

ZnSe HEKSAQONAL BİRLƏŞMƏSNİN STRUKTUR VƏ ELEKTRON XASSƏLƏRİNİN TƏMƏL PRİNSİPLƏRDƏN HESABLANMASI

V.N. CƏFƏROVA

Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu

Az 1143, Bakı, H.Cavid pr., 131

vcafarova@beu.edu.az

Təqdim olunan işdə Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsi əsasında meta-Ümumiləşmiş Qradient Yaxınlaşması istifadə olunmaqla Quantum Wise proqram paketi ilə ZnSe birləşməsinin primitiv özəyini təşkil edən atomların tarazlıq vəziyyəti hesablanmış, qəfəs parametrləri təyin edilmişdir. Birləşmə üçün təməl prinsiplərdən Brillüen zonası üzrə zona quruluşu və hal sıxlığı təyin edilmiş, qadagan zolağın eni qiymətləndirilmişdir. Hesablamalarda elektron-ion qarşılıqlı təsiri normanı qoruyan Hartwigsen-Goedecker-Hutter ion psevdopotensialı ilə nəzərə alınmışdır. Təməl prinsiplərdən hesablanmış zona quruluşu və hal sıxlığı mənzərəsinə əsasən müəyyən olunmuşdur ki, valent zonasının tavanı və keçirici zonanın minimumu Brillüen zonasının Γ simmetrik nöqtəsində olub, kristal düzkeçidli birləşmədir.

Açar sözlər:ZnSe, qəfəs parametri, zona quruluşu, hal sıxlığı (DOS), Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsi (DFT), meta-Ümumiləşmiş Qradient Yaxınlaşması (MGGA).

UOT: 538.915

GİRİŞ

Tədqiqat obyektini olaraq ZnSe yarımkeçiricisinin seçilməsi bu birləşmənin bir sıra texniki tətbiq imkanları ilə bağlıdır [1, 2]. ZnSe kristalı işə mavi-ışığı saçan diodların, qısa dalğa uzunluqlu lazerlərin, foto detektorların, günəş batareyalarının, sensorların, infraqırmızı pəncərələrin, fotovolt-taik qurğuların istehsalında geniş istifadə olunur. Bu birləşmə II-VI qrup yarımkeçirici materiallar sinfinə aid olub, iki müxtəlif quruluşda kristallaşır: hekzaqonal vürsit və səthə mərkəzləşmiş kubik kristallar. Məqalədə hesablamalar ZnSe-in vürsit strukturu üçün yerinə yetirilmişdir.

HESABLAMA METODU

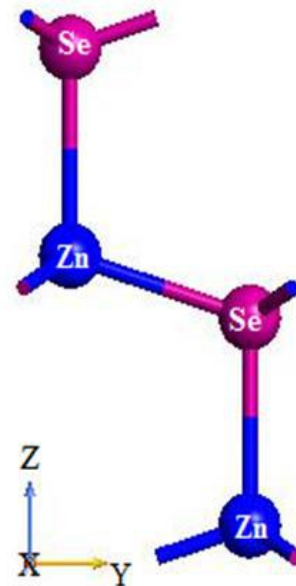
Təqdim olunan nəzəri tədqiqat işində Atomistic ToolKit (ATK) (<http://quantumwise.com/>) proqram paketi istifadə olunmaqla, Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsi (DFT) [3] əsasında meta-Ümumiləşmiş Qradient Yaxınlaşması (MGGA) [4] ilə ZnSe hekzaqonal kristalının struktur və elektron xassələri tədqiq edilmişdir. Hesablamalarda Tier3 bazis setləri istifadə olunmaqla, TB09LDA mübadilə korrelyasiya funksionalı tətbiq olunmuşdur. Elektron-ion qarşılıqlı təsiri normanı qoruyan Hartwigsen-Goedecker-Hutter (HGH) ion psevdopotensialları [5] ilə nəzərə alınmışdır. Birləşmənin primitiv özəyini təşkil edən atomların tarazlıq vəziyyəti təməl prinsiplərdən hesablanmış, buradan kristal quruluş və qəfəs parametrləri təyin edilmişdir. Bundan sonra Brillüen zonası (BZ) üzrə zona quruluşu və hal sıxlığı hesablanmış, qadagan zolağın eni qiymətləndirilmişdir. BZ üzrə inteqrallama Monkhorst-Pack sxemi [6] üzrə $7 \times 7 \times 7$ k -nöqtə istifadə olunmaqla xüsusi nöqtələr üzrə cəmləmə ilə əvəz olunmuşdur. Korrelyasiya effektləri Ceperley-Alder-Perdew-Zunger [7] sxemi üzrə nəzərə alınmışdır. Baxılan halda kristalın strukturunun optimallaşdırılması zamanı atomlararası qarşılıqlı təsir qüvvəsinin maksimal qiyməti $0.001 \text{ eV}/\text{Å}$, mexaniki gərginlik tenzorunun maksimal qiyməti isə $0.001 \text{ eV}/\text{Å}^3$ -dan kiçik olana qədər, yəni tarazlıq quruluş parametrlərinə gətirilənə qədər optimallaşdırma proseduru davam etdirilmişdir. Dalğa funksiyalarının ayrılışında kinetik enerjinin maksimal qiyməti 150 Ry olmuşdur.

