



## بررسی ویژگی‌های ساختاری، اپتیکی و گرمایی ایندیم نیتريد در فازهای فشار بالا

حمدا. صالحی\*، نادیا نواصر

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، صندوق پستی: ۶۱۳۵۷۸۳۱۵۱، اهواز - ایران

مقاله‌ی فنی

تاریخ دریافت مقاله: ۹۸/۱۲/۲۷ تاریخ پذیرش مقاله: ۹۹/۲/۲۹

### چکیده

در این مقاله ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، اپتیکی و گرمایی ایندیم نیتريد در فازهای تحت فشار مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش شبه‌پتانسیل، در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسباتی کوانتوم-اسپرسو با تقریب‌های  $GGA$ ،  $LDA$  و  $PBE$  انجام شده است. نتایج نشان می‌دهد که ایندیم نیتريد در فاز تحت فشار خاصیت نیمه‌رسانایی خود را حفظ کرده و دارای ضریب شکست استاتیک ۲/۷۵ می‌باشد. هم‌چنین بیش‌ترین سهم در نوار ظرفیت مربوط به اوربیتال  $s$  اتم نیتروژن و در نوار رسانش مربوط به اوربیتال‌های  $s$  و  $p$  اتم ایندیم است. نتایج به‌دست آمده از ویژگی‌های اپتیکی حاکی از انطباق تقریبی ساختار نواری با سهم موهومی تابع دی‌الکتریک و هم‌چنین برابری تقریبی گاف نواری با گاف اپتیکی است. نتایج به‌دست آمده با دیگر داده‌های موجود سازگاری دارد.

**کلیدواژه‌ها:** نظریه‌ی تابعی چگالی، ایندیم نیتريد، گاف نواری، گاف اپتیکی

## Investigation of structural, optical, and thermal properties of indium nitride in high pressure phases

H. Salehi\*, N. Navasr

Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, P.O.Box: 6135783151, Ahvaz – Iran

Technical Paper

Received 17.3.2020, Accepted 18.5.2020

### Abstract

In this paper, the structural, electronic, optical, and thermal properties of indium nitride in the pressure phases are investigated. The calculations are performed using the pseudopotential method in the framework of density functional theory and by using the quantum-espresso Package. In the calculations, the exchange-correlation terms of  $LDA$ ,  $GGA$ , and  $PBE0$  approximation are used. The results show that indium nitride retains its semiconducting properties under the pressure phase and has a static refractive index of 2.75. And the largest part in the valence band is related to the orbital  $s$  of the N atom and in the conduction band is to the orbitals of  $s$  and  $p$  of the In atom. The results of the optical properties show that the band structure approximation corresponds to the imaginary contribution of the dielectric function as well as the approximate equality of the bandgap to the optical bandgap. The results are consistent with other available data.

**Keywords:** Density functional theory, Indium nitride, Band gap, Optical gap

\*Email: salehi\_h@scu.ac.ir

۱. مقدمه

در سال‌های اخیر ایندیم نیتريد (InN) به‌عنوان یک نیمه‌رسانای III-V به‌علت داشتن گاف انرژی مستقیم در حدود ۰.۷-۱.۸ الکترون‌ولت و ویژگی‌های منحصر به فرد مانند جرم مؤثر کوچک، تحرک الکترونی بالا، ثابت پیزوالکتریک بالا، پایداری شیمیایی خوب، ترکیب فعال در قطعات الکتريکی و اپتوالکتریک مانند سنسورهای گرمایی، دیودهای گسیل نور و دیودهای لیزری که در محدوده‌ی طیفی فرابنفش، آبی و سبز کار می‌کنند، شناخته شده است [۱]. ساختارهای معمول ایندیم نیتريدور تسایت و بلندروی هستند و در فشارهای بالا یک گذار از ساختار ورتسایت به سنگ نمک دارد. رفتار ساختاری با افزایش فشار مسئله‌ای است که در سال‌های اخیر مورد بررسی قرار گرفته است. فشار یک متغیر ترمودینامیکی مناسب برای آشکار کردن ویژگی‌های مکانیکی بیشتر جامدات و آلیاژها می‌باشد. از آن‌جا که جاذبه‌ی ملکولی جامدات بسیار مهم است، فاصله‌ی بین ملکولی در اثر اعمال فشار تغییر می‌کند، به‌طوری‌که ویژگی‌های فازهای فشار بالا می‌تواند با ویژگی‌های ساختار در حالت پایدار متفاوت باشد [۲].

