‌های گوناگون ترکیب ایندیم نیتريد برای فاز بلندروی با استفاده از تقریب GGA آورده شده است.

از این نمودارها، این گونه برداشت می‌شود که اوربیتال‌های s و p مربوط به اتم ایندیوم و اوربیتال p اتم نیتروژن نقش پر رنگی را در ایجاد

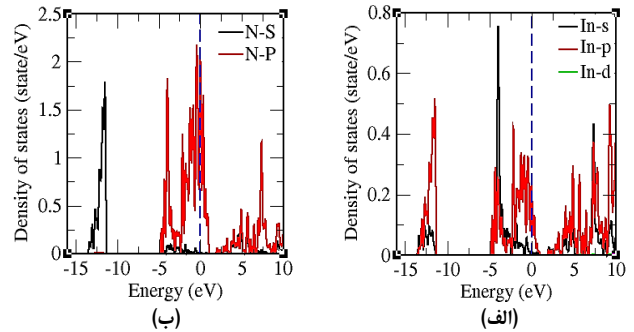
در این تقریب‌ها است محاسبه مقدار پتانسیل تبادلی-همبستگی است که در روش PBE مقدار دقیق تری از جمله تبادلی، جایگزین جمله تبادلی در تقریب‌های چگالی موضعی و شیب تعمیم یافته می‌شود و تصحیح مربوط به بخش تبادلی است. این تقریب گاف نواری را بهبود می‌بخشد. بنابراین در محاسبه انرژی با استفاده از تقریب‌های گوناگون، نکته مورد توجه دست‌یابی به تقریبی مناسب برای محاسبه پتانسیل-همبستگی است که با نتیجه‌های تجربی سازگار باشد. در کل می‌توان گفت که تقریب‌های LDA و GGA؛ تقریب‌های موضعی (شبه‌موضعی) هستند ولی توابع هیبریدی با در بر داشتن سهمی از انرژی تبادلی - همبستگی هارتری - فوک، نتیجه‌ها را نسبت به این تقریب‌ها بهبود می‌بخشند.

چگالی حالت‌های الکترونی

این تابع در فرایندهای الکترونی به ویژه در پدیده‌های تراپردی بسیار مهم است. با استفاده از آن برای الکترون‌های یک بلور افزون بر محاسبه مقدار گاف نواری می‌توان سهم مربوط به اوربیتال هر یک از اتم‌های شرکت کننده در ترکیب را تعیین نمود. در شکل (۵) طیف چگالی حالت‌های کل بر حسب انرژی در تقریب‌های گوناگون برای ساختارهای ورتسایت و بلندروی در گستره انرژی ۱۵- تا ۱۰ الکترون ولت رسم شده است. در این شکل‌ها صفر انرژی، مقیاس تراز فرمی است و با نقطه‌چین نشان داده شده است. مهم‌ترین پارامتری که می‌توان از نمودار چگالی حالت‌های کلی استخراج کرد گاف نواری است، که در ساختارهای ورتسایت



شکل ۸ - نمودار تغییر سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی در ساختار (الف) ورتسایت و (ب) بلندروی



شکل ۹ - نمودار چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اوربیتال‌های اتم‌های (الف) ایندیوم و (ب) نیتروژن ساختار بلندروی

تابع دی‌الکتریک برای توصیف پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی به کار می‌رود و با استفاده از آن می‌توان ویژگی‌های نوری ماده، رسانندگی الکتریکی و کاربردهای تکنولوژیکی بسیاری را تعیین کرد که به صورت $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + \epsilon_2(\omega)$ نشان داده می‌شود [۴] که در آن $\epsilon_1(\omega)$ سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک و $\epsilon_2(\omega)$ سهم موهومی تابع دی‌الکتریک می‌باشد. رابطه ضریب شکست و ضریب خاموشی با تابع دی‌الکتریک به صورت معادله (۲) است:

$$\epsilon_1(\omega) = n^2(\omega) + k^2(\omega), \quad \epsilon_2(\omega) = 2n(\omega)k(\omega) \quad (2)$$

جزر $\epsilon_1(0)$ ضریب شکست استاتیکی، $n(0) = \sqrt{\epsilon_1(0)}$ را نتیجه می‌دهد.

سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک

در ساختار ورتسایت مؤلفه‌های اصلی تابع دی‌الکتریک به صورت $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} \neq \epsilon_{zz}$ می‌باشد که می‌توان نتیجه گرفت ساختار ورتسایت در راستای x و y همسان گرد می‌باشد. ساختار بلندروی دارای تقارن مکعبی می‌باشد و مؤلفه‌های اصلی تابع دی‌الکتریک در این ساختار به صورت $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz}$ است، که در سه راستای x، y و z همسان گرد است. با توجه به تطابق کامل نمودارهای ϵ_{xx} و ϵ_{yy} در شکل ۸ تغییر سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک ساختار ورتسایت و بلندروی نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی نشان داده شده است. با توجه به شکل ۸، نتیجه‌های ضریب شکست استاتیکی در دو راستای x و z به همراه نتیجه‌های دیگران در جدول ۳ آورده شده است.

از نمودارهای سهم حقیقی شکل ۸ دیده می‌شود که این نمودارها در بازه کمی از انرژی دارای مقدارهای منفی می‌باشد. در ناحیه‌ای که ϵ_1 منفی است امواج منتشر نمی‌شوند.

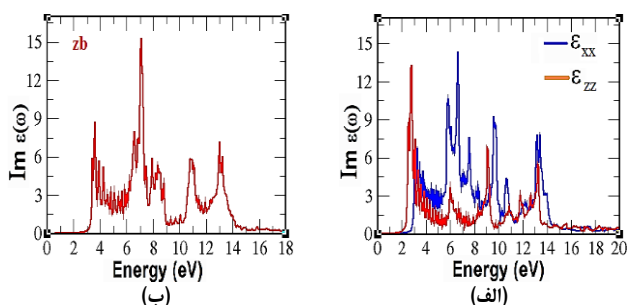
نوارهای انرژی در اطراف تراز فرمی ایفا می‌کنند. با توجه به چگالی حالت‌های جزئی، اوربیتال d اتم In به علت پر بودن، سهم ناچیزی را در چگالی حالت‌های کلی و جزئی داراست. مشارکت عمده اوربیتال p اتم نیتروژن، در نوار ظرفیت است و قله‌ای به اندازه ۲/۲۵ حالت بر الکترون‌ولت در دو ساختار دارد. اوربیتال s اتم ایندیم نیز بیش‌ترین مشارکت را در نوار ظرفیت دارد اگر چه هر دو اوربیتال به ترتیب مشارکت چشمگیری هم در نوار رسانش و ظرفیت دارند ولی مشارکت اوربیتال‌های p اتم نیتروژن در نوار ظرفیت بیش‌تر از اوربیتال‌های p اتم ایندیم است که نشان‌دهنده هیبریدشدگی این دو اوربیتال می‌باشد و یک پیوند کووالانسی را نشان می‌دهد و به این وسیله می‌توان نتیجه گرفت که ایندیم نیتريد دارای پیوند یونی کووالانسی می‌باشد. بیشینه چگالی حالت اوربیتال ایندیم به اندازه ۰/۸ حالت بر الکترون‌ولت می‌باشد و بیشینه چگالی حالت اوربیتال نیتروژن به اندازه ۲/۲۵ حالت بر الکترون‌ولت است. این مقدارها نشان‌دهنده مشارکت عمده این اوربیتال‌هاست. توجه به این نکته ضروری است که جمع چگالی حالت‌های جزئی هیچ‌گاه برابر چگالی حالت‌های کلی نیست، زیرا کره‌ها در اطراف اتم‌ها کل فضای یاخته واحد را اشغال نمی‌کنند.

ویژگی‌های نوری

گاف نواری بیش‌تر نیم‌رساناها در بازه صفر تا ۴ الکترون‌ولت می‌باشد. فوتون‌هایی با انرژی کافی می‌توانند منجر به تحریک الکترون‌ها از نوارهای ظرفیت پر به نوارهای رسانش خالی شوند. طیف نوری نیم‌رساناها منبع وسیعی از اطلاعات را برای مطالعه ساختار نواری، ویژگی‌های الکترونی، برانگیختگی‌ها و نوسانات شبکه در اختیار ما قرار می‌دهد. این ویژگی‌ها مبنای بسیاری از کاربردهای نیم‌رساناها مانند لیزرها، دیودهای گسیل نور و آشکارسازهای نوری هستند [۲۰].