Qeyd edək ki, birləşmənin qadagan zolağının eninin eksperimentdən məlum nəticəyə uyğun alınması məqsədilə meta-GGA metodunda $c=0.576$ düzəlişi nəzərə alınmışdır. Bu mübadilə-korrelyasiya potensialı ilk dəfə 2009-cu ildə Tran və Blaha tərəfindən tətbiq edilmişdir [8] və aşağıdakı kimi təyin olunur:

$$c = \alpha + \beta \left[\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \frac{|\nabla \rho(\mathbf{r})|}{\rho(\mathbf{r})} d\mathbf{r} \right]^{1/2}$$

burada α və β sərbəst parametrlər, $\alpha = -0.012$ ölçüsüz kəmiyyətdir. $B = 1.023 \text{ Bor}^{1/2}$ olub, əksər yarımkeçiricilərin və dielektriklərin qadagan zolağını eksperimental nəticəyə uyğunlaşdırmaq üçün tətbiq edilir və Ω isə vahid özəyin həcmidir.

NƏTİCƏ VƏ MÜZAKİRƏ ZnSe-in STRUKTUR XASSƏLƏRİ



Şəkil 1. ZnSe-in kristal quruluşu.

Tədqiq edilən ZnSe heksaqonal birləşməsi C_{6v}^4 simmetriyasına, $P6_3mc$ fəza qrupuna malik olub, vürsit strukturunda kristallaşır [9]. Belə ki, Zn və Se atomlarından hər biri, uyğun olaraq təpələrində Se və Zn atomu olan, düzgün tetraedrin mərkəzində yerləşir. Əksər II-VI qrup yarımkəçiricilərdə olduğu kimi, bu birləşmənin kristal quruluşu ion rabitəsi ($Zn^{2+}-Se^{2-}$) hesabına yaranır. ZnSe vürsit birləşməsinin kristal quruluşu şəkil 1-də verilmişdir. Qeyd edək ki, bütün hesablamalarda struktur üçün optimallaşdırma prosesi yerinə yetirilmişdir. Hesablanmış kristal struktura əsasən müəyyən olunmuşdur ki, ZnSe-in özəyini təşkil edən Zn və Se atomları arasındakı rabitənin uzunluğu 2.3 Å-dir. [10] işində Zn-Se məsafəsi üçün 2.2Å alınmışdır.

Strukturun qurulmasında təməl parametrlər kimi cədvəl 1-də verilmiş atom koordinatlarından istifadə edilmişdir. ZnSe kristalı üçün təməl prinsiplərdən təyin edilmiş qəfəs sabitlərinin qiymətləri və bu parametrlərin əvvəlki işlərdən məlum olan qiymətləri müqayisə üçün birlikdə cədvəl 2-də verilmişdir.

Cədvəl 1
Hesablamalarda Zn və Se üçün istifadə edilən atom koordinatları.

