بیست و سومین کنفرانس اپتیک و فوتونیک و نهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
دانشگاه تربیت مدرس
۱۲-۱۴ بهمن ۱۳۹۵
23rd Iranian Conference on Optics and Photonics and 9th Conference on Photonics Engineering and Technology
Tarbiat Modares University, Tehran, Iran
January 31- February 2, 2017

مطالعه خواص اپتیکی و الکترونیکی $CdSiP_2$ بر پایه نظریه تابعی چگالی

سید مقصود گلزان، آرش عبدالهی و سیما محمودی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ارومیه، ارومیه

چکیده – در این مطالعه، خواص الکترونیکی و اپتیکی ساختار کالکوپیریت $CdSiP_2$ در چارچوب نظریه تابعی چگالی و بوسیله تابعی های *GGA-WC* و *B3LYP*، بررسی شده اند. خصوصیات الکترونیکی شامل ساختار نواری انرژی و چگالی حالت های الکترونی و همینطور خصوصیات اپتیکی شامل تابع دی الکتریک، ضریب جذب، ضریب شکست و خاموشی، و ضریب بازتاب محاسبه و نتایج با نتایج تجربی مقایسه گردیده اند. نتایج نشان می دهد با وجود اینکه استفاده از تابعی هیبریدی *B3LYP* به نتایج دقیقتری در خصوص ساختار نواری می انجامد، تابعی *GGA-WC* را می توان جهت محاسبه توابع اپتیکی $CdSiP_2$ با دقتی بالاتر بکار برد.

کلید واژه- خواص الکترونی، خواص اپتیکی، نظریه تابعی چگالی، CdSiP2

A Study of the Electronic and Optical Properties of $CdSiP_2$ Based on Density Functional Theory

Seyyed Maqsood Golzan, Arash Abdollahi , and Sima Mahmoodi

Department of physics, Faculty of Science, Urmia University of Urmia, P.O.Box165, Urmia.

Abstract- In this study, the electronic and optical properties of chalcopyrite $CdSiP_2$ have been investigated in the framework of density functional theory (DFT) using GGA-WC and B3LYP functionals**.** The electronic properties included band structure and density of states, and optical properties included dielectric function, absorption coefficient, refractive index and extinction coefficient, and reflectance have been calculated and the results are compared with experimental data. The results show that despite the fact that the hybrid B3LYP functional provides more accurate band structure profile, the GGA-WC functional can be successfully used to estimate the optical properties of $CdSiP_2$.

Keywords: Electronic properties, Optical properties, Density functional theory, $CdSiP_2$.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-01]

این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

۱- مقدمه

کادمیم سیلیکون فسفید یک ماده اپتیکی غیر خطی است که متعلق به ترکیبات کالکوپیریت سه تایی است و ساختار تتراگونال (گروه فضایی $I\bar{4}2d$) دارد [۱-۲]. این ترکیب بدلیل کاربردهای بالقوه‌ای که در اپتیک خطی و اپتیک غیر خطی دارد مورد توجه قرار گرفته است[۳]. بلور $CdSiP_2$ با خواص منحصر به فردی مشخص می شود، مانند شفافیت در بازه گسترده‌ای (۰٫۵ μm-۹) از طول موج، ضرایب اپتیکی غیر خطی بزرگ (۸۴/۵ pm/V)، و هدایت حرارتی بالا (۱۳/۶ W/mK)[۴]. همچنین، $CdSiP_2$ یک بلور دوشکستی منفی تک محور است و به عنوان یکی از مناسب‌ترین مواد غیر خطی در حوزه مادون قرمز شناخته می شود [۵]. رشد تک کریستال $CdSiP_2$ توسط چندین محقق برای مدت طولانی مورد بررسی قرار گرفته است [۶-۸]. خواص فیزیکی این ماده به طور گسترده با استفاده از روش‌های مختلف نظری مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است. خواص اپتیکی و الکتریکی این بلور توسط محققین مختلف تحت بررسی قرار گرفته است [۹-۱۱].

