



بررسی ویژگی‌های اپتیکی فازهای فشار بالای $HgTe$ با استفاده از نظریه تابعی چگالی

حمدا... صالحی*، زینب ایزدی

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

تاریخ ثبت اولیه: ۱۴۰۱/۰۶/۰۷، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۴۰۱/۰۹/۱۶، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۴۰۱/۰۹/۲۵

چکیده

در این مقاله خواص اپتیکی ترکیب تلوراید جیوه نظیر تابع دی‌الکتریک، ضرایب شکست و ضریب خاموشی با استفاده از تقریب‌های مختلف در سه فاز بلند روی، هگزاگونال و اورتورومبیک مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو صورت گرفته است. نتایج حاصل از سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نشان دهنده مطابقت گاف اپتیکی با گاف نواری می باشد. هم چنین نتایج حاصل از پارامترهای اپتیکی برای دو فاز بلندروی و هگزاگونال ترکیب تلوراید جیوه نشان دهنده این مطلب است که این ترکیب در فاز بلندروی دارای ضریب شکست $3/413$ و در فاز هگزاگونال در راستای x و z به ترتیب دارای ضریب شکست $3/192$ و $3/339$ می باشد. دلیل بیشتر بودن ضریب شکست در فاز بلندروی به هگزاگونال را می توان به خاصیت شبه فلزی این ترکیب نسبت داد.

واژه های کلیدی: تابع دی‌الکتریک، ضریب شکست، ضریب خاموشی، تلوراید جیوه، کوانتوم اسپرسو.

۱. مقدمه

تلوراید جیوه یکی از مواد نیم رسانای متعلق به گروه IV-II می باشد [۱]. در سال های اخیر این دسته از نیم رساناها به علت داشتن گاف نواری مستقیم و ویژگی گسیل نور در دمای اتاق مورد توجه بسیاری واقع شده اند [۲]. ترکیب های XTe ($X=Zn, Cd, Hg$) متعلق به این گروه، به علت خواص اپتیکی برجسته و تبدیل ساختاری چندریختی شان از اهمیت خاصی برخوردارند. این ترکیبات

*عهده دار مکاتبات: حمدا... صالحی

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

پست الکترونیک: E-mail: salehi_h@scu.ac.ir

تلفن: ۰۹۱۶۶۱۸۲۲۳۹

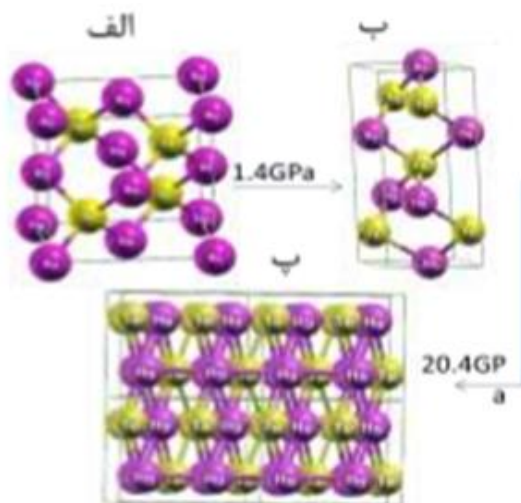
کاندیدای خوبی برای بسیاری از کاربردهای تکنولوژیکی، مثل ابزارهای لیزر حالت جامد، ابزارهای فوتولتاییک، سلول های خورشیدی، دستگاه های کنترل از راه دور، فیلم های نازک، ترانزیستورها، آشکارسازها و دستگاه های تصویربرداری و غیره می باشند [۳]. مطالعات تجربی بر روی تلوریدجیوه با پراش پرتو x نشان داد که این ترکیب در محدوده نسبتاً کوچکی از فشار به ترتیب از ساختار بلندروی (شبه فلز، فاز اول) به فاز هگزاگونال سینابار (نیم رسانا، فاز دوم) و سپس به فاز نمک طعام (فلز، فاز سوم) گذار می کند [۴]. هم چنین در سال ۲۰۱۶ ویژگیهای ساختاری، کشسانی و نوری آلیاژهای $Cd_{1-x}Zn_xHg_y$ مورد بررسی قرار گرفت [۵]. رفتار ساختاری با افزایش فشار مساله ای است که در دهه اخیر به شدت مورد بررسی قرار گرفته است. فشار یک متغیر ترمودینامیکی مناسب برای آشکار کردن ویژگی های مکانیکی بیشتر جامدات و آلیاژها می باشد. از آن جا که جاذبه ملکولی جامدات بسیار مهم است، فاصله بین ملکولی در اثر اعمال فشار تغییر می کند، به طوری که خواص فازهای فشار بالا می تواند با خواص ساختار در حالت پایدار متفاوت باشد [۳]. در میان نیم رساناهای VI - II رفتار فشار بالای ترکیب تلوراید جیوه توجه بسیاری را به خود جلب کرده است. در سال ۱۹۴۰ بریجمن برای اولین بار تراکم پذیری ترکیب های $HgTe$ و $HgSe$ را اندازه گیری کرد. در سال ۱۹۶۱ بلیر^۱ و اسمیت^۲ متوجه یک افزایش ناگهانی در مقاومت ترکیب تلوراید جیوه در فشار ۱۶kbar شدند. در نهایت این تغییرات به یک گذار مرتبه اول در فشار ۱٫۲۵ گیگاپاسکال به همراه یک تغییر حجم ۸٫۴ درصد از فاز بلندروی به فاز هگزاگونال سینابار نسبت داده شد. در سال ۱۹۶۳ ماریانو^۳ و وارکویس^۴ نیز به وسیله اندازه گیری پراش پرتو x موفق به مشاهده این گذار شدند [۶]. اندازه گیری مقاومت به عنوان تابعی از فشار بر روی ترکیب تلوراید جیوه نشان داد که این ترکیب با اعمال فشار ناچیزی در معرض یک ترتیب گذار از یک شبه فلز به یک نیم رسانا و سپس یک فلز قرار می گیرد. این تغییرات در مقاومت هم چنین با گذار های ساختاری از ساختار بلندروی (شبه فلز) به ساختار هگزاگونال سینابار (نیم رسانا) و سپس به ساختار rocksalt (فلز) متناظر می باشند [۷]. هم چنین محاسبات با استفاده از پراکندگی چندگانه ضمن تأیید این گذارهای ساختاری، حضور یک فاز اورتورومبیک را پس از فاز نمک طعام نشان می دهد. فشار گذار تجربی از فاز نمک طعام به فاز اورتورومبیک ۱۱ گیگا پاسکال می باشد [۷]. شکل (۱) نمایی از این ساختار را در هر سه فاز بلندروی، سینابار و اورتورومبیک در منطقه اول به همراه فشارهای گذار تجربی نشان می دهد. لذا در این کار ویژگی های اپتیکی از جمله تابع دی الکتریک، ضریب شکست، ضریب خاموشی و تابع اتلاف در سه فاز با استفاده نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار می گیرند. بنا بر اطلاعات موجود تاکنون پژوهشی در مورد فازهای فشار بالا (فاز هگزاگونال و فاز سینابار) در مورد ویژگی های اپتیکی ترکیب تلوراید جیوه با بسته محاسباتی کوآتوم اسپرسو و شبه پتانسیل بار پایسته و تقریب شیب تعمیم یافته انجام نشده است.

