

## Calculations of Energy Band Structure of GaAs, GaSb and GaP Crystals as a Function of Temperature Using the Semiempirical Tight Binding Method

Ismail Th. T. Yahya <sup>1\*</sup>, Mumtaz M. S. Hussien <sup>2</sup>

<sup>1\*,2</sup> Department of Physics, College of Education for Pure Sciences, University of Mosul, Mosul, Iraq

E-mail: <sup>1\*</sup> [ismael.esp126@student.uomosul.edu.iq](mailto:ismael.esp126@student.uomosul.edu.iq), <sup>2</sup> [momtaz\\_hussien@uomosul.edu.iq](mailto:momtaz_hussien@uomosul.edu.iq)

(Received June 28, 2021; Accepted August 23, 2021; Available online September 01, 2021)

DOI: [10.33899/edusj.2021.130682.1170](https://doi.org/10.33899/edusj.2021.130682.1170), © 2021, College of Education for Pure Science, University of Mosul.

This is an open access article under the CC BY 4.0 license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

### Abstract

In this paper, the band structure of gallium group of III-V semiconductor has been calculated with temperature, the semi-empirical tight binding method was used to calculate the band structure and the matrix elements were calculated for both models  $sp^3$  and  $sp^3s^*$ . A computer program in MATLAB was designed to calculate the energy eigenvalues for the wave vector points in the first Brillouin zone between high symmetry points to form energy bands. The effect of temperature on the energy band of these group of crystals has been studied by changing the values of the lattice constant under the influence of temperature according to the Pierron relation and thus calculating the change in the length of the bond with temperature, which in turn affects the change in the values of the elements of the Hamiltonian matrix. The energy gap and refractive index were calculated at points of high symmetry as a function of temperature. The results showed a decrease in the energy gap values of GaAs, GaSb and GaP crystals with increasing temperature. Then the experimental Varshni relation was used to calculate the change in the energy gap values of these crystals and the results obtained from current study were compared with the results of Panish and Bellani, where the results showed that a model  $sp^3s^*$  gives better results than the model  $sp^3$ . As well as the calculations of the refractive index of these crystals using the Moss formula showed that the refractive index will gradually increase with increasing temperatures.

**Keyword:** energy bands, semiconductor bands. energy gap with temperature, refractive index.

حسابات تركيب حزم الطاقة للبلورات GaAs، GaSb و GaP كدالة لدرجة الحرارة بأستخدام طريقة الربط المحكم شبه التجريبية

اسماعيل ثمين طليح يحيى <sup>1\*</sup>، ممتاز محمد صالح حسين <sup>2</sup>

<sup>1\*,2</sup> قسم الفيزياء، كلية التربية للعلوم الصرفة، جامعة الموصل، الموصل، العراق

### المخلص:

لقد أحتسب في هذا البحث تركيب حزم الطاقة لمجموعة الكاليوم في بلورات شبه الموصل من نوع III-V مع درجة الحرارة، إذ استخدمت نظرية الربط المحكم شبه التجريبية في حساب شكل الحزمة، وأحتسب عناصر المصفوفة لكلا النموذجين  $sp^3$  و  $sp^3s^*$ . إذ تم تصميم برنامج حاسوبي بلغة MATLAB لحساب القيم الذاتية للطاقة من خلال تكوين نقاط لمتجه الموجة في منطقة برليون الاولى (BZ) Brillouin zone بين نقاط التماثل العالية لتشكيل حزم الطاقة. إذ درس تأثير درجة الحرارة على حزم الطاقة لهذه المجموعة من البلورات من خلال حساب تغير قيم ثابت الشبكة تحت تأثير درجة الحرارة حسب علاقة Pierron وبالتالي حساب تغير طول الأصرة مع درجة الحرارة والتي تؤثر بدورها في تغير قيم معاملات عناصر مصفوفة الهاملتوني. تم حساب فجوة الطاقة ومعامل

الانكسار عند النقاط عالية التماثل مع درجة الحرارة. بينت النتائج نقصان في قيم فجوة الطاقة للبلورات GaP و GaSb، GaAs، و Varshni التجريبية لحساب التغير في قيم فجوة الطاقة لهذه البلورات وقورنت النتائج التي تم الحصول عليها في الدراسة الحالية مع نتائج Bellani و Panish، حيث اظهرت النتائج ان نموذج  $sp^3s^*$  يعطي نتائج افضل من النموذج  $sp^3$ . وكذلك بينت حسابات معامل الانكسار لهذه البلورات باستخدام صيغة Moss أن معامل الانكسار يزداد تدريجياً مع زيادة درجات الحرارة.

**الكلمات المفتاحية:** حزم الطاقة، حزم اشباه الموصلات، فجوة الطاقة مع درجة الحرارة، معامل الانكسار.

## 1. المقدمة Introduction

تعد درجة الحرارة والضغط من أهم المتغيرات الترموديناميكية عند دراسة تراكيب حزم الطاقة لأشباه الموصلات المختلفة. اذ بذل الكثير من الباحثين جهوداً كبيرة لاستغلال الخصائص الحرارية لأشباه الموصلات تحت تأثير درجات الحرارة العالية لأنها ذات أهمية أساسية للتطبيقات التكنولوجية [1]. فعند زيادة درجة حرارة المواد شبه الموصلة تحدث تغيرات بالتركيب الالكتروني ودراسة هذه التغيرات يمكن اجراء العديد من التعديلات في تركيب الحزمة، اذ يؤثر ارتفاع درجة الحرارة في فجوة الطاقة وبالتالي يحدث تغيير في الكتل الفعالة لكل من الالكترون والفجوة. لذلك فإن دراسة تغيرات فجوة الطاقة مع درجة الحرارة أمر ضروري لأشباه الموصلات. اذ يمكن من خلال دراسة تأثير درجات الحرارة العالية على تركيب حزم الطاقة للمواد شبه الموصلة من معرفة فجوة الطاقة التي تلعب دوراً مهماً للغاية في أشباه الموصلات لأنها ستؤثر بشكل كبير على الخصائص الكهربائية لمواد ونبائط أشباه الموصلات [2]. تعد هذه الدراسة هي استكمال لدراسة سابقة تم اجراءها على بلورة GaAs باستخدام النموذجين  $sp^3$  و  $sp^3s^*$  حيث تم مقارنة فجوة الطاقة في كلا النموذجين اضافة الى حساب الكتلة الفعالة في الاتجاه [111] بشكل مباشر من حساب حزم الطاقة [3]. يهدف البحث الى تطبيق طريقة الربط المحكم للجيران الاقرب باستخدام النموذجين  $sp^3$  و  $sp^3s^*$  لحساب تركيب حزم الطاقة مع درجة الحرارة للبلورات GaP و GaSb، GaAs وذلك من خلال اعداد برنامج حاسوبي وحساب تغير فجوة الطاقة مع درجات حرارة مختلفة عند نقاط التماثل العالية بدون استخدام معادلة Varshni وباستخدامها وحساب تغير معامل الانكسار باستخدام صيغة Moss عند درجات حرارة مختلفة.

