



محاسبه خواص نوری ترکیب فسفید ایندیم در حالت‌های حجمی و نانو ورقه

ظاهره داورزنی، علی بخشایشی*، ایمان مطیع، روح ا... تقوی مندی

گروه فیزیک، واحد مشهد، دانشگاه آزاد اسلامی، مشهد، ایران

تاریخ ثبت اولیه: ۱۴۰۲/۰۷/۰۵، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۴۰۲/۰۹/۲۴، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۴۰۲/۱۰/۱۶

چکیده

خواص نوری ترکیب فسفید ایندیم در حالت حجمی و نانو ورقه بر اساس رویکرد نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته Wien2k، محاسبه شده اند. مقادیری مانند بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، مقادیر ناهمسانگردی مواد، انتقال‌های نوری، انرژی‌های پلاسما و ضریب شکست محاسبه شده است. ضریب شکست و بازتابش نوری برای هر دو حالت حجمی و نانو ورقه محاسبه شده است. با تغییر ساختار در دو حالت حجمی و نانو ورقه، تفاوت معنی داری در قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک که مربوط به قطبش پذیری سیستم است در دو جهت عمود بر سطح و موازی با سطح مشاهده می‌شود. بین ریشه‌های بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک، هنگامی که تابع دی‌الکتریک منفی است، ترکیب مانند یک فلز رفتار می‌کند. تعداد و محل ریشه‌ها در حالت حجمی و نانو ورقه متفاوت است. در مورد نانو ورقه، انتقال‌های نوری افزایش یافته، اما شدت قله‌ها کاهش می‌یابد. انرژی پلاسما برای حالت حجمی در دو جهت عمود و موازی با سطح تفاوت چندانی ندارد، اما در مورد نانو ورقه به انرژی‌های پایین‌تر منتقل می‌شود و تفاوت محسوسی بین این دو جهت وجود دارد.

واژه‌های کلیدی: ساختار *InP*، نظریه تابعی چگالی، خواص نوری

۱. مقدمه

در چند دهه گذشته، با توسعه فناوری‌های پیشرفته ساخت میکرو/نانو یا ساختارهای جدید [۱-۳] دستگاه‌های نیمه‌رسانای مرکب مربوط به گروه III-V توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند. ترانزیستورهای با تحرک الکترون بالا ساخته شده است. سیستم‌های موج و حتی کاربردهای تراهرتز [۴-۶] مانند دفاع ملی، هوافضا و رادار ماهواره‌ای را هم می‌توان از کاربردهای این نوع نیمه رساناها

*معهده دار مکاتبات: علی بخشایشی

نشانی: گروه فیزیک، واحد مشهد، دانشگاه آزاد اسلامی، مشهد، ایران

پست الکترونیک: a_bakhshayeshi@yahoo.com

دانست. به عنوان یک ماده با سرعت بازترکیب سطحی پایین، خواص نوری ایندیوم فسفاید موضوع تحقیقات در جستجو برای کاربردهای دستگاه اپتوالکترونیکی پیشرفته است [۷-۸]. همچنین، ایندیوم فسفاید برای ساخت دستگاه‌های الکترونیکی مفید است که عملکرد خوبی را به عنوان دستگاه‌های اثر میدانی نشان می‌دهد [۹-۱۰]. علاوه بر این، نانوسیم‌های ایندیوم فسفاید در رویکردهای نظری و تجربی برای تحقیقات عمیق در مورد محصور شدن الکترون در ساختارهای با ابعاد کم استفاده می‌شوند [۱۱-۱۴].

اخیراً، یافته‌های نظری، تغییرات در طول عمر جذب و تابش نانو ساختارهای کریستالی ایندیوم فسفاید را مشخص می‌کنند [۱۵-۱۶]. نانوسیم‌های کریستالی ایندیوم فسفاید قابل اعتماد را می‌توان از چندین روش رشد به دست آورد [۱۷-۱۸] و کنترل پیشرفته این فرآیندها نشان داده است که ساختارهای امیدوارکننده جدیدی نیز می‌توانند ساخته شوند مانند نانوسیم‌هایی که فازهای ترکیبی روی و ورتزیت متناوب را نشان می‌دهند که شامل ساختارهای هسته-پوسته و ساختارهای ابرشبکه دوقلو [۱۹] هستند.

رشد نانوسیم‌های ایندیوم فسفاید انعطاف‌پذیری‌های بیشتری را در انتخاب بستر و خواص مکانیکی ارائه می‌دهد. نانوسیم‌های ایندیوم فسفاید را به یک گزینه امیدوارکننده برای دستگاه‌های الکترونیکی و فوتونی یکپارچه و همچنین برای توسعه انواع مختلف ساختارهای ناهمسان هستند [۲۰-۲۲]. تا به امروز، هزاران مورد دستگاه‌های مبتنی بر نانوسیم‌های ایندیوم فسفاید با موفقیت ساخته شده‌اند. از نمونه‌های آنها می‌توان به دیودهای ساطع‌کننده نور، آشکارسازهای نور، ترانزیستورهای اثر میدانی و سلول‌های خورشیدی اشاره کرد [۲۱-۲۰]. در مقایسه با خواص الکترونیکی، مطالعات بر روی خواص نوری غیرخطی نانوسیم‌های ایندیوم فسفاید نسبتاً نادر گزارش شده است [۲۳-۲۴].

ایندیوم فسفاید در ساخت دستگاه‌هایی مانند دیودها، لیزر، ترانزیستورها و تقویت‌کننده‌های نوری استفاده می‌شود. تحقق ترانزیستورهای دوقطبی ناهمگونی ایندیوم فسفاید یک موضوع مهم در توسعه سیستم‌های ارتباطی فیبر نوری پرسرعت (۲۰ تا ۴۰ گیگابیت بر ثانیه) است [۲۵]. در واقع، دیودهای لیزر و آشکارسازهای عکس ساخته شده از ایندیوم فسفاید با طول موج‌های مورد استفاده برای این نوع انتقال (۱/۳ تا ۱/۵۵ میکرومتر) سازگار هستند و به دست آوردن کیفیت خوب، امکان ادغام یکپارچه دستگاه‌های اپتوالکترونیکی مبتنی بر ایندیوم فسفاید را فراهم می‌کند.

در این مقاله خواص نوری ترکیب ایندیوم فسفاید در حالت‌های حجمی و نانورقه بر اساس رویکرد تئوری تابعی چگالی و استفاده از بسته Wien2k انجام شده است و از تقریب (TB-mBJ) برای پتانسیل تبادل همبستگی استفاده شده است. کمیتهایی نظیر بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، مقادیر ناهمسانگردی ماده، انتقال‌های نوری، انرژی‌های پلاسmoni، ضریب شکست و بازتابش نوری برای دو حالت حجمی و نانو ورقه محاسبه شده‌اند. با تغییر ساختار در دو حالت حجمی و نانو ورقه، اختلاف چشمگیری در هر کدام از کمیت‌های ذکر شده برای دو راستای عمود و موازی با سطح مشاهده می‌شود.