¹ Blair

² Smith

³ Mariano

⁴ Warekois



شکل ۱. (الف) ساختار بلندروی، (ب) ساختار سینابار و (پ) ساختار اورتورومبیک

۲. روش‌های محاسباتی

محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام شده است [۸]. در این بسته محاسباتی معادلات تک ذره کوهن-شم با استفاده از روش شبه پتانسیل و بسط تابع موج الکترون‌های ظرفیت بر حسب امواج تخت حل می‌گردد. در محاسبات از شبه پتانسیل‌های ساخته شده به روش بار پایسته بر پایه تقریب شیب تعمیم یافته و تقریب چگالی موضعی استفاده شده است. ارییتال‌های ظرفیت که در این شبه پتانسیل‌ها در نظر گرفته می‌شوند و محاسبات برای آن‌ها به کار می‌رود در مورد اتم جیوه به صورت $6s^2$ ، $5d^{10}$ و در اتم تلوریم به صورت $5p^4$ ، $5s^2$ می‌باشند. در این محاسبه مقدار انرژی قطع برای بسط تابع موج را بهینه کرده ایم. این مقدار برای هر سه ساختار و در هر دو تقریب برابر با ۵۰ ریدبرگ می‌باشد. برای فازهای بلندروی، هگزاگونال و اورتورومبیک انتگرال گیری بر روی ناحیه اول بریلون، به ترتیب با استفاده از مش یکنواخت $8 \times 8 \times 8$ ، $8 \times 8 \times 6$ و $8 \times 8 \times 8$ انجام گردید. در محاسبات حاضر، دقت همگرایی انرژی از مرتبه 1×10^{-7} ریدبرگ می‌باشد.

۳. نتایج و بحث

تابع دی‌الکتریک، که برای توصیف پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی به کار می‌رود، مهمترین تابع پاسخ در فیزیک حالت جامد می‌باشد که با استفاده از آن می‌توان ویژگی‌های اپتیکی ماده، رسانندگی الکتریکی و کاربردهای تکنولوژیکی بسیاری را تعیین کرد. سایر ویژگی‌های اپتیکی از جمله ضریب شکست، ضریب خاموشی، ضریب جذب و... با استفاده از این تابع محاسبه می‌شوند [۹]. آزمایش‌های بازتاب، تراکسیل و شکست اپتیکی راهی برای تعیین ثابت دی‌الکتریک جامد ارائه می‌کند. ثابت دی‌الکتریک تابعی از رسانندگی می‌باشد. در حالت کلی رسانندگی و تابع دی‌الکتریک تانسور هستند. برای یافتن رابطه ای میان ثابت دی‌الکتریک و رسانندگی می‌توان از معادلات ماکسول استفاده کرد. ثابت دی‌الکتریک تحت تأثیر ساختار بلوری و تقارن‌های موجود در آن تغییر می‌کند. همان‌طور که گفته شد این کمیت یک تانسور است. همان‌طور که مشاهده می‌شود تانسور دی

الکترونیک برای بلورهای مکعبی کمیته اسکالر می باشد. می توان به کمک معادلات کرامرز کرونیگ سهم حقیقی و موهومی تابع دی الکترونیک را به هم مربوط ساخت. تابع دی الکترونیک دارای دو سهم درون نواری و بین نواری می باشد. در گذار درون نواری فوتون فرودی باعث می شود الکترون تنها در همان نواری که قرار دارد به سمت انرژی های بالاتر جا به جا شود که این امر در سهم موهومی تابع دی الکترونیک انعکاس می یابد. اما در گذار بین نواری الکترون ها با جذب انرژی فوتون فرودی از گاف نواری عبور کرده و وارد نوار جدیدی در نوار رسانش می شوند. در این نوع گذار با توجه به گسسته بودن بین نوارهای متفاوت، با استفاده از روابط کوانتومی می توان تابع دی الکترونیک را به صورت زیر تعریف کرد [۱۰]:

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

در این رابطه M ماتریس دو قطبی، i و j حالت های اولیه و نهایی f_i تابع توزیع فرمی برای حالت i ام و E_i انرژی الکترون در حالت i ام می باشد. سهم حقیقی تابع دی الکترونیک به استفاده از سهم موهومی آن و با رابطه کرامرز کرونیگ به دست می آید. از طرف دیگر با بررسی تابع دی الکترونیک پاسخ بلور به میدان های الکترومغناطیسی تعیین می شود. این تابع از دو سهم حقیقی $\varepsilon_1(\omega)$ و موهومی $\varepsilon_2(\omega)$ تشکیل شده است. $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ که ویژگی اپتیکی ترکیب با تابع دی الکترونیک مختلط از رابطه (۱) به دست می آید. گذارهای احتمالی از قسمت بالایی نوار ظرفیت به قسمت انتهایی نوار رسانش سهم عمده را در طیف اپتیکی ماده دارا می باشند. در ادامه محاسبات به دلیل این که نتایج با تقریب شیب تعیم یافته نسبت به تقریب چگالی موضعی به نتایج دیگران نزدیکتر است. کلیه محاسبات با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته انجام شده است.