جدول ۳ - نتیجه‌های ضریب شکست استاتیکی محاسبه شده در ساختارهای ورتسایت و بلندروی با استفاده از تقریب PBE^o

فاز	کمیت‌های محاسبه شده	PBE ^o	کار نظری [۱۸]	کار تجربی [۱۴]
ورتسایت	$\epsilon_{xx}(0)$	۷/۶۴	۸/۸۱	۸/۶۹
	n_{xx}	۲/۷۶	۲/۹۶	۲/۹۴
	درصد خطای n_{xx} نسبت به مقدار تجربی	۶/۱	۰/۶۸	-
	$\epsilon_{zz}(0)$	۷/۶۵	۸/۶۹	۸/۹۱
	n_{zz}	۲/۷۷	۲/۹۴	۳/۰۷
	درصد خطای n_{zz} نسبت به مقدار تجربی	۹/۷۷	۴/۲۳	-
بلندروی	$\epsilon_{xx}(0)$	۵/۹۸	۹/۴۵	۹/۴۵
	n_{xx}	۲/۴۴	۳/۶۹	۳/۶۹
	درصد خطای n_{xx} نسبت به مقدار تجربی	۳۱/۵۶	۰	-



شکل ۹ - نمودار تغییر سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی با استفاده از تقریب PBE^o برای ساختار (الف) ورتسایت و در راستای X و Z و (ب) بلندروی در راستای X

این تابع متناسب با احتمال اتلاف انرژی E در واحد طول برای یک الکترون در حال عبور از محیط است. شاخص‌ترین قله در طیف اتلاف انرژی به‌عنوان قله پلاسמוنی شناخته می‌شود که بیانگر برانگیختگی‌های جمعی چگالی بار در محیط است. در یک بلور امکان وجود چند قله پلاسمونی وجود دارد. قله پلاسمونی مربوط به نوسان پلاسما است و بسامد منطبق بر آن بسامد پلاسما نامیده می‌شود. در شکل ۱۰ طیف اتلاف انرژی در بازه صفر تا ۲۴ الکترون‌ولت مربوط به دو راستای X و Z در ساختار ورتسایت و بازه صفر تا ۱۶ الکترون‌ولت مربوط به ساختار بلندروی با استفاده از تقریب PBE^o رسم شده است. در ساختار ورتسایت بلندترین قله در راستای X در انرژی ۱۲/۱ الکترون‌ولت و در راستای Z در انرژی ۱۰/۵ الکترون‌ولت قرار گرفته است. در ساختار بلندروی بلندترین قله در راستای X در انرژی ۰/۴ الکترون‌ولت قرار گرفته است.

با توجه به نمودار اتلاف انرژی الکترون، در ساختار ورتسایت و بلندروی به ترتیب از حدود ۰/۹ و ۱/۹ الکترون‌ولت آغاز شده که مربوط به گاف نواری مستقیم بالای تراز فرمی است و برای ساختار

