

An investigation of structural, electronic and optical properties of HgTe in cinnabar phase using pseudopotential method

Hamdollah Salehi^{1*}
Zeinab Izadi¹

Received: 2015-12-16
Accept: 2018-03-14

Abstract

In this paper, the structural, electronic and optical properties of Mercury Telluride (HgTe) in hexagonal phase have been studied. The calculations have been performed with pseudopotential method in density functional theory (DFT) framework using Quantum-Espresso package. It can be seen from band structure calculations that the cinnabar phase has semi-conducting property. The calculation of the real part of dielectric function leads to refractive index 4.489 for hexagonal phase.

Keywords: *Mercury Telluride, Density functional theory, Optical properties, Hexagonal phase.*

¹ Department of physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.

* Corresponding Author; E-mail: salehi_h@scu.ac.ir

بررسی ویژگی‌های ساختاری و الکترونی و اپتیکی ترکیب تلوراید جیوه در فاز سینابار^۱

حمداله صالحی^{۲*}، زینب ایزدی^۲

تاریخ ارسال: ۹۴/۹/۲۵

تاریخ تصویب: ۱۳۹۶/۱۲/۲۳

چکیده

در این مقاله خواص ساختاری و الکترونی و اپتیکی ترکیب تلوراید جیوه در فاز هگزاگونال بررسی و با نتایج کارهای دیگر مقایسه می‌شود. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو صورت گرفته است. نتایج ساختار نواری نشان‌دهنده خاصیت نیم‌رسانایی این ترکیب در فاز سینابار می‌باشد. محاسبه سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک، ضریب شکست را برای فاز سینابار ۴/۴۸۹ می‌دهد. نتایج حاصل از سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نشان‌دهنده مطابقت گاف اپتیکی با گاف نواری می‌باشد.

واژه‌های کلیدی: تلوراید جیوه، فاز هگزاگونال، نظریه تابعی چگالی، خواص اپتیکی.

^۱ شناسه دیجیتال (DOI): 10.22051/jap.2018.7804.1020

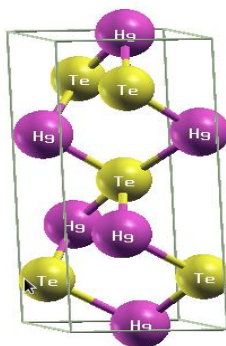
^۲ گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، ایران.

* نویسنده مسئول: salehi_h@scu.ac.ir

۱. مقدمه

ترکیب تلوراید جیوه یکی از مواد نیم‌رسانای متعلق به گروه II-IV می‌باشد. در سال‌های اخیر این دسته از نیم‌رساناها به دلیل داشتن گاف نواری مستقیم و توانایی گسیل نور در دمای اتاق مورد توجه بسیاری واقع شده‌اند. این ترکیبات در بسیاری از زمینه‌ها، از قبیل ابزارهای لیزر حالت جامد، ابزارهای فوتوولتائیک، سلول‌های خورشیدی، سیستم‌های کنترل از راه دور، فیلم‌های نازک، ترانزیستورها، آشکاراها، سیستم‌های تصویربرداری و غیره کاربرد فراوان دارند. این ترکیب در فشار معمولی دارای فاز مکعبی مرکز سطحی و ساختار بلندروی می‌باشد. در این فاز، ترکیب دارای خاصیت شبه‌فلزی (نیم‌رسانایی با گاف نواری صفر) است [۳-۱].

مطالعات تجربی بر روی تلوراید جیوه به وسیله پراش پرتو X یک گذار فاز مرتبه اول از ساختار بلندروی به ساختار هگزاگونال سینابار (نیم‌رسانا) در فشار ۱/۲۵ گیگا پاسکال و سپس به ساختار نمک طعام (فلز) در فشار ۸ گیگاپاسکال نشان می‌دهند [۴]. شکل ۱ به صورت شماتیک ترکیب تلوراید جیوه را در فاز ساختاری سینابار نشان می‌دهد. در سال ۱۹۷۹، شالمن و مک‌گیل با استفاده از روش بستگی قوی به مطالعه ابرشبکه‌های HgTe و CdTe پرداختند و با رسم ساختار نواری برای حالت توده این ترکیب در فشار معمولی مقدار گاف نواری صفر را به دست آوردند. همچنین در سال ۲۰۱۱، سوان و همکاران به مطالعه ساختار نواری سیستم‌های HgX (X=S, Se, Te) با استفاده از تقریب QSGW هیبریدی و به کار بردن برهم کنش اسپین مدار پرداختند. آن‌ها دریافتند که HgTe دارای یک ساختار نواری معکوس با گاف انرژی $E_0 = -0.18\text{eV}$ می‌باشد. نتایج آن‌ها در توافق خوبی با اندازه‌گیری‌های فوتوگسیل توسط اروکی و دیگران بود. بنابر اطلاعات موجود در فازهای این ترکیب در فشارهای زیاد، کارهای بسیار کمی در دسترس می‌باشد، لذا در این جا برخی خواص این ترکیب را در فاز سینابار بررسی می‌کنیم.



