

## بهبود پیش‌بینی خواص نوری GaSe در فاز $\beta$ با تقریب TB-mBJ

سهامانی، محمدرضا<sup>۱</sup> توانا، علی<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه محقق اردبیلی

### چکیده

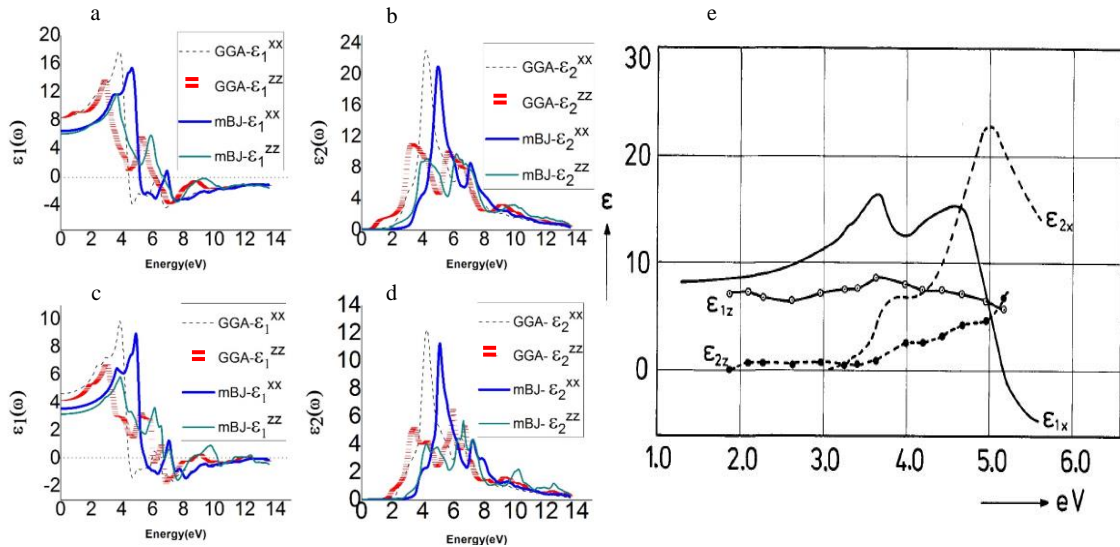
محاسبات ساختار الکترونی به روش FP-LAPW و خواص نوری در تقریب فاز کاتوره‌ای برای ترکیب کپه‌ای و تک‌لایه‌ی GaSe انجام گرفته‌اند. مشاهده می‌کنیم که پتانسیل تبدیلی TB-mBJ به عنوان یک روش نیم‌موضعی می‌تواند با بهبود ساختار نواری ترکیب GaSe در تعیین خواص نوری با تقریب فاز کاتوره‌ای بهتر عمل کند، به طوری که نتایج ما در توافق بسیار خوبی با داده‌های تجربی هستند.

محاسبات ساختار الکترونی به روش نظریه‌ی تابعی چگالی با پتانسیل کامل در پایه‌ی امواج تخت الحاقی و خواص نوری در تقریب فاز کاتوره‌ای برای ترکیب کپه‌ای و تک‌لایه‌ی GaSe در فاز ساختاری  $\beta$  به کمک Wien2k انجام گرفته‌اند. همگرایی در محاسبه‌ی انرژی کل با استفاده از یک شبکه‌ی نسبتاً متراکم  $19 \times 19 \times 4$  به دست آمد [۱]. GaSe در سیستم لایه‌ای شش‌وجهی متبلور می‌شود که دارای گروه فضایی  $P6_3/mmc$  است [۲]. GaSe به دلیل پیوند کوالانسی قوی درون لایه‌هایش و پیوند ضعیف بین لایه‌ها از نوع واندروالس و پیوند یونی کوچک، یک ماده‌ی بسیار ناهمسانگرد است. بنابراین می‌تواند به راحتی در امتداد سطح (۰۰۱) شکافته و منجر به ایجاد یک سطح آینه-مانند برای اندازه‌گیری بازتاب شود. اخیراً بک و جانسون یک پتانسیل تبدیلی ارائه دادند که برای بازسازی پتانسیل تبدیلی دقیق در اتم‌ها استفاده می‌شود و توسط ترن و بلاها به صورت زیر بهبود یافت [۳]:

$$v_{x,\sigma}^{TB-mBJ}(r) = cv_{x,\sigma}^{BR}(r) + (3c - 2) \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{5}{6}} \sqrt{\frac{t_{\sigma}(r)}{\rho_{\sigma}(r)}} \quad (1)$$

کولر، ترن و بلاها در سال ۲۰۱۲ به منظور بهبود گاف نواری، موفق به یافتن پارامترگذاری جدیدی برای  $c$  شدند [۴] که ما در محاسبات خود از آن‌ها بهره می‌بریم.