۲- روش انجام محاسبات

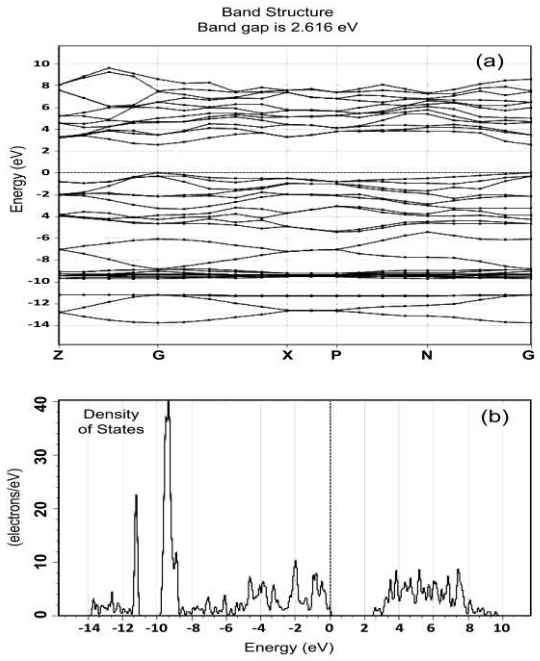
محاسبات به کمک کد محاسباتی CASTEP مبتنی بر روش شبه پتانسیل و در چارچوب نظریه تابعی چگالی صورت گرفته است. محاسبات الکترونیکی و اپتیکی با استفاده تابعی GGA-WC از مجموعه گرادیان تعمیم یافته و بر پایه تابعی PBE، که در آن قسمت تابعی تبادلی تا چهارمین مرتبه بسط گرادیان انرژی تبادلی در نظر گرفته شده [۱۲]، و همینطور تابعی هیبریدی B3LYP [۱۳] انجام شده است. تابعی B3LYP با توجه به ضرایب برازش داده شده برای تخمین مقدار گاف نواری و انرژی ترازها از دقت بالاتری در مقایسه با تابعی‌های تقریب‌های LDA و GGA برخوردار است. تابعی B3LYP با کمک رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$E_{xc}^{B3LYP}(\rho)=(1-a)E_x^{LDA}+aE_x^{HF} \\ +bE_x^B+(1-c)E_c^{LSDA}+cE_c^{LYP} \qquad (۱)$$

شبه پتانسیل‌های بکار رفته برای همه اتم‌ها در وضعیت پایه انتخاب شده‌اند. بازه همگرایی انرژی در محاسبات 10^{-6} eV و بازه همگرایی برای نیرو 10^{-4} eV/bohr منظور شده است. همچنین، برای نمونه برداری منطقه اول بریلوئن از روش مانخورست پک با ۴×۶×۶ تقسیم بندی استفاده شده است.

۲-۱- خواص ساختاری و الکترونیکی

برای مطالعه خواص حالت پایه، یکی از پارامترهای مهم، ثابت شبکه است که برای تأیید نظری مسئله نیز باید محاسبه شود. مقدار بدست آمده به کمک تابعی WC برای پارامتر های a و c به ترتیب ۵/۶۷۷ و ۱۰/۴۹ آنگستروم می باشد که در توافق بسیار خوبی با نتایج تجربی ۵/۶۸ و ۱۰/۴۳ آنگستروم [۱۴] است. ساختار نواری انرژی و چگالی حالتهای الکترونی $CdSiP_2$ در شکل ۱ نشان داده شده اند. نتایج بدست آمده استفاده از تابعی B3LYP نشان می‌دهد که این ماده یک گاف انرژی مستقیم به اندازه ۲/۶۲ eV دارد. این مقدار اندکی بزرگتر از مقدار تجربی آن، ۲/۳۸ eV [۱۴] می باشد. در مقابل، نتایج محاسبات با استفاده از تابعی GGA-WC گاف نواری را حدود ۱/۲۱ eV و بسیار پایین‌تر از مقدار تجربی بدست می دهد.



شکل ۱: ساختار نواری انرژی (a) و چگالی حالتهای الکترونی (b) که با استفاده از تابعی *B3LYP* محاسبه شده اند.