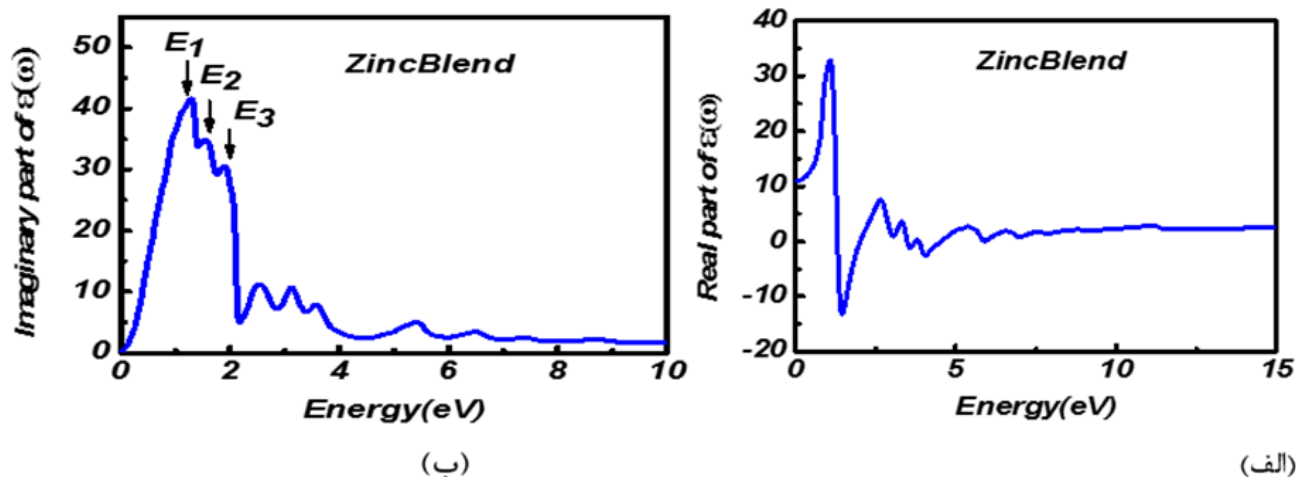
۳-۱. فاز ساختاری بلندروی

در تقارن مکعبی، مؤلفه های اصلی تانسور دی الکترونیک در راستای هر سه محور با هم برابر و به صورت $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz}$ می باشند. بنابراین فقط محاسبه یک مؤلفه از تابع دی الکترونیک ضروری است. در شکل (۲) سهم های حقیقی و موهومی تابع دی الکترونیک برای این ساختار آورده شده است. جذر سهم حقیقی تابع دی الکترونیک در انرژی صفر منجر به ضریب شکست استاتیکی سامانه می شود [۱۱].

$$n_o(\omega) = \sqrt{\varepsilon_1(0)} \quad (2)$$

میزان ضریب شکست ترکیب تلوراید جیوه در فاز بلندروی در هر سه راستا برابر با ۳/۴۱۳ است. از نمودار سهم حقیقی دیده می شود که این نمودار در محدوده کمی از انرژی دارای مقادیر منفی می باشد. در ناحیه ای که $\varepsilon_1(\omega)$ منفی است امواج منتشر نمی شوند و فرایندهای جذب و اتلاف صورت می گیرد. از نمودار سهم موهومی تابع دی الکترونیک چنین برمی آید که جذب از انرژی های بسیار کوچک شروع شده است که این امر بیان گر این واقعیت است که این ماده در این فاز گاف انرژی ندارد. سپس نمودار با شیب تندی افزایش می یابد و این افزایش ناگهانی بیان گر جذبی است که به دنبال آن گذارهای میان نواری اتفاق می افتند که در این جا با

توجه به صفر بودن گاف انرژی الکترون ها بدون نیاز به انرژی قادر خواهند بود از نوار ظرفیت وارد نوار رسانش شوند. این ملاحظات گاف صفر ساختار نواری را تأیید می کند، یعنی گاف نواری با گاف اپتیکی یکسان است.



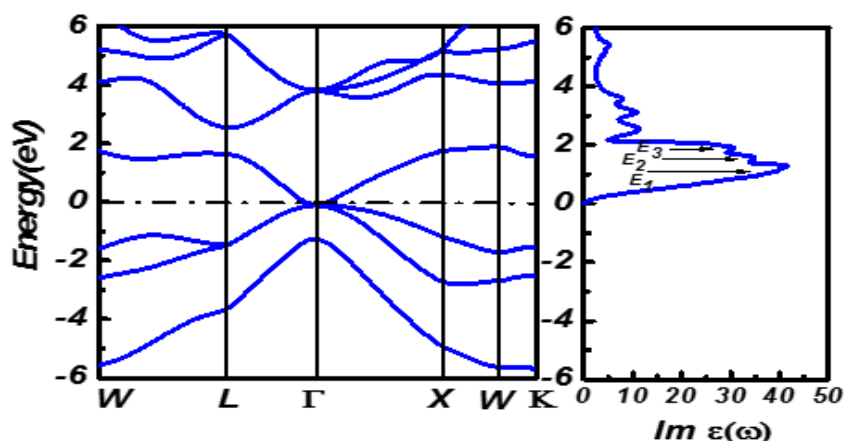
شکل ۲. تغییرات تابع دی الکتریک نسبت به انرژی فوتون های فرودی برای سهم (الف) حقیقی و (ب) موهومی.

نقاط E_1 , E_2 , E_3 قله های اصلی این منحنی را تشکیل می دهند، که این قله ها می توانند بیانگر انرژی مورد نیاز برای گذارهای احتمالی از نوار ظرفیت به نوار رسانش باشند. در جدول (۱) نتایج ضریب شکست با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته در فاز بلندروی به همراه نتایج دیگران آورده شده است. لازم به توضیح است که نتایج به دست آمده در این کار با داده های موجود در مرجع [۱۲] مقایسه شده است که قابل قبول است. در مرجع فوق نویسندگان با استفاده از کد محاسباتی Abinit و روش شبه پتانسیل و با تقریب چگالی موضعی کار شده است. در حالی که نتایج کار در این مقاله با بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو و شبه پتانسیل بار پایسته و تقریب شیب تعمیم یافته انجام شده است.