۲. روش انجام محاسبات

محاسبات با استفاده از روش ابتدا به ساکن در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی توسط کد کوانتوم اسپرسو با شبه‌پتانسیل در پایه‌ی موج تخت انجام شدند [۳]. در این بسته‌ی محاسباتی، معادلات تک‌ذره‌ای کوهن-شم با استفاده از روش شبه‌پتانسیل و بسط توابع موج الکترون‌های ظرفیت برحسب امواج تخت حل می‌شوند [۴]. از آن‌جا که در روش تابعی چگالی با استفاده از موج تخت، حجم محاسبات زیاد است، بنابراین انتخاب شبه‌پتانسیلی که بتواند خواص بلور را توصیف کرده و حجم محاسبات را کاهش دهد، از اهمیت بسیاری برخوردار است. در این‌جا از شبه‌پتانسیل‌های بار پایسته<sup>۱</sup> با تقریب‌های شیب تعمیم‌یافته (GGA<sup>۲</sup>) و چگالی موضعی (LDA<sup>۳</sup>) استفاده شده است. پارامترهای اولیه شبکه‌ی بلوری از داده‌های تجربی به‌صورت  $a=۳.۵۵$ ,  $c=۵.۷۱$  آنگستروم استفاده شد [۵]. پس از انجام آزمون‌های هم‌گرایی لازم، انرژی قطع موج ۹۰ ریدبرگ و مش یکنواخت  $۸ \times ۸ \times ۵$  برای انجام محاسبات در نظر گرفته شد.

۳. نتایج

۱.۳ بررسی ویژگی‌های ساختاری

اگر چه فاز سنگ‌نمکی، فاز تحت فشار خارجی ترکیب ایندیم نیتريد محسوب می‌شوند، اما پس از آن‌که گذار فاز اتفاق افتاد، ترکیب در حالتی با انرژی کمینه در فاز جدید آرام می‌گیرد و فشار درونی ترکیب برابر صفر می‌شود. پارامتر شبکه‌ی تعادلی مربوط به هر دو تقریب در جدول ۱ گزارش شده است. پس از انجام محاسبات، ساختار ایجاد شده از این فاز توسط نرم‌افزار Xcrysden در شکل ۱ نمایش داده شده است. چنان‌چه فشار در واحد حجم به اندازه‌ی  $dP$  افزایش یابد حجم موردنظر به اندازه‌ی  $dV$  کاهش می‌یابد. از نسبت این دو عبارت، می‌توان مدول حجمی را به‌صورت زیر نوشت [۶].

$$B = -V \frac{dP}{dV}, V = V_0 \quad (1)$$

هرچه این کمیت بیشتر باشد، بلور سخت‌تر بوده و خاصیت تراکم‌پذیری آن کم‌تر است و در نتیجه انتظار می‌رود اتم‌ها در فاصله‌ی دورتری از هم قرار داشته باشند. ثابت شبکه‌ی تعادلی و مدول حجمی ( $B$ ) با به‌کارگیری معادله‌ی مورناگون در منحنی انرژی برحسب حجم به‌دست آمده است. نتایج حاصل از ثابت‌های شبکه، مدول حجمی، مشتق و تراکم‌پذیری ساختار نمک طعام ترکیب ایندیم نیتريد در جدول ۱ گزارش شده است.

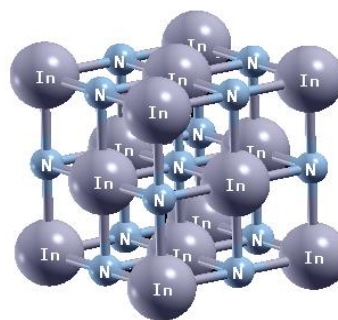
با محاسبه‌ی مدول حجمی می‌توان میزان تراکم‌پذیری ترکیب ایندیم نیتريد را در فاز نمک طعام سنجید و با حالتی‌که این ترکیب در فاز پایدار خود می‌باشد، مقایسه کرد.

جدول ۱. مقادیر محاسبه شده برای پارامترهای ساختاری، مدول حجمی، مشتق آن و تراکم‌پذیری ایندیم نیتريد در فاز نمک طعام در پژوهش حاضر و نتایج دیگران

کمیت محاسبه شده	LDA	GGA	کار نظری [۷]
$B(GPa)$	۱۵۵.۵	۱۳۲	۱۷۰
$B_0'$	۴.۳۶	۳.۷۵	۴.۶۳
$K(GPa)^{-۱}$	۰.۰۰۶	۰.۰۰۷	-
$a(\text{Å})$	۴.۷۷	۴.۷۸	-

1. Norm Conserving  
2. Generalized Gradient Approximation  
3. Linear Discriminant Analysis

مشارکت اوربیتال‌های مختلف در نوارهای رسانش و ظرفیت و نیز قله‌های موجود در نمودار چگالی حالت‌های الکترونی کلی در هر دو تقریب GGA و LDA، نمودار چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اوربیتال‌های ظرفیت  $s$ ،  $p$  و  $d$  اتم ایندیم در تقریب GGA و  $s$  و  $p$  اتم نیتروژن در تقریب LDA ساختار نمک طعام به ترتیب در شکل‌های ۳، ۴ و ۵ نمایش داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، بیش‌ترین سهم اوربیتالی در ایجاد نوارهای اطراف تراز فرمی، مربوط به اوربیتال‌های  $s$  و  $p$  اتم ایندیم و اوربیتال  $p$  اتم نیتروژن می‌باشد.