شکل ۱ یاخته واحد ترکیب تلوراید جیوه در فاز سینابار.

۲. روش محاسبات

محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام شده است. در این بسته محاسباتی، معادلات تک‌ذره کوهن-شم با استفاده از روش شبه‌پتانسیل و بسط تابع موج الکترون‌های ظرفیت بر حسب امواج تخت حل می‌شود. در محاسبات از شبه‌پتانسیل‌های ساخته شده به روش بار پایسته بر پایه تقریب شیب تعمیم‌یافته (GGA) استفاده شده است. در تقریب چگالی موضعی، انرژی تبادل-همبستگی به صورت یکنمایی تعریف می‌شود، اما در GGA شکل کلی انرژی تبادل-همبستگی چنین است،

$$\rho(r) \quad \epsilon_X^{Unif}$$

$$E_{XC}^{GGA}[\rho(r)] = \int \rho(r) \epsilon_X^{Unif}[\rho(r)] F_X(s) d^3r$$

که در آن، $r(r)$ چگالی و e_X^{Unif} انرژی تبادل گاز یکنواخت است که خود تابعی از چگالی است. علاوه بر این، نحوه انتخاب تابعی F_X به تقریب‌های مختلف می‌انجامد. ارییتال‌های ظرفیت در این ترکیب برای اتم Hg، عبارت است از ۵d و ۶s و برای اتم Te عبارت است از ۵s و ۵p. پس از انجام تست‌های همگرایی لازم، مقدار انرژی قطع تابع موج تخت برابر با ۵۰ Ry انتخاب شد. انتگرال‌گیری بر روی ناحیه اول بریلوئن با استفاده از مش یکنواخت $8 \times 8 \times 6$ انجام شد.

۳. نتایج و بحث

الف: خواص ساختاری

فاز سینابار را که در فشارهای زیاد پایدار است می‌توان شبکه‌ای هگزاگونال در نظر گرفت. این فاز توسط دو پارامتر شبکه a و c و دو پارامتر داخلی u و v تعریف می‌شود. در این ساختار اتم‌های Hg در مکان‌های (۰، ۰، ۱/۳۳۳) و (u, v) و اتم‌های Te در مکان‌های (۰، ۰، ۱/۸۳۳) قرار دارند. u و v به ترتیب برابر با ۰/۶۴۱ و ۰/۵۶۲ است [۵، ۶]. پارامترهای ساختاری محاسبه شده در جدول ۱ آمده است.

جدول ۱ پارامترهای ساختاری محاسبه شده برای ساختار سینابار در کار حاضر به همراه نتایج دیگران.

فاز سینابار	$a(A^\circ)$	b/a	c/a	$B(Gpa)$	B'
کار حاضر	۴/۴۸۲	۱/۰۰۰	۲/۲۳۵	۵۲/۹۰۰	۵/۲۲
کار نظری [۵]	۴/۴۸۲	۱/۰۰۰	۲/۲۳۵	۵۷/۷	----
کار تجربی [۷]	۴/۴۸۳	۱/۰۰۰	۲/۲۸۸	----	----

ب: مدول حجمی و تراکم‌پذیری

مدول حجمی تمایل جسم برای یک تغییر شکل معین در سیستم و معیاری از سختی بلور می‌باشد. چنانچه فشار در واحد حجم مایع به اندازه dp افزایش یابد حجم مورد نظر به اندازه dV - کاهش می‌یابد. از نسبت این دو، مدول حجمی حاصل می‌شود [۸]،