جدول ۱. نتایج حاصل از سهم حقیقی تابع دی الکتریک برای ترکیب تلوراید جیوه در فاز بلندروی و مقایسه با نتایج دیگران.

فاز بلندروی	$\epsilon(0)$	n
کار حاضر	۱۱,۶۵۵	۳,۴۱۳
کار نظری [۱۲]	۱۴,۵	۳,۸۱

به منظور نمایش انطباق این نقاط با گذارهای احتمالی، نمودار سهم موهومی تابع دی الکتریک در کنار ساختار نواری در شکل (۳) رسم شده است. به دلیل کاهش یافتن احتمال گذار در انرژی های بالاتر، در این نواحی قله های ظاهر شده در $\epsilon_2(\omega)$ به طور قابل ملاحظه ای کاهش می یابند و قله های ضعیف بعدی ناشی از گذارهای بین نوارهای ظرفیت و نوارهای رسانش بالاتر هستند.

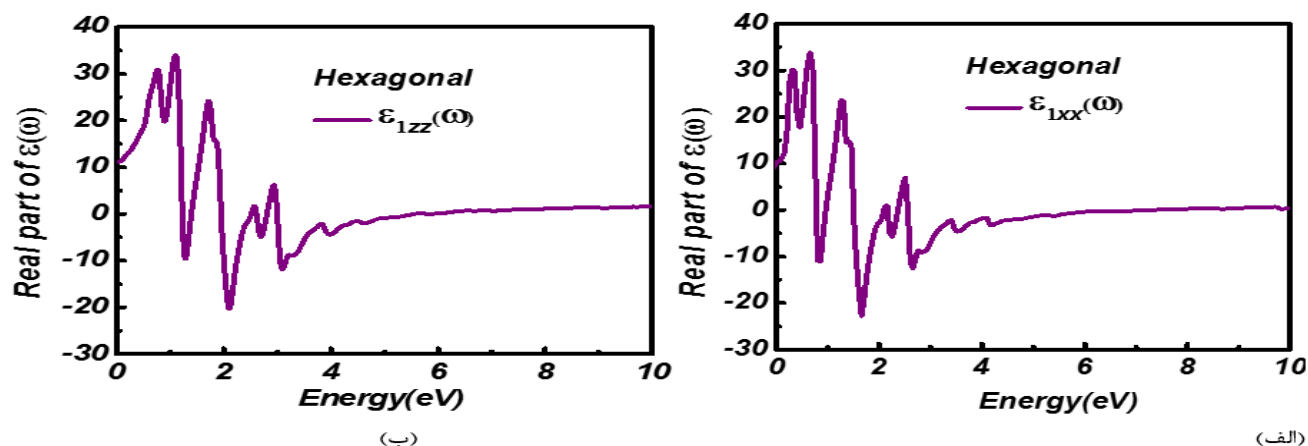


شکل ۳. تطابق نسبی سهم موهومی تابع دی الکتریک و ساختار نواری.

با توجه به نمودار بالا مشاهده می شود که گاف انرژی در تراز فرمی به هم رسیده اند و گاف نواری صفر را برای این ساختار نتیجه می دهد. سه قله موجود در منحنی می توانند نمایش سه گذار احتمالی از نواری ظرفیت به نواری رسانش باشد. قله اول E_1 که در انرژی ۱٫۲۸ الکترون ولت واقع است می تواند متناظر با گذار غیر مستقیم در راستای $\Gamma \rightarrow L$ باشد. قله های E_2 و E_3 به ترتیب در انرژی های ۱٫۵۳ و ۱٫۸۸ الکترون ولت می توانند بیانگر گذارهای غیر مستقیم به ترتیب $\Gamma \rightarrow X$ و $\Gamma \rightarrow W$ باشند.

۲-۳. فاز ساختاری هگزاگونال

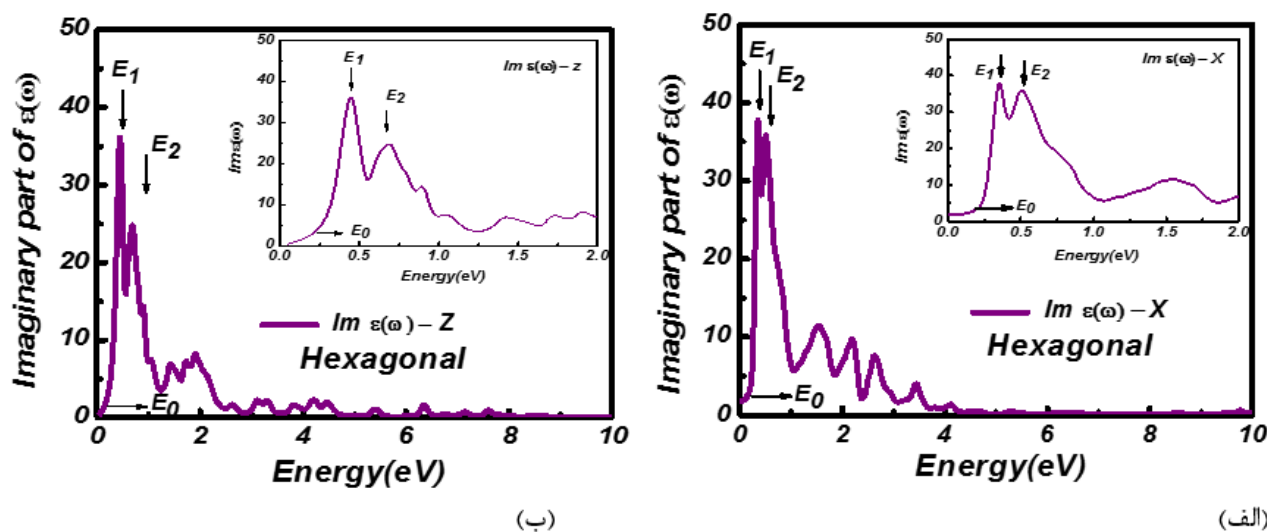
فاز هگزاگونال سینابار در تمام کلکوژن های جیوه روی می دهد. این ترکیب همان طور که قبلاً نیز بیان شد تحت فشار ۱٫۴ گیگا پاسکال از یک فاز بلندروی در فشار معمولی به فاز هگزاگونال گذار می کند [۱۳]. ساختار هگزاگونال نسبت به ساختار بلند روی از تقارن کمتری برخوردار می باشد. در این ساختار دو ثابت شبکه a و b با هم برابر و با ثابت شبکه c اختلاف دارند. بنابراین مؤلفه های اصلی تابع دی الکتریک در این ساختار به صورت $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} \neq \epsilon_{zz}$ می باشد که می توان نتیجه گرفت که ساختار هگزاگونال در راستای x و y ساختاری همسانگرد می باشد. سهم حقیقی تابع دی الکتریک ترکیب تلوراید جیوه در فاز هگزاگونال در راستای x و z در شکل (۴) نشان داده شده است.