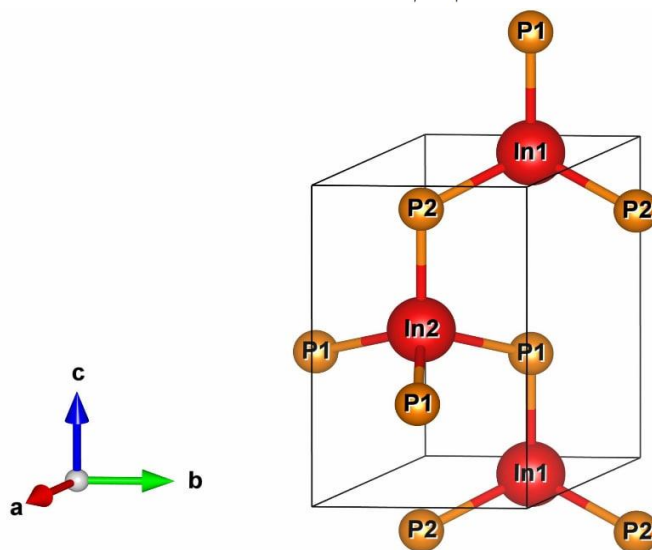
۲. محاسبات

۲-۱. محاسبه خواص بهینه شده InP در دو حالت حجمی و نانورقه تک لایه

این قسمت شامل محاسبات مربوط به خواص ساختاری InP در دو حالت حجمی و تک لایه است. خواصی مانند بلور شناسی، ثابتهای شبکه‌ی بهینه شده، پارامتر داخلی شبکه، طول پیوندهای In-P زاویه های پیوندی، حجم بهینه و مدول حجمی هستند. هنگام بدست آوردن این خواص لازم است تا معادله‌ی حالت سیستم برای ساختار معلوم باشد. معادله‌ی حالت سیستم، معادله‌ای است که تغییرات انرژی درونی سیستم را نسبت به تغییرات حجم (V) و یا فشار (P) مشخص می کند. یکی از انواع معادله های حالت برای سیستم معادله بیرچ-مورنگان است. با توجه به این معادله می توان خواص ساختاری نظیر مدول حجمی و مشتق مدول حجمی را بدست آوریم [۲۶].

$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0 B_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^3 B_0' + \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^2 \left[6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \right] \right\} \quad (1)$$

در معادله (۱) به ترتیب V_0 حجم تعادلی، V حجم نمونه، B_0 مدول حجمی و B_0' مشتق مدول حجمی می باشند. از آنجایی که خواص فیزیکی ساختار InP در حالت تک لایه با حالت حجمی آن متفاوت است، برای شروع کار روش بدست آوردن ساختار بهینه در حالت حجمی InP توضیح داده می شود. ترکیب ساختار InP در فاز وورتزایت، در شکل ۱ نشان داده شده است. ساختار ترکیب InP در فاز وورتزایت، یک ساختار هگزاگونال با پارامترهای شبکه‌ای تجربی [۲۷] $a = b = 4.204 \text{ \AA}$ و $c = 6.899 \text{ \AA}$ و نسبت $c/a = 1.644$ است که مقدار پارامتر داخلی در آن برابر با $u = 0.374$ است. اتم‌های In و P بر اساس نتایج تجربی در مکان‌های $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0)$ و $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, u)$ قرار داده شده اند.



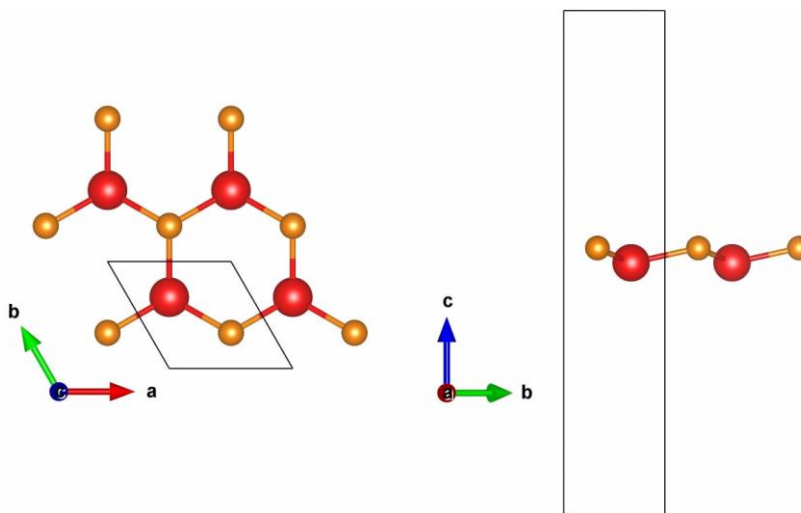
شکل ۱. ساختار ترکیب InP در فاز وورتزایت

از آنجایی که در ساختار هگزاگونال، بر اساس پارامترهای شبکه a و c دو پارامتر آزاد وجود دارد، نمی‌توانیم تنها بر اساس کمینه کردن حجم نمونه، حجم بهینه و پارامترهای شبکه‌ی بهینه را محاسبه کنیم (یک معادله و دو مجهول داریم). بسته‌ی Wien2k با ثابت نگه داشتن حجم تجربی نمونه، انرژی درونی سیستم را بر حسب تغییرات درصد c/a کمینه می‌کند. بر اساس محاسبات انجام شده مقادیرهای بهینه شده در جدول ۱ خلاصه و با نتایج نظری و تجربی مقایسه شده‌اند. مقدار محاسبه شده برای پارامترهای شبکه در توافق خوبی با نتایج نظری و تجربی است. پس از بهینه سازی ثوابت شبکه، مقدار بهینه شده‌ی پارامتر داخلی u با استفاده از ثوابت شبکه محاسبه شده است. برای این هدف از روش کمینه کردن نیروهای وارده بر سیستم استفاده می‌کنیم. مقدار بهینه شده u در جدول ۱ بیان شده است. مقدار بدست آمده با نتایج نظری و تجربی در دسترس، در تطابق بسیار خوبی قرار دارد.

جدول ۱. مقادیر بهینه شده ثوابت شبکه، مدول حجمی، حجم بهینه و نسبت c/a بهینه در InP حجمی

پارامتر محاسبه	$a_o (A^\circ)$	$c_o (A^\circ)$	c_o/a_o	B(GPa)	$V_o (au)^3$	$E_o (Ry)$	u
این مقاله	۴/۱۵۸۸	۶/۸۲۰۵	۱/۶۴	۶۷/۵۸	۶۸۹/۴۵۲۵	-۲۴۸۹۷/۸۵۹۲	۰/۳۷۵
مرجع نظری [۲۸]	۴/۲۰۴	۶/۸۹۹	۱/۶۴۱	-	-	-	۰/۳۷۴
مرجع تجربی [۲۷]	۴/۱۵۰	۶/۷۷۷	۱/۶۳۳	-	-	-	۰/۳۷۵

در حالت نانو ورقه‌ی تک لایه‌ی InP، ابتدا باید ساختار مناسب برای محاسبات را از روی ساختار بهینه شده‌ی حجمی بدست آوریم. شکل ۲ ساختار تک لایه‌ی نانو ورقه‌ی InP را نشان می‌دهد.