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

با توجه به اینکه تمامی محاسبات در دمای صفر صورت می‌گیرد، آنتروپی ثابت است و داریم: $dU = -PdV$ ، به طوری که dU تغییر انرژی ناشی از تغییر حجم می‌باشد و در نهایت خواهیم داشت:

$$B = V \frac{d^2U}{dV^2} \quad (2)$$

تراکم‌پذیری حجمی که عکس مدول حجمی است به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$k_V = - \frac{1}{V_0} \frac{dV}{dP} \quad (3)$$

به منظور محاسبه مدول حجمی و مشتق آن، پس از وارد کردن مقادیر بهینه انرژی قطع، نقاط k ، ثابت‌های شبکه بهینه و پایدارترین موقعیت اتم‌ها به ازای حجم‌های متفاوت در اطراف حجم تعادلی، به ازای هر حجم یک اجرای خودسازگار انجام داده و از خروجی هر اجرا انرژی متناظر با آن حجم را می‌یابیم. سپس با برازش انرژی بر حسب حجم با استفاده از معادله حالت مورناگون، می‌توان حجم تعادلی، مدول حجمی و مشتق آن را محاسبه نمود. انرژی کل بر حسب حجم با استفاده از معادله حالت مورناگون چنین است [۹]:

$$E(V) = E_0 + \frac{BV_0}{B'} \left[\frac{V}{V_0} + \left(\frac{V}{V_0} \right)^{1-B} - \frac{B'}{B'-1} \right] \quad (4)$$

در این رابطه، V_0 حجم تعادلی، E_0 انرژی حالت پایه در دما و فشار صفر، B مدول حجمی و B' مشتق آن را بیان می‌کند. به عبارت دیگر، کمیت B' سختی ماده در برابر فشار را نشان می‌دهد. هر چه مقدار مدول حجمی بیشتر باشد، بلور سخت‌تر و خاصیت تراکم‌پذیری آن کمتر است و در نتیجه انتظار می‌رود اتم‌ها در فاصله دورتری از یکدیگر قرار داشته باشند. نتایج حاصل از مدول حجمی، مشتق مدول حجمی و تراکم‌پذیری فازهای متفاوت ترکیب تلوراید جیوه در جدول ۲ آمده است. از مقادیر محاسبه شده در می‌یابیم که با افزایش فشار از فاز بلندروی به فاز کلرید سزیم مقدار مدول حجمی افزایش می‌یابد، که خود نشان‌دهنده افزایش سختی ماده می‌باشد.

جدول ۲ نتایج محاسبات مدول حجمی، مشتق آن و تراکم پذیری ترکیب تلوراید جیوه در فاز هگزاگونال و مقایسه آن با نتایج دیگران.

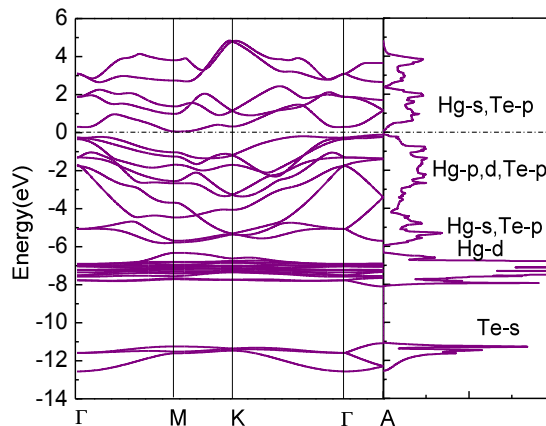
کمیات محاسبه شده	کار حاضر (GGA)	کار حاضر (LDA)	LDA (Castep) [۵]
$B(Gpa)$	۵۲,۹۰۰	۵۰,۶۰۰	۵۷,۷
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۸,۳۱۸	۱۲,۳۵۰	----
B'	۵,۲۲۰	۵,۱۰۰	----
$k(Gpa)^{-1}$	۰,۱۸۹	۰,۱۹	۰,۱۷
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۱۱,۷۶۴	۱۱,۷۶۴	----