شکل ۴. تغییرات تابع دی الکتریک نسبت به انرژی فوتون های فرودی برای سهم حقیقی (الف) در راستای x و (ب) در راستای z .

همان طور که گفته شد تابع دی الکتریک فازسینابار با ساختار هگزاگونال در راستاهای x و y برابر و با راستای z متفاوت می باشد. میزان ضریب شکست استاتیک در راستاهای x و z به ترتیب دارای مقادیر $۳/۱۹۲$ و $۳/۳۳۹$ می باشد که دیده می شود میزان ضریب شکست در راستای z نسبت به راستای x افزایش یافته است. با توجه به این که نمودار سهم حقیقی تابع دی الکتریک در هر دو راستا در بازه انرژی $۰/۹۶$ تا ۷ الکترون ولت منفی است در می یابیم که در هر دو راستا در این بازه انرژی هیچ موجی در ترکیب منتشر نمی شود. مشاهده می شود که در انرژی های بالاتر از ۶ الکترون ولت سامانه در هر دو راستای x و z از خود رفتاری همسانگرد نشان می دهد.

در شکل (۵) نمودار سهم موهومی تابع دی الکتریک در راستای x و z آورده شده است. همان طور که از شکل پیداست، سهم موهومی تابع دی الکتریک تا قبل از انرژی $۰/۱۷$ الکترون ولت دارای تغییراتی آرام می باشد. این تغییرات آرام که ناشی از جذب فوتون های کم انرژی است می تواند منجر به گذارهای درون نواری شود. پس از انرژی $۰/۱۷$ الکترون ولت سهم موهومی به صورت ناگهانی افزایش می یابد که این امر بیان گر جذبی است که به دنبال آن گذارهای بین نواری اتفاق می افتد و الکترون ها با به دست آوردن این انرژی گاف نواری را طی کرده و از نواری ظرفیت وارد نواری رسانش شوند.



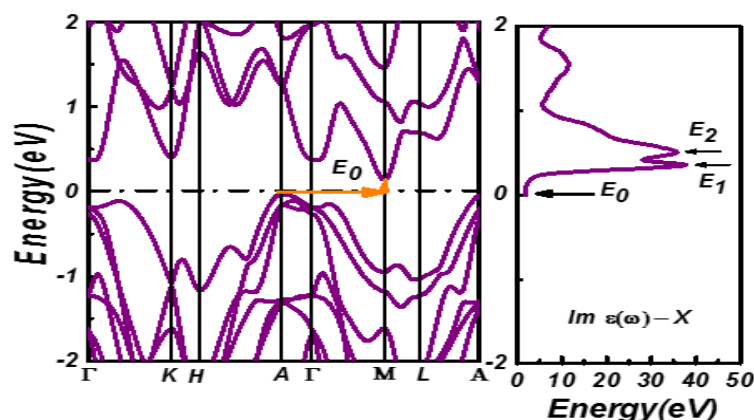
شکل ۵. تغییرات تابع دی الکتریک نسبت به انرژی فوتون های فرودی برای سهم موهومی (الف) در راستای x و (ب) در راستای y .

سه نقطه مهم درون نمودار با نام های E_0 , E_1 و E_2 نشان داده شده اند. انرژی E_0 که انرژی لازم برای عبور از گاف را نشان می دهد. این انرژی آستانه جذب میان نواری و بیانگر گاف اپتیکی بلور است و مقدار این نقطه تأیید کننده گاف به دست آمده از ساختار نواری است. دو نقطه E_1 و E_2 نشان دهنده گذارهای احتمالی بعدی می باشند. باز هم به دلیل کاهش یافتن احتمال گذار در انرژی های بالاتر، در این نواحی قله های ظاهر شده در $\epsilon_2(\omega)$ به طور قابل ملاحظه ای کاهش می یابند و قله های ضعیف بعدی ناشی از گذارهای بین نواری ظرفیت و نواری رسانش بالاتر هستند. در جدول (۲) نتایج ضریب شکست در فاز هگزاگونال آورده شده است. بنابراین اطلاعات موجود داده ای وجود نداشت که بتوان با آن مقایسه نمود.

جدول ۲. نتایج حاصل از سهم حقیقی تابع دی الکتریک برای ترکیب تلوراید جیوه در فاز هگزاگونال.

فاز هگزاگونال	$\varepsilon(0)$		n	
	$\varepsilon_{xx}(0)$	$\varepsilon_{zz}(0)$	n_{xx}	n_{zz}
کار حاضر	۱۰/۱۸۸	۱۱/۱۴۸	۳/۱۹۲	۳/۳۳۹
کار دیگران	-----	-	-----	-

برای مقایسه این نقاط با گذارهای احتمالی، نمودار سهم موهومی تابع دی الکتریک در امتداد محور X در کنار نمودار ساختار نواری در شکل (۶) آورده شده است. با توجه به این شکل مشاهده می شود که گاف اپتیکی این سامانه در فشار صفر و در راستای X برابر با ۰/۱۷ الکترون ولت است که با گاف نواری ناشی از ساختار نواری (۰/۱۶ الکترون ولت) سازگاری خوبی دارد. قله E_1 در انرژی ۰/۳۴ الکترون ولت و E_2 در انرژی ۰/۴۹ الکترون ولت را می توان گذارهایی در نظر گرفت که به ترتیب در راستاهای $A \rightarrow K$ و $A \rightarrow \Gamma$ اتفاق می افتند.



