

ZnSe BİRLƏŞMƏSİNİN OPTİK XASSƏLƏRİNİN TƏMƏL PRİNSİPLƏRƏ ƏSASLANAN HESABLAMA METODU İLƏ SİMULYASIYASI

V.N. CƏFƏROVA¹, X.Ə. HƏSƏNOVA^{2,1}

¹Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti, Azadlıq pr. 20, Az-1010, Bakı, Azərbaycan

²Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi, Fizika İnstitutu,

H. Cavid pr.131, Az-1073, Bakı, Azərbaycan

e-mail: rasulova.khayala@mail.ru

Heksaqonal quruluşa malik ZnSe birləşməsinin optik xassələri funksional sıxlıq nəzəriyyəsinin lokal sıxlıq yaxınlaşması (DFT-LDA) və Hubbard U metodu çərçivəsində təməl prinsiplər əsasında tədqiq edilmişdir. Hesablamalar Atomistic ToolKit proqram paketi vasitəsilə aparılmış və elektron-ion qarşılıqlı təsirləri Fritz-Haber-Institut psevdopotensialı ilə nəzərə alınmışdır. ZnSe kristalı üçün ϵ_{lc} və ϵ_{∞} polyarlaşmalarına uyğun olaraq kompleks dielektrik funksiyası, sındırma, əksolma, sönmə və udma əmsalları, kompleks həssaslıq, polyarlaşma dərəcəsi və optik keçiricilik kimi əsas optik parametrlər müəyyən edilmiş, bu polyarlaşma istiqamətləri üzrə birləşmənin optik əksolma spektrləri udmanın dərinlikləri baxımından təhlil olunmuşdur. Eyni zamanda, ϵ_{lc} və ϵ_{∞} polyarlaşmaları üçün əldə edilən optik parametrlərin qiymətləri müqayisə edilmiş və kristalda nəzərəcarpacaq optik anizotropluğun müşahidə olunmadığı müəyyən edilmişdir.

Açar sözlər: ZnSe, DFT optik xassələr, dielektrik funksiyası, udma, əksolma, polyarlaşma, anizotropluq

DOI:10.70784/azip.2.2025232

GİRİŞ

Məlumdur ki, ZnSe birləşməsi II–VI qrup yarımkeçirici materiallara aid olub, hekzaqonal və kubik olmaqla iki müxtəlif kristal struktura malikdir. Təqdim olunan işdə aparılan hesablamalar hekzaqonal quruluşa malik ZnSe kristalı üçün yerinə yetirilmişdir. ZnSe hekzaqonal birləşməsi C_{6v}^{4-} simmetriyasına, $P6_3mc$ fəza qrupuna malikdir [1]. Tədqiqat obyekti olaraq II–VI yarımkeçiricilər qrupuna aid, geniş qadağan zolağına (2,7 eV) malik ZnSe birləşməsinin seçilməsi, onun geniş texniki tətbiq potensialı ilə əlaqədardır. [2-6]. ZnSe kristalı isə mavi-ışığısaqan diodların, qısa dalğa uzunluqlu lazerlərin, fotodetektorların, günəş batareyalarının, sensorların, infraqırmızı pəncərələrin, fotovoltaiq qurğuların istehsalında geniş istifadə olunur.

ZnSe-nin optik xassələrinə aid məlum nəzəri işlərin tədqiqi göstərir ki, bir çox işlər təcrübəyə əsaslanır. Halatı və başqalarının işində [7] vürsət quruluşlu ZnSe kristalının optik xassələri təməl prinsiplərdən Becke-Johnson (TB-mBJ) potensialı və FP-LAPW yaxınlaşması ilə WIEN2k proqram paketi istifadə olunmaqla tədqiq edilmiş, dielektrik funksiyası hesablanmışdır. Həqiqi və xəyali dielektrik funksiyalarının xaraktercə müxtəlif enerji asılılıqları alınmışdır. Bu da öz növbəsində ZnSe-in anizotrop xassəyə malik olduğunu göstərir. Bu işdə nəzəri hesablanmış dielektrik funksiyasının həqiqi hissəsində 5.67; 6.08; 7.12 və 8.53 eV enerjilərə uyğun olmaqla 4 ədəd pik alınmışdır. Xəyali dielektrik funksiyasının qrafikində alınan piklər 5.70; 7.01; 7.82 və 9.76 eV-dir. [8] işində müəlliflər ultrabənövşəyi-görünən-yaxın infraqırmızı (UB-görünən-YİQ) oblasda işləyən spektrofotometr vasitəsilə 200–650 nm diapazonunda ZnSe təbəqəsinin optik xassələrini təcrübi olaraq tədqiq etmişlər. Optik spektrlərə əsasən, qadağan olunmuş zonanın eni 2.69–2.81 eV, əksətmə əmsalı isə nümunənin qalınlığından asılı olaraq 2.14–2.48 eV intervalında müəyyən edilmişdir.