در جدول ۱، نتایج این تحقیق در خصوص ثابتهای شبکه و انرژی گاف، به همراه نتایج محاسبات دیگران، با نتایج تجربی مقایسه گردیده است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-01]

جدول۱: خواص ساختاری و الکترونیکی *CdSiP2*. پارامترها بر حسب آنگستروم و انرژی برحسب الکترون ولت می باشد.

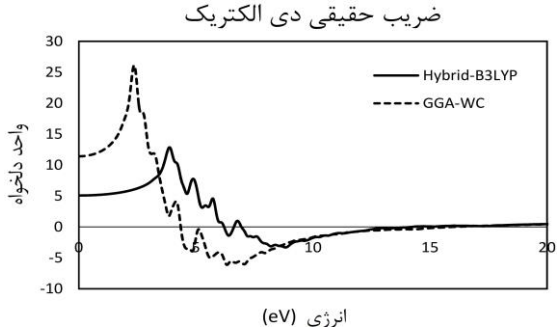
روش	ثابت a	ثابت c	انرژی گاف
تجربی (۱۴)	۵/۶۸	۱۰/۴۴۳	۲/۳۸
LDA (۹)	۵/۶۱۹	۱۰/۳۳۳	۲/۲ و ۲/۴۵
B3LYP (این تحقیق)	-	-	۲/۶۱۶
WC-GGA (این تحقیق)	۵/۶۷۷	۱۰/۴۹۳	۱/۲۱

۲-۲- خواص اپتیکی

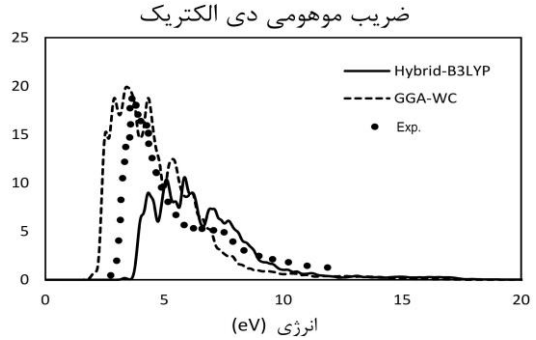
تابع دی الکتریک، یک تابع مختلط است که به صورت زیر تعریف می گردد:

$$\varepsilon = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \qquad (۲)$$

$\varepsilon_1(\omega)$ قسمت حقیقی است و مفهوم فیزیکی دارد. در واقع، در ناحیه‌ای که $\varepsilon_1(\omega)$ منفی است امواج منتشر نمی‌شود و فرآیندهای جذب و اتلاف صورت می‌گیرد و سهم قسمت موهومی تابع دی الکتریک مستقیماً ناشی از گذارهای بین نواری است و از فرمول کوبو-گرین وود بدست می‌آید [۱۵]. روابط کرامز-کرونیگ قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک را به هم مربوط می‌کند و تمام ثابت‌های اپتیکی را می‌توان از این داده ها بدست آورد. در شکل های ۲ و ۳ موقعیت پیک‌ها برای قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک نشان داده شده است. در این شکل‌ها نتایج محاسبات با استفاده از تابعی B3LYP و تابعی GGA-WC مقایسه شده اند. همانطور که در شکل ۳ دیده می شود، نتایج بدست آمده گویای برتری محسوس تابعی WC در تعیین رفتار کلی و تغییرات بخش موهومی تابع دی الکتریک است. در واقع آستانه افزایش نمودار تجربی در فاصله ای حدود یک الکترون ولت از نتایج محاسبات قرار می گیرد که متناظر با اختلاف گاف انرژی محاسبه شده و مقدار تجربی می باشد. بنابراین بنظر می رسد با توجه به انحراف قابل ملاحظه نتایج محاسبات تابعی هیبریدی B3LYP در تعیین رفتار و مقدار این ضریب، تابعی GGA-WC در تعیین خواص اپتیکی موفقتر است. همچنین در شکلهای ۴ تا ۷، به ترتیب ضریب شکست، ضریب خاموشی، ضریب بازتاب و ضریب جذب که به کمک تابعی هیبریدی B3LYP و تابعی WC بدست آمده اند مقایسه شده اند.