شکل ۶. تطابق نسبی سهم موهومی تابع دی الکتریک و ساختار نواری.

۳-۳. تابع اتلاف انرژی

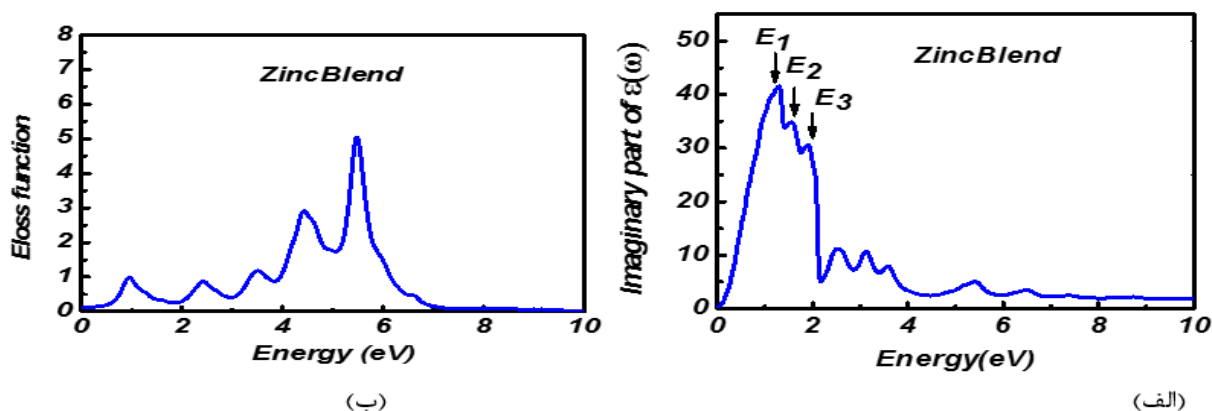
طیف اتلاف انرژی الکترون کمیته مهم جهت بررسی خواص ماکروسکوپی و میکروسکوپی جامدات می باشد. این طیف در بردارنده تحریک دسته جمعی الکترون های ظرفیت (پلاسمون ها) به داخل حالت های اشغال شده در نوار رسانش می باشد. تابع اتلاف داده می شود با [۱۴]:

$$\text{EELSpectrum} = \text{Im}[-1/\varepsilon(\omega)] = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} \quad (3)$$

این تابع متناسب با احتمال اتلاف انرژی E در واحد طول برای یک الکترون در حال عبور از محیط است. مهمترین بخش این نمودار قله های آن می باشد که بیان گر رفتارهای مشخصه مرتبط با نوسانات پلازما هستند. بسامدهای متناظر، بسامدهای پلازما نامیده می شوند. پلازما محیطی است که در آن، تراکم بارهای مثبت و منفی مساوی است و بسامد پلازما، بسامد گاز پلاسمای الکترون های

آزاد درون ماده است. رابطه بالا بیان می کند که تابع اتلاف انرژی با سهم موهومی تابع دی الکتریک رابطه معکوس دارد. به این معنا که در بازه هایی از انرژی که تابع اتلاف دارای قله می باشد، سهم های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مقادیر بسیار کوچکی دارند. در نمودار تابع اتلاف علاوه بر قله هایی که بیان گر بسامد پلاسما هستند، قله های دیگر بیان گر گذار بین نواری و متناظر با تغییر علامت انحنا نمودار تابع دی الکتریک می باشند.

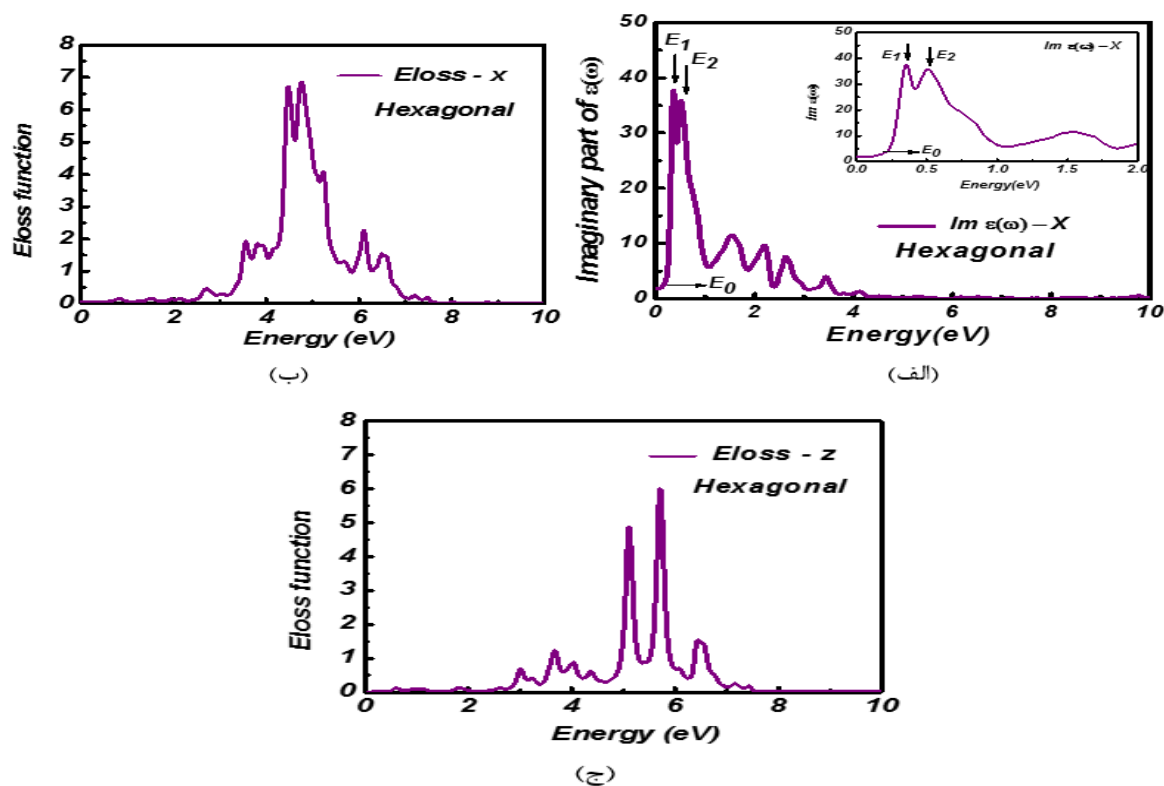
در شکل (۷) نمودار تابع اتلاف انرژی برای فاز پایدار ترکیب تلوراید جیوه (فاز بلندروی) آورده شده است. همان طور که مشاهده می شود طیف اتلاف انرژی از انرژی صفر الکترون ولت آغاز می شود. با مشاهده سهم موهومی تابع دی الکتریک درمی یابیم که به دلیل عدم حضور گاف در این ساختار جذب از انرژی صفر الکترون ولت شروع شده و در بازه صفر تا ۲ الکترون ولت حضور قله ها بیان گر گذارهای بین نوار ظرفیت و نوار رسانش می باشند. از آن جا که تابع اتلاف با تابع دی الکتریک نسبت عکس دارد، انتظار می رود که در بازه انرژی مذکور تابع اتلاف به علت شدت انتقال های بین نواری، کمینه باشد.