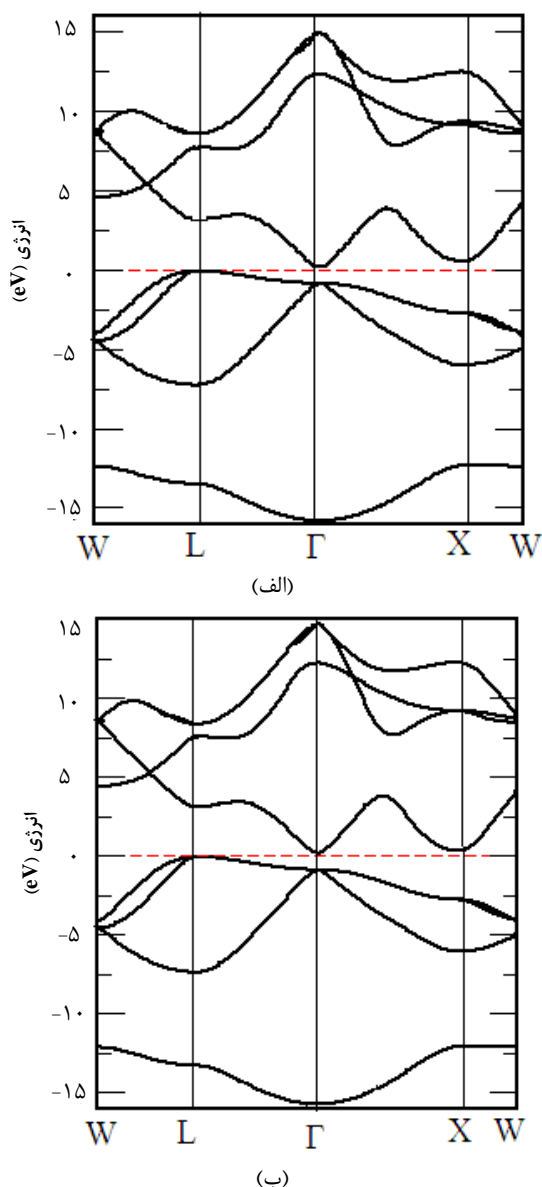
شکل ۱. ساختار بلوری ترکیب ایندیم نیتريد در فاز نمک طعام.

مدول حجمی ترکیب ایندیم نیتريد ساختار نمک طعام از دو ساختار ورتسایت و بلندروی بیش‌تر و تراکم‌پذیری آن کم‌تر است. بنابراین این ساختار سختی بالا و تراکم‌پذیری کم‌تری نسبت به دو ساختار دیگر دارد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، مقدار مدول حجمی در تقریب LDA نسبت به تقریب GGA بزرگ‌تر است که دور از انتظار نیست. زیرا مقادیر ثابت‌های شبکه در تقریب LDA نسبت به تقریب GGA کوچک‌تر هستند. بنابراین در این تقریب بلور سخت‌تر است و از آن‌جا که مدول حجمی معیاری از سختی بلور است، مقدار بیش‌تری دارد.