HESABLAMA METODU

İşdə Atomistic ToolKit (ATK) proqram paketi istifadə olunmaqla, Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsi (DFT) [9]

əsasında Lokal Sıxlıq Yaxınlaşması (LDA) [10] və Hubbard U metodu ilə ZnSe-in optik xassələri tədqiq edilmişdir.

Elektron-ion qarşılıqlı təsiri Fritz-Haber-Institute psevdopotensialı [11] 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, optik spektr və sabitlər və müvafiq asılılıq qrafikləri təməl prinsiplərdən hesablanmış, qadağan olunmuş zonanın eni təyin olunmuşdur. Optik xassələrin öyrənilməsində BZ üzrə inteqrallamalar Monkhorst-Pack [12] sxemi üzrə əsasən $21 \times 21 \times 21$ k -nöqtə istifadə olunmaqla xüsusi nöqtələr üzrə cəmləmə ilə əvəz olunmuşdur. Korrelyasiya effektləri Ceperley-Alder-Perdew-Zunger sxemi üzrə nəzərə alınmışdır. Kristalın strukturunun həndəsi optimallaşdırılması zamanı strukturu əmələ gətirən atomlararası qarşılıqlı təsir qüvvəsinin və gərginlik tenzorunun maksimal qiymətləri müvafiq olaraq 0.001 eV/Å, və 0.001 eV/Å³ olana qədər optimallaşdırma proseduru yerinə yetirilmişdir. Dalğa funksiyalarının müstəvi dalğalar üzrə ayrılışında elektronun kinetik enerjisinin maksimal qiyməti 75 Ha-yə bərabər olmuşdur.

Qeyd edək ki, yerinə yetirilmiş nəzəri tədqiqat işində Zn [Ar]+3d¹⁰4s² elektron konfigurasiyasına əsasən 12, Se [Ar]+3d¹⁰4s²4p⁴ üçün isə 6 elektron valent elektronu hesab edilmişdir. ZnSe birləşmənin qadağan olunmuş zonanın eninin təcrübədən əldə etdiyimiz qiymətə uyğun alınması məqsədilə hesablamalarda Zn-in 3d- və Se-in 4p- halı üçün Hubbard parametrləri uyğun olaraq 4.5 və 3.5 eV götürülmüşdür [13-15].

ZnSe-nin optik xassələri LDA+ U metoduna əsaslanan təməl prinsip hesablamalarından istifadə edilməklə tədqiq edilmişdir. Bu yanaşma, keçid metallarının oksidləri üçün mühüm olan lokal Kulon qarşılıqlı təsirlərini nəzərə almaqla, materialın optik reaksiyasını dəqiq proqnozlaşdırmağa imkan verir. Optik davranışın öyrənilməsində əsas kəmiyyətlərdən biri kompleks dielektrik funksiyasıdır. Bu funksiya materialın

elektron zona quruluşu ilə onun optik xüsusiyyətləri arasında əlaqə yaradır və aşağıdakı kimi təyin olunur [16]:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i \cdot \varepsilon_2(\omega). \quad (1)$$

Burada $\varepsilon_1(\omega)$ dielektrik funksiyanın həqiqi hissəsidir və materialın dispersiya xüsusiyyətləri ilə əlaqəlidir, $\varepsilon_2(\omega)$ isə onun xəyali hissəsidir və materialın optik udulması ilə birbaşa bağlıdır. Bu udulma əsasən valent zonadan keçirici zonaya interzonal və intrazonal elektron keçidləri nəticəsində yaranır. Bu funksiya dolu və boş hallar arasında impuls matrisa elementləri əsasında hesablanı bilər.