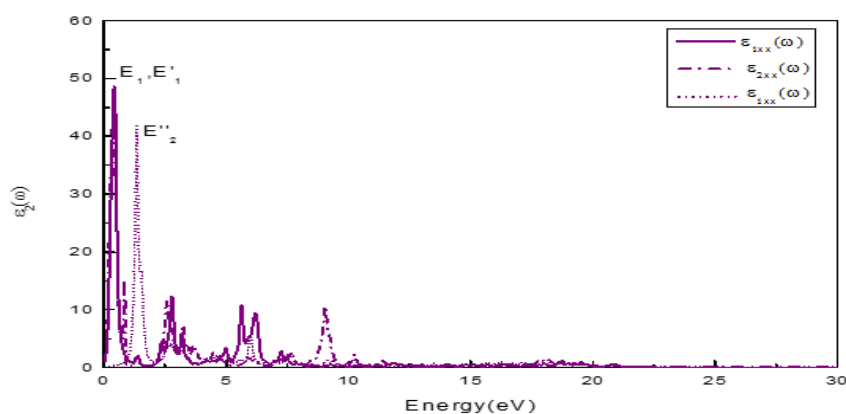
شکل ۷. الف) نمودار سهم موهومی تابع دی الکتریک و ب) طیف مربوط به اتلاف انرژی الکترونی در فاز بلندروی.

همان طور که دیده می شود چندین قله در نمودار وجود دارد و بلندترین قله در انرژی ۵/۴۵ الکترون ولت می باشد که همان انرژی متناظر با پلاسماون های حجمی است. در انرژی هایی که تابع اتلاف انرژی بیشینه است، شدت انتقال میان نواری کمینه است. بنابراین در انرژی ۵/۴۵ الکترون ولت که بیشترین اتلاف انرژی وجود دارد، شدت انتقال بین نواری بسیار کم است. در نهایت در انرژی های بالاتر از ۱۰ الکترون ولت، تابع اتلاف انرژی به سمت مقادیر صفر میل می کند.

در شکل (۸) نمودار طیف اتلاف انرژی برای فاز هگزاگونال در بازه انرژی صفر تا ۱۰ الکترون ولت در راستای x آورده شده است. با مشاهده نمودار سهم موهومی تابع دی الکتریک در بازه صفر تا ۲ الکترون ولت در می یابیم که حضور قله ها نشانه ای بر گذارهای میان نواری هستند. در این بازه انرژی انتظار می رود نمودار تابع اتلاف به دلیل شدت انتقال های بین نواری، مقدار بسیار کمی داشته باشد. نمودار تابع اتلاف انرژی در بازه ۳ تا ۶ الکترون ولت دارای چندین قله می باشد و در انرژی ۴/۵۷ الکترون ولت برای راستای x و در انرژی ۵/۷۰ برای راستای z بیشترین مقدار را دارد. این بیشینه متناظر با نوسان پلاسما می باشد. در نهایت این تابع در انرژی های بالاتر از ۸ الکترون ولت به دلیل کاهش احتمال گذار در انرژی های بالا به سمت صفر میل می کند.



شکل ۸. (الف) نمودار سهم موهومی تابع دی الکتریک در راستای x و نمودار مربوط به اتلاف انرژی الکترونی (ب) در راستای x و (ج) در راستای y. علاوه بر این ساختار نواری فاز اورتورومبیک؛ $cmcm$ ؛ یک فاز فلزی را نشان می دهد. این ساختار از نظر اپتیکی ساختاری ناهمسانگرد می باشد به این معنی که برای این ساختار مؤلفه های اصلی تابع دی الکتریک به صورت $\epsilon_{xx} \neq \epsilon_{yy} \neq \epsilon_{zz}$ می باشد. در شکل (۹) نمودار $\epsilon_2(\omega)$ را برای فاز $cmcm$ آورده ایم. این شکل عدم حضور گاف و فلز بودن این ساختار را تأیید می کند. بیشترین جذب برای راستاهای xx, yy و zz به ترتیب در انرژی های $E_1' = 0.45eV, E_1 = 0.4eV$ و $E'' = 1.30eV$ اتفاق می افتد.



شکل ۹. سهم موهومی تابع دی الکتریک در فاز اورتورومبیک

در این فاز که در فشار بیشتری نسبت به فاز سینابار تشکیل می شود تعداد قله های ظاهر شده در قسمت موهومی تابع دی الکتریک کاهش یافته و بیشینه جذب نسبت به ساختار سینابار به سمت انرژی های پایین تر جابه جا می شود.