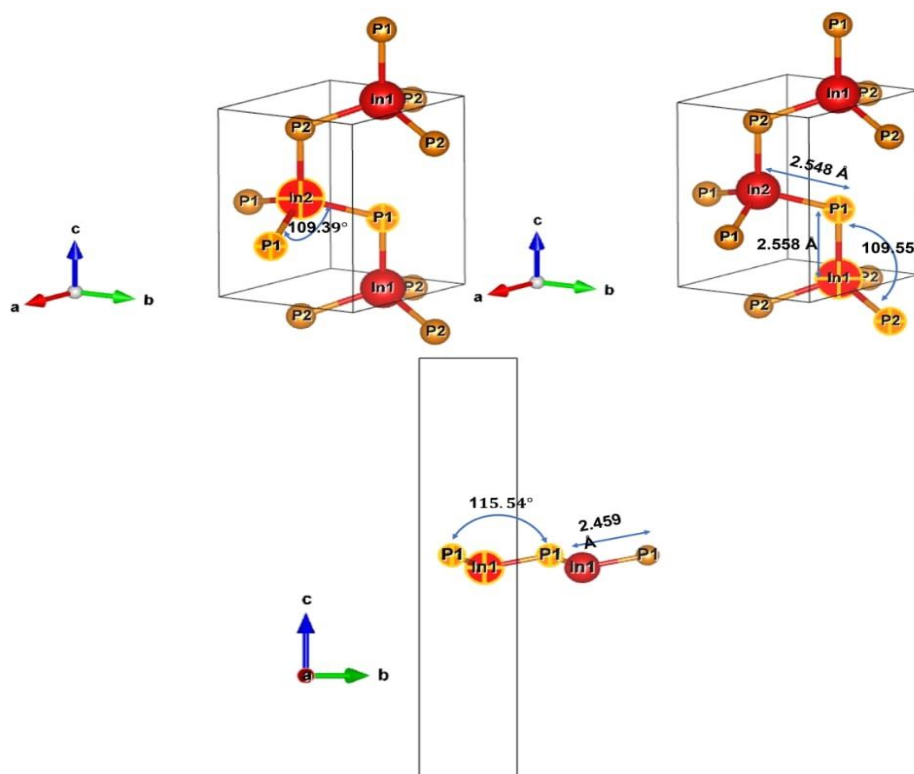
شکل ۲. ساختار نانو ورقه‌ی تک لایه InP.

برای ایزوله شدن و تضعیف بر همکنش بین لایه‌های InP با صفحات همسایه در راستای محور Z (محور C بلور شناسی) حدود ۲۰ آنگسترم خلاء در نظر می‌گیریم که بر اساس کارهای نظری انجام شده برای دیگر نانورقه‌های تک لایه، مقدار اولیه‌ی مناسبی برای کمینه کردن بر همکنش‌های بین لایه‌های اتمی همسایه است. در نانورقه تک لایه‌ی InP اتم‌های In و P در ساختار حجمی، درون یک صفحه x-y قرار ندارند و بین اتم‌های In و اتم‌های P در راستای z، یک فاصله‌ی Δ وجود دارد. در ابتدا ما این مقدار Δ را بر حسب ساختار حجمی در حدود $\Delta = 0.582 \text{ \AA}$ در نظر گرفته‌ایم. مقدار بهینه شده بعداً توسط کمینه کردن نیروها محاسبه خواهد شد.

با همان روشی که برای ساختار حجمی داشتیم، در حالت نانو ورقه تک لایه نیز از روش بهینه سازی دو بعدی برای بدست آوردن پارامترهای شبکه بهینه استفاده کردیم. در مقایسه با حالت حجمی مشاهده می‌کنیم که تغییرات قابل توجهی در طول پیوند In-P و زاویه پیوندی In-P-In در حالت نانورقه نسبت به حالت حجمی بوجود آمده است. در صورتی که مقدار بهینه شبکه‌ی a_0 تفاوت چندانی با حالت حجمی ندارد. علت را می‌توان در تغییر نوع هیبریداسیون بین اتم‌های In-P و همچنین تغییر ساختار فضایی شبکه بلوری جستجو کرد. شکل ۳ طول‌های پیوندی و زوایای پیوندی در ساختار InP در دو حالت حجمی و تک لایه را نشان می‌دهد. مقدار پارامتر Δ که به پارامتر قلاب شدگی معروف است با انجام عملیات واهلش نیرو در ساختار InP تک لایه محاسبه می‌شود. بر اساس مقادیر بهینه شده در ساختار حجمی InP و نانورقه‌ی تک لایه InP خواص دیگر فیزیکی این ساختارها محاسبه خواهند شد.

جدول ۲. ثابت شبکه بهینه، فاصله عمودی اتم فسفر از اتم ایندیوم، طول پیوند In-P، زاویه پیوندی In-P-In و گروه فضایی در ساختار حجمی و نانورقه تک لایه InP

گروه فضایی	زاویه پیوندی In-p-In	طول پیوند In-p (\AA)	$\Delta(\text{\AA}^\circ)$	$c_0 (\text{\AA}^\circ)$	$a_0 (\text{\AA}^\circ)$	کمیت
$P6_3mc$	109.394° و 109.549°	۲/۵۴۸	۰/۸۵۲	۶/۸۲۰۵	۴/۱۵۸۸	InP حجمی
$P3m1$	115.543°	۲/۴۵۹	۰/۵۲۷	۱۸/۱۵۱	۴/۱۶۰۲	InP نانورقه
-	115.8°	۲/۴۶	۰/۵۱	-	۴/۱۷	نانورقه (نظری) [۲۹]



شکل ۳. طول پیوند و زوایای پیوندی در InP

۲-۲. محاسبه خصوصیات نوری InP در حالت حجمی و نانورقه تک لایه

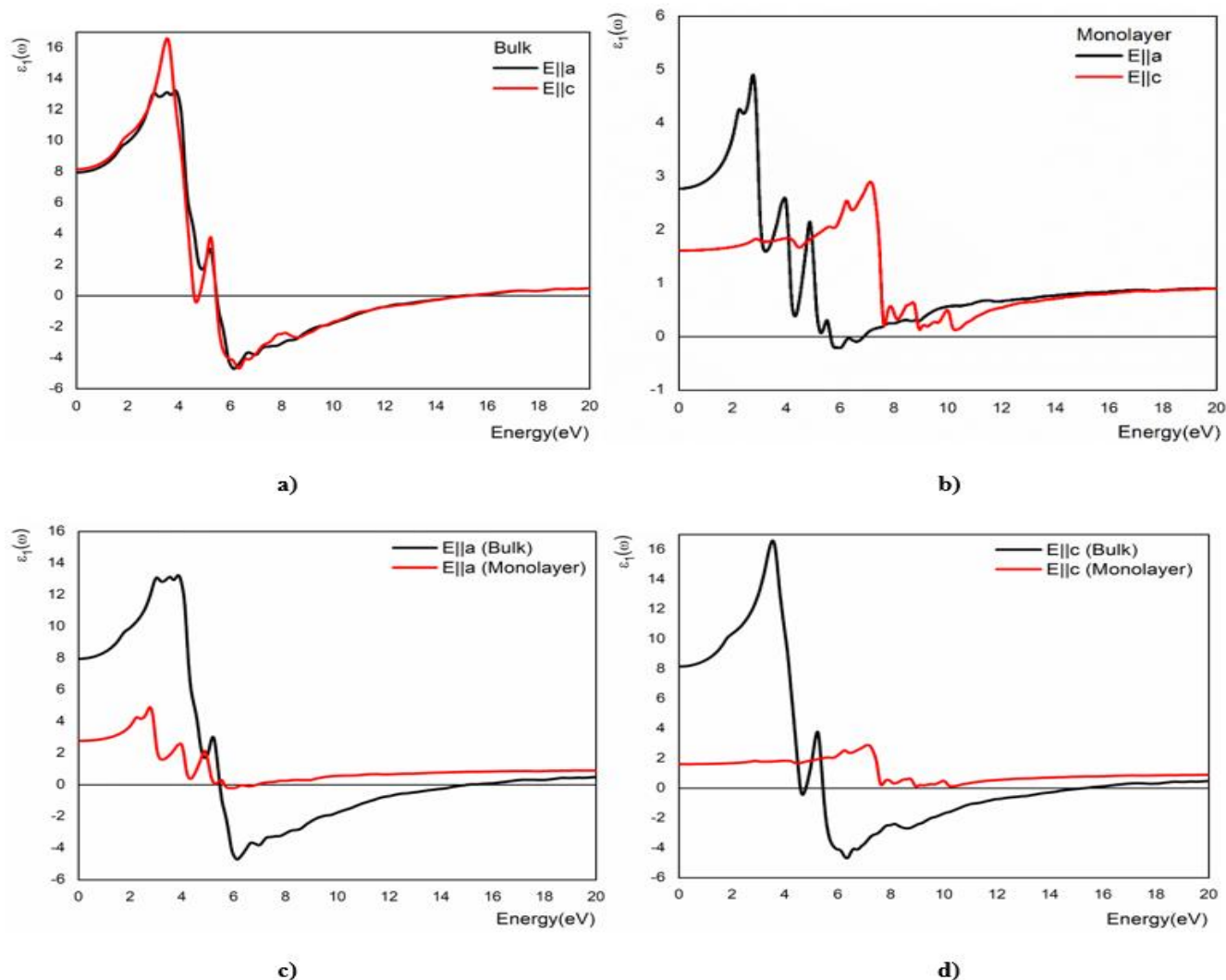
در این بخش از محاسبات، نتایج مربوط به خواص نوری ترکیب InP در حالت حجمی و نانورقه ارائه شده است. این محاسبات شامل قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک، قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک، تابع اتلاف انرژی، ضریب شکست و بازتابش نوری است.