سهم موهومی تابع دی‌الکتریک

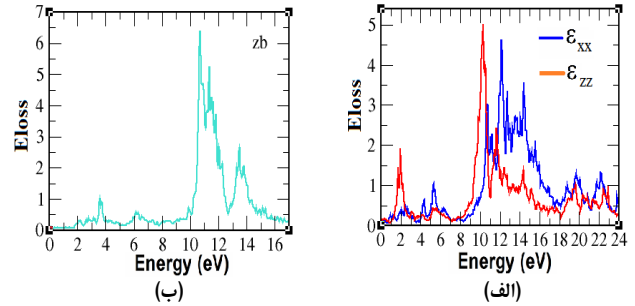
شکل ۹ نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک را نشان می‌دهد. همان‌گونه که در شکل برای ساختار ورتسایت نشان داده شده است، سهم موهومی تابع دی‌الکتریک تا پیش از انرژی ۲/۱ الکترون‌ولت دارای تغییراتی آرام می‌باشد. این تغییرها که به علت جذب فوتون‌های کم انرژی است می‌تواند منجر به گذارهای درون نواری شود. پس از انرژی ۲/۱ الکترون‌ولت سهم موهومی به صورت ناگهانی افزایش می‌یابد که این امر بیانگر جذبی است که به دنبال آن گذارهای بین‌نواری اتفاق می‌افتد و الکترون‌ها با به دست آوردن این انرژی، گاف نواری را طی کرده و از نوار ظرفیت وارد نوار رسانش می‌شوند. برای ساختار بلندروی جذب از انرژی ۲/۸ الکترون‌ولت آغاز و در ۶/۵ الکترون‌ولت به بیش‌ترین مقدار خود می‌رسد. در گذار درون نواری فوتون فرودی باعث می‌شود که الکترون تنها در همان نواری که قرار دارد به سمت انرژی‌های بالاتر جابه‌جا شود که این امر در سهم موهومی تابع دی‌الکتریک انعکاس می‌یابد. انرژی یک نوار را می‌توان به صورت پیوسته در نظر گرفت. در گذار بین‌نواری الکترون‌ها با جذب انرژی فوتون فرودی از گاف نواری عبور کرده و وارد نوار جدیدی در نوار رسانش می‌شوند.

تابع اتلاف انرژی

طیف اتلاف انرژی الکترون کمی مهم برای بررسی ویژگی‌های ماکروسکوپی و میکروسکوپی جامدات می‌باشد. این طیف دربردارنده تحریک دسته جمعی الکترون‌های ظرفیت (پلاسمون‌ها) به درون حالت‌های اشغال شده در نوار رسانش می‌باشد. تابع اتلاف وارون سهم موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط است و از معادله (۳) به دست می‌آید [۲].

$$EELS(\omega) = \text{Im} \left[\frac{1}{\epsilon_1 + i\epsilon_2} \right] = \frac{-\epsilon_2}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \quad (3)$$

GGA و PBE محاسبه شد. نتیجه‌های ساختار نواری و چگالی حالت‌های به دست آمده نشان می‌دهد که ایندیم نیتريد یک گاف نواری مستقیم در نقطه Γ به اندازه $2/2$ الکترون‌ولت دارد. هم چنین نتیجه‌ها نشان می‌دهد که بیش‌ترین سهم در نوار ظرفیت مربوط به اوربیتال s اتم نیتروژن و در نوار رسانش مربوط به اوربیتال‌های s و p اتم ایندیم است. هم چنین مدول حجمی ترکیب ایندیم نیتريد ساختار نمک طعام از دو ساختار ورتسایت و بلندروی بیش‌تر و تراکم پذیری کم‌تری داد. پس این ساختار سختی بالا و تراکم پذیری کم‌تری نسبت به دو ساختار دیگر دارد. نتیجه‌های به دست آمده از ویژگی‌های نوری بیانگر انطباق تقریبی ساختار نواری با سهم موهومی تابع دی‌الکتریک و هم چنین برابری تقریبی گاف نواری با گاف نوری است. نتیجه‌های به دست آمده در بسیاری از موردها با دیگر داده‌های موجود سازگاری خوبی دارد.



شکل ۱۰ - نمودار طیف اتلاف انرژی ایندیم نیتريد با استفاده از تقریب PBE در ساختارهای (الف) ورتسایت و (ب) بلندروی

ورتسایت انرژی در راستاهای x و z به ترتیب برابر $12/1$ و $10/5$ است و برای فاز ساختاری بلندروی بیشینه اتلاف انرژی را $10/4$ الکترون‌ولت می‌بینم که در واقع همان انرژی مربوط به پلاسمون‌های حجمی است.