ج: خواص الکترونی

نوارهای انرژی مربوط به الکترون‌های یک بلور، در راستای خطوط تقارنی در ناحیه اول بریلوئن، محاسبه می‌شوند. با افزایش الکترون‌های درون بلور محاسبه ویژه مقادیر انرژی از طریق حل معادله شرودینگر برای هر یک از الکترون‌ها ممکن نیست، بنابراین بهتر است با استفاده از عمل‌های تقارنی، تعداد نقاط k مربوط به بردارهای موج الکترونی را کاهش داد. از آنجا که برای هر ساختار بلوری می‌توان یاخته بسط و ناحیه بریلوئن تعریف کرد که با تکرار آن کل بلور ایجاد می‌شود، در یافتن ویژه مقادیر انرژی برای رسم ساختار نواری بلور نیز می‌توان از نقاط ویژه‌ای که اصطلاحاً نقاط پرتقارن نامیده می‌شود، در ناحیه اول بریلوئن استفاده کرد. شماری از مسیرها که در راستای نقاط پرتقارن درون بلور قرار گرفته‌اند، مسیرهای تقارنی محدود و مشخصی را نشان می‌دهند که نه تنها محاسبه ویژه مقادیر انرژی در این نقاط ساده‌تر است بلکه محاسبات به شدت کاهش می‌یابد، چرا که با تکرار این نقاط، کل بلور ایجاد می‌شود. نقاط پرتقارن در بلور به طور قراردادی با اندیس‌های Γ ، M ، L ، ... نام گذاری می‌شوند. به کمک ساختار نواری می‌توان به محاسبه گاف نواری بلورها و پیش‌بینی خواص نظیر رسانا، نیم‌رسانا یا عایق بودن ترکیب یا حتی به نوع گاف از لحاظ مستقیم یا غیرمستقیم بودن پی برد. در شکل ۲، نمودار ساختار نواری ترکیب تلوراید جیوه در فاز ساختاری هگزاگونال و در کنار آن، منحنی چگالی حالت‌های کل را در تقریب GGA آورده‌ایم.

پایین‌ترین قسمت نوار ظرفیت در اطراف انرژی ۱۲- الکترون‌ولت ناشی از حالت s اتم‌های تلوریوم است. در میانه نوار ظرفیت و در اطراف انرژی ۸- تا ۶- الکترون‌ولت بلندترین قله مربوط به حالت‌های d اتم‌های جیوه می‌باشد. بالای نوار ظرفیت از حالت‌های p اتم‌های تلوریوم و حالت‌های p و d اتم‌های جیوه تشکیل شده است، در حالی که پایین نوار رسانش ترکیبی از حالت‌های s اتم‌های جیوه و p اتم‌های تلوریوم می‌باشد. در نقطه Γ گاف نواری مستقیمی به

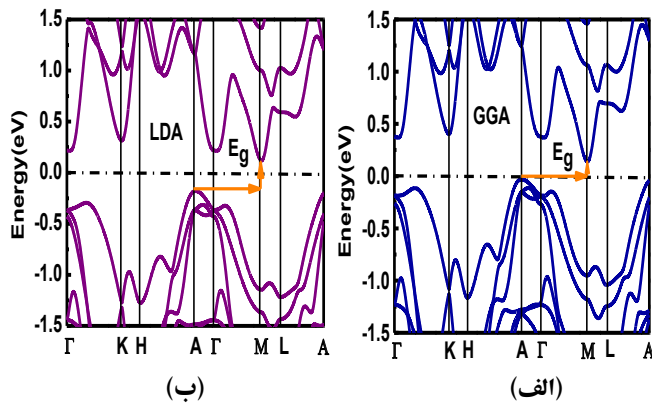
بزرگی $0/18$ الکترون‌ولت دیده می‌شود، که این نتیجه بیانگر خاصیت نیم‌رسانایی ترکیب تلوراید جیوه در این فاز می‌باشد. در هر دو تقریب نوارهای موجود در میانه نوار ظرفیت ناشی از اربیتال‌های d اتم‌های جیوه می‌باشند، این نوارها همان‌طور که قبلاً نیز بیان شد جایگزیده و تختند و چگالی حالت متناظر با آن‌ها زیاد است. در این ساختار اربیتال‌هایی که در ایجاد گاف نواری سهم هستند حالت‌های p اتم‌های تلوریم و p و s اتم‌های جیوه می‌باشند.



شکل ۲ منحنی ساختار نواری (چپ) به همراه نمودار چگالی حالت‌های کل (راست) برای فاز سینابار در تقریب GGA.