۲-۲-۱. قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک ساختار InP

شکل ۴ تغییرات قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک InP را برای دو حالت حجمی و نانورقه تک لایه، بر حسب انرژی فوتون فرودی، در حالت تابش عمودی نشان می‌دهد. در مورد قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک سه نکته کلی وجود دارند: تابع دی‌الکتریک استاتیک، (صفرهای) تابع دی‌الکتریک و ناهمسانگردی تابع دی‌الکتریک است. هر کدام از این موارد را در شکل ۴ مورد بررسی قرار می‌دهیم.

مقدار تابع دی‌الکتریک در انرژی‌های بسیار پایین (طول موج‌های بلند) تابع دی‌الکتریک استاتیک نامیده می‌شود. مقدار تابع دی‌الکتریک استاتیک در جدول ۳ خلاصه شده است. مشاهده می‌شود که مقدار تابع دی‌الکتریک استاتیک در حالت حجمی اختلاف چندانی ندارند و البته مقدار تابع دی‌الکتریک استاتیک در جهت c (میدان الکتریکی موازی محور c بلور شناسی) اندکی بزرگتر است. با تغییر ساختار، اما اختلاف چشمگیری هم در اندازه و هم اختلاف تابع دی‌الکتریک استاتیک رخ می‌دهد. بر اساس شکل ۴ و

جدول ۳، در نانو ورقه تک لایه InP مقدار تابع دی‌الکتریک استاتیک کاهش محسوس داشته است. علاوه بر این مقدار تابع دی‌الکتریک در راستای a (میدان الکتریکی موازی با محور a بلور شناسی) از راستای c بیشتر شده است و اختلاف قابل توجه است.



شکل ۴. تغییرات قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک ترکیب InP در دو حالت حجمی و نانورقه تک لایه

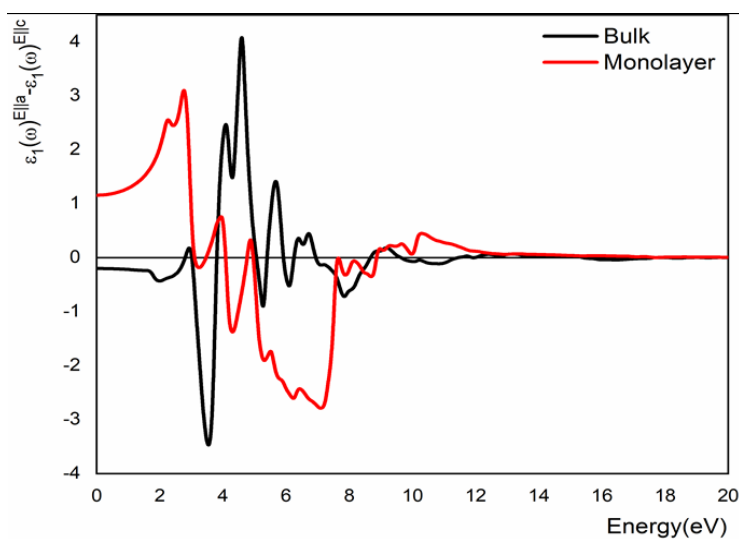
از آنجایی که قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک به قطبش پذیری سیستم مربوط می‌شود و با توجه به اینکه در حالت نانورقه از چگالی اتم‌های حجمی کاسته می‌شود و سیستم ایزوله است و در راستای عمود بر صفحه‌ی نانورقه بر همکنش با نانورقه‌ی همسایه تضعیف شده است، بنابراین می‌توانیم این کاهش و تغییر چشمگیر را به این موارد نسبت دهیم. با افزایش انرژی در حالت حجمی، مقادیر تابع دی‌الکتریک افزایش می‌یابد و به مقدار بیشینه می‌رسد و سپس شدیداً افت می‌کند و به مقادیر صفر و منفی می‌رسد. ریشه‌های قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در جدول ۳ آورده شده‌اند. ریشه‌های قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک مفهوم فیزیکی را مشخص می‌کنند. در بین ریشه‌های قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک که تابع دی‌الکتریک منفی است، ترکیب مانند یک فلز رفتار می‌کند. در این نواحی، فرآیندهای جذب و بازتابش غالب و امواج الکترومغناطیس میرا می‌شوند. سه نکته در مورد ریشه‌های تابع

دی الکتریک در حالت حجمی و نانورقه وجود دارد: اول اینکه در حالت حجمی در راستای c، چهار ریشه وجود دارد در صورتی که در راستای a، تنها دو ریشه مشاهده می‌شود. بنابراین فرایندهای جذب در راستای c در مناطق بیشتری رخ دهد. دوم اینکه برای نانورقه InP، در راستای c، تابع دی الکتریک منفی نمی‌شود و ریشه‌ای وجود ندارد. بنابراین در این راستا، نانورقه InP تقریباً شفاف است. نکته سوم این است که بازه انرژی که در راستای a برای نانورقه، تابع دی الکتریک منفی می‌شود بسیار کوچکتر از حالت حجمی است.

جدول ۳. تابع دی الکتریک استاتیک ϵ_0 ، ریشه‌های قسمت حقیقی تابع دی الکتریک

و بازه انرژی ممنوعه برای انتشار امواج الکترومغناطیس

InP	راستا	ϵ_0	$E_1(eV)$	$E_2(eV)$	$\Delta E(eV)$	$E_3(eV)$	$E_4(eV)$	$\Delta E(eV)$
حجمی	E a	۷/۹۵	۵/۴۵	۱۵/۰۳	۹/۵۸	-	-	-
	E c	۸/۱۵	۴/۵۸	۴/۷۷	۰/۱۷	۵/۴۳	۱۵/۲۸	۹/۸۵
نانورقه تک لایه	E a	۲/۷۷	۵/۶۵	۶/۹۰	۱/۲۵	-	-	-
	E c	۱/۶۱	-	-	-	-	-	-



شکل ۵. تغییرات ناهمسانگردی در تابع دی الکتریک ترکیب InP در دو حالت حجمی و تک لایه

در شکل ۴ نیز توابع دی الکتریک در راستای a و c برای دو حالت حجمی و نانورقه مقایسه شده است. ملاحظه می‌شود که تغییرات در هر دو راستای نسبت به یکدیگر زیاد هستند. برای بررسی بهتر ناهمسانگردی تابع دی الکتریک برای دو حالت حجمی و نانورقه در شکل ۵ رسم شده است (ناهمسانگردی اختلافی است که بین توابع دی الکتریک در دو راستای a و c وجود دارد). بر اساس شکل

۵ برای حالت حجمی InP در انرژی پایین تا حدود ۴eV ناهمسانگردی کم است و بر خلاف آن ناهمسانگردی در نانورقه بیشتر است. با افزایش انرژی فوتون فرودی ناهمسانگردی در حالت حجمی زیاد می‌شود و تقریباً می‌توان گفت که رفتار ناهمسانگردی در حالت حجمی و نانورقه عکس یکدیگرند. از حدود ۱۳eV به بعد ناهمسانگردی در هر دو حالت کاسته شده و به سمت صفر میل می‌کند.