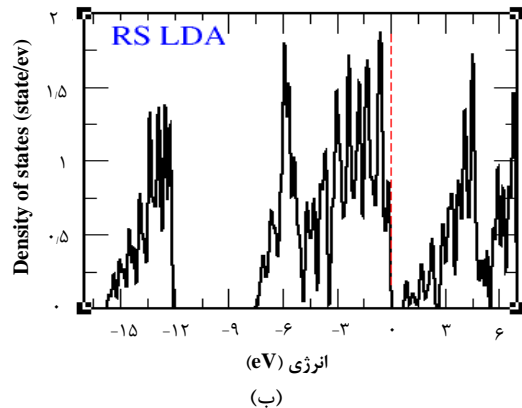
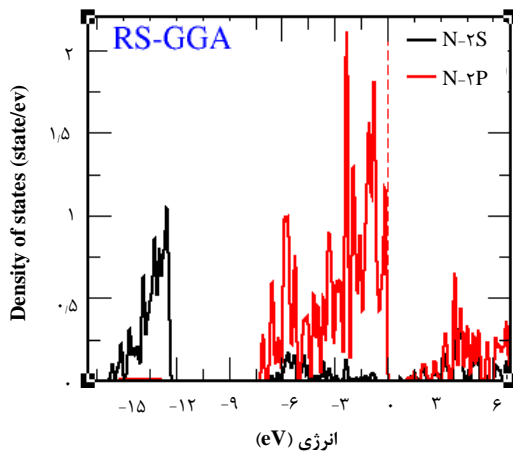
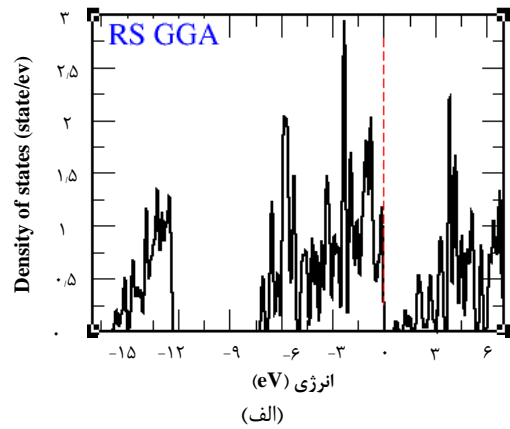
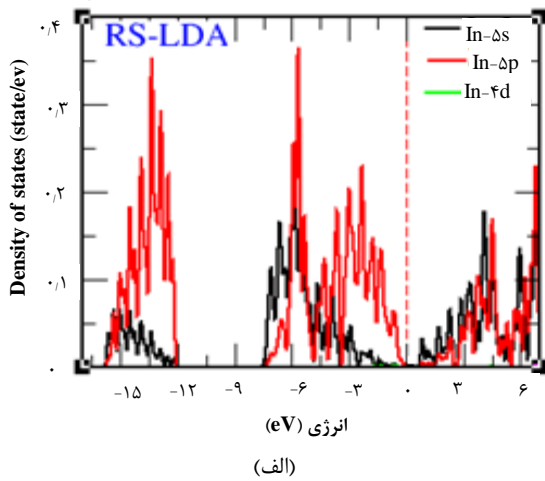
### ۲.۳ ویژگی‌های الکترونی

کاربرد یک ماده در یک فاز معین زمانی مشخص می‌شود که نوع ماده و بزرگی گاف نواری آن مشخص شود. یکی از روش‌های تعیین این دو پارامتر، رسم ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی آن ترکیب است. ساختار نواری برای فاز مورد نظر در شکل ۲ رسم شده است. در هر دو نمودار انرژی در بازه‌ی ۱۵- تا ۱۵ الکترون‌ولت انتخاب شده و انرژی فرمی بر روی صفر تراز شده است.

ساختارهای نواری رسم شده بیان‌گر این است که ترکیب ایندیم نیتريد در فاز نمک طعام، دارای گاف غیرمستقیم و نیمه‌رسانا می‌باشد؛ به این معنی که ترکیب ایندیم نیتريد با گذار از فاز پایدار ورتسایت به فاز نمک طعام ماهیت نیمه‌رسانایی خود را از دست نمی‌دهد. در فرایند جذب غیرمستقیم کمینه‌ی گاف انرژی ساختار نواری مربوط به الکترون‌ها و حفره‌هایی است که به اندازه‌ی یک بردار موج از یک‌دیگر فاصله دارند. در این حالت یک گذار فوتونی مستقیم با انرژی گاف کمینه نمی‌تواند لازمه‌ی پایستگی بردار موج را برآورده کند، زیرا بردارهای موج فوتون در گستره‌ی انرژی موردنظر قابل چشم‌پوشی هستند. برای بررسی چگونگی



شکل ۲. ساختار نواری ایندیم نیتريد در فاز نمک طعام با استفاده از تقریب (الف) GGA و (ب) LDA.

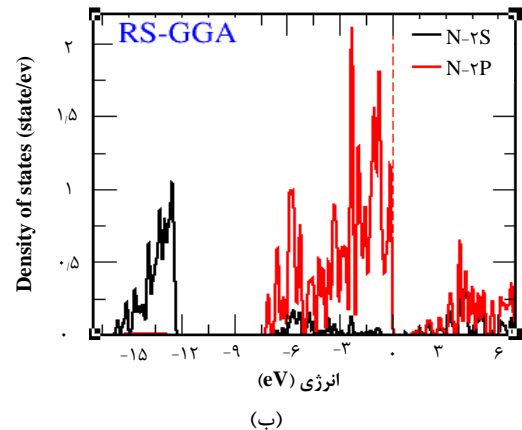
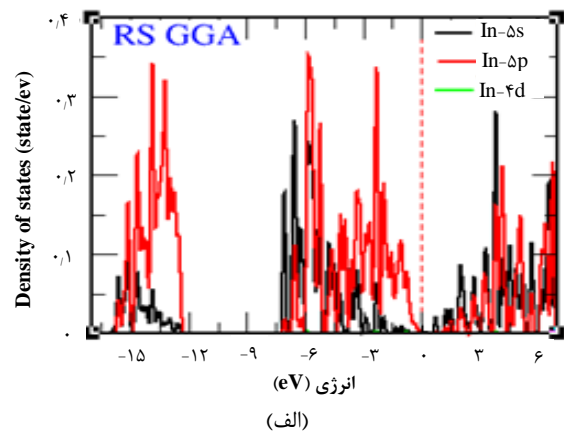