شکل ۲: قسمت حقیقی تابع دی الکتریک ترکیب $CdSiP_2$

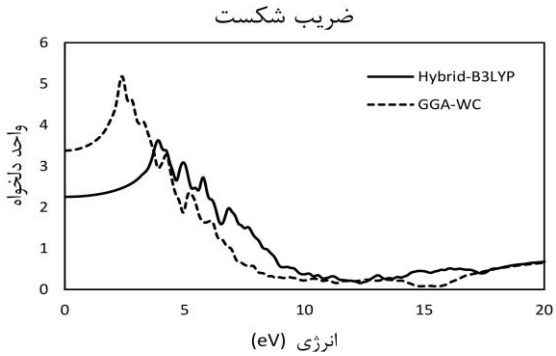


شکل ۳: قسمت موهومی تابع دی الکتریک ترکیب $CdSiP_2$ داده های تجربی مربوط به مرجع [۱۶] هستند.

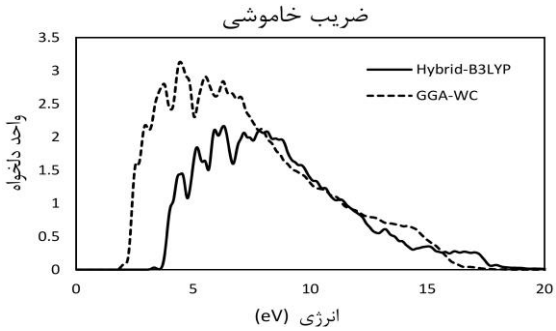
همانطور که در شکل ۴ دیده می شود ضریب شکست استاتیک محاسبه شده با کمک تابعی WC (۳/۳) در همخوانی بهتری با نتایج تجربی (حدود ۳ [۶]) قرار دارد. نتایج تابعی B3LYP با مقداری حدود ۲/۱ با فاصله نسبتا زیادی در پایین نتایج تابعی WC قرار دارند. همانطور که در شکل های ۵ و ۶ قابل مشاهده است، اختلاف زیادی مابین نتایج بدست آمده از دو تابعی GGA-WC و B3LYP در مورد ضریب شکست و ضریب خاموشی مشاهده می‌شود. به غیر از جابجایی حدود ۱eV در بازه فرکانس که ناشی از تخمین نادرست گاف نواری از طریق تابعی WC است، ضرایب محاسبه شده، در تمام بازه فرکانس، در حدود ۳۵٪ اختلاف دارند. این اختلاف در خصوص ضریب بازتاب (شکل ۶) نیز قابل مشاهده است. علارغم محدود بودن داده‌های تجربی در خصوص تابع جذب، همانطور که در شکل ۷ دیده می شود، می توان نتیجه گرفت که تابعی WC در تخمین تغییرات جذب $CdSiP_2$ موفقتر است.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

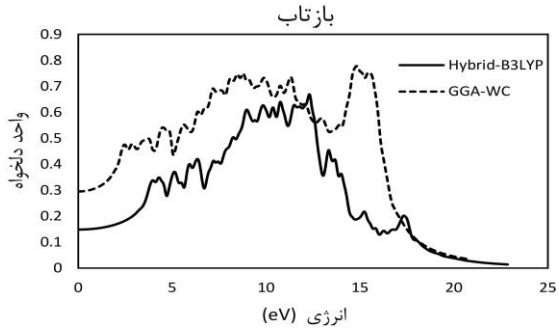
[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-01]



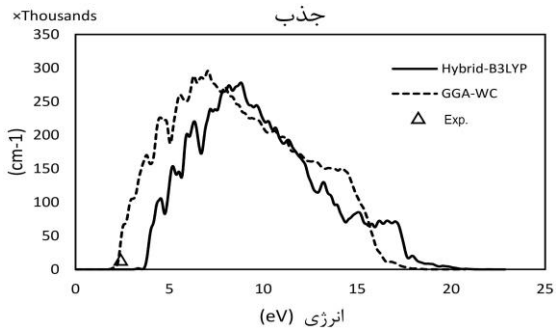
شکل ۴: ضریب شکست ترکیب $CdSiP_2$



شکل ۵: ضریب خاموشی ترکیب $CdSiP_2$



شکل ۶: ضریب بازتاب ترکیب $CdSiP_2$



شکل ۷: ضریب جذب ترکیب $CdSiP_2$. داده تجربی مربوط به مرجع [۱۴] است.