Tezlikdən asılı olan dielektrik funksiyası optik keçidlər haqqında vacib məlumatlar verir və sındırma əmsalı, udma əmsalı və əksolma əmsalı kimi digər optik sabitlərin təyin olunması üçün əsas rol oynayır. Dielektrik funksiyanın davranışına uyğun olaraq, təməl prinsip hesablamaları vasitəsilə əldə edilmiş optik parametrlər (elektrik həssaslıq, polarizasiya qabiliyyəti və optik keçiricilik) paralel ($\parallel\omega$) və perpendikulyar ($\perp\omega$) komponentlər arasında zəif anizotropiya nümayiş etdirir. Bu xüsusiyyət ZnSe kristalının laylı quruluşunun birbaşa nəticəsidir. Bundan əlavə, kompleks dielektrik funksiyanın həqiqi və xəyali hissələrindən ZnSe üçün digər vacib optik parametrləri – udma əmsalı $\alpha_a(\omega)$, sönmə əmsalı $k(\omega)$, əksolma əmsalı $r(\omega)$ və sındırma əmsalı $n(\omega)$ – əldə etmək mümkündür. Bu parametrlər aşağıdakı şəkildə ifadə olunur [16]:

$$\alpha_a(\omega) = 2\omega \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega)}{2}}, \quad (2)$$

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} + \varepsilon_1(\omega)}{2}}, \quad (3)$$

$$k(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega)}{2}}, \quad (4)$$

Optik udma əmsalı $\alpha(\omega)$, materialdan keçən işığın vahid məsafə üzrə nə qədər udulduğunu xarakterizə

rizə edən mühüm bir parametrdir. Bu əmsal, kompleks sındırma əmsalının xəyali hissəsi olan sönmə əmsalı $k(\omega)$ ilə birbaşa əlaqəlidir. Bu əlaqə aşağıdakı tənliklə ifadə olunur:

$$\alpha_a(\omega) = 2 \frac{\omega}{c} k(\omega). \quad (5)$$

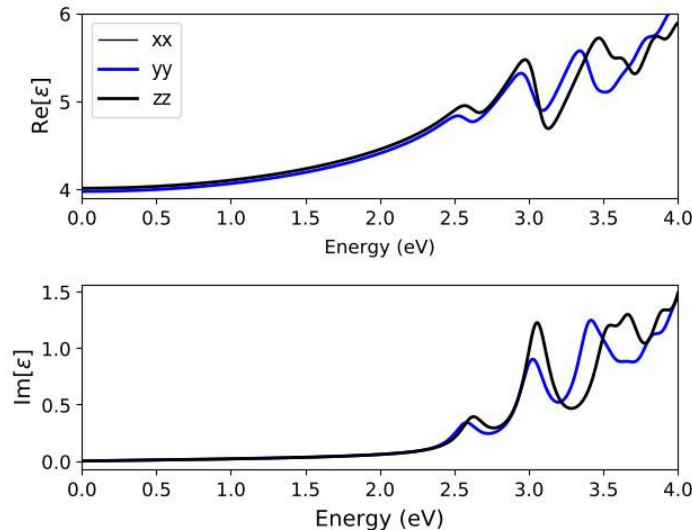
Burada: $\alpha(\omega)$ -udulma əmsalı (sm^{-1}), $k(\omega)$ - sönmə əmsalı (ölçüsüz), λ -ışığın dalğa uzunluğu (sm), ω - fotonun tezliyidir.

Əks etdirmə qabiliyyəti $r(\omega)$, işığın bir səth və ya interfeys tərəfindən əks olunma faizini izah edir və işığın materiallarla necə qarşılıqlı əlaqədə olduğunu başa düşmək üçün vacib bir optik parametrdir. Udulmaya məruz qalmayan material üçün əks etdirmə qabiliyyəti, sönmə əmsalı $k(\omega)$ və sındırma əmsalı $n(\omega)$ ilə əlaqəlidir. Normal halda əks etdirmə $r(\omega)$ düsturu aşağıda verilmişdir [16]:

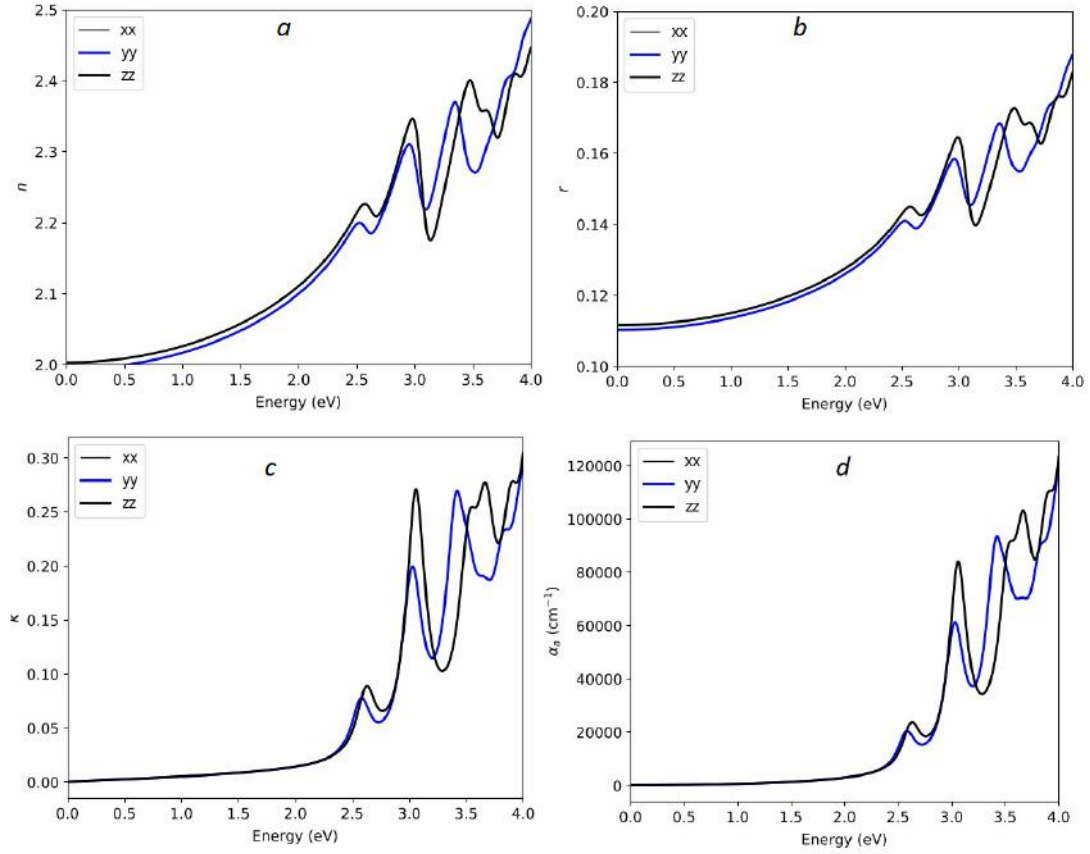
$$r(\omega) = \frac{(1 - n)^2 + k^2}{(1 + n)^2 + k^2}. \quad (6)$$

NƏTİCƏ VƏ MÜZAKİRƏ ZnSe-in HESABLANMIŞ OPTİK SPEKTRİ VƏ DİGƏR OPTİK PARAMETRLƏRİ

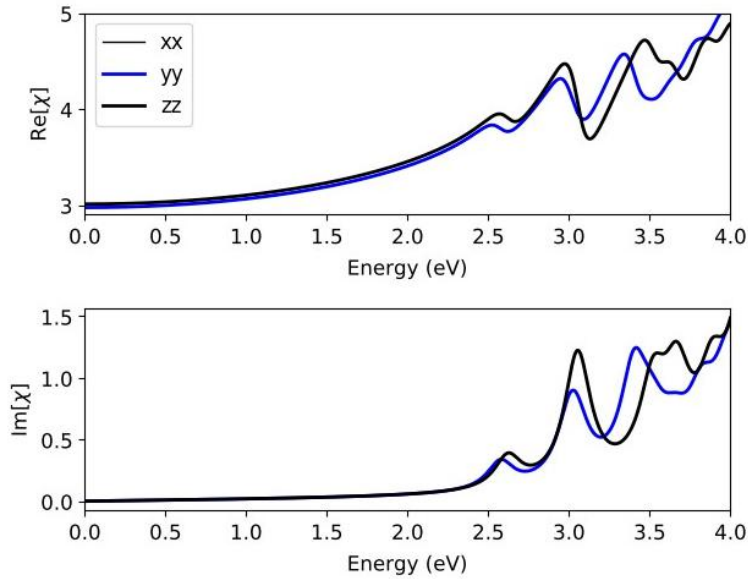
Təqdim olunan işdə ZnSe heksaqonal birləşməsinin optik xassələri LDA və Hubbard U metodu ilə təməl prinsiplərdən tədqiq edilmiş, optik parametrlər dielektrik funksiyası (həqiqi və xəyali hissə), enerjinin, dalğa uzunluğunun asılılıq qrafikləri, udma əmsalı, hesablanmış optik spektr əsasında birləşmənin qadağan olunmuş zonanın eni qiymətləndirilmişdir. Təməl prinsiplərdən hesablamalar funksional sıxlıq nəzəriyyəsinin lokal sıxlıq yaxınlaşması (DFT-LDA) və FHI psevdopotensialları istifadə olunmaqla hesablamalardan alınmış optik spektr şəkil 1-də verilmişdir. Şəkillərdə göy və qara xətlər uyğun olaraq optik parametrlərin eninə ($\perp\omega$) və uzununa ($\parallel\omega$) komponentlərinə uyğundur. Optik spektr əsasında müəyyən edilmiş enerji zolağının eni, ədəbiyyatda verilmiş eksperimental nəticələrlə uyğunluq təşkil etmişdir.



Şəkil 1. ZnSe üçün LDA+U ilə hesablanmış kompleks dielektrik funksiyası.



Şəkil 2. ZnSe üçün hesablanmış sındırma (a), əksolma (b), sönmə (k) və udulma (α) əmsalının grafik asılılıqları.



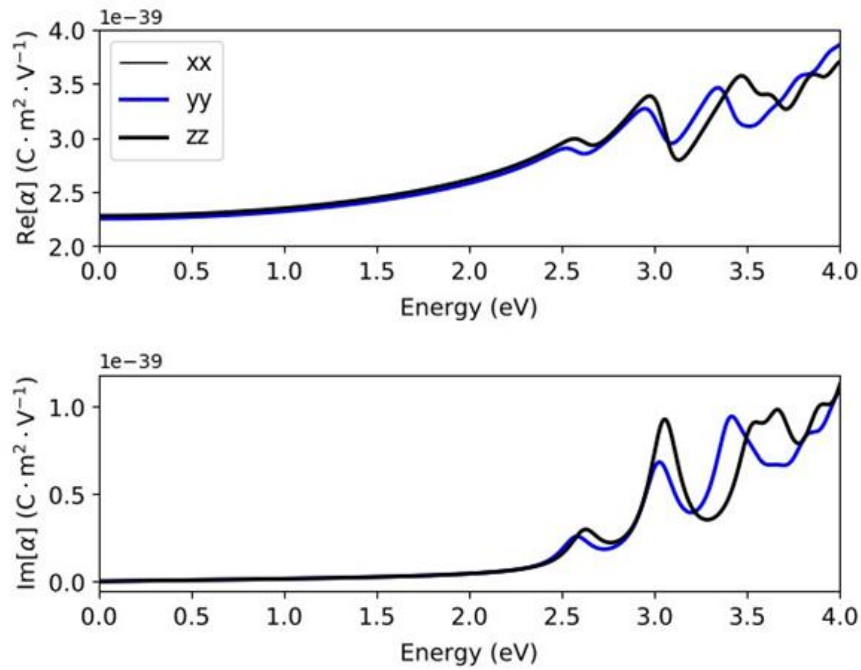
Şəkil 3. ZnSe üçün LDA+U ilə hesablanmış həssaslıq əmsalı.

Dielektrik funksiyasının asılılığına əsasən ($\epsilon(\omega)$) piklər 3 və 3.5 eV-da yerləşir. Hesablamalardan əksolma əmsalı $r=0.1$, sındırma əmsalı $n=2$ və statik dielektrik sabiti üçün isə $\text{Re}[\epsilon(\omega=0)]=4$ alınmışdır.