خواص نوری GaSe را می‌توان با استفاده از تابع دی‌الکتریک مختلط  $\epsilon(\omega)$  شرح داد. شکل ۱، قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک به دست آمده از تقریب‌های TB-mBJ و GGA در مقایسه با داده‌های استخراج شده از آزمایش بیضی‌سنجی [۵] را نشان می‌دهد. قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک  $\epsilon_1(\omega)$  نشان‌دهنده‌ی پراکندگی فوتون تابشی به وسیله‌ی مواد است در حالی که قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک  $\epsilon_2(\omega)$  به انرژی جذب شده توسط مواد مرتبط است. در شکل ۱،  $\epsilon_1^{xx}(\omega)$  برای حالت کپه‌ای و لایه‌ای به ترتیب در بازه‌ی انرژی  $5/18 - 6/76$  eV و  $5/51 - 6/76$  eV منفی می‌شوند که حالت کپه‌ای در توافق بسیار خوبی با داده‌های تجربی شکل ۱(e) است. این نشان می‌دهد که در این ناحیه‌های انرژی، امواج الکترومغناطیسی تابشی از ماده منعکس می‌شوند، بنابراین ماده می‌تواند در این محدوده‌ی انرژی به عنوان یک محافظ در مقابل تابش استفاده شود. قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک استاتیکی  $\epsilon_1^{xx}(0)$  برای حالت کپه‌ای و لایه‌ای با تقریب GGA به ترتیب برابر  $8/4$  و  $4/7$  و با تقریب TB-mBJ به ترتیب برابر  $6/4$  و  $3/6$  به دست آمد. این تفاوت بر اساس مدل پن [۶]  $\epsilon_0 = 1 + (\hbar\omega_p / E_g)^2$  قابل توجیه است، چون انرژی کوچکتر منجر به یک مقدار بزرگتر  $\epsilon_0$  می‌شود.

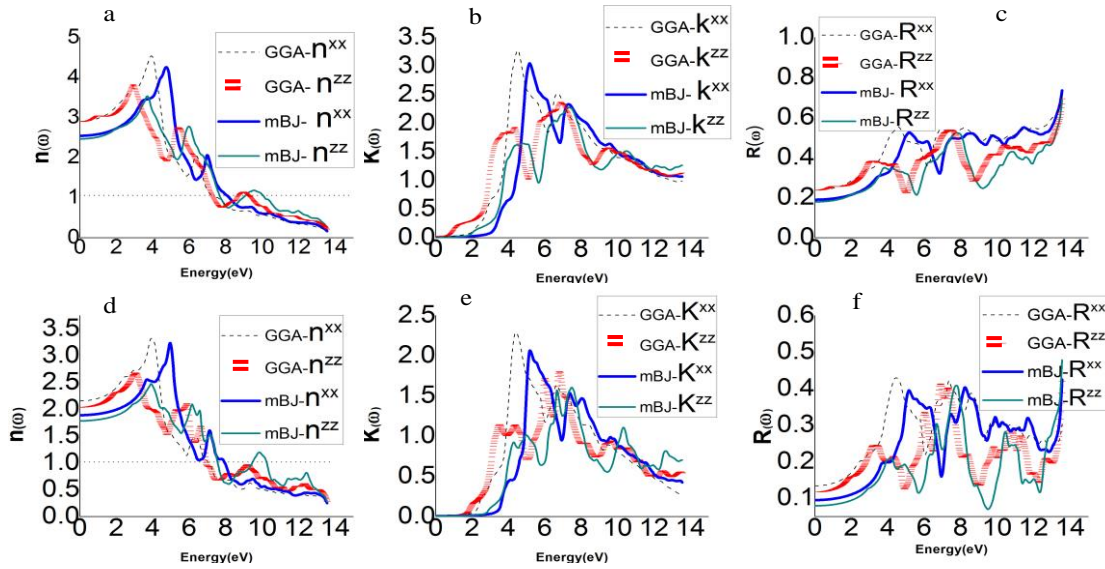


شکل ۱: وابستگی انرژی کپه‌ای به: (a) قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک (b) قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک و وابستگی انرژی تک لایه به: (c) قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک (d) قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک (e) نتایج آزمایش بیضی‌سنجی برای GaSe کپه‌ای [۵]