نتیجه‌گیری

در این مطالعه ساختار نواری ترکیب ایندیم نیتريد در هر سه فاز ساختاری با استفاده از نظریه تابعی چگالی و تقریب‌های LDA،

مراجع

- [1] Lu H., Schaff W.J., Eastman, Surface Chemical Modification of InN for Sensor Application, *Applied Physics*, **96**: 3577-3579 (2004).
- [2] Furthmuller J., Bechstedt F., Band Structures and Optical Spectra of In Npolimorphs: Influence of Quasiparticle and Exeitononic Effects, *Physical Review*, **72**: 205106 (2005).
- [3] Tansley T.L. Foley C.P., Optical Band Gap of InN, *J. Appl. Phys.* **59**: 3241 (1986).
- [4] Anchez M.S, "Electronic Structure and Optical Properties of III-N Nanowires", University of Valencia (2010).
- [5] Kanoun B., A. Merad E., Merad G., Cibert J., Prediction Study of Elastic Properties Under Pressure Effect for Zincblende BN, AlN, GaN and InN, *Solid-State Electronics*, **48(9)**: 1601-1606 (2004).
- [6] Bechstedt F., Furthmüller J., Hahn P., Fuchs F., Nonparabolicity and Excitions in Optical Absorption of InN, *Journal of crystal growth*, **288**: 294-297 (2006).
- [7] Gorcyca I., Electron Structure and Effective Masses of InN Under Pressure, *J. App. Phys.*, **104(1)**: 013704 (2008).
- [8] Lyons J.J., Van de Walle C.G., Hybrid Functional Calculations of Native Point Defects in InN, *Physica Status Solidi (a)* **209(1)**: 65-70 (2012).

- [9] Hussain A., Baig M.W., Mustafa N., [DFT Studies of Indium Nanoclusters, Nanotubes and Their Interaction with Molecular Hydrogen](#), *The Nucleus*, **52(4)**: 185-191 (2015).
- [10] Liang D., Quhe R., Chen Y., Wu L., Wang Q., Guan P., Wang S., Lu P., [Electronic and Excitonic Properties of Two-Dimensional and Bulk Inn Crystals](#), *RSC Advances*, **7**: 42455-42461 (2017).
- [11] Giovanne B., Pinhal N., Marana L., Guilherme S., Fabris L., Sambrano Structural J.R., [Electronic and Mechanical Properties of Single-Walled AlN and GaN Nanotubes via DFT/B3LYP](#), *Theoretical Chemistry Accounts*, **138**: 1-11 (2019).
- [12] Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., [QUANTUM ESPRESSO: A Modular and Open-Source Software Project for Quantum Simulations of Materials](#), *Condensed Matter*, **21**: 395502(2009).
- [13] Bachelet G.B., Hamann D.R., Shluter M., [Pseudopotentials that Work: from H to Pu](#), *Physical Review*, **26**: 4199 (1982).
- [14] Qian Z., Shen W., Ogawa H., Guo Q., [Experimental Studies of Latic Dynamic Properties in Indium Nitride](#), *Condensed Matter*, **16**: (2004) R381.
- [۱۵] جاودانی ز.، "بررسی ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی با استفاده از نظریه تابعی چگالی SrFe_2O_4 ترکیب مونوفریت استرانسیوم"، پایان‌نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه شهید چمران، اهواز، ایران (۱۳۹۱).
- [16] Vurgaftman I., Meyer J.R., and Ram-Mohan L.R., [Band Parameters for III-V Compound Semiconductors Their Alloys](#), *J. Appl. Phys*, **89(11)**: 5815-5875 (2001).
- [17] Bechstedt F., Furthmüller J., [Do We Know the Fundamental Energy Gap of InN](#), *Journal of Crystal Growth*, **246(3-4)**: 315-319 (2002).
- [18] Graine R., Chemam R., [First Principles Calculation of Structural, Electronic and Optical Properties of InN Compound](#), *International Journal of Modern Physics*, **29(5)**: 0217-9792 (2015).
- [19] Ji X., Lau S., Yang H., Zhang Q., [Structural and Optical Properties of Wurtzite InN Grown on Si \(111\)](#), *Thin Solid Films*, **515(11)**: 4619-4623 (2007).
- [20] Wang S.Q., Ye H.Q., [Plane-Wave Pseudopotential Study on Mechanical and Electronic Properties for IV and III-V Crystalline Phases with Zinc-Blende Structure](#), *Physical Review*, **66**: 235111 (2002).