۴. نتیجه گیری

در این کار ویژگی های اپتیکی ترکیب تلوریدجیوه از جمله ساختار نواری، تابع دی الکترونیک و ضرائب شکست در سه فاز بلند روی، هگزاگونال و اورتورومبیک با استفاده از روش شبه پتانسیل بررسی شده است. نتایج به دست آمده بیانگر این است که برای فاز بلندروی ضریب شکست در توافق خوبی با نتایج دیگران می باشد، اما برای فازهای هگزاگونال و اورتورومبیک داده ای برای مقایسه وجود ندارد، اما با مفاهیم اولیه سازگاری دارد. نتایج حاصل از پارامترهای اپتیکی برای دو فاز بلندروی و هگزاگونال ترکیب تلورایدجیوه نشان دهنده این مطلب است که این ترکیب در فاز بلندروی دارای ضریب شکست 3.413 و در فاز هگزاگونال در راستای x و z به ترتیب دارای ضریب شکست 3.192 و 3.339 می باشد. دلیل بیشتر بودن ضریب شکست در فاز بلندروی به هگزاگونال را می توان به خاصیت شبه فلزی این ترکیب نسبت داد. نتایج حاصل از سهم موهومی تابع دی الکترونیک نشان دهنده مطابقت گاف اپتیکی با گاف نواری می باشد. هم چنین لازم به توضیح است که فاز پایدار بلندروی نیم رسانایی با گاف نواری صفر یا شبه فلز و فاز ساختاری هگزاگونال نیم رسانایی با گاف نواری کوچک می باشد. در فشارهای بالا به ترتیب این ترکیب به فازهای rocksalt، اورتورومبیک و کلریدسزیم گذار می کند، که این سه ساختار رفتاری فلزی را از خود نشان می دهند.

۵. مراجع

- [1] Tan, J., Ji, G., Chen, X., Zhang, L., & Wen, Y. (2010). The high-pressure phase transitions and vibrational properties of zinc-blende XTe (X= Zn, Cd, Hg): Performance of local-density-approximation density functional theory. *Computational Materials Science*, 48(4), 796-801.
- [2] Mnasri, S., Nasrallah, S. A. B., Sfina, N., Bouarissa, N., & Said, M. (2009). Electronic, lattice vibration and mechanical properties of CdTe, ZnTe, MnTe, MgTe, HgTe and their ternary alloys. *Semiconductor science and technology*, 24(9), 095008.
- [3] Salehi, H., Izadi, Z., & Amiri, P. (2020). Ab-Initio Study of Structural and Electronic Properties of HgTe in Different Phases. *Nashrieh Shimi va Mohandesi Shimi Iran*, 39(1), 53-63.
- [4] Hassan, F. E. H., Al Shafaay, B., Meradji, H., Ghemid, S., Belkhir, H., & Korek, M. (2011). Ab initio study of the fundamental properties of HgSe, HgTe and their Hg_{1-x}SexTe_{1-x} alloys. *Physica Scripta*, 84(6), 065601.
- [5] Tamer, M. (2016). Investigation of structural, electronic, elastic and optical properties of Cd_{1-x}Y_xZn_xHg_{1-x-y}Te alloys. *AIP Advances*, 6(6), 065115.
- [6] A. Ohtani, T. Seike, M. Motobayshi and A. Onodera, (1982), " The Electrical properties of and HgTe under very high pressure, " *J.Phys. Chem. Solids*, 43, 627-632.
- [7] Hao, A., Yang, X., Yu, R., Gao, C., Han, Y., Liu, R., & Tian, Y. (2009). Study of structural stabilities and optical properties of HgTe under high pressure. *Journal of physics and Chemistry of Solids*, 70(2), 433-438.
- [8] <http://www.quantum-espresso.org>.
- [9] Shaukat, A., Saeed, Y., Nazir, S., Ikram, N., & Tanveer, M. (2009). Ab initio study of structural, electronic and optical properties of Ca_{1-x}Sr_xS compounds. *Physica B: Condensed Matter*, 404(21), 3964-3972.
- [10] Wang, H., Zheng, Y., Cai, M. Q., Huang, H., & Chan, H. L. (2009). First-principles study on the electronic and optical properties of BiFeO₃. *Solid State Communications*, 149(15-16), 641-644.
- [11] S. W. Koch, "Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors," World Scientific Publishing Company Incorporated, 1994.

- [12] Guo, S. D., & Liu, B. G. (2012). Density-functional theory investigation of energy gaps and optical properties of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ and $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$. *Chinese Physics B*, 21(1), 017101.
- [13] Wright, N. G., McMahon, M. I., Nelmes, R. J., & San-Miguel, A. (1993). Crystal structure of the cinnabar phase of HgTe . *Physical Review B*, 48(17), 13111.
- [14] Ambrosch-Draxl, C., & Sofo, J. O. (2006). Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented planewave method. *Computer physics communications*, 175(1), 1-14.

Investigation of optical properties of HgTe using density functional theory

Hamdollah Salehi*¹, Z. Izadi

Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran

Submitted: 29 August 2022, Revised: 07 December 2022, Accepted: 16 December 2022

Abstract

In this paper, the optical properties of HgTe compounds such as dielectric function $\epsilon(\omega)$, Refractive coefficients, and extinction index using different approximations in three Zincblend, hexagonal and orthorhombic phases have been studied. The calculations have been performed by pseudopotential method in the framework density functional theory with GGA and LDA approximation by Quantum-Espresso package. The results obtained from the imaginary part of the dielectric function show the correspondence between the optical gap and the band gap. Also, the results of the optical parameters for the two Zincblend and hexagonal phases of the HgTe compound show that this composition has a refractive index of 3.413 in the Zincblend phase and 3.192 and 3.339 in the hexagonal phase, in direction x and z respectively. The reason for the higher refractive index in the Zincblend, than the hexagonal phase can be attributed to the quasi-metallic properties of this compound.

Keywords: dielectric function, HgTe, refraction index, extinction index, Quantum-Espresso.

*Corresponding author : Hamdollah Salehi

Address: Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University, of Ahvaz, Ahvaz, Iran

Tel: 09166182239

E-mail: salehi_h@scu.ac.ir