شکل ۳. نمودار چگالی حالت‌های کلی برای ترکیب ایندیم نیتريد در ساختار نمک طعام و با استفاده از تقریب (الف) GGA و (ب) LDA.

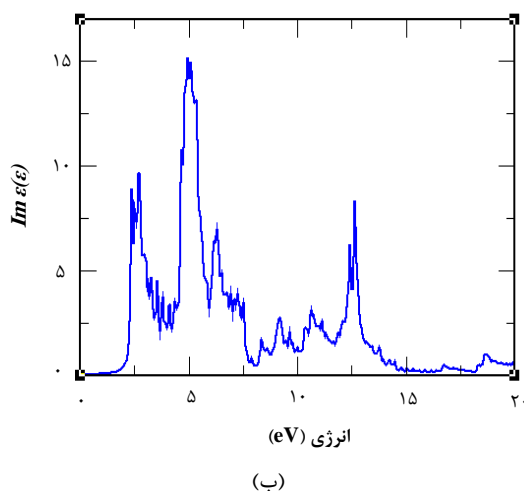
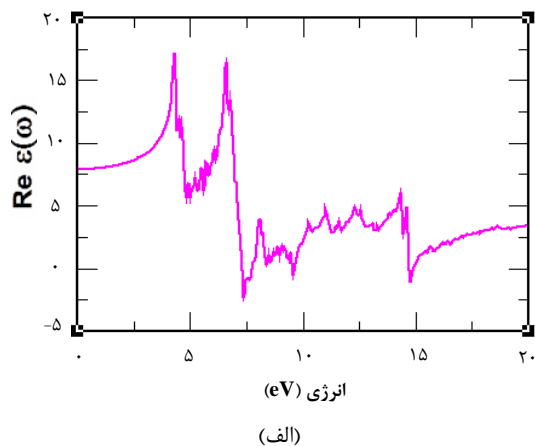
شکل ۵. نمودار چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اوربیتال‌های اتم‌های (الف) ایندیم، (ب) نیتروژن با تقریب LDA.

### ۳.۳ بررسی خواص اپتیکی

گاف نواری اکثر نیمه‌رساناها در محدوده‌ی صفر تا ۴ الکترون‌ولت است. فوتون‌هایی با انرژی کافی می‌توانند منجر به تحریک الکترون‌ها از نوارهای ظرفیت پر به نوارهای رسانش خالی شوند. طیف اپتیکی نیمه‌رساناها منبع وسیعی از اطلاعات را برای مطالعه‌ی ساختار نواری، خواص الکترونی، برانگیختگی‌ها و نوسانات شبکه در اختیار ما قرار می‌دهد. این خواص مبنای بسیاری از کاربردهای نیمه‌رساناها از قبیل لیزرها، دیودهای گسیل نور و آشکارسازهای نوری هستند [۸]. تابع دی‌الکتریک برای توصیف پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی به‌کار می‌رود و با استفاده از آن می‌توان ویژگی‌های اپتیکی ماده، رسانندگی الکتريکی و کاربردهای تکنولوژیکی بسیاری را تعیین کرد که به‌صورت  $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + \epsilon_2(\omega)$  نشان داده می‌شود [۹]. ویژگی



شکل ۴. نمودار چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اوربیتال‌های اتم‌های (الف) ایندیم و (ب) نیتروژن با تقریب GGA.



شکل ۶. نمودار تغییرات (الف) سهم حقیقی و (ب) سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی در راستای  $x$  با تقریب  $PBE$ .