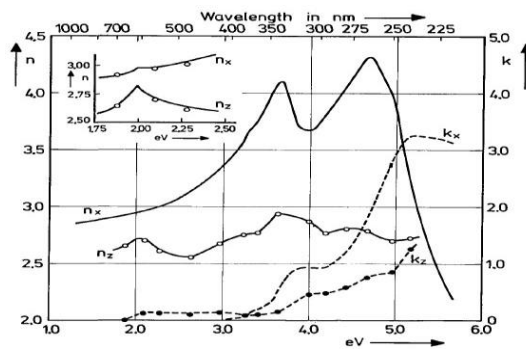
انتقال به سمت راست نتایج TB-mBJ نسبت به GGA برای  $\epsilon_2(\omega)$  در بازه‌ی انرژی ۸-۴ eV به خاطر گاف انرژی بهبود یافته‌ی TB-mBJ در مقابل GGA است، اما این تفاوت در انرژی‌های بالاتر، کوچک می‌شود. لازم به ذکر است که در روش ما، اثرات اکسیتونی در  $\epsilon_2(\omega)$  به طور دقیق در نظر گرفته نمی‌شود. اثرات میدان موضعی یعنی تغییر دوره‌ای سلول برحسب پتانسیل نیز نادیده گرفته می‌شود. هم‌چنین اصلاحات خود انرژی الکترونی، می‌تواند گاف نواری را افزایش و ثابت دی‌الکتریک سیستم را کاهش دهد. بدیهی است که برهم‌کنش الکترون-حفره موقعیت و ارتفاع قله را تغییر می‌دهد. اختلاف ناچیزی که بین نتایج ما و روش تجربی وجود دارد به دلیل محدودیت‌های تقریب فاز کاتوره‌ای در در نظر گرفتن برهم‌کنش الکترون-حفره است.

تفاوت ۰/۷eV لبه‌ی جذب  $\epsilon_2(\omega)$  در شکل ۱ با روش TB-mBJ بین حالت کپه‌ای و لایه‌ای ناشی از اثر محدود شدگی کوانتومی است. به دلیل عدم آمیختگی بین لایه‌ای اوربیتال‌های Se در ساختار تک لایه، امکان پرش الکترونی به مقدار قابل توجهی کاهش می‌یابد که نتیجه‌ی آن افزایش گاف انرژی و لبه‌ی جذب است.

با استفاده از قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، محاسبه‌ی طیف ترکیبات نوری مانند بازتاب  $R(\omega)$ ، ضریب شکست  $n(\omega)$  و ضریب خاموشی  $K(\omega)$  امکان‌پذیر است. همان‌طور که از شکل‌های ۲ و ۳ مشخص است نتایج ما در توافق خوبی با روش تجربی است. قله‌های طیف توسط گذارهای دو قطبی-الکتریکی مجاز بین نوارهای ظرفیت و رسانش ایجاد می‌شوند. دلیل این‌که منحنی ضریب شکست  $n(\omega)$  در انرژی‌های بالاتر محو می‌شود به خاطر این واقعیت است که ماده در خارج از انرژی‌های معین، فوتون‌های پرنانرژی را جذب می‌کند و دیگر نمی‌تواند مانند ماده‌ی شفاف عمل کند. هم‌چنین از شکل ۲ مشخص است که در محدوده‌ای از فرکانس‌ها ضریب شکست کم‌تر از واحد است. ضریب شکست کم‌تر از واحد نشان می‌دهد که سرعت فوتون‌های فرودی بیشتر از سرعت نور است، با این حال این پدیده را می‌توان با این حقیقت توضیح داد که یک سیگنال باید به عنوان یک بسته‌ی موج منتقل شود نه به عنوان یک موج تک‌فام.



شکل ۲: وابستگی انرژی لایه اول GaSe به (a) ضریب شکست (b) ضریب خاموشی (c) بازتاب و وابستگی انرژی لایه دوم GaSe به: (d) ضریب شکست (e) ضریب خاموشی (f) بازتاب



شکل ۳: نتایج آزمایش بیضی‌سنجی ضریب شکست و ضریب خاموشی لایه اول GaSe [۵]

## نتیجه‌گیری

تقریب TB-mBJ با به دست آوردن بهتر ساختار نواری GaSe، بهبود قابل ملاحظه‌ای در تعیین خواص نوری آن ایجاد می‌کند. همچنین مشاهده می‌شود که به رغم استفاده از تقریب فاز کاتوره‌ای برای محاسبه‌ی خواص نوری، نتایج ما توافق بسیار خوبی با تجربه دارند که بیانگر ناچیز بودن سهم برهم‌کنش الکترون-حفره در این ترکیب است.

## مرجع‌ها

۱. سهمانی، محمدرضا و توانا، علی ثبت شده در بیستمین نشست سالانه‌ی فیزیک ماده چگال IASBS، زنجان
۲. Zs. Rak, S.D. Mahanti, Krishna C. Mandal, N.C. Fernelius, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* ۷۰, ۳۴۴-۳۵۵ (۲۰۰۹).
۳. F. Tran and P. Blaha, *Phys. Rev. Lett* ۱۰۲, ۲۲۶۴۰۱ (۲۰۰۹).
۴. D. Koller, F. Tran, and P. Blaha, *Phys. Rev. B* ۸۵, ۱۵۵۱۰۹ (۲۰۱۲).
۵. F. Meyer, E. E. de Kluizenaar, and D. den Engelsens *Journal of the optical society of America Volume* ۶۳, Number ۵ (۱۹۷۳).
۶. D.R. Penn, *Phys. Rev.* ۱۲۸.۲۰۹۳ (۱۹۶۲).