حال، نوبت به بررسی بزرگی و جهت گاف انرژی در هر دو تقریب می‌رسد. همان‌طور که قبلاً گفتیم گاف انرژی اختلاف انرژی بیشینه نوار ظرفیت و کمینه نوار رسانش می‌باشد. الکترون‌ها با دریافت انرژی کافی می‌توانند بر گاف نواری غلبه کرده و خود را از حالت پایه به یک حالت برانگیخته در نوار رسانش برسانند. در این ساختار یک گاف نواری غیرمستقیم از نقطه A به M وجود دارد. یعنی، الکترون‌ها علاوه بر اینکه باید از گاف عبور کنند، برای رسیدن به نقطه M لازم است در مسیری افقی با انرژی ثابت اما به ازای مقادیر مختلف k حرکت نمایند و این امر با جذب یا گسیل یک فونون همراه خواهد بود.

برای بهتر دیده شدن بزرگی و جهت گاف انرژی و تفاوت میان دو تقریب LDA و GGA در بزرگی گاف در شکل ۳ نمودار ساختار نواری را در هر دو تقریب LDA و GGA در بازه انرژی $1/5$ تا $1/5$ الکترون‌ولت آورده‌ایم.



شکل ۳ منحنی ساختار نواری فاز هگزگونال با تقریب (الف) GGA و (ب) LDA.

بزرگی گاف نواری فاز هگزگونال در تقریب GGA، ۰/۱۶ و در تقریب LDA، ۰/۳۰ الکترون ولت می‌باشد. بنابراین، ترکیب تلوراید جیوه در فاز هگزگونال نیم‌رسانایی با گاف انرژی کوچک و غیرمستقیم می‌باشد. مقادیر گاف نواری به دست آمده با بزرگی گاف به دست آمده از چگالی حالت‌ها در این فاز همخوانی دارد. در جدول ۳ نتایج گاف محاسبه شده در این کار را در هر دو تقریب به همراه کارهای دیگران برای فاز هگزگونال آورده‌ایم. همچنین این ترکیب در فاز هگزگونال نیم‌رسانایی با گاف غیرمستقیم کوچک می‌باشد.

جدول ۳ نتایج محاسبه شده برای گاف نواری فاز هگزگونال ترکیب تلوراید جیوه.

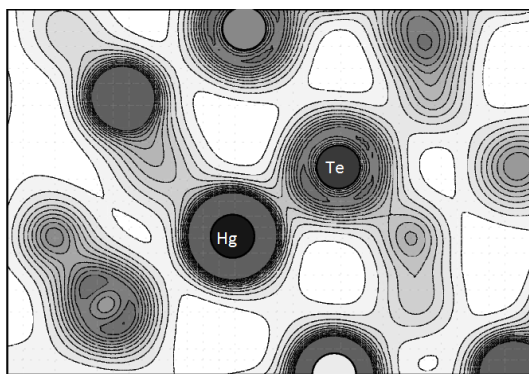
کار تجربی	کار نظری (Castep)	کار حاضر (LDA)	کار حاضر (GGA)	کمیت
----	۰/۲۰[۵]	۰/۳۰	۰/۱۶	E_g
----	غیرمستقیم؛ $A \rightarrow \Gamma$	غیرمستقیم؛ $A \rightarrow M$	غیرمستقیم؛ $A \rightarrow M$	نوع گاف

بنابر اطلاعات موجود تاکنون هیچ کار تجربی در زمینه ساختار الکترونی بر روی فاز هگزگونال این ترکیب انجام نشده است که بتوانیم نتایج حاصل را با آن مقایسه کنیم.

د: چگالی ابر الکترونی

چگالی ابر الکترونی نحوه توزیع بار را در اطراف اتم‌ها نشان می‌دهد. احتمال یافتن الکترون در هر ناحیه معین متناسب با چگالی ابر الکترونی در آن ناحیه است. این احتمال در ناحیه‌ای که ابر الکترونی تراکم بیشتری داشته باشد بیشتر خواهد بود. با توجه به میزان توزیع بار در اطراف اتم‌ها