## 2. الجزء النظري Theoretical part

يقلل التناظر في المواد البلورية العديد من المشاكل التي تتعرض لها وحدة الخلية الابتدائية، ويمكن كتابة دوال

الموجة للإلكترون المنفرد  $|n\vec{k}\rangle$  على شكل موجات بلوخ [4]:

$$|n\vec{k}\rangle = \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta}(n, \vec{k}) \left\{ \sum_R e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_\beta} \alpha, \vec{R}_\beta \right\} \quad (1)$$

اذ ان  $\vec{R}_\beta = \vec{R} + \vec{r}_\beta$  حيث  $\vec{R}$  يمثل متجه الشبكة و  $\vec{r}_\beta$  ازاحة الذرة ويشير الحرفان  $\alpha$  و  $\beta$  الى نوع الذرة ونوع المدار الذري على التوالي. في حين تمثل المعاملات  $C_{\alpha\beta}(n, \vec{k})$  معاملات الجمع الخطي التي تعتمد على نوع الحزمة  $n$  ومتجه الموجة  $\vec{k}$ . بالنسبة لأشباه الموصلات ذات تركيب المشبك الخارصيني (ZB) فإن نموذج الربط المحكم  $sp^3$  الذي قدمه Chadi بدون تأثير تقاعل البرم

- المدار يستخدم حالة واحدة من المدار s وثلاث حالات من المدار p للذرة الاساس بالتالي تنتج 8 مدارات لخلية بدائية تحتوي على ذرتين. بينما يستخدم نموذج الربط المحكم  $sp^3s^*$  الذي قدمه Vogl بدون تفاعل البرم المدار حالة مثارة للذرة الاساس للنموذج  $sp^*$  مما يؤدي الى تكوين 10 مدارات لخلية بدائية تحتوي على ذرتين. يحتاج نموذج  $sp^3$  الى 9 معلمات إدخال بينما نموذج  $sp^3s^*$  يحتاج الى 13 من معلمات الادخال والتي يتم تحديدها بالمقارنة مع نتائج تجريبية [5, 6]. معلمات التفاعل هذه عبارة عن عناصر مصفوفة مستقلة بشكل أساسي، تتكون من اربع طاقات هي  $E_{p0}, E_{p1}, E_{s0}, E_{s1}$  وخمس تكاملات هي  $V_{ss}, V_{xx}, V_{xy}, V_{s0p}, V_{s1p}$  بالنسبة لنموذج  $sp^3$ ، بينما نموذج  $sp^3s^*$  يتكون من ست طاقات هي  $E_{sa}, E_{pa}, E_{sc}, E_{pc}, E_{s^*a}, E_{s^*c}$  وسبعة تكاملات هي  $V_{sapc}, V_{pasc}, V_{s^*apc}, V_{pas^*c}$  حيث ان a تمثل الأيون و c تمثل الكاتيون [7].

### 3. الحسابات والنتائج Results and calculations

يكون تأثير الحرارة على مواد اشباه الموصلات من خلال التعديل في الترتيب الذري، والتي تشمل التغير في أطوال الاواصر الذرية  $d$  وكذلك الزوايا للتراكيب المكعبة مثل تركيب ZB [8]. اذ تم إدخال تأثير درجة الحرارة في حسابات عناصر المصفوفة من خلال تغير ثابت الشبيكة مع درجة الحرارة حسب علاقة Pierron والتي تعطى بالصيغة الاتية [9]:

$$\alpha_{th} = \frac{1}{a} \frac{\partial a}{\partial T} \quad (2)$$

ومن خلال هذه العلاقة وبعد معرفة قيم معامل التمدد الحراري  $\alpha_{th}$  للبلورات GaAs، GaSb و GaP المبينة في الجدول (1) نستنتج قيمة ثابت الشبيكة عند درجة الحرارة معينة  $a_T$  اذ يعطى بالعلاقة الاتية:

$$a_T = a_0 e^{\alpha_{th} T} \quad (3)$$

اذ تمثل  $a_T$ : ثابت الشبيكة عند درجة الحرارة  $T$ ،  $a_0$ : ثابت الشبيكة عند درجة حرارة 0K،  $\alpha_{th}$ : معامل التمدد الحراري.

الجدول (1): معامل التمدد الحراري للبلورات GaAs، GaSb و GaP ذات تركيب ZB

Crystal	$\alpha_{th} \times 10^{-6} (1/K)$	Ref.
GaAs	5.73	[10]
GaSb	6.1	[10]
GaP	6.1	[11]

ومن تغير ثابت الشبيكة مع درجة الحرارة يتم حساب قيم طول الأصرة تحت تأثير درجة الحرارة باستخدام العلاقة التالية [12]:

$$d = \frac{\sqrt{3}}{4} a \quad (4)$$

$$d_0 = \frac{\sqrt{3}}{4} a_0 \quad (5)$$

اذ يمثل  $d_0$ : طول الأصرة بين الذرات عند درجة الحرارة 0K.

$$d_T = \frac{\sqrt{3}}{4} a_T \quad (6)$$

اذ يمثل  $d_T$ : طول الأصرة بين الذرات عند درجة الحرارة  $T$ . ومن خلال المعادلتين (5) و (6) يمكن استنتاج العلاقة الاتية لحساب قيم طول الأصرة عند درجة حرارة معينة :

$$d_T = d_0 \left( \frac{a_T}{a_0} \right) \quad (7)$$

يبين الجدول (2) قيم طول الأصرة وثابت الشبكة تحت تأثير درجة الحرارة بوحدات (K) للبلورات GaAs، GaSb و GaP.

الجدول (2): قيم طول الأصرة  $d_T$  وثابت الشبكة  $a_T$  عند درجات حرارة مختلفة للبلورات GaAs، GaSb و GaP

Crystal	Parameter	Temperature (K)					
		0	90	185	294	673	973
GaAs	$a_T$ (Å)	5.6532 [13]	5.6562	5.6592	5.6628	5.6751	5.6849
	$d_T$ (Å)	2.4479	2.4492	2.4505	2.4520	2.4574	2.4616
Crystal	Parameter	Temperature (K)					
		0	60	120	183	240	300
GaSb	$a_T$ (Å)	6.0959 [13]	6.0982	6.1004	6.1027	6.1049	6.1071
	$d_T$ (Å)	2.6396	2.6406	2.6415	2.6525	2.6435	2.6444
Crystal	Parameter	Temperature (K)					
		0	150	417	620	868	1273
GaP	$a_T$ (Å)	5.4505 [13]	5.4555	5.4644	5.4712	5.4794	5.4930
	$d_T$ (Å)	2.3601	2.3623	2.3661	2.3690	2.3726	2.3785

بعد حساب التغيرات في طول الأصرة وثابت الشبكة عند درجات حرارة مختلفة، تم حساب تغير تركيب حزم الطاقة عند

درجة حرارة معينة من خلال تغير معاملات عناصر المصفوفة بواسطة قاعدة القياس التجريبية [14]:

$$V_{U'm} = \eta_{U'm} \frac{\hbar^2}{2m_e d^2} \quad (8)$$

$$V(0) = \eta_{U'm} \left( \frac{\hbar^2}{2m_e d_0^2} \right) \quad (9)$$

اذ ان  $V(0)$ : تمثل معاملات الربط المحكم عند درجة حرارة 0K، و  $\eta_{U'm}$ : عامل هندسي للتركيب رباعي الوجه.

$$V(T) = \eta_{U'm} \left( \frac{\hbar^2}{2m_e d_T^2} \right) \quad (10)$$

اذ ان  $V(T)$ : تمثل معاملات الربط المحكم عند درجة الحرارة  $T$ . ومن خلال المعادلتين (9) و (10) يمكن استنتاج علاقة لحساب تغير معاملات عناصر المصفوفة:

$$V(T) = V(0) \left( \frac{d_0}{d_T} \right)^2 \quad (11)$$

وبعد ادخال درجة الحرارة في تغير قيم ثابت الشبكة وطول الأصرة مع درجة الحرارة والتي بدورها تؤثر في معاملات عناصر

المصفوفة التي تستخدم في حساب شكل حزم الطاقة، تم الحصول على نتائج حسابات عناصر المصفوفة عند درجات حرارة مختلفة

للبلورات GaAs، GaSb و GaP وكما موضحة في الجداول (3)، (4) و (5) على التوالي.

الجدول (3): قيم عناصر المصفوفة عند درجات حرارة مختلفة لبلورة GaAs

Model	Matrix Elements	Temperature(K)					
		0	90	185	294	673	973
sp <sup>3</sup>	$E_{p0}$	1.16	1.1588	1.1575	1.1561	1.1511	1.1471
	$E_{p1}$	3.35	3.3465	3.3429	3.3387	3.3243	3.3129
	$E_{s0}$	-8.21	-8.2015	-8.1926	-8.1824	-8.1469	-8.1190
	$E_{s1}$	-3.19	-3.1867	-3.1832	-3.1793	-3.1655	-3.1546
	$V_{ss}$	-6.76	-6.7530	-6.7457	-6.7373	-6.7081	-6.6850
	$V_{xx}$	2.11	2.1078	2.1055	2.1029	2.0938	2.0866
	$V_{xy}$	5.96	5.9539	5.9474	5.9400	5.9142	5.8939
	$V_{s0p}$	4.75	4.7451	4.7399	4.7340	4.7135	4.6973
	$V_{s1p}$	5.48	5.4744	5.4684	5.4616	5.4379	5.4192
sp <sup>3</sup> s*	$E_{sa}$	-8.3431	-8.3345	-8.3254	-8.3150	-8.2790	-8.2506
	$E_{pa}$	1.0414	1.0403	1.0392	1.0379	1.0334	1.0299
	$E_{sc}$	2.6569	-2.6542	-2.6513	-2.6480	-2.6365	-2.6274
	$E_{pc}$	3.6686	3.6648	3.6608	3.6563	3.6404	3.6279
	$E_{s^*a}$	8.5914	8.5825	8.5732	8.5625	8.5254	8.4961
	$E_{s^*c}$	6.7386	6.7317	6.7243	6.7159	6.6868	6.6639
	$V_{ss}$	-6.4513	-6.4446	-6.4376	-6.4296	-6.4017	-6.3798
	$V_{xx}$	1.9546	1.9526	1.9505	1.9480	1.9396	1.9329
	$V_{xy}$	5.0779	5.0727	5.0671	5.0608	5.0389	5.0216
	$V_{sapc}$	4.4800	4.4754	4.4705	4.4649	4.4456	4.4303
	$V_{pasc}$	5.7839	5.7779	5.7717	5.7644	5.7395	5.7198
	$V_{s^*apc}$	4.8422	4.8372	4.8318	4.8259	4.8050	4.7885
	$V_{pas^*c}$	4.8077	4.8027	4.7975	4.7915	4.7708	4.7544

الجدول (4): قيم عناصر عند درجات حرارة مختلفة لبلورة GaSb

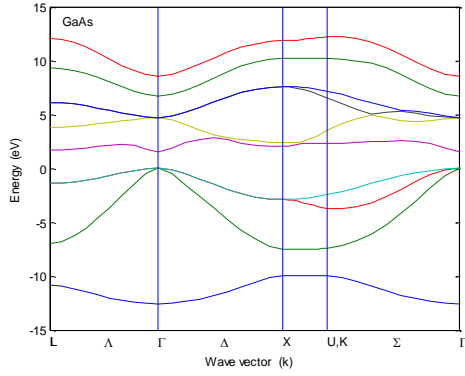
Model	Matrix Elements	Temperature(K)					
		0	60	120	183	240	300
sp <sup>3</sup>	$E_{p0}$	0.68	0.6795	0.6790	0.6785	0.6780	0.6775
	$E_{p1}$	2.63	2.6281	2.6262	2.6241	2.6223	2.6204
	$E_{s0}$	-6.84	-6.8350	-6.8300	-6.8247	-6.8200	-6.8150
	$E_{s1}$	-3.91	-3.9071	-3.9043	-3.9013	-3.8986	-3.8957
	$V_{ss}$	-6.06	-6.0556	-6.0511	-6.0465	-6.0423	-6.0379
	$V_{xx}$	1.64	1.6388	1.6376	1.6363	1.6352	1.6340
	$V_{xy}$	4.32	4.3168	4.3137	4.3104	4.3074	4.3042
	$V_{s0p}$	5.55	5.5459	5.5419	5.5376	5.5338	5.5297
	$V_{s1p}$	4.76	4.7565	4.7530	4.7494	4.7461	4.7426
sp <sup>3</sup> s*	$E_{sa}$	-7.3207	-7.3153	-7.3100	-7.3044	-7.2993	-7.2940
	$E_{pa}$	0.8554	0.8548	0.8541	0.8535	0.8529	0.8523
	$E_{sc}$	-3.8993	-3.8964	-3.8936	-3.8906	-3.8879	-3.8851
	$E_{pc}$	2.9146	2.9125	2.9103	2.9081	2.9061	2.9040
	$E_{s^*a}$	6.6354	6.6305	6.6257	6.6206	6.6160	6.6112
	$E_{s^*c}$	5.9846	5.9802	5.9758	5.9713	5.9671	5.9627
	$V_{ss}$	-6.1567	-6.1522	-6.1477	-6.1430	-6.1387	-6.1342
	$V_{xx}$	1.5789	1.5777	1.5766	1.5754	1.5743	1.5731
	$V_{xy}$	4.1285	4.1255	4.1225	4.1193	4.1164	4.1134
	$V_{sapc}$	4.9601	4.9565	4.9528	4.9490	4.9456	4.9420
	$V_{pasc}$	4.6675	4.6641	4.6607	4.6571	4.6539	4.6504
	$V_{s^*apc}$	4.9895	4.9858	4.9822	4.9784	4.9749	4.9713
	$V_{pas^*c}$	4.2180	4.2149	4.2118	4.2086	4.2057	4.2026

الجدول (5): قيم عناصر المصفوفة عند درجات حرارة مختلفة لبلورة GaP

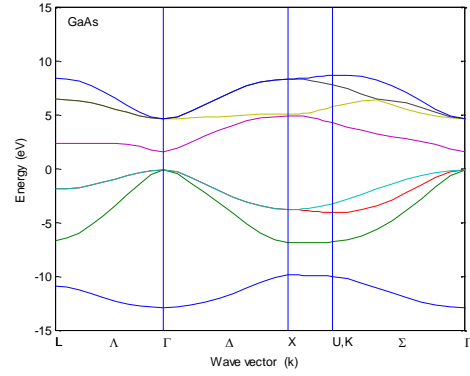
Model	Matrix elements	Temperature(K)					
		0	150	417	620	868	1273
sp <sup>3</sup>	$E_{p0}$	1.28	1.2777	1.2735	1.2704	1.2665	1.2603
	$E_{p1}$	3.82	3.8130	3.8006	3.7912	3.7798	3.7611
	$E_{s0}$	-7.60	-7.5861	-7.5614	-7.5427	-7.5199	-7.4829
	$E_{s1}$	-2.72	-2.7150	-2.7062	-2.6995	-2.6913	-2.6781
	$V_{ss}$	-7.66	-7.6460	-7.6211	-7.6023	-7.5793	-7.5420
	$V_{xx}$	2.26	2.2559	2.2485	2.2430	2.2362	2.2252
	$V_{xy}$	6.20	6.1887	6.1685	6.1533	6.1347	6.1045
	$V_{s0p}$	5.33	5.3203	5.3030	5.2898	5.2739	5.2479
	$V_{s1p}$	5.84	5.8293	5.8104	5.7960	5.7785	5.7500
sp <sup>3</sup> s*	$E_{sa}$	-81124	-8.0976	-8.0712	-8.0513	-8.0269	-7.9874
	$E_{pa}$	1.1250	1.1229	1.1193	1.1165	1.1131	1.1077
	$E_{sc}$	-2.1976	-2.1936	-2.1864	-2.1810	-2.1745	-2.1637
	$E_{pc}$	4.1150	4.1075	4.0941	4.0840	4.0717	4.0516
	$E_{s^*a}$	8.5150	8.4994	8.4718	8.4508	8.4253	8.3838
	$E_{s^*c}$	7.1850	7.1719	7.1485	7.1309	7.1093	7.0743
	$V_{ss}$	-7.4709	-7.4572	-7.4330	-7.4146	-7.3922	-7.3558
	$V_{xx}$	2.1516	2.1477	2.1407	2.1354	2.1289	2.1184
	$V_{xy}$	5.1369	5.1275	5.1108	5.0982	5.0828	5.0577
	$V_{sapc}$	4.2771	4.2693	4.2554	4.2449	4.2320	4.2112
	$V_{pasc}$	6.3190	6.3074	6.2869	6.2714	6.2524	6.2216
	$V_{s^*apc}$	4.6541	4.6456	4.6305	4.6190	4.6051	4.5824
$V_{pas^*c}$	5.0950	5.0857	5.0691	5.0566	5.0413	5.0165	

توضح الاشكال (1)، (2)، (3)، (4)، (5) و (6) تركيب حزم الطاقة للبلورات GaAs، GaSb و GaP عند درجة حرارة

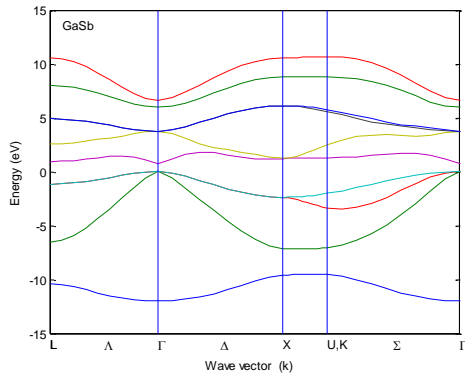
0K التي تم حسابها باستخدام طريقة الربط المحكم للنموذجين sp<sup>3</sup> و sp<sup>3</sup>s\* على التوالي.



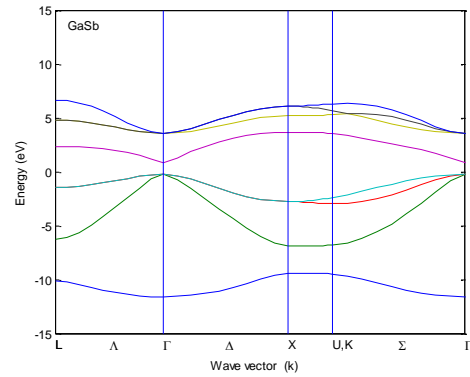
الشكل (4): تركيب حزمة الطاقة لبلورة GaAs لنموذج  $sp^3s^*$



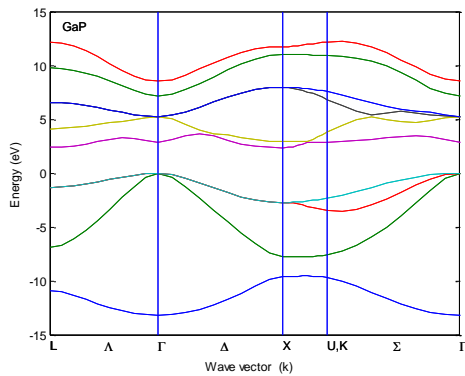
الشكل (1): تركيب حزمة الطاقة لبلورة GaAs لنموذج  $sp^3$



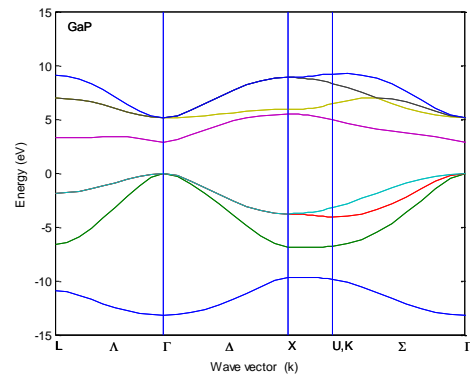
الشكل (5): تركيب حزمة الطاقة لبلورة GaSb لنموذج  $sp^3s^*$



الشكل (2): تركيب حزمة الطاقة لبلورة GaSb لنموذج  $sp^3$



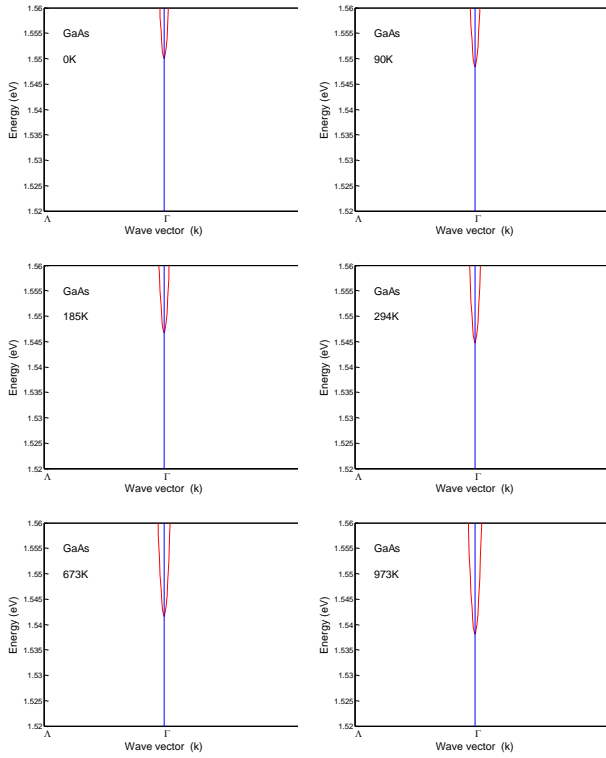
الشكل (6): تركيب حزمة الطاقة لبلورة GaP لنموذج  $sp^3s^*$



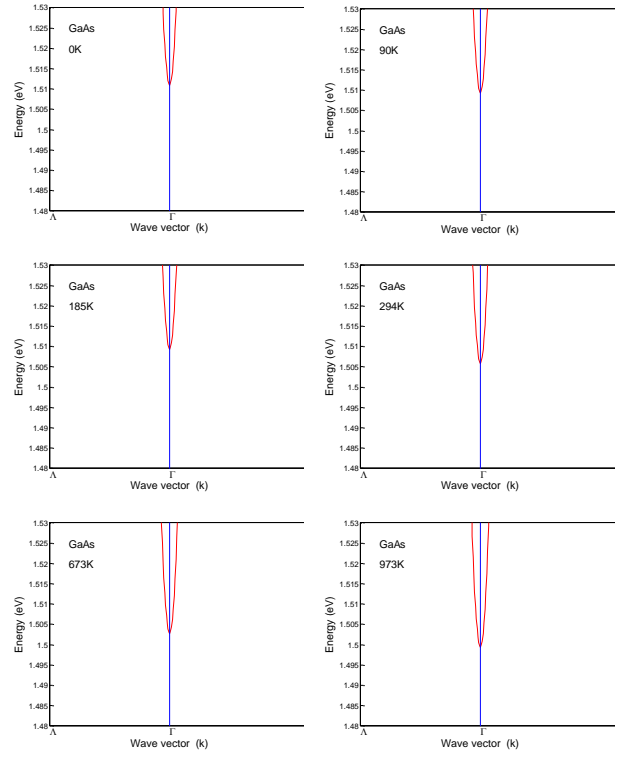
الشكل (3): تركيب حزمة الطاقة لبلورة GaP لنموذج  $sp^3$

وعند استخدام معاملات عناصر المصفوفة عند درجات الحرارة العالية المختلفة لبلورات GaAs، GaSb و GaP المبينة في الجداول (3)، (4) و (5) تم الحصول على شكل تركيب حزمة التوصيل عند درجات الحرارة المختلفة، إذ تم تحديد المسار  $(\Lambda \rightarrow \Gamma)$  لتوضيح انخفاض تركيب حزمة التوصيل عند ارتفاع درجة الحرارة والنموذجين  $sp^3$  و  $sp^3s^*$  للبلورات GaSb، GaAs و GaP وكما موضحة في الأشكال (7)، (8)، (9)، (10)، (11) و (12) على التوالي.

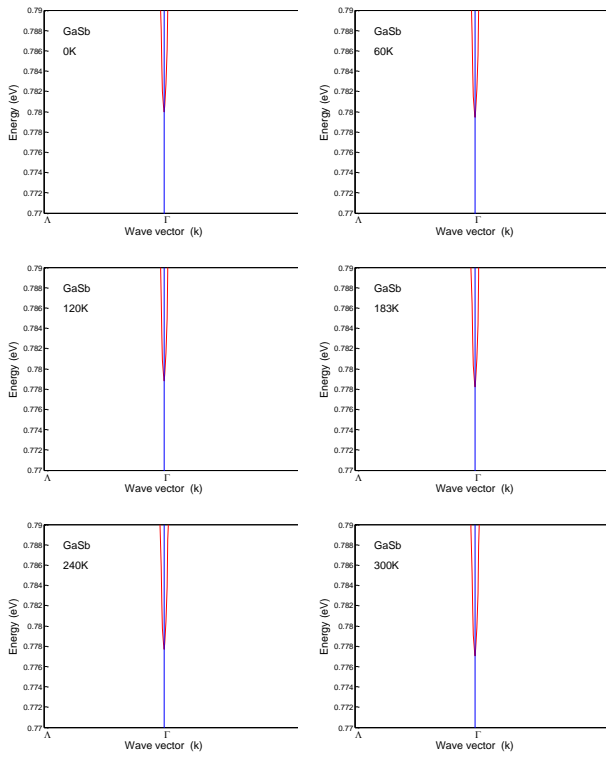




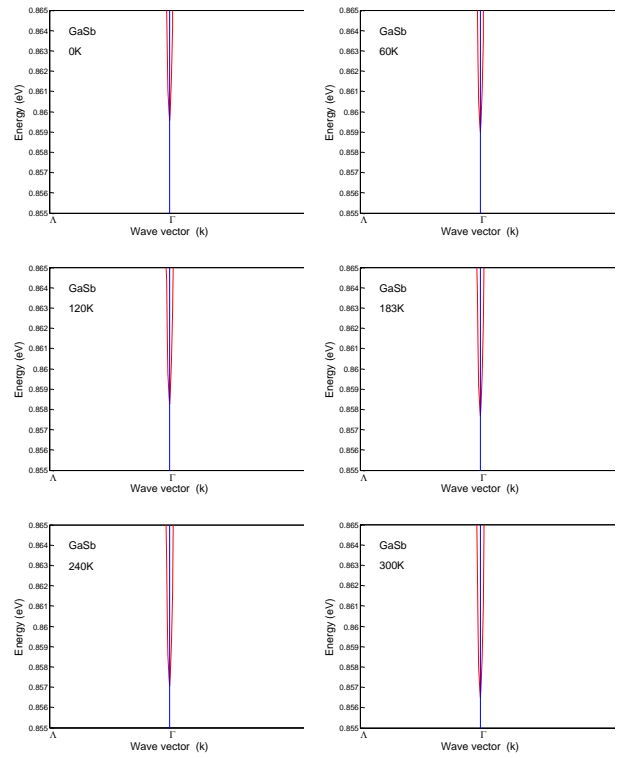
الشكل (8): تركيب حزمة التوصيل عند النقطة  $\Gamma$  لبلورة GaAs عند درجات حرارة مختلفة نموذج  $sp^3s^*$



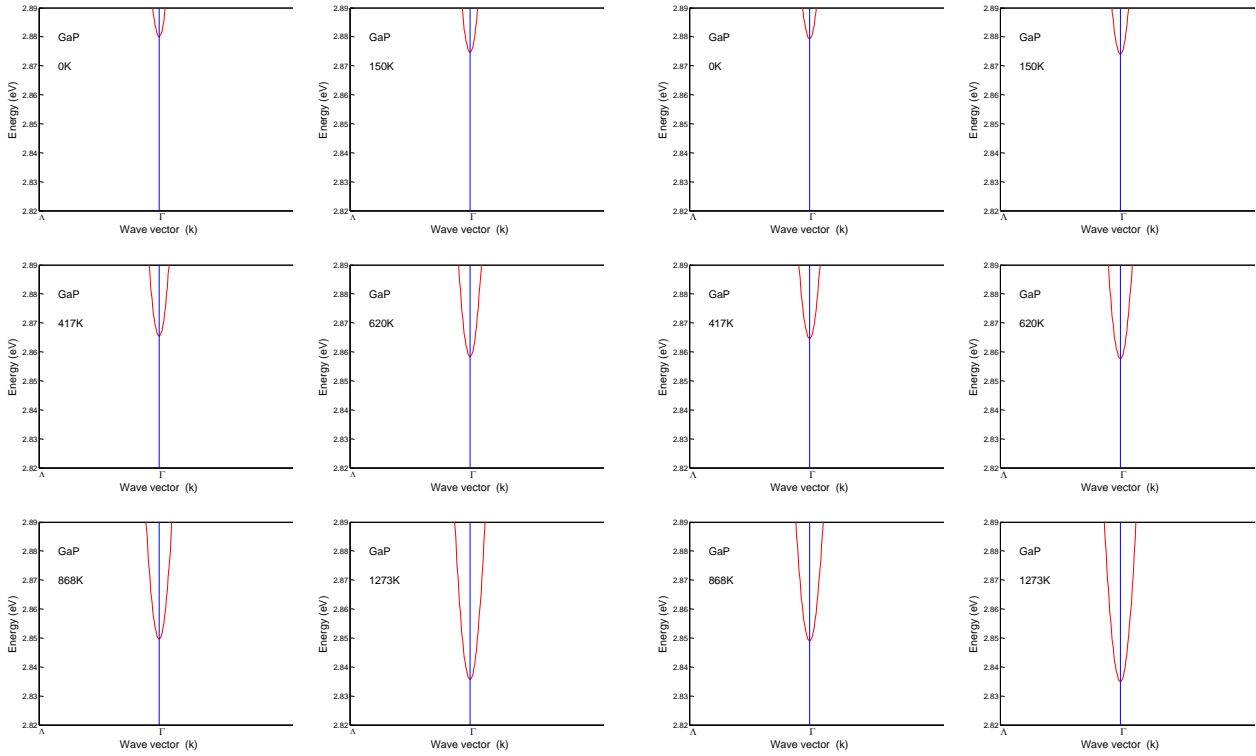
الشكل (7): تركيب حزمة التوصيل عند النقطة  $\Gamma$  لبلورة GaAs عند درجات حرارة مختلفة نموذج  $sp^3$



الشكل (10): تركيب حزمة التوصيل عند النقطة  $\Gamma$  لبلورة GaSb عند درجات حرارة مختلفة نموذج  $sp^3s^*$



الشكل (9): تركيب حزمة التوصيل عند النقطة  $\Gamma$  لبلورة GaSb عند درجات حرارة مختلفة نموذج  $sp^3$



الشكل (11): تركيب حزمة التوصيل عند النقطة  $\Gamma$  لبلورة GaP عند

الشكل (12): تركيب حزمة التوصيل عند النقطة  $\Gamma$  لبلورة GaP عند

درجات حرارة مختلفة نموذج  $sp^3$

درجات حرارة مختلفة نموذج  $sp^3s^*$

#### 4. تغير فجوة الطاقة للبلورات GaAs، GaSb و GaP مع درجة الحرارة

##### Variation of energy gap of GaAs, GaSb and GaP crystals with temperature

يمكن حساب العديد من الخصائص مباشرة من شكل حزم الطاقة للبلورات GaAs، GaSb و GaP عند مدى معين من درجات الحرارة قبل حدوث تغيير في تركيب ZB لهذه البلورات، إذ احتسبت فجوة الطاقة لـ GaAs، GaSb و GaP عند درجات حرارة مختلفة ومباشرة من حزم الطاقة المحسوبة عند نقاط التماثل العالية L، X، K و  $\Gamma$  كما هو مبين في الجداول (6)، (7) و (8) على التوالي.

الجدول (6): فجوة الطاقة لبلورة GaAs عند نقاط التماثل العالية عند درجات حرارة مختلفة

Model	Energy gap (eV)	Temperature (K)					
		0	90	185	294	673	973
$sp^3$	$E_g^L$	2.3033	2.3009	3.2984	2.2955	2.2856	2.2777
	$E_g^X$	4.8808	4.8759	4.805	4.8645	4.8434	4.8267
	$E_g^K$	4.2272	4.2229	4.2183	4.2130	4.1948	4.1803
	$E_g^\Gamma$	1.5109	1.5094	1.50078	1.5059	1.4994	1.4942
$sp^3s^*$	$E_g^L$	1.6902	1.6885	1.6867	1.6845	1.6772	1.6715
	$E_g^X$	2.0300	2.0279	2.0257	2.0232	2.0144	2.0075
	$E_g^K$	2.3516	2.3492	2.3467	2.3437	2.3335	2.3256
	$E_g^\Gamma$	1.5500	1.5483	1.5467	1.5448	1.5380	1.5329

**الجدول (7): فجوة الطاقة لبلورة GaSb عند نقاط التماثل العالية عند درجات حرارة مختلفة**

Model	Energy gap (eV)	Temperature (K)					
		0	60	120	183	240	300
sp <sup>3</sup>	$E_g^L$	2.3503	2.3486	2.3469	2.3451	2.3435	2.3418
	$E_g^X$	3.6694	3.6667	3.6640	3.6612	3.6586	3.6560
	$E_g^K$	3.5242	3.5216	3.5190	3.5164	3.5139	3.5113
	$E_g^\Gamma$	0.8596	0.8590	0.8583	0.8577	0.8571	0.8565
sp <sup>3</sup> s*	$E_g^L$	0.9621	0.9615	0.9607	0.9600	0.9593	0.9586
	$E_g^X$	1.2100	1.2092	1.2082	1.2072	1.2065	1.2056
	$E_g^K$	1.2879	1.2870	1.2860	1.2850	1.2841	1.2831
	$E_g^\Gamma$	0.7799	0.7794	0.7788	0.7782	0.7777	0.7770

**الجدول (8): فجوة الطاقة لبلورة GaP عند نقاط التماثل العالية عند درجات حرارة مختلفة**

Model	Energy gap (eV)	Temperature (K)					
		0	60	120	183	240	300
sp <sup>3</sup>	$E_g^L$	3.2685	3.2625	3.2519	3.2439	3.2341	3.2181
	$E_g^X$	5.4530	5.4430	5.4253	5.4119	5.3956	5.3689
	$E_g^K$	4.9599	4.9508	4.9348	4.9225	4.9077	4.8835
	$E_g^\Gamma$	2.8792	2.8740	2.8646	2.8576	2.8489	2.8349
sp <sup>3</sup> s*	$E_g^L$	2.3968	2.3924	2.3847	2.3788	2.3715	2.3599
	$E_g^X$	2.3500	2.3457	2.3381	2.3323	2.3252	2.3138
	$E_g^K$	2.8877	2.8824	2.8731	2.8660	2.8572	2.8432
	$E_g^\Gamma$	2.8800	2.8746	2.8654	2.8583	2.8496	2.8356

اقترح Varshni علاقة مهمة جداً لوصف فجوات الطاقة المعتمدة على درجة الحرارة في مختلف بلورات أشباه الموصلات، حيث حققت هذه العلاقة التجريبية نجاحاً كبيراً في تركيب فجوات الطاقة المعتمدة على درجة الحرارة في العديد من مواد أشباه الموصلات وكذلك في المواد النانوية، تعطى العلاقة التجريبية Varshni's empirical formula لتغيير طاقة فجوة الحزمة مع درجة الحرارة هي [15]:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{AT^2}{T+B} \quad (12)$$

اذ تمثل  $E_g(T)$ : فجوة الطاقة عند درجة الحرارة  $T$ ،  $E_g(0)$ : فجوة الطاقة عند درجة حرارة 0K،  $A$  و  $B$ : معاملات درجة الحرارة. يوضح الجدول (9) قيم معاملات درجة الحرارة عند نقاط التماثل العالية  $L$ ،  $X$ ،  $K$  و  $\Gamma$  لبلورات GaSb، GaAs و GaP ذات تركيب ZB.

**الجدول (9):** معاملات درجة الحرارة للبلورات GaP و GaSb ،GaAs

Crystal	Temperature coefficients	Symmetry points			
		L	X	K	$\Gamma$
GaAs	$A(m\ eV/K)$	0.605	0.460	0.5405	0.5405
	$B(K)$	204	204	204	204
GaSb	$A(m\ eV/K)$	0.597	0.475	0.475	0.417
	$B(K)$	140	94	94	140
GaP	$A(meV/K)$	0.5771	0.5771	0.5771	0.5771
	$B(K)$	372	372	372	372

Ref. [13]

تم استخدام معادلة Varshni لإيجاد فجوة الطاقة لـ GaAs ،GaSb و GaP عند نقاط التماثل العالية L ،X ،K و  $\Gamma$  وكما مبين في الجداول (10)، (11) و(12) على التوالي.

**الجدول (10):** تغير فجوة الطاقة مع درجة الحرارة عند نقاط التماثل العالية باستخدام معادلة Varshni لبلورة GaAs

Model	Energy gap (eV)	Temperature (K)					
		0	90	185	294	673	973
$sp^3$	$E_g^L$	2.3033	2.2866	2.2501	2.1983	1.9908	1.8167
	$E_g^X$	4.8808	4.8681	4.8403	4.8010	4.6432	4.5108
	$E_g^K$	4.2272	4.2123	4.1796	4.1334	3.9481	3.7924
	$E_g^\Gamma$	1.5109	1.4960	1.4633	1.4171	1.2318	1.0761
$sp^3s^*$	$E_g^L$	1.6902	1.6735	1.6370	1.5852	1.3777	1.1152
	$E_g^X$	2.0300	2.0173	1.9895	1.9502	1.7924	1.6600
	$E_g^K$	2.3516	2.3367	2.3040	2.2578	2.0725	1.9168
	$E_g^\Gamma$	1.5500	1.5351	1.5024	1.4562	1.2709	1.1152

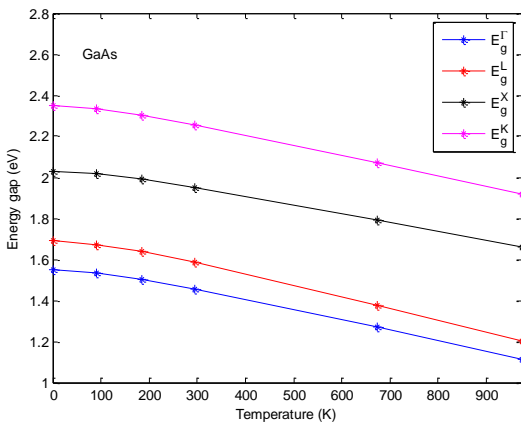
**الجدول (11):** تغير فجوة الطاقة مع درجة الحرارة عند نقاط التماثل العالية باستخدام معادلة Varshni لبلورة GaSb

Model	Energy gap (eV)	Temperature (K)					
		0	60	120	183	240	300
$sp^3$	$E_g^L$	2.3503	2.3396	2.3172	2.2884	2.2598	2.2282
	$E_g^X$	3.6694	3.6583	3.6374	3.6120	3.5875	3.5609
	$E_g^K$	3.5242	3.5131	3.4922	3.4668	3.4423	3.4157
	$E_g^\Gamma$	0.8596	0.8521	0.8365	0.8164	0.7964	0.7743
$sp^3s^*$	$E_g^L$	0.9621	0.9514	0.9290	0.9002	0.8716	0.8400
	$E_g^X$	1.2100	1.1989	1.1780	1.1526	1.1281	1.1015
	$E_g^K$	1.2879	1.2768	1.2559	1.2305	1.2060	1.1794
	$E_g^\Gamma$	0.7799	0.7724	0.7568	0.7367	0.7167	0.6946

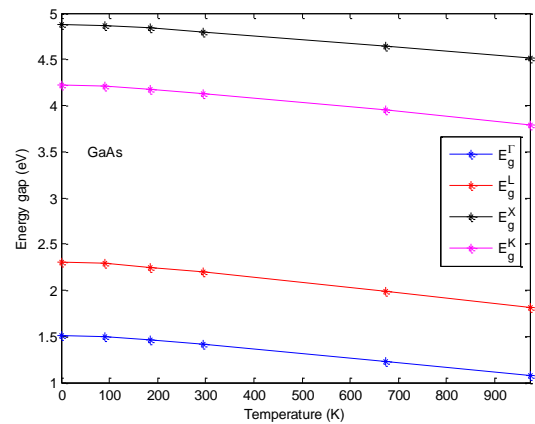
الجدول (12): تغير فجوة الطاقة مع درجة الحرارة عند نقاط التماثل العالية باستخدام معادلة Varshni لبلورة GaP

Model	Energy gap (eV)	Temperature (K)					
		0	150	417	620	868	1273
sp <sup>3</sup>	$E_g^L$	3.2685	3.2436	3.1413	3.0449	2.9179	2.7000
	$E_g^X$	5.4530	5.4281	5.3258	5.2294	5.1024	4.8845
	$E_g^K$	4.9599	4.9350	4.8327	4.7363	4.6093	4.3914
	$E_g^\Gamma$	2.8792	2.8543	2.7520	2.6556	2.5286	2.3107
sp <sup>3</sup> s*	$E_g^L$	2.3968	2.3719	2.2696	2.1732	2.0462	1.8283
	$E_g^X$	2.3500	2.3251	2.2228	2.1264	1.9994	1.7815
	$E_g^K$	2.8877	2.8628	2.7605	2.6641	2.5371	2.3192
	$E_g^\Gamma$	2.8800	2.8551	2.7528	2.6564	2.5294	2.3115

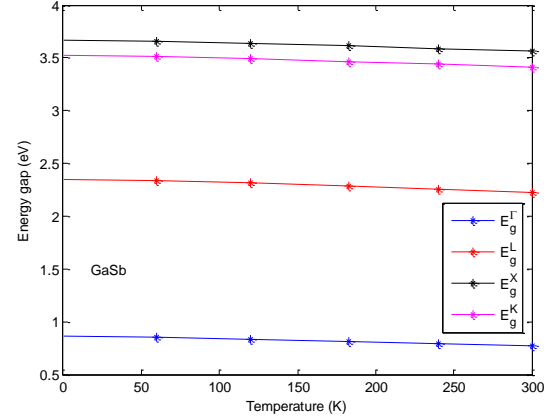
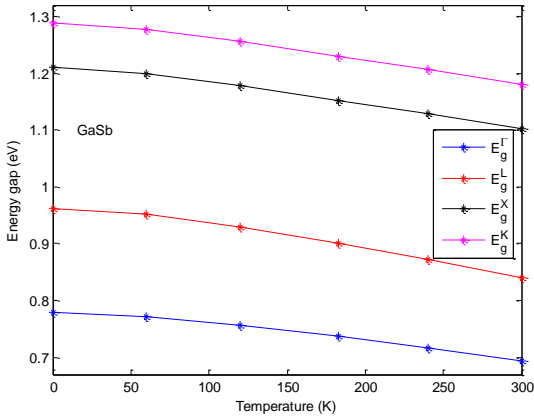
توضح الاشكال (13)، (14)، (15)، (16)، (17) و (18) كيفية تغير فجوة الطاقة مع تغير درجة الحرارة لـ GaAs، GaP و GaSb عند نقاط التماثل العالية L، X، K و  $\Gamma$  باستخدام معادلة Varshni للنموذجين sp<sup>3</sup> و sp<sup>3</sup>s\* على التوالي حيث نلاحظ انخفاض في قيمة فجوة الطاقة مع زيادة درجات الحرارة. هناك طريقتين لتفسير تأثير درجة الحرارة على فجوة الطاقة لأشباه الموصلات، الطريقة الاولى هي انه عندما ترتفع درجة الحرارة فأن سعة اهتزاز الذرات سوف تزداد مما يؤدي الى كبر المسافة بين الذرات، وبما ان فجوة الطاقة تتناسب بشكل عكسي مع مربع ثابت الشبكة لذا فإن زيادة ثابت الشبكة يؤدي الى التمدد الحراري للشبكة وتقليل فجوة الطاقة. اما الطريقة الثانية فهي نتيجة التفاعلات التي تحدث بين الإلكترون والفونون مما يؤدي الى اضطراب في فجوة الطاقة، حيث تكتسب الإلكترونات طاقة حرارية وتتحول الى ادنى مستويات طاقة ممكنة قبل ان تندمج مع الفجوات وبذلك تظهر اقل فجوة طاقة [16].



الشكل (14): تغير فجوة الطاقة مع درجة الحرارة عند نقاط التماثل العالية باستخدام معادلة Varshni لبلورة GaAs نموذج sp<sup>3</sup>s\*

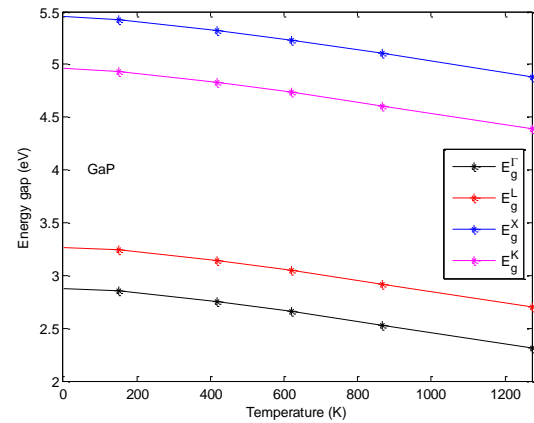
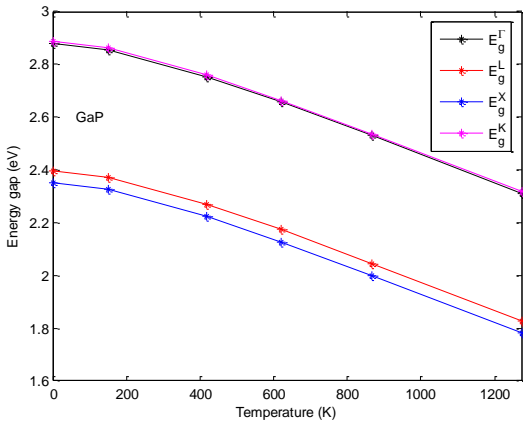


الشكل (13): تغير فجوة الطاقة مع درجة الحرارة عند نقاط التماثل العالية باستخدام معادلة Varshni لبلورة GaAs نموذج sp<sup>3</sup>



الشكل (16): تغير فجوة الطاقة مع درجة الحرارة عند نقاط التماثل العالية باستخدام معادلة Varshni لبلورة GaSb نموذج  $sp^3s^*$

الشكل (15): تغير فجوة الطاقة مع درجة الحرارة عند نقاط التماثل العالية باستخدام معادلة Varshni لبلورة GaSb نموذج  $sp^3$



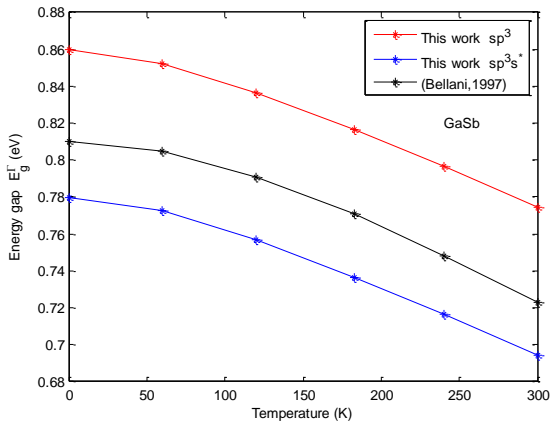
الشكل (18): تغير فجوة الطاقة مع درجة الحرارة عند نقاط التماثل العالية باستخدام معادلة Varshni لبلورة GaP نموذج  $sp^3s^*$

الشكل (17): تغير فجوة الطاقة مع درجة الحرارة عند نقاط التماثل العالية باستخدام معادلة Varshni لبلورة GaP نموذج  $sp^3$

