بررسی خواص اپتوالکترونیکی ترکیب $CdGa_2S_4$ تحت فشار

بصیرت ، شیوا [1]؛رهنمای علی آباد ، حسین اصغر [2]

[1] گروه فیزیک ، دانشگاه پیام نور مشهد ، مشهد
[2] گروه فیزیک ، دانشگاه حکیم سبزواری ، سبزوار

چکیده

در این مقاله خواص اپتوالکترونیکی ترکیب $CdGa_2S_4$ در فشارهای مختلف محاسبه شده است. در محاسبات مان از نظریه تابعی چگالی (DFT) و از تقریبهای شیب تعمیم یافته (GGA) و بک جانسون اصلاح شده (mBJ) استفاده کردهایم. نتایج نشان می دهد که با افزایش فشار تا ۴.۵۸ GPa گاف انرژی افزایش می دهد و بعد از این فشار با افزایش آن گاف انرژی کاهش می یابد. دلیل این رفتار را می توان در تغییر پارامترهای شبکه بواسطه فشار خارجی جستجو کرد. نشان داده شده است که با افزایش فشار تا 0.58 GPa مقدار تابع دی الکتریک استاتیک کاهش و در فشارهای بالاتر افزایش می یابد. بنابراین خواص اپتوالکترونیکی به فشار حساس می باشند.

Investigation of the optoelectronic properties of $CdGa_2S_4$ under pressure

Basirat , shiva [1]; Rahnamaye Aliabadi , Hossein asghar [2]

[1] *Department of physics,Payamnoor Mashad Uneversity,Mashad*
[2] *Department of Physics, Hakim Sabzevari University, Sabzevar*

Abstract

In this paper, optoelectronic properties of $CdGa_2S_4$ have been calculated at various pressures. In our calculation, we have used density function theory (DFT), generalized gradient approximation (GGA) and modified Becke–Johnson (mBJ). The results showed that an increase in pressure to 4.58 GPa increases the band gap then it is decrease with increase in pressure to 20 GPa. This behaviour is related to the effect of pressure on the lattice parameters of compouds. It is shown that with increasing pressure the statice dielectric function are decreased to 0.58 GPa then it is increased with increase in pressure to 20 GPa. Therefore, optoelctronic properties are sensitive to pressure.

PACS No. 71, 78

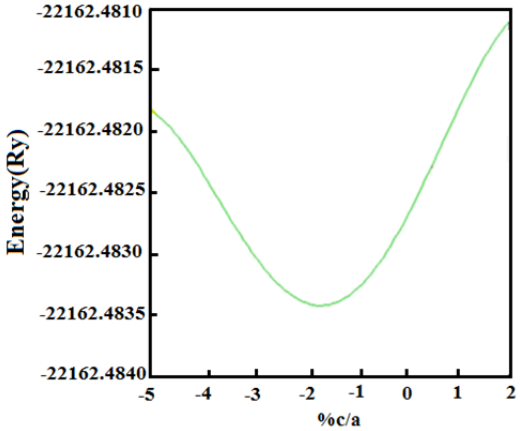
مقدمه

بلور کادمیوم تیوگالیت ($CdGa_2S_4$)نیمه رسانایی است که ساختار تتراگونال با گروه فضایی $I\bar{4}$ (No=82) دارد [1] . این ترکیب با ساختار بلوری زینتل کاربردهای زیادی در پنجره های مادون قرمز، قطعات اپتیکی غیر خطی و صافی های اپتیکی نوار باریک دارد. در مجموع این بلور با حساسیت نوری بالا، لومینسانس شدید و مقادیر خیلی بالا برای پذیرفتاری غیر خطی در ترکیبات اپتوالکترونیک مورد استفاده قرار می گیرد [2]. از آنجایی که خواص اپتوالکترونیکی این ترکیب به

فشار خارجی بستگی دارد بنابراین در این پروژه اثر فشار بر این گونه از خواص بررسی شده است.