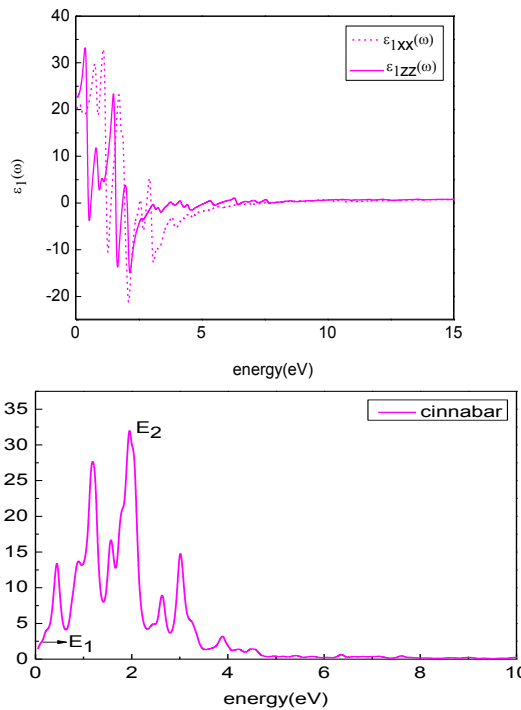
می‌توان نوع پیوند بین آن‌ها را تشخیص داد. تراکم زیاد بین اتم‌ها نشان‌دهنده قوی بودن پیوند و تراکم کمتر الکترون بین دو اتم پیوند ضعیفتری را نشان می‌دهد. طبق مقیاس الکترونگاتیوی پائولینگ هرچه اختلاف الکترونگاتیوی بین دو عنصر زیاد ($1/7$ تا $3/3$) باشد، پیوند بین دو عنصر از نوع یونی و هرچه اختلاف الکترونگاتیوی بین دو عنصر کم (0 تا $1/7$) باشد پیوند بیشتر از نوع کووالانسی است [۱۰]. از آنجا که اختلاف الکترونگاتیوی عنصر جیوه و تلوریم بسیار کوچک می‌باشد در این ترکیب پیوند موجود در میان اتم‌ها به میزان زیادی از نوع کووالانسی می‌باشد. شکل ۴ چگالی ابر الکترونی ترکیب تلوراید جیوه را در فاز سینابار در صفحه (۰۴۴) نشان می‌دهد. از شکل چگالی ابر الکترونی چنین بر می‌آید که میان دو اتم جیوه و تلوریم تراکم بار بسیاری وجود دارد. این تراکم زیاد نشانه‌ای از حضور پیوندهای کووالانسی میان دو اتم می‌باشد. از آنجا که مقدار اختلاف الکترونگاتیوی میان دو اتم بسیار ناچیز است، طبق مقیاس الکترونگاتیوی پائولینگ می‌توان برای این ترکیب حضور پیوندهای کووالانسی قوی را انتظار داشت. در این ترکیب، جیوه با دو الکترون s و تلوریم با دو الکترون s و چهار الکترون p برای تشکیل پیوند شرکت می‌کنند. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود بیشترین تراکم بار در اطراف اتم‌های تلوریم به چشم می‌خورد که نشان‌دهنده الکترون‌دوستی شدید این اتم در ترکیب می‌باشد. به دلیل تراکم زیاد الکترون‌ها بین اتم جیوه و تلوریم می‌توان دریافت که در این ترکیب پیوندهای کووالانسی قوی وجود دارند. از طرفی به دلیل ناچیز بودن مقدار الکترونگاتیوی بین دو اتم پیوند یونی ضعیف شکل می‌گیرد. بررسی نمودار چگالی حالت‌های جزئی نشان می‌دهد که اربیتال d اتم جیوه سهم بسزایی در این نمودار دارد. حضور نوار d کاتیونی درون نوار ظرفیت اصلی در ترکیب تلوراید جیوه باعث بروز ویژگی‌های متفاوتی با دیگر اعضای گروه II-IV شده است.



شکل ۴ چگالی ابر الکترونی فاز سینابار در صفحه (۰۴۴).

۵: خواص اپتیکی

گذارهای احتمالی از قسمت بالایی نوار ظرفیت به قسمت انتهایی نوار رسانش سهم عمده را در طیف اپتیکی ماده دارد. مؤلفه‌های اصلی تابع دی‌الکتریک در فاز سینابار به صورت $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} \neq \epsilon_{zz}$ است. سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک ترکیب تلوراید جیوه در فاز سینابار در شکل ۵ نشان داده شده است.



شکل ۵ قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک ترکیب تلوراید جیوه در فاز سینابار.