Atom	Atom koordinatları		
	x	y	z
Zn	0.3333	0.6667	0.0000
Se	0.3333	0.6667	0.375

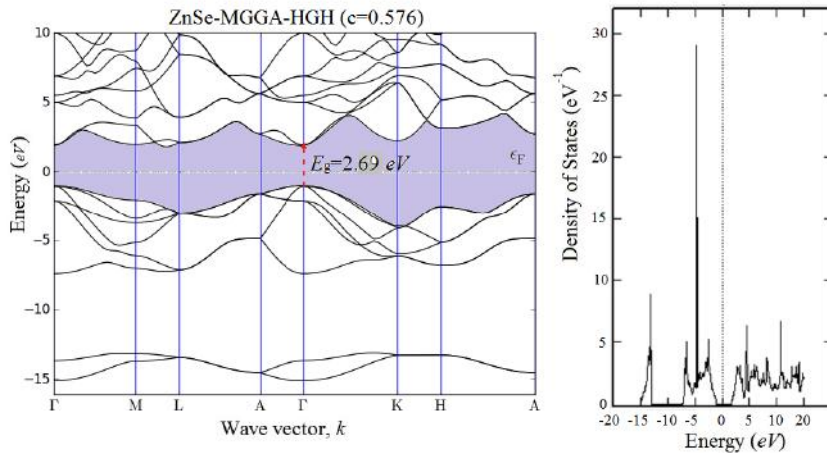
Cədvəl 2.
ZnSe-in MGGA-HGH metodu ilə təyin edilmiş struktur parametrləri.

a (Å)	c (Å)	c/a	u	Ədəbiyyat
3.75	6.138	1.637	0.38	
3.980	6.530	1.64	0.379	[11]
3.974	6.506	1.637	0.375	Eksp.[12]

Hesablamalardan ZnSe üçün $a=3.980\text{Å}$, $c=6.6530\text{Å}$ və daxili parametr üçün $u=0.379$ (eksp.: $a=3.974\text{Å}$ və $c=6.506\text{Å}$ [12]) alınmışdır: hər iki qəfəs parametrlərinin (a və c) qiymətləri məlum eksperimental nəticədən ~5% fərqlənir. Göründüyü kimi, birləşmə üçün təməl prinsiplərdən təyin olunmuş struktur və qəfəs parametrlərinin qiymətləri məlum eksperimental və digər nəzəri işlərin nəticələri ilə yaxşı uzlaşır.

ZnSe-in ELEKTRON XASSƏLƏRİ

İşdə MGGA tədqiqat metodundan istifadə etməklə ZnSe-in elektron xassələri təməl prinsiplərdən tədqiq edilmiş, birləşmənin qadağan zolağının eni qiymətləndirilmişdir. ZnSe vürsit struktur üçün DFT-MGGA metodu və normanı qoruyan HGH ion psevdopotensialı ilə hesablamalardan alınmış zona quruluşu və hal sıxlığı mənzərələri, uyğun olaraq, şəkil 2-də verilmişdir. Şəkilə Fermi səviyyəsi qırıq xətlə göstərilmişdir. Hesablamalardan $T=300\text{K}$ temperaturda ZnSe-in qadağan zolaqlarının eni üçün 2.69 eV (eksp.: 2.70eV ($T=295\text{K}$)).



Şəkil 2. ZnSe vürsit kristalının hesablanmış zona quruluşu (solda) və hal sıxlığı (sağda).

ZnSe birləşməsi üçün DFT-MGGA-HGH metodu ilə hesablanmış zona quruluşu və hal sıxlığı mənzərəsinə görə valent zona quruluşunu əsasən iki qrupa ayırmaq mümkündür. Birinci qrup (-15÷-13.7) eV enerji oblastını əhatə etməklə, əsasən selenin s hallarından yaranır. İkinci qrup valent enerji zolağı (-7.44÷-1) eV isə selenin p və əsasən də sinkin d hallarından ibarətdir. Beləliklə, valent zonanın tavanı və keçirici zonanın dibi əsasən sinkin və selenin d hallarından törəyir.