روش انجام محاسبات

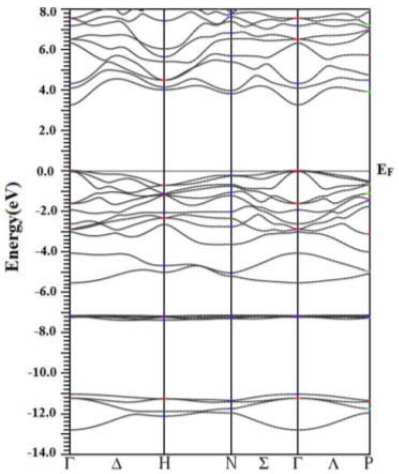
محاسبات با استفاده از تقریبهای شیب تعمیم یافته (GGA) و بک جانسون اصلاح شده (mBJ) در چارچوب نظریه تابعی چگالی(DFT) انجام شده است. برای انجام محاسبات از نرم افزار Wein2k استفاده شده است[3]. مقدار پارامتر همگرایی برای $R_{MT}\times K_{max}$ عدد ۷ انتخاب شده است. که R_{MT} کوچکترین شعاع کره مافین تین و K_{max} انرژی برش برای موج تخت در اولین منطقه بریلوئن است. مراحل تکرار، بعد از محاسبات انرژی کل با همگرایی در حدود ۰.۰۰۰۱ Ry به اتمام رسید. فشارهایی از 0تا 20 GPa به ساختار بلوری اعمال گردید و خواص الکترونیکی و اپتیکی محاسبه شدند.از آنجایی که ساختار بلوری تتراگونال است بنابراین انرژی بر حسب درصد c/a بهینه شده است و در شکل ۱ آورده شده است.



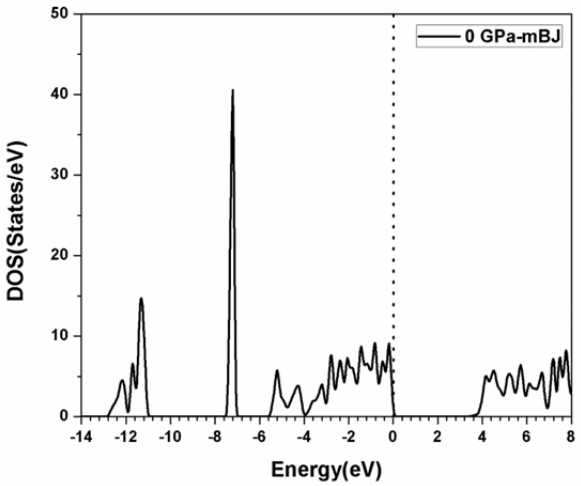
شکل۱ : انرژی بر حسب درصد c/a در فشار صفر گیگا پاسکال

نتایج: خواص الکترونیکی

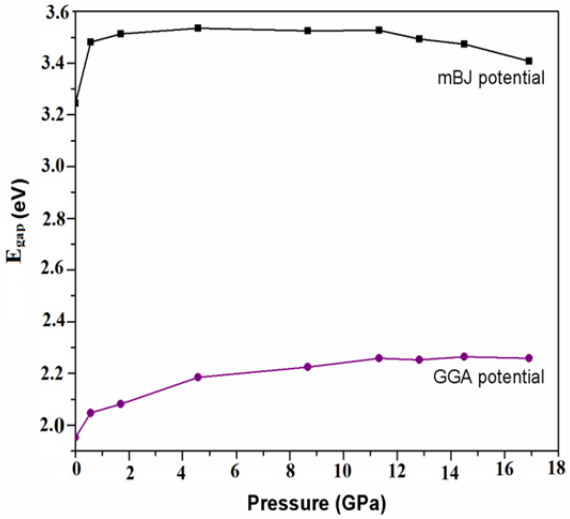
در شکل ۲ ساختار نواری ترکیب $CdGa_2S_4$ با استفاده از تقریب mBJ ، در گستره انرژی 8 تا 14 eV – در فشار 0 GPa نشان داده شده است. زیر تراز فرمی با گستردگی حدود 14 eV به ۳ قسمت مجزا تقسیم شده‌است. بالای نوار ظرفیت (از ۰ تا ۴- eV) از اربیتال های p اتم های Cd، Ga و S و s اتم Cd تشکیل شده است. پایین نوار ظرفیت (از ۴- تا ۵.۵- eV) از اربیتال های s و p اتم Ga سهم دارد. یک نوار بسیار باریک و جایگزیده در محدوده انرژی ۷- تا ۷.۵- eV از اوربیتال های 4d اتم Cd تشکیل شده است. در محدوده انرژی ۱۱- تا ۱۲.۷- eV اوربیتال s اتم S سهم دارد. یکی از اهداف مهم این پروژه بررسی اثر فشار بر خواص الکترونیکی این ترکیب است که در شکل ۳ نشان داده شده است. نتایج بدست آمده نشان می دهد که مقادیر گاف در فشارهای مختلف با استفاده از تقریب GGA پایین تر از تقریب mBJ است. با افزایش فشار تا مقدار 4.58 GPa، گاف‌انرژی روند افزایشی داشته و از آن مقدار تا فشار 20 GPa، روندی نسبتا کاهشی مشاهده می گردد. که این رفتار را می توان به تغییرات پارامترهای شبکه‌ای و ساختاری در فشارهای مختلف نسبت داد.