### ۱.۳.۳ تابع اتلاف انرژی

طیف اتلاف انرژی الکترون کمیته مهم جهت بررسی خواص ماکروسکوپی و میکروسکوپی جامدات است. این طیف دربردارنده‌ی تحریک دسته‌جمعی الکترون‌های ظرفیت (پلاسمون‌ها) به داخل حالت‌های اشغال شده در نوار رسانش می‌باشد. تابع اتلاف معکوس سهم موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط است و از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید [۱۰]:

$$EELS(\omega) = Im \left[ \frac{1}{\epsilon_1 + i\epsilon_2} \right] = \frac{-\epsilon_2}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \quad (3)$$

این تابع متناسب با احتمال اتلاف انرژی  $E$  در واحد طول برای یک الکترون در حال عبور از محیط است. شاخص‌ترین قله در طیف اتلاف انرژی به‌عنوان قله‌ی پلاسمونی شناخته می‌شود که بیان‌گر برانگیختگی‌های جمعی چگالی بار در محیط است. در یک بلور امکان وجود چند قله‌ی پلاسمونی

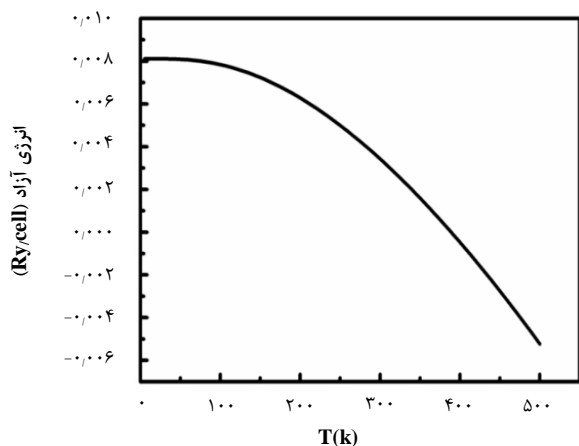
اپتیکی ترکیب با سهم موهومی تابع دی‌الکتریک طبق رابطه‌ی زیر داده می‌شود با:

$$\epsilon_r(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum_j \langle i | M | j \rangle^2 \times f_j (1 - f_j) \times \delta(E_f - E_i - \omega) d^3k \quad (2)$$

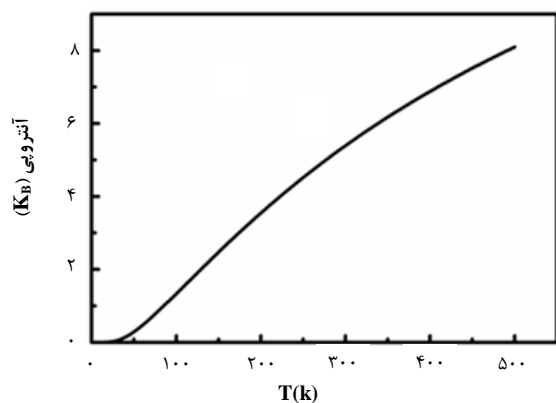
که در آن  $M$  ماتریس دو قطبی،  $i$  و  $j$  به ترتیب حالت‌های اولیه و نهایی،  $f_i$  تابع توزیع فرمی برای حالت  $i$  ام و  $E_i$  انرژی الکترون در حالت  $i$  ام می‌باشد. سهم حقیقی را می‌توان با توجه به سهم موهومی و با استفاده از روابط کرامرز-کرونینگ تعیین کرد.

محاسبات خواص اپتیکی نیز فقط توسط تقریب  $PBE$  صورت گرفته است. از آن‌جا که در فاز نمک طعام مؤلفه‌های اصلی تانسور دی‌الکتریک در سه راستا با هم برابر و به صورت  $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz}$  بوده و ساختار همسانگرد است، بنابراین محاسبه‌ی یک مؤلفه برای این فاز ضروری است. سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در شکل ۶ الف رسم شده است و شکل ۶ ب سهم موهومی تابع دی‌الکتریک را نشان می‌دهد. برای ساختار نمک طعام، جذب از انرژی ۲٫۸ الکترون‌ولت شروع و در ۵ الکترون‌ولت به بیش‌ترین مقدار خود می‌رسد. این سهم تا قبل از انرژی ۲٫۸ الکترون‌ولت دارای تغییراتی آرام می‌باشد. این تغییرات که ناشی از جذب فوتون‌های کم انرژی است می‌تواند منجر به گذارهای درون‌نواری شود. پس از انرژی ۲٫۸ الکترون‌ولت، سهم موهومی به صورت ناگهانی افزایش می‌یابد که این امر بیان‌گر جذبی است که به دنبال آن گذارهای بین‌نواری اتفاق می‌افتد و الکترون‌ها با به دست آوردن این انرژی، گاف نواری را طی کرده و از نوار ظرفیت وارد نوار رسانش می‌شوند. جذر  $\epsilon_1(\omega)$  ضریب شکست استاتیک،  $n(\omega) = \sqrt{\epsilon_1(\omega)}$  را نتیجه می‌دهد که در این فاز برابر است با  $n = \sqrt{Re[\epsilon(\omega)]} = \sqrt{7.6} = 2.75$

ریشه‌ی سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک، یا به بیان دیگر مقدار انرژی که به ازای آن کمیت  $\epsilon_1(\omega)$  صفر می‌گردد دارای مفهوم فیزیکی است و در واقع شرط لازم برای پلاسمون‌های حجمی در ماده هستند ولی شرط کافی برای آن‌ها، وجود اتلاف انرژی است.