NƏTİCƏ

İşdə Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsinə əsaslanaraq meta-Ümumiləşmiş Qradient Yaxınlaşmasından istifadə et-

məklə ZnSe heksaqonal birləşməsinin struktur və elektron xassələri tədqiq edilmişdir. ZnSe-in hesablanmış zona quruluşuna əsasən təyin edilmiş qadağan zolağın eni ($E_g=2.69\text{eV}$) eksperimental işlərin nəticələri ilə ($E_g=2.7\text{eV}$) çox yaxşı uyğunluq təşkil edir. Təməl prinsiplərdən hesablanmış zona quruluşu mənzərəsinə əsasən müəyyən olunmuşdur ki, tədqiq edilən ZnSe heksaqonal kristalının qadağan zolağı Brillüen zonasının mərkəzi $\Gamma(0,0,0,0)$ simmetrik nöqtəsində yerləşir və birləşmə düzkeçidli yarımkəçiricilər qrupuna aiddir.

Təqdim olunan nəzəri tədqiqat işinin yerinə yetirilməsində göstərdiyi texniki dəstəyə görə AMEA Fizika İnstitutunun baş mütəxəssisi Ceyhun Quliyev və f.ü.f.d. Qurban Eyyubova dərin təşəkkürümü bildirirəm.

- [1] *G.F. Neumark, R.M. Park, J.M. Depuydt.* Physics Today, 1994, v. 47, p. 26.
- [2] *H. Karzel, et al..* Physical Review B, 1996, v. 53, p.11425.
- [3] *P. Hohenberg, W. Khon.* Phys. Rev. B, 1964, v.136, p. B864.
- [4] *J.P. Perdew, et al..* J. Chem. Phys., 2004, v.120, p. 6898.
- [5] *C. Hartwigsen, S. Goedecker, J. Hutter.* Phys. Rev. B, 1998, v.58, p.3641.
- [6] *H.J. Monkhorst, J.D. Pack.* Phys. Rev. B, 1976, v.13, p. 5188.
- [7] *J.Perdew, A.Zunger.* Phys. Rev. B, 1981, v. 23, p. 5048.
- [8] *F. Tran, and P. Blaha.* Phys. Rev. Lett., 2009, v.102, p.226401.
- [9] *S.G. Alghamdi, A.Z. Alzahrani.* Middle-East J.of Sci. Research, 2013,v.13, p.1144.
- [10] *A.N. Rosli, N.A. Zabidi, H.A. Kassim.* Frontiers in Physics, 2014, v.1588, p. 265.
- [11] *V.N. Cəfərova.* AMEA Xəbərləri, 2021, v. XLI, №2, p.121.
- [12] *C.Y. Yeh, Z.W. Lu, S.Froyen, A.Zunger.* Phys. Rev. B, 1992, v. 46, p.10086.
- [13] *D.Theis.* Physica Status Solidi (b), 1977, v. 79, p.125.
- [14] *W.Y. Liang and A.D. Yoffe.* Mathem.and Phys. Sciences, 1967, v. 300, p. 326.

V.N. JAFAROVA

AB INITIO STUDY OF STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF ZnSe

The structural and electronic properties of ZnSe crystal were studied by DFT-MGGA method within meta-General Gradient Approximation using Atomistix ToolKit program software. The electron-ion interactions were treated by the Hartwigsen-Goedecker-Hutterion pseudopotential. The TB09LDA exchange-correlation functional and Tier3 basis sets were used in resent calculations. First-principle studied reveal that the valence band maximum and conduction band minimum located at the $\Gamma(0, 0, 0)$ symmetric point.

В.Н. ДЖАФАРОВА

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ZnSe ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Представлены результаты теоретических исследований структурных и электронных свойств ZnSe. Основные расчеты выполнены с использованием программного пакета Atomistix ToolKit. Для описания структурных и электронных свойств применялись теория функционала электронной плотности в рамках мета-обобщённого градиентного приближения и использовались обменно-корреляционный функционал TB09LDA и базисные наборы Tier3. Исследования из первых принципов показывают, что в обычных условиях максимум валентной зоны и минимум зоны проводимости расположены в точке симметрии $\Gamma(0, 0, 0)$.

Qəbul olunma tarixi: 08.06.2021