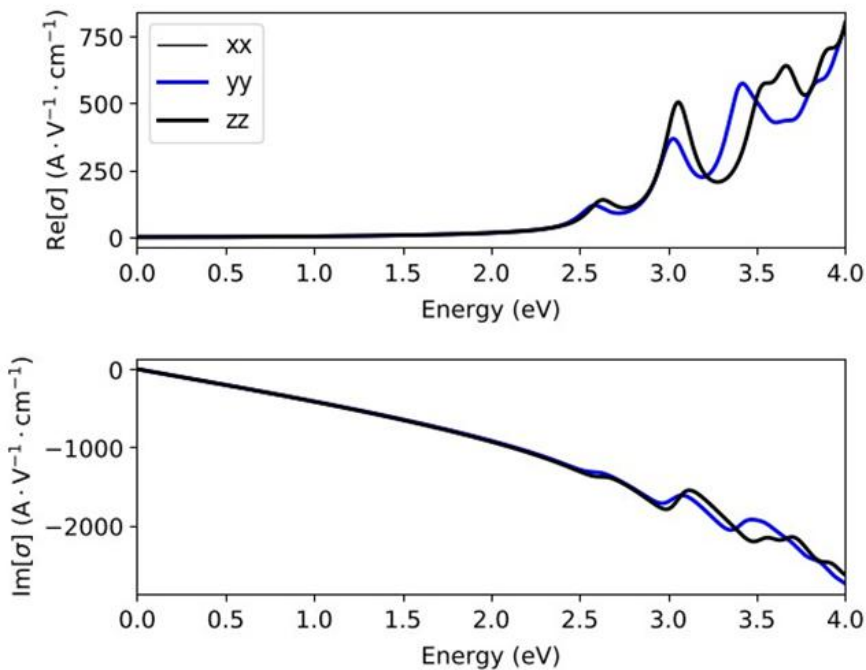
Birləşmənin dielektrik sabiti tenzoru tetraqonal koordinat sistemində diaqonal şəkllə malikdir və kristalın dielektrik xassələrində ciddi anizotropluq müşahidə olunmur. Dielektrik funksiyasının real və həqiqi komponentlərini bilməklə ZnSe üçün digər optik parametrləri hesablamaq mümkündür. İşdə həmçinin sındırma (n), əksolma (r), sönmə (k) və udma (α) əmsal-

ları hesablanmış və grafik asılılıqları şəkil 2-də verilmişdir.

Bundan əlavə kompleks həssaslıq (şəkil 3), polarlaşma dərəcəsi (şəkil 4) və optik keçiricilik üçün alınmış nəticələr (şəkil 5) paralel və perpendikulyar komponentlər arasında ciddi anizotropluğun olmadığını göstərir. Təməl prinsiplərdən hesablanmış optik spektrə-udma əmsalının enerjiddən asılılığına əsasən ZnSe üçün qiymətləndirilmiş qadağan olunmuş zonanın eni 2.4 eV olmuşdur.



Şəkil 4. ZnSe üçün LDA+U ilə hesablanmış polyarlaşma dərəcəsi.



Şəkil 5. ZnSe üçün LDA+U ilə hesablanmış optik keçiricilik.

Qeyd edək ki, ZnSe üçün LDA+U metodu ilə hesablanmış optik parametrlər üçün alınmış nəticələr təcrübi nəticələr [8] ilə uyğunluq təşkil edir.

NƏTİCƏ

İşdə ZnSe birləşməsinin optik xassələri DFT-LDA və Hubbard U metodları ilə təməl prinsiplərdən tədqiq olunmuşdur. Hesablamalar nəticəsində alınan dielektrik funksiyası, sındırma, əksolma, sönmə və udulma əmsalları, kompleks həssaslıq, polyarlaşma dərəcəsi və optik keçiricilik göstəriciləri kristalın optik anizotropiyasının zəif olduğunu göstərmişdir. Dielek-

trik funksiyanın piki 3 və 3.5 eV-da yerləşmiş, qadağan zolağın eni isə 2.4 eV olaraq qiymətləndirilmiş və bu nəticələr təcrübi məlumatlarla uyğunluq təşkil edir. Valent zonanın tavanını və keçirici zonanın dibini əsasən Se-in 4p və Zn-in 4s halları formalaşdırır. Müəyyən edilmişdir ki, ZnSe-in dielektrik tenzoru tetraqonal koordinat sistemində diaqonal şəkllə malikdir və kristalın dielektrik xassələrində ciddi anizotropiyaya müşahidə olunmur. Bu işdə aparılan hesablamalar ZnSe birləşməsinin optoelektron tətbiqlər üçün perspektivli material olduğunu göstərmişdir.

- [1] N. Ahmed, M.A. Rafiq, S. Naseem. Structural and magnetic properties of CoFe_2O_4 nanoparticles. *Materials Science-Poland*, Vol. 35, pp. 479, 2017.
- [2] V.N. Cəfərova. Magnetic properties of substituted spinel ferrites. *AJP Fizika*, Vol. XXVIII, № 1, pp. 43, 2022.
- [3] S.K. Chang, M.C. Wang, T.S. Chin. Magnetic anisotropy in cobalt ferrite. *Journal of Applied Physics*, Vol. 62, pp. 4835, 1987.
- [4] W. Benstaali, F. Boukhari, S. Matar. Optical and structural study of ferrite thin films. *Materials Science in Semiconductor Processing*, Vol. 16, pp. 231, 2013.
- [5] P.V.B. Lakshmi, B. Ramesh, K.H. Rao. Influence of rare-earth substitution on cobalt ferrites. *Crystal Research and Technology*, Vol. 44, pp. 153, 2009.
- [6] S. Dai, Q. Wang, Y. Liu. Structural evolution and magnetism in doped ferrites. *Results in Physics*, Vol. 8, pp. 628–632, 2018.
- [7] M.S. Halati, A. Rezaee Yazdi, M. Houshmand. Surface analysis of ferrite nanopowders. *Applied Surface Science*, Vol. 566, pp. 150690, 2021.
- [8] M.F.Hasaneen, M.S. El Nahhas, A.A. Marzouk. Dielectric and electrical properties of ferrites – *Materials Research Express*, Vol. 7, pp. 016422, 2020.
- [9] P. Hohenberg, W. Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review B*, Vol. 136, pp. B864, 1964.
- [10] R.G. Parr, W. Yang. *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules* – Oxford University Press, New York, Vol. IX, 333 pp., 1989.
- [11] F. Martin, S. Matthias. Numerical methods for atomic basis sets. *Computer Physics Communications*, Vol. 119, № 1, pp. 67, 1999.
- [12] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*, Vol. 13, pp. 5188–5192, 1976.
- [13] V.N. Jafarova. First-principles investigation of Co-based ferrites. *Journal of Modern Physics B*, Vol. 36, № 24, pp. 2250156, 2022.
- [14] V.N.Cəfərova, N.T. Məmmədov, M.A. Musayev. Computational study of Ga-doped ferrites. *AJP Fizika*, Vol. XXVIII, № 3, pp. 46, 2022.
- [15] V.N. Cəfərova. Structural characteristics of substituted spinels. *AMEA-nın Xəbərləri*, Vol. XXVIII, № 5, pp. 107, 2022.
- [16] H. Mehnane, B. Abidri, N. Bouarissa. Optical characterization of cobalt ferrite thin films. *Superlattices and Microstructures*, Vol. 51, pp. 772, 2012.

V.N. JAFAROVA, Kh.A. HASANOVA

SIMULATION OF THE OPTICAL PROPERTIES OF THE ZnSe COMPOUND USING A FIRST-PRINCIPLES-BASED COMPUTATIONAL METHOD

The optical properties of the hexagonal-structured ZnSe compound have been investigated based on first principles within the framework of Density Functional Theory using the Local Density Approximation (DFT-LDA) and the Hubbard U method. Calculations were carried out using the Atomistic ToolKit software package, and the electron-ion interactions were considered using the Fritz-Haber-Institute pseudopotentials. For the ZnSe crystal, key optical parameters such as complex dielectric function, refractive index, reflectivity, extinction coefficient, absorption coefficient, complex susceptibility, degree of polarization, and optical conductivity were determined for $e\parallel c$ and $e\perp c$ polarizations. The optical reflection spectra of the compound were analyzed in terms of absorption depths for these polarization directions. Additionally, the values of the optical parameters obtained for $e\parallel c$ and $e\perp c$ polarizations were compared, and it was determined that there is no significant optical anisotropy in the crystal.

Qəbul olunma tarixi: 14.05.2025