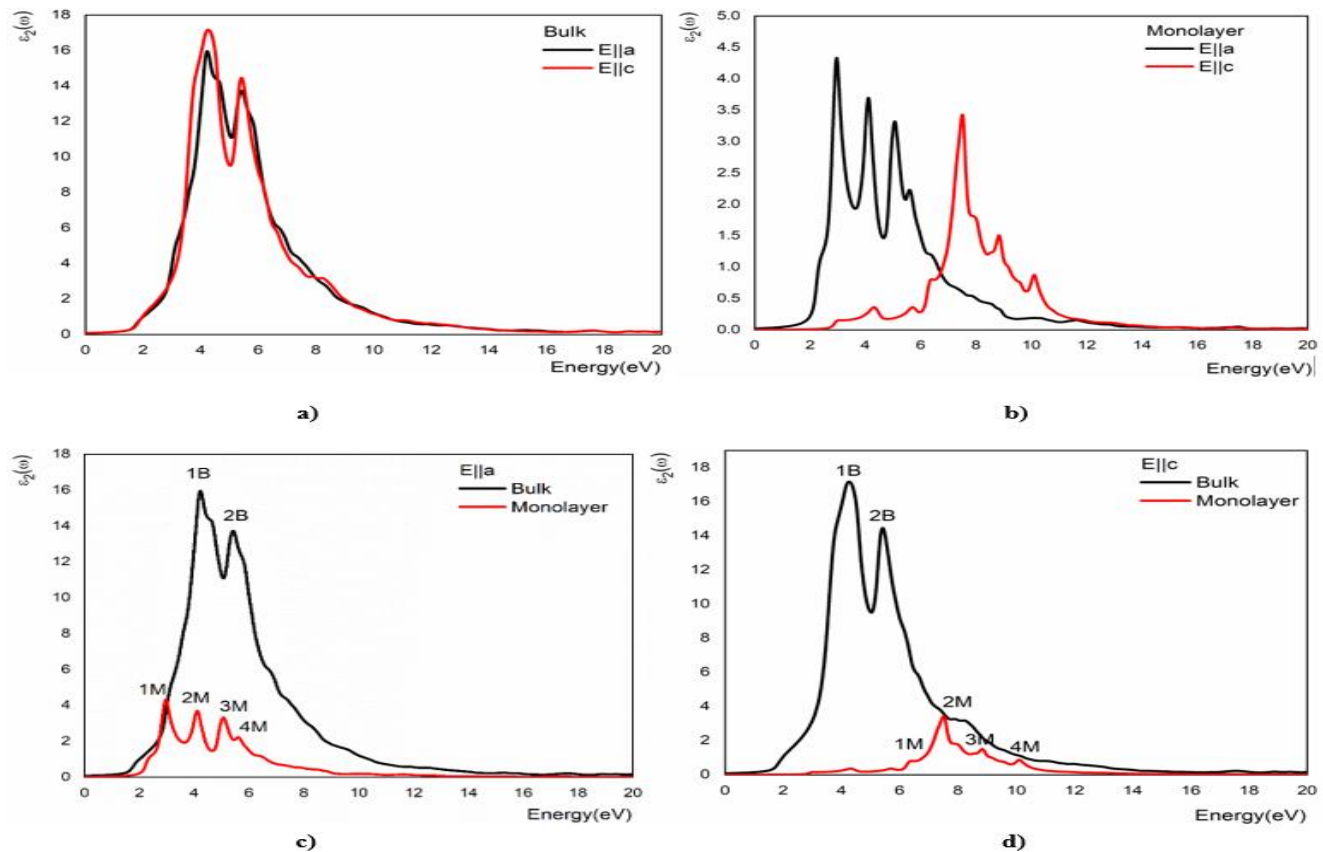
۲-۲-۲. قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک ساختار InP

همانطور که می‌دانیم، قسمت‌های موهومی کمیت‌های فیزیکی به پدیده‌های جذب و اتلاف مربوط می‌شوند. در شکل ۶ نیز قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک InP در دو حالت حجمی و نانورقه یک لایه، بر حسب انرژی فوتون فرودی در تابش نرمال نشان داده شده است. در مورد قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک سه نکته مشخص است. نکته اول در مورد لبه جذب، نکته دوم قله‌های برجسته در تابع و نکته سوم شدت قله‌ها می‌باشد. از شکل ۶ کاملاً مشخص است که با تغییر ساختار از حالت حجمی به نانورقه، تغییرات قابل توجهی در قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک مشاهده می‌شود. همانطور که در شکل‌ها مشخص شده است در تمامی ساختارها، قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک تا یک مقدار معینی در انرژی‌های پایین، صفر و یا کم مقدار است. در جایی که قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک افزایش می‌یابد، بعنوان لبه جذب در نظر گرفته می‌شود.

لبه جذب (E_o) برای هر دو ساختار در جدول ۴ خلاصه شده است. بعد از لبه جذب قله‌های برجسته‌ای در قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک مشاهده می‌شود. این قله‌ها معرف انتقال‌های نوری است (الکترون‌های زیر تراز فرمی با میدان الکتریکی فوتون‌های فرودی برهمکنش می‌کنند و با کسب انرژی لازم به حالت‌های خالی در بالای تراز فرمی منتقل می‌شوند). قله‌های برجسته برای هر ساختار و در هر راستا در جدول ۴ خلاصه شده است.

جدول ۴. قله‌های برجسته و اصلی در قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک و انرژی پلاسمون‌های حجمی در InP

ساختار	راستا	$E_o(eV)$	$E_1(eV)$	$E_2(eV)$	$E_3(eV)$	$E_4(eV)$	$E_p(eV)$
حجمی (B)	E a	~ ۱/۴۵	۴/۲۳	۵/۴۳	-	-	۱۵/۹۹
	E c	~ ۱/۴۵	۴/۲۶	۵/۴۳			۱۵/۴۴
نانورقه تک لایه (M)	E a	~ ۲/۰	۲/۹۵	۴/۱۲	۵/۰۷	۵/۵۹	۸/۹۴
	E c	~ ۲/۷	۶/۴۰	۷/۵۲	۸/۸۳	۱۰/۱۱	۱۰/۵۷