۳- نتیجه گیری

نتایج بدست آمده در این تحقیق در خصوص خواص اپتیکی ترکیب $CdSiP_2$، نشان می‌دهد که مقادیر محاسبه شده برای ضریب شکست و تابع دی الکتریک، که به کمک تابعی GGA-WC بدست آمده‌اند، از دقت بالاتری در مقایسه با نتایج تابعی هیبریدی B3LYP برخوردارند. این درحالیست که مقادیر بدست آمده برای ثابت‌های شبکه به کمک تابعی GGA-WC، نیز در توافق بسیار خوبی با نتایج تجربی قرار دارند. با این وجود، همانطور که انتظار می رفت، مقدار گاف نواری حاصل از تابعی B3LYP با داشتن خطای نسبی حدود ۹ درصد در توافق بیشتری با نتایج تجربی است. بنابراین، علارغم برتری تابعی های مجموعه هیبرید در برآورد خواص الکترونی، مشاهده می شود که تابعی WC که نسخه اصلاح شده‌ای از تابعی PBE محسوب می شود، در تعیین رفتار و مقدار ضرایب اپتیکی $CdSiP_2$ موفقتر است.

مراجع

[1] W.R.L. Lambrecht, X. Jiang, Phys. Rev. B 70 (2004) 045204.
[2] Wang Z W, Jie W Q, Li P S *et al*. *Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2007, 36(3): 390 .
[3] P. G. Schunemann, K. T. Zawilski, T. M. Pollak, V. Petrov,D. E. Zelmon, in Advanced solid-state photonics, conference program and technical digest. Optical Society of America, (2009)
[4] Yan Hui, Zhu Shifu, Zhao Beijun *et al*. *Journal of Synthetic Crystals*[J], 2012, 41(1): 11 (in Chinese)
[5] M.H. Rakowsky, W.K. Kuhn, W.J. Lauderdale, L.E. Halliburton, G.J. Edwards, M.P. Scripsick, P.G. Schunemann, T.M. Pollak, M.C. Ohmer, F.K. Hopkins, Appl. Phys. Lett. 64 (1994) 1615
[6] Zawilski K T, Schunemann P G, Pollak T C et al. Journal of Crystal Growth[J], 2010, 312: 1127
[7] Isomura S, Masumoto K. Physica Status Solidi (A) Applied Research[J], 1972, 13: 223
[8] L. Fan, S. F. Zhu, B. J. Zhao, B. J. Chen, Z. Y. He, H. Yang, G. Y.
[9] F.Chiker,B.Abbar,A.Tadjer,H.Aourag,B.Khelifa,Mater.Sci.Eng.B98(2003) 81.
[10] Z. He, B. Zhao, S. Zhu, B. Chen, H. Hou, Y. Yu, L. Xie, Comput. Mater. Sci. 72 (2013) 26.
[11] J. Xiao, Z. He, S. Zhu, B. Chen, G. Jiang, Comput. Mater. Sci. 117 (2016) 472.
[12] Z. Wu and R. E. Cohen, Phys. Rev. B 73, 235116 (2006).
[13] A. D. Becke, "Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange", J. Chem. Phys. 1993, 98, 5648-5652J.
[14] S. Isomura, K. Masumoto; "Preparation and some optical properties of ZnGeP2 and CdSiP2", physica status solidi (a) 13 (1972) 223.
[15] R. Kubo; "Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems"; J. Phys. Soc. Jpn. 12 (1957) 570-586.
[16] G. Ambrazevicius, G. Babonas, A. Sileika; "Reflectance Spectra of CdSiP2 and ZnSiP2", Phys. Stat. Sol. (b) 95 (1979) 643.

این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-01]