بررسی قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک، ضریب شکست ایستایی را در راستاهای x و z را به ترتیب $4/489$ و $4/745$ نتیجه می‌دهد. علاوه بر این، قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک آستانه جذب میان نواری، E_0 ، را $0/18$ الکترون‌ولت تخمین می‌زند که با نتیجه به دست آمده از ساختار الکترونی همخوانی بسیار خوبی دارد. بیشترین میزان جذب در این فاز در انرژی $1/95$ الکترون‌ولت رخ می‌دهد. نتایج حاصل از قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک نشان‌دهنده مطابقت گاف اپتیکی با گاف نواری می‌باشد. نتایج به دست آمده با نتایج دیگران همخوانی دارد [۵].

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله پارامترهای ساختاری بلور ترکیب تلوراید جیوه با استفاده از روش شبه‌پتانسیل، در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با اعمال تقریب‌های مختلف مطالعه و بررسی شده است. نتایج ساختار نواری و چگالی حالت‌های کل بیانگر خاصیت خاصیت نیم‌رسانایی ترکیب در فاز سینابار است. همچنین، نتایج حاصل از مشارکت ارییتال‌های مختلف در ساختار نواری بیانگر مشارکت اصلی حالت‌های p اتم‌های تلوریم و s و p اتم‌های جیوه می‌باشد. نتایج حاصل از سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نشان‌دهنده‌ی مطابقت گاف اپتیکی با گاف نواری می‌باشد. شکل چگالی ابر الکترونی نشان‌دهنده‌ی حضور پیوند کووالانسی قوی در بین اتم‌های این ترکیب می‌باشد. همچنین در این محاسبات تقریب GGA، به دلیل اینکه وابستگی چگالی الکترونی در یک نقطه علاوه بر چگالی موضعی، تغییرات چگالی را در اطراف آن نقطه نیز در بر می‌گیرد و نزدیکی این مدل با واقعیت، تقریبی مناسب‌تر است.

مراجع

- [1] V. Dinesh, S. Shriya, R. Khenata; "structural phase transition and elastic properties of mercury chalcogenides"; *Journal materials chemistry and physics* **135**, 36365e 384, (2012).
- [2] S. Mnasri, S. Abdi-Ben Nasrallah, N. Sfina, N. Bouarissa, and M. Said, "Electronic, lattice vibration and mechanical properties of CdTe, ZnTe, MnTe, MgTe, HgTe and their ternary alloys", *Semiconductor Science and Technology* **24** No. 9 (2009).
- [3] R. Franco, P. Mori-Sanchez, J.M., Recio, ; "Theoretical compressibilities of high-pressure ZnTe polymorphs", *Phys. Rev. B* **68**, 195208, (2003).
- [4] A. Onodera, M. Motobayashi, T. Seike, and O. Fukunage, in *Proceedings of the 8th AIRAPT Conference*, Uppsala, Sweden, (1981), edited by C. M. Backman, T. Johansson, and L. Tegner (Arkitektkopia, Uppsala), Vol. I, p. 321. (1982).
- [5] H. Aimin, Y. Xiaocui, Y. Ruomeng, G. Chunxai, L. Riping, and T. Yongjun, "Study of structural stabilities and optical properties of HgTe under high pressure", *Journal of physics and Chemistry of Solids* **70** 433-438 (2009).
- [6] C. Michel, O. Zakharov, A. Rubio, and L. Marvin Cohen, " AB initio calculations of the pressure-induced structural phases transitions for four II-VI compounds", Vol **55**, Number 19, (1996).
- [7] N. G. Wright, M. I. McMahon, R. J. Nelmes, and A. San-Miguel, "Crystal structure of the cinnabar phase of HgTe", *Phys. Rev. B* **48** 13111 (1993).

[۸] ز. جاودانی، "بررسی ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی ترکیب مونوفریت استرانسیم با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی"، پایان‌نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه شهید چمران اهواز (۱۳۹۱).

مجلة فيزيك کاربردى دانشگاه الزهراء(ع)، سال ششم، پیاپی ۱۲، بهار و تابستان ۱۳۹۶ / ۶۳

[9] F. D. Murnaghan, "The compressibility of media under extreme pressure", *Proc. Nat. Acad. Sci.* **30** 244 (1944).

[10] L. Pauling, *The nature of the chemical bond and the structure of molecules and crystals: an introduction to modern structural chemistry*, Cornell University Press (1960).