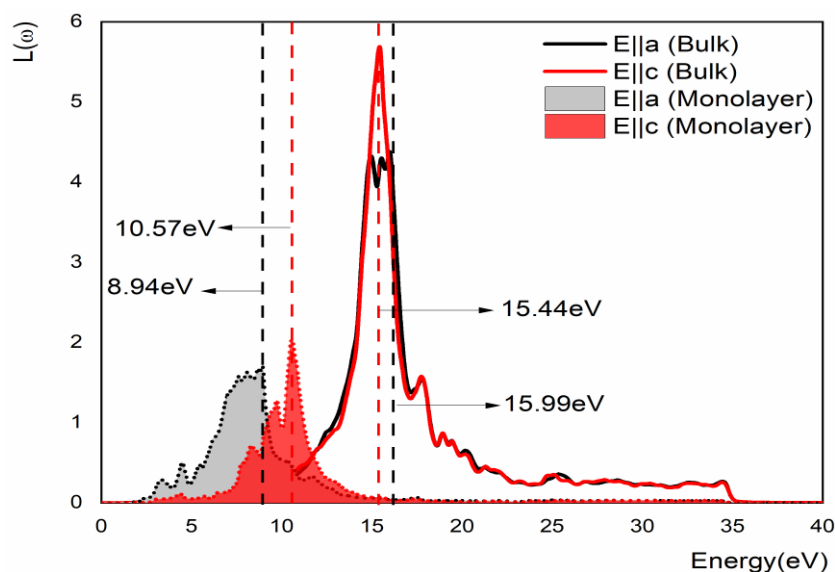


شکل ۶. تغییرات قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک InP در دو حالت حجمی و نانورقه تک لایه

بر اساس جدول ۴ می‌بینیم که در حالت نانورقه انتقال‌های نوری بیشتر شده است ولی از طرفی شدت قله‌ها کاسته شده است. علاوه بر این راستای c انتقال‌ها بصورت ملموسی به سمت انرژی‌های بالاتر سوق پیدا کرده‌اند. علت کاهش شدت بدلیل ضخامت بسیار کم نانورقه تک لایه نسبت به حالت حجمی است.

۲-۳-۲. تابع اتلاف انرژی ساختار InP

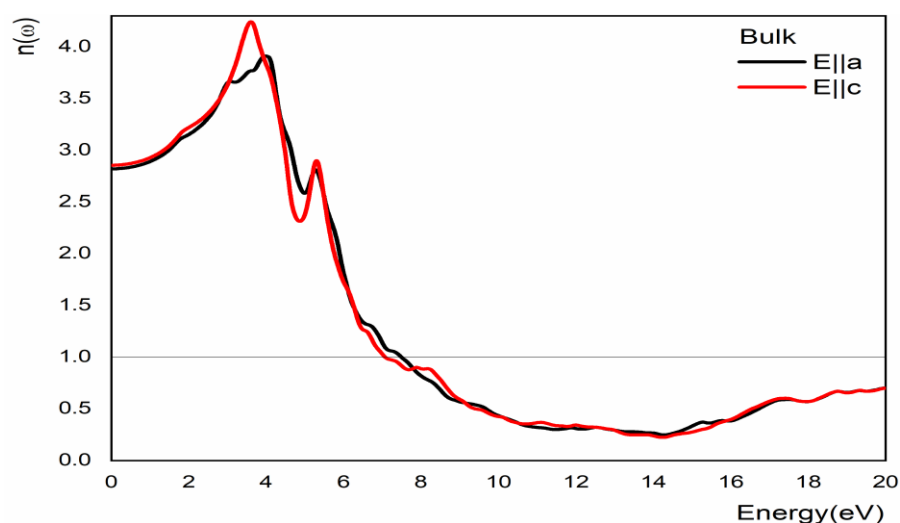
شکل ۷ تغییرات تابع اتلاف انرژی ساختار InP را در دو حالت حجمی و تک لایه بر حسب انرژی فوتون فرودی، در تابش نرمال را مشخص کرده است. می‌دانیم که بزرگترین قله در تابع اتلاف انرژی پلاسمونی حجمی ترکیب را تعیین می‌کند. انرژی پلاسمونی حجمی، انرژی است که در آن الکترون‌ها در ناحیه ظرفیت بصورت دسته جمعی نوسان می‌کنند. این انرژی‌های پلاسمونی حجمی در جدول ۵ خلاصه شده‌اند. با توجه به شکل نتیجه می‌گیریم که انرژی پلاسمونی برای حالت حجمی در دو راستای a و c اختلاف چندانی ندارند ولی در حالت نانورقه، این انرژی پلاسمونی به خوبی به سمت انرژی‌های پایینتر سوق یافته‌اند همچنین اختلاف محسوسی بین آن دو در راستای a و c وجود دارد. از این مشخصه می‌توان برای تعیین ضخامت نانورقه‌های چند لایه و لایه نازک استفاده کرد.



شکل ۷. تابع اتلاف انرژی فوتون فرودی در دو حالت حجمی و نانورقه تک لایه

۲-۲-۴. ضریب شکست ساختار InP

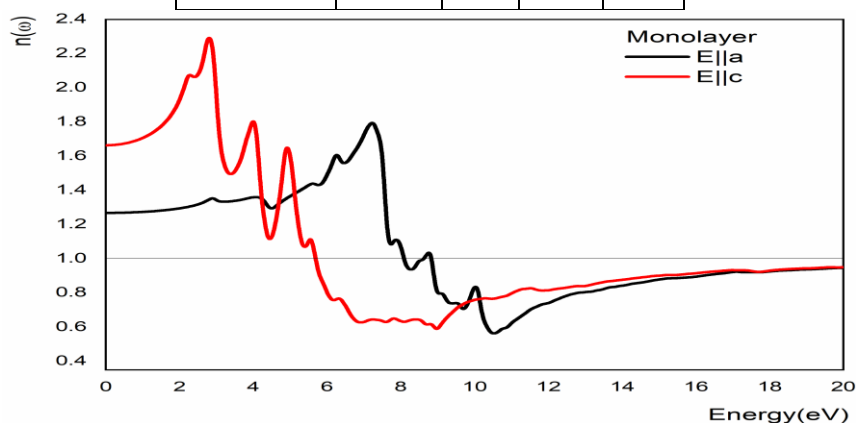
تغییرات ضریب شکست InP بر حسب انرژی فوتون فرودی در تابش نرمال، برای حالت حجمی و نانورقه تک لایه در شکل-های ۸ و ۹ نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که تغییر ساختار، اثر قابل توجهی بر ضریب شکست InP داشته است. همانند قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک، برای ضریب شکست نیز ضریب شکست استاتیک تعریف می‌شود. مقدار ضریب شکست در انرژی‌های بسیار پایین (طول موج بلند)، ضریب شکست استاتیک نامیده می‌شود. مقادیر ضریب شکست استاتیک به همراه مقادیر پیشینه و کمینه ضریب شکست و انرژی‌هایی که این اکستریم‌ها رخ می‌دهد در جدول ۵ خلاصه شده است. مشاهده می‌شود که در حالت حجمی میزان ضریب شکست استاتیک در دو راستای a و c نزدیک به هم است ولی در نانورقه‌ی InP مقدار ضریب شکست علاوه بر این که در دو راستا کاهش چشمگیری دارند، اختلاف قابل توجهی نیز در دو راستا با هم دارند.