شکل۲ : ساختار نواری ترکیب $CdGa_2S_4$ در فشار 0 GPa با استفاده از تقریب mBJ .



شکل۳ : چگالی حالت های کل ترکیب $CdGa_2S_4$ در فشار 0 GPa با استفاده از تقریب mBJ .

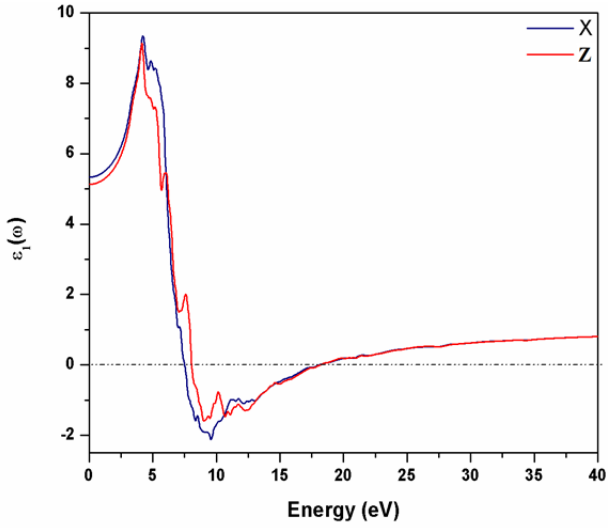


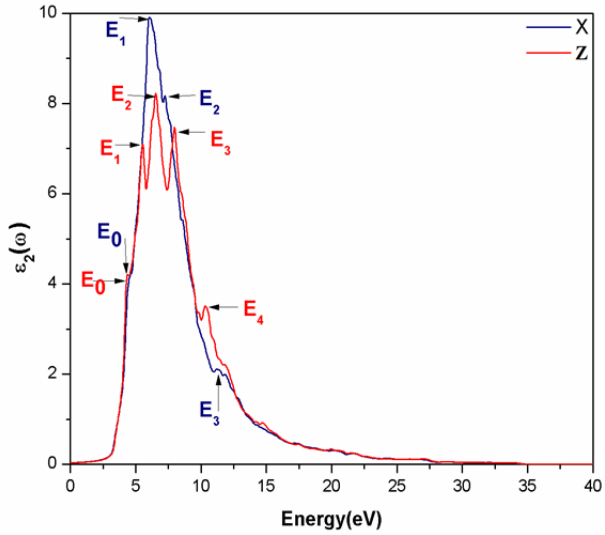
شکل۴ : تغییرات گاف انرژی بر حسب فشار برای ترکیب $CdGa_2S_4$ با استفاده از تقریب های mBJ و GGA .

نتایج: خواص اپتیکی

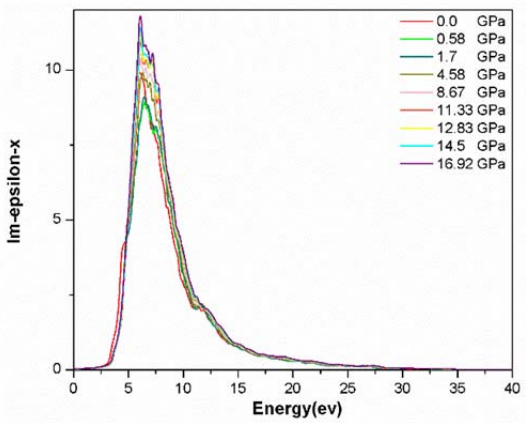
از تابع دی‌الکتریک برای بررسی و توصیف پاسخ بلور به میدان‌های الکترومغناطیسی استفاده‌می‌شود. تابع دی‌الکتریک، یک تابع مختلط است و از قسمت های حقیقی، $\varepsilon_1(\omega)$، و موهومی، $\varepsilon_2(\omega)$، تشکیل شده است. تغییرات قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک بر حسب انرژی فوتون برای ترکیب $CdGa_2S_4$ با استفاده از تقریب mBJ در شکل ۵ نشان داده شده است.تابع دی‌الکتریک حقیقی در انرژی صفر، تابع دی الکتریک استاتیک است. با توجه به شکل مفادیر 5.23و 5.12 برای تابع دی الکتریک استاتیک در راستاهای x و z بدست آمد. جذر تابع دی الکتریک استاتیک ضریب شکست استاتیک است. با توجه به اینکه این مقادیر برای دو راستا متفاوت می باشند بنابراین این ترکیب خاصیت دوشکستی دارد. تغییرات تابع دی الکتریک استاتیک بر حسب فشار برای ترکیب $CdGa_2S_4$ با استفاده از تقریب mBJ در شکل ۷ نشان داده شده است. نتایج بدست آمده نشان می دهد که با افزایش فشار مقادیر ثابت دی‌الکتریک استاتیک بعد از یک کاهش کوچک در فشار 0.58 GPa، روند افزایشی دارد.