شکل ۸. نمودار تغییرات انرژی آزاد نوسانی برحسب دما برای ترکیب ایندیم نیتريد در ساختار نمک طعام با استفاده از تقریب GGA.



شکل ۹. نمودار تغییرات آنتروپی برحسب دما برای ترکیب ایندیم نیتريد در ساختار نمک طعام با تقریب GGA.

#### ۲.۴.۳ ظرفیت گرمایی در حجم ثابت

ظرفیت گرمایی یکی از بارزترین ویژگی‌های گرمایی یک ترکیب در کاربرد آن می‌باشد. ظرفیت گرمایی با مشتق آنتروپی نسبت به دما و یا به عبارتی با شیب نمودار تغییرات آنتروپی نسبت به دما رابطه‌ی مستقیم دارد. از این رو انتظار می‌رود که مقدار ظرفیت گرمایی نیز همانند آنتروپی با افزایش دما، افزایش یابد. نمودار تغییرات ظرفیت گرمایی نسبت به دما با استفاده از تقریب GGA در شکل ۱۰ نشان داده شده است. با توجه به قانون دولن پتی در دماهای بالا مقدار ظرفیت گرمایی ویژه به یک مقدار اشباع می‌رسد. با توجه به محاسبات انجام شده برای تقریب GGA در دمای ۳۰۰ کلوین ظرفیت گرمایی مقدار تقریباً ۶R است که معادل ۴۸/۸۸۴ J/K.mol را به خود می‌گیرد. در دماهای پایین، مقدار ظرفیت گرمایی به طور قابل ملاحظه‌ای افت کرده و با نسبت  $T^3$  رفتار می‌کند، تا جایی که در دمای صفر مطلق مقدار آن به صفر میل می‌کند. این نتیجه با واقعیات تجربی سازگاری خوبی دارد.

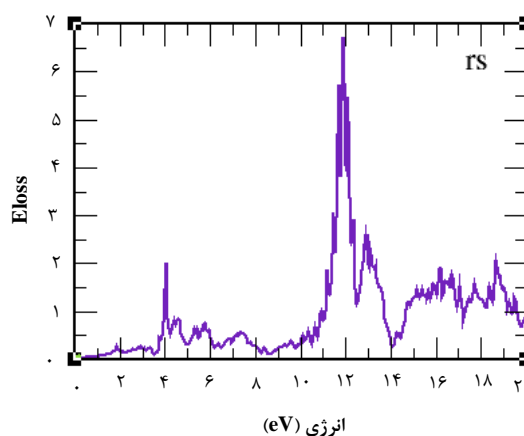
وجود دارد. قله‌ی پلاسمونی مربوط به نوسان پلازما است و بسامد منطبق بر آن بسامد پلازما نامیده می‌شود. طیف اتلاف انرژی در بازه‌ی صفر تا ۲۰ الکترون‌ولت در شکل ۷ رسم شده است. با توجه به نمودار اتلاف انرژی الکترون در این ساختار از حدود ۰/۹ الکترون ولت شروع شده، که مربوط به گاف نواری مستقیم بالای تراز فرمی است، و در انرژی ۱۲ الکترون ولت بیش‌ترین اتلاف انرژی رخ خواهد داد، که در واقع همان انرژی مربوط به پلاسمون‌های حجمی است.

#### ۴.۳ خواص گرمایی

در نرم‌افزار اسپرسو برای بررسی ویژگی‌های گرمایی از تقریب شبه‌همانگ<sup>۱</sup> QHA استفاده می‌شود. در این تقریب با محاسبه‌ی انرژی آزاد هلمهولتز و استفاده از قوانین ترمودینامیک می‌توان ویژگی‌های گرمایی ترکیب را به دست آورد. اندازه‌ی انرژی آزاد نوسانی نقطه‌ی صفر برای ایندیم نیتريد در فاز نمک طعام در فشار صفر با استفاده از تقریب GGA به ترتیب برابر با ۰/۰۰۸ (Ry/Cell) می‌باشد. نمودار تغییرات انرژی آزاد نوسانی برحسب دما با استفاده از تقریب GGA در شکل ۸ رسم شده است.