شکل ۸. تغییرات ضریب شکست ساختار InP در حالت حجمی بر حسب انرژی فوتون فرودی

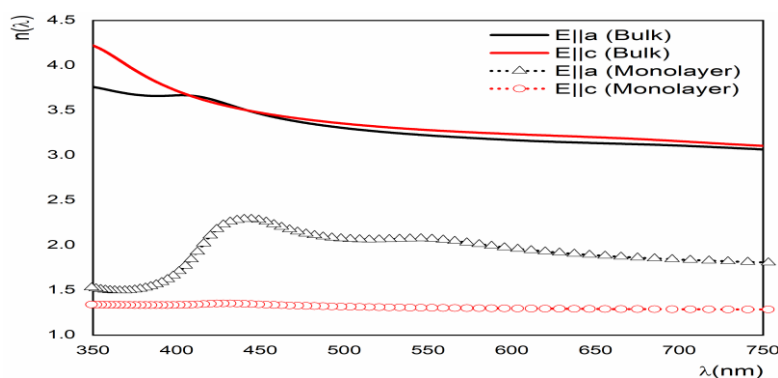
جدول ۵. ضریب شکست استاتیکی، ضریب شکست کمینه و بیشینه

InP	راستا	n_0	n_{max}	n_{min}
حجمی	E a	۲/۸۲	۳/۹۱	۰/۲۵
	E c	۲/۸۵	۴/۲۴	۰/۲۲
نانورقه تک لایه	E a	۱/۶۶	۲/۲۹	۰/۵۹
	E c	۱/۲۷	۱/۷۹	۰/۵۶



شکل ۹. تغییرات ضریب شکست ساختار InP در حالت نانورقه تک لایه بر حسب انرژی فوتون فرودی

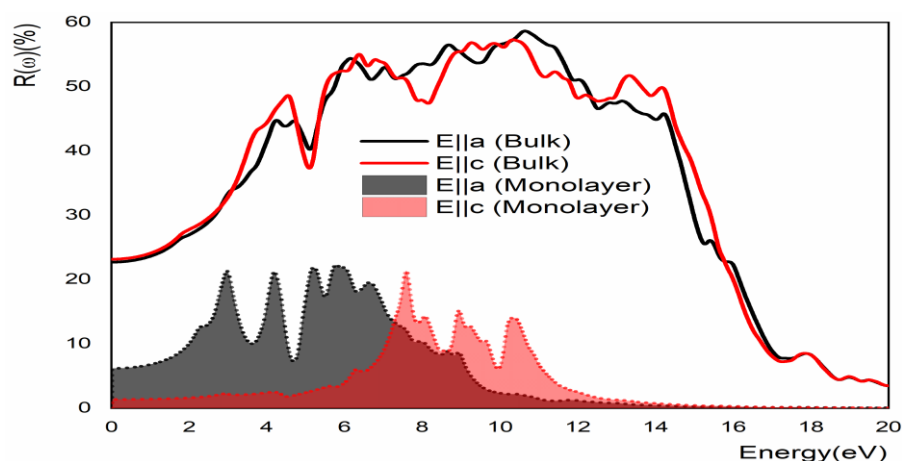
شکل ۱۰ تغییرات ضریب شکست InP در دو حالت در طول موج مرئی بررسی شده است. مشاهده می‌شود که رفتار در دو ساختار متفاوت است. برای InP در حالت حجمی، تقریباً در هر دو جهت با افزایش طول موج ضریب شکست کاهش می‌یابد و اختلاف کمی بین ضریب شکست در دو راستا وجود دارد. در حالی که در حالت نانورقه ضریب شکست در راستای a به صورت صعودی و نزولی است و در حالی که در راستای c تقریباً بصورت یکنواخت و نزولی است. علاوه بر این اختلاف زیادی بین ضرایب شکست در دو راستا وجود دارد.



شکل ۱۰. تغییرات ضریب شکست InP در دو حالت حجمی و نانورقه تک لایه در طول موج مرئی

۲-۵. بازتابش نوری ساختار InP در حالت حجمی و نانورقه تک لایه

در شکل ۱۱ تغییرات بازتابش نوری ساختار InP در دو حالت حجمی و نانورقه تک لایه در دو راستای a و c بر حسب انرژی فوتون فرودی، در تابش نرمال نشان داده شده است که در آن میزان بازتابش نوری بر حسب درصد مشخص شده است. مشاهده می‌شود که تغییر ساختار از حالت حجمی به نانورقه تک لایه تاثیر قابل توجهی در بازتابش نوری داشته است. بعنوان نمونه، بازتابش نوری در انرژی‌های پایین (R_c) برای حالت حجمی در راستای a و c به ترتیب ۲۴/۷٪ و ۲۳/۱۶٪ بدست آمده است. در حالی که برای نانورقه تک لایه InP این مقادیر به ترتیب ۶/۲٪ و ۱/۴٪ بدست آمده است. بعبارت دیگر به شدت از بازتابش نوری در این نانورقه کاسته شده است و تفاوت قابل توجهی بین بازتابش نوری در دو راستا مشاهده می‌شود.



شکل ۱۱. تغییرات بازتابش نوری در ساختار InP در دو حالت حجمی و نانورقه تک لایه

۴. نتیجه گیری

محاسبات نشان می‌دهند که با تغییر ساختار ایندیم-فسفاید در دو حالت حجمی و نانورقه، اختلاف چشمگیری در قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در دو راستای عمود و موازی با سطح مشاهده شد. در بین ریشه‌های قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک که تابع دی‌الکتریک منفی است، ترکیب مانند یک فلز رفتار می‌کند و تعداد و محل ریشه‌ها در دو حالت حجمی و نانورقه متفاوت بودند. رفتار ناهمسانگردی در حالت حجمی و نانورقه عکس یکدیگر بوده و از حدود 13 eV به بعد ناهمسانگردی در هر دو حالت کاسته شده و به سمت صفر میل می‌کند. در حالت نانورقه انتقال‌های نوری بیشتر شده ولی از شدت قله‌ها کاسته شده است. انرژی پلاسمونی برای حالت حجمی در دو راستای عمود و موازی با سطح اختلاف چندانی ندارند ولی در حالت نانورقه، بسمت انرژی‌های پایینتر سوق یافته و اختلاف محسوسی بین دو راستا وجود دارد. در حالت حجمی ضریب شکست در هر دو راستا با افزایش طول موج کاهش می‌یابد و اختلاف کمی دارند. در حالت نانورقه ضریب شکست در راستای موازی با سطح به صورت صعودی و نزولی بوده و در راستای عمود بر سطح نزولی است. با تغییر ساختار از بازتابش نوری در حالت نانورقه کاسته شده است. بنابراین می‌توان گفت که نسبت به حالت حجمی، نانورقه بسیار شفاف‌تر است.

۵. مراجع

- [1] Shanguan, L., Ma, L., Li, M., Peng, W., Zhong, Y., Su, Y., Duan, Z., (2018). Study on the shrinkage behavior and conductivity of silver microwires during electrostatic field assisted sintering, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 51, 185603.
- [2] Wang W., Su Y. F., Liu C. R., Li D. X., Wang P., Duan Z. Y., (2015) The Morphology of Patterning with Pseudoplastic Metal Nanoparticle Fluids during Heat Treatment, *Chinese Physics Letters*, 32, 128102.
- [3] Ma L. H., Han W. H., Zhao X. S., Guo Y. Y., Dou Y. M., Yang F. H., (2018). Influence of dopant concentration on electrical quantum transport behaviors in junctionless nanowire transistors, *Chinese Physics B*, 27, 088106.
- [4] Ajayan J., Nirmal D., (2016) 20 nm high performance enhancement mode InP HEMT with heavily doped S/D regions for future THz applications, *Superlattices and Microstructures*, 100, 526-534.
- [5] Jo H. B., Baek J. M., Yun D. Y., Son S. W., Lee J. H., Kim T. W., Kim D. H., Tsutsumi T., Sugiyama H., Matsuzaki H., (2018). $L_g=87$ nm InAlAs/InGaAs High-Electron- Mobility Transistors With a gm max of 3 S/mm and f_T of 559, *IEEE Electron Device Letters*, 39, 1640-1643.
- [6] Takahashi T., Kawano Y., Makiyama K., Shiba S., Sato M., Nakasha Y., Hara N., (2016), Enhancement of f_{max} to 910 GHz by Adopting Asymmetric Gate Recess and Double-Side-Doped Structure in 75-nm-Gate InAlAs/InGaAs HEM, 64, 89-95.
- [7] K. Li, H. Sun, F. Ren, K.W. Ng, T.-T.D. Tran, R. Chen, C.J. Chang-Hasnain, (2014), Tailoring the optical characteristics of microsized InP nanoneedles directly grown on silicon, *Nano letters*, 14, 183-190.
- [8] Cui Y., Wang J., Plissard S. R., Cavalli A., Vu T. T., Van Veldhoven R. P., Gao L., Trainor M., Verheijen M. A., Haverkort J. E., (2013), Efficiency enhancement of InP nanowire solar cells by surface cleaning, *Nano letters*, 13, 4113-4117.
- [9] Kim H., Jung C. Y., Kim S. H., Cho Y., Kim D. W., (2016), A comparative electrical transport study on Cu/n-type InP Schottky diode measured at 300 and 100 K, *Current Applied Physics*, 16, 37-44.
- [10] Hui A.T., Wang F., Han N., Yip S., Xiu F., Hou J. J., Yen Y. T., Hung T., Chueh Y. L., Ho J.C., (2012), High-performance indium phosphide nanowires synthesized on amorphous substrates: from formation mechanism to optical and electrical transport measurements, *Journal of Materials Chemistry*, 22, 10704-10708.
- [11] Rebello Sousa Dias M., Picinin A., Lopez-Richard V., Ulloa S., Castelano L., Rino J., Marques G., (2012) Tuning hole mobility in InP nanowires, *Applied Physics Letters*, 101, 182104.
- [12] Tsuzuki H., Cesar D.F., Rebello de Sousa Dias M., Castelano L.K., Lopez-Richard V., Rino J.P., Marques G.E., (2011), Tailoring electronic transparency of twin-plane 1D superlattices, *ACS nano*, 5, 5519-5525.
- [13] Kunets V.P., Teodoro M., Dorogan V., Lytvyn P., Tarasov G., Sleezer R., Ware M., Mazur Y.I., Krasinski J., Salamo G., (2010), Interface roughness scattering in laterally coupled InGaAs quantum wires, *Applied Physics Letters*, 97, 262103.
- [14] Kunets V.P., Prosandeev S., Mazur Y.I., Ware M., Teodoro M., Dorogan V., Lytvyn P., Salamo G., (2011), Isotropic Hall effect and "freeze-in" of carriers in the InGaAs self-assembled quantum wires, *Journal of Applied Physics*, 110, 083714.
- [15] Zhang L., Luo J. W., Zunger A., Akopian N., Zwiller V., Harmand J. C., (2010), Wide InP nanowires with wurtzite/zincblende superlattice segments are type-II whereas narrower nanowires become type-I: an atomistic pseudopotential calculation, *Nano letters*, 10, 4055-4060.
- [16] Kamimura H., Gouveia R., Carrocine S., Souza L., Rodrigues A., Teodoro M., Marques G., Leite E., Chiquito A., (2016), Optical and transport properties correlation driven by amorphous/crystalline disorder in InP nanowires, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 28 475303.
- [17] Patzke G.R., Kontic R., Shiolashvili Z., Makhatadze N., Jishiashvili D., (2012), Hydrazine-assisted formation of indium phosphide (InP)-based nanowires and core-shell composites, *Materials*, 6, 85-100.

- [18] Haapamaki C., LaPierre R., (2011), Mechanisms of molecular beam epitaxy growth in InAs/InP nanowire heterostructures, *Nanotechnology*, 22, 335602.
- [19] Algra R.E., Verheijen M.A., Borgström M.T., Feiner L. F., Immink G., van Enckevort W.J., Vlieg E., Bakkers E.P.,(2008), Twinning superlattices in indium phosphide nanowires, *Nature*, 456, 369-372.
- [20] Jia C., Lin Z., Huang Y., Duan X., (2019), Nanowire electronics: from nanoscale to macroscale, *Chemical reviews*, 119, 9074-9135.
- [21] Quan L.N., Kang J., Ning C.Z., Yang P., (2019), Nanowires for photonics, *Chemical reviews*, 119, 9153-9169.
- [22] Deng J., Su Y., Liu D., Yang P., Liu B., Liu (2019), Nanowire photoelectrochemistry, *Chemical reviews*, 119, 9221-9259.
- [23] Pemasiri K., Montazeri M., Gass R., Smith L.M., Jackson H.E., Yarrison-Rice J., Paiman S., Gao Q., Tan H.H., Jagadish C., (2009), Carrier dynamics and quantum confinement in type II ZB-WZ InP nanowire homostructures, *Nano letters*, 9, 648-654.
- [24] Tuin G.L., Borgström M.T., Trägårdh J., Ek M., Wallenberg L., Samuelson L., Pistol M. E., (2011), Valence band splitting in wurtzite InP nanowires observed by photoluminescence and photoluminescence excitation spectroscopy, *Nano Research*, 4, 159-163.
- [25] Chattopadhyay G., (2011), Technology, capabilities, and performance of low power terahertz sources, *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*, 1, 33-53.
- [26] Birch F., (1947), Finite elastic strain of cubic crystals, *Physical review*, 71, 809.
- [27] Larsson M.W., Wagner J.B., Wallin M., Håkansson P., Fröberg L.E., Samuelson L., Wallenberg L.R., (2006), Strain mapping in free-standing heterostructured wurtzite InAs/InP nanowires, *Nanotechnology*, 18, 015504.
- [28] Li D., Wang Z., Gao F., (2010), First-principles study of the electronic properties of wurtzite, zinc-blende, and twinned InP nanowires, *Nanotechnology*, 505709, 21.
- [29] Şahin H., Cahangirov S., Topsakal M., Bekaroglu E., Akturk E., Senger R.T., Ciraci S., (2009), Monolayer honeycomb structures of group-IV elements and III-V binary compounds: First-principles calculations, *Physical Review B*, 80, 155453.

Calculation of optical properties for InP structure in bulk and nanosheet states

T. Davarzani, A. Bakhshayeshi*, I. Motie, R. Taghavimendi

Department of Physics, Mashhad Branch, Islamic Azad University, Mashhad, Iran

Submitted: 27 September 2023, Revised: 15 December 2023, Accepted: 06 January 2024

Abstract

Optical properties of the indium phosphide compound in bulk and nanosheet states have been calculated based on the density functional theory approach and using Wien2k Package. Quantities such as real and imaginary parts of the dielectric function, material anisotropy values, optical transitions, plasmon energies, refractive index and optical reflectivity have been calculated for both bulk and nanosheet states. By changing the structure in both bulk and nanosheet states, a significant difference in the real part of the dielectric function, which is related to the polarizability of the system, is observed in two directions, perpendicular and parallel to the surface. Between the roots of the real part of the dielectric function, which is a negative dielectric function, the compound behaves like a metal. The number and location of the roots are different in the bulk and nanosheet states. In the case of nanosheets, the optical transmissions increased, but the intensity of the peaks decreased. The plasmon energy for the bulk state is not much different in the two directions perpendicular and parallel to the surface, but in the case of the nanosheet, it is shifted to lower energies and there is a noticeable difference between the two directions.

Keywords: *InP Structure, Density functional theory, Optical properties*

*Corresponding author : A. Bakhshayeshi

Address: Department of Physics, Mashhad Branch, Islamic Azad University, Mashhad, Iran

E-mail: a_bakhshayeshi@yahoo.com