از بیشینه‌های قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک برای بررسی گذارهای بین نواری استفاده می‌شود. مقدار E_0 در نمودار قسمت موهومی بیانگر گاف اپتیکی است که این مقادیر بسیار نزدیک به مقدار گاف نواری محاسبه شده می‌باشد. همچنین مقادیر E_1،E_2،E_3 و E_4 مقادیر انرژی مورد نیاز برای گذار از نوار ظرفیت به اولین نوار رسانش می‌باشد که در راستای x این مقادیر به ترتیب برابر 4.61 eV، 6.04 eV، 7.23 eV و 11.23 eV می‌باشد و در راستای z به‌ترتیب مقادیر 4.38 eV، 5.53 eV، 6.54 eV، 7.96 eV، 10.33 eV را خواهد داشت.

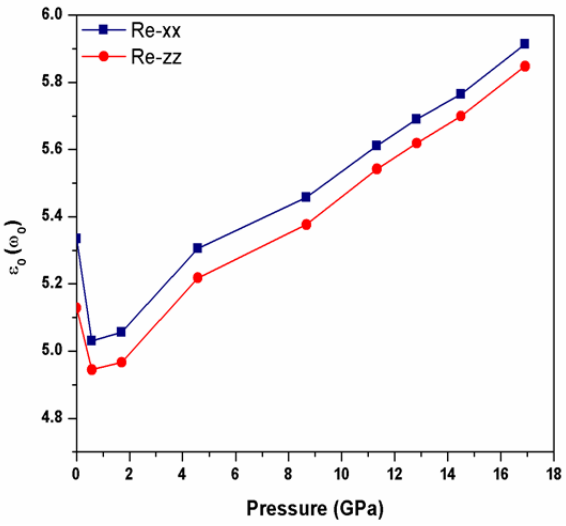




شکل۵ : تغییرات قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک بر حسب انرژی فوتون برای ترکیب $CdGa_2S_4$ با استفاده از تقریب mBJ .



شکل6 : تغییرات قسمت موهومی تابع دی الکتریک بر حسب انرژی فوتون در فشارهای مختلف برای ترکیب $CdGa_2S_4$ با استفاده از تقریب mBJ



شکل7 : تغییرات تابع دی الکتریک استاتیک بر حسب فشار برای ترکیب $CdGa_2S_4$با استفاده از تقریب mBJ .

نتیجه‌گیری

در این مقاله خواص اپتوالکترونیکی ترکیب $CdGa_2S_4$ تحت فشارهای مختلف از ۰ تا ۲۰ GPa با استفاده از نظریه DFT و تقریب های GGA و mBJ مورد بررسی قرار گرفت. گاف انرژی مستقیم بدست آمده در فشار0 GPa ، 3.245 eV است که در توافق خوبی با نتایج تجربی است. تابع دی الکتریک استاتیک در فشار0 GPa، 5.23و 5.12 در راستاهای x و z می باشد. گاف انرژی و تابع دی الکتریک استاتیک به شدت به فشار اعمال شده بستگی دارند و رفتارهای متفاوتی را مشاهده می کنیم.

مرجع‌ها

[1] N.N. Syrbu ,A.V Tiron, V.I. Parvan, V.V. Zalamai and I.M. Tiginyanu, “Interference of birefractive waves in $CdGa_2S_4$ crystals”, Physica B **463**, (2015) 88–92.

[2] N.V. Joshia, J. Luengo, and F. Vera, Materials Letters 61, (2007) 1926.

[3] M. Petersen, F. Wagner, L. Hufnagel, M. Scheffler, P. Blaha, K. Schwarz, Comput. Phys. Commun. 126, (2000) 294.

[3] J. Marquina, Ch. Power, P. Grima, M. Morcoima, M. Quintero, B. Couzinet, . C. Chervin, P. Munsch, and J. Gonzalez, J. Appl. Phys. 100, (2006) 093513.

[4] S.-H. Ma. Z.-Y. Jiao and X.-Z. Zhang, “Structural, elastic, electronic, and optical properties of defect-chalcopyrite structure CdGa2X4 (X=S, Se) compounds”, J Mater Sci (2012) 3849–3854.