#### ۱.۴.۳ آنتروپی

در شکل ۹ با استفاده از تقریب GGA نمودار تغییرات آنتروپی برحسب دما رسم شده است. همان‌طور که انتظار می‌رود، مقدار آنتروپی با افزایش دما، افزایش می‌یابد. از این نمودار چنین برداشت می‌شود که مقدار آنتروپی از دمای حدود ۲۵ کلوین به سرعت افزایش می‌یابد و در دمای ۳۰۰ کلوین، که دمای اتاق در نظر گرفته می‌شود، به مقدار ۵/۸۳۱ K<sub>B</sub> می‌رسد.

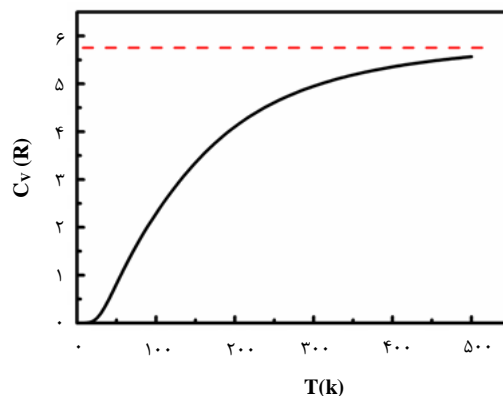


شکل ۷. نمودار طیف اتلاف انرژی ایندیم نیتريد در ساختار نمک طعام با استفاده از تقریب PBE.

1. Quasi-Harmonic Approximation

## مراجع

1. H. Lu, W.J. Schaff, L.F. Eastman, *Surface chemical modification of In N for sensor application*, *Applied Physics*, **96**, 3577-3579 (2004).
2. C.M. Fang, C.A.de Wijs, *Phonon spectrum and thermal properties of cubic Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> from first-principles calculations*, *Journal of Applied physics*, **93**, 5175 (2003).
3. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, *Quantum Espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials*, *Condensed Matter*, **21**, 395502 (2009).
4. G.B. Bachelet, D.R. Hamann, M. Shluter, *Pseudopotentials that work: From H to Pu*, *Physical Review*, B **26**, 4199 (1982).
5. Z. Qian, et al, *Experimental studies of lattice dynamica properties in indium nitride*, *Condensed Matter*, **16**, R381 (2004).
6. Z. Javdani, *Investigation of structural and magnetic properties using density functional theory of Strontium mono ferrite(SrFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) composition*, *Master Thesis, Shahid Chamran University of Ahvaz*, (1391) (In Persian).
7. I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan, *Band Parameters for III-V compound semiconductores their alloyas*, *J. Appl. Phys*, **89**, No.11, 5815 (2001).
8. S.Q. Wang, H.Q. Ye, *Plane-wave pseudopotential study on mechanical and electronic properties for IV and III-V crystalline phases with zinc-blende structure*, *Physical Review*, B **66**, 235111 (2002).
9. A.M. Sanchez, *Electronic structure and optical properties of III-N nanowires*, *PhD Theses, University of Valencia* (2010).
10. J. Furthmuller, F. Bechstedt, *Band structures and optical spectra of InN polymorphs: Influence of quasiparticle and excitonic effects*, *Physical Review*, **B72**, 205106 (2005).



شکل ۱۰. نمودار تغییرات ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت برای ترکیب ایندیم نیتريد در ساختار نمک طعام با تقریب GGA.

## ۴. نتیجه گیری

در این مقاله ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، اپتیکی و گرمایی ایندیم نیتريد در فازهای تحت فشار با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی و تقریب‌های LDA، GGA و PBE مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاصل از بررسی ترکیب ایندیم نیتريد به صورت زیر است:

بررسی ساختار نوارهای انرژی ترکیب در فاز تحت فشار بیانگر خاصیت نیمه‌رسانا بودن این ترکیب است. هم‌چنین مدول حجمی ترکیب ایندیم نیتريد ساختار نمک طعام از دو ساختار ورتسایت و بلندروی بیش‌تر و تراکم‌پذیری آن کم‌تر است. بنابراین این ساختار سختی بالا و تراکم‌پذیری کم‌تری نسبت به دو ساختار دیگر دارد. بررسی ویژگی‌های گرمایی برای دو فاز بلندروی و نمک طعام نشان می‌دهد که ظرفیت گرمایی این ترکیب در دماهای پایین طبق نتایج تجربی متناسب با توان سوم دما می‌باشد و در دماهای بالا به یک مقدار اشباع می‌رسد که به دما وابسته نیست؛ این نتیجه با واقعیات تجربی سازگار است. علاوه بر این نتایج به دست آمده در بسیاری از موارد با دیگر داده‌های موجود سازگاری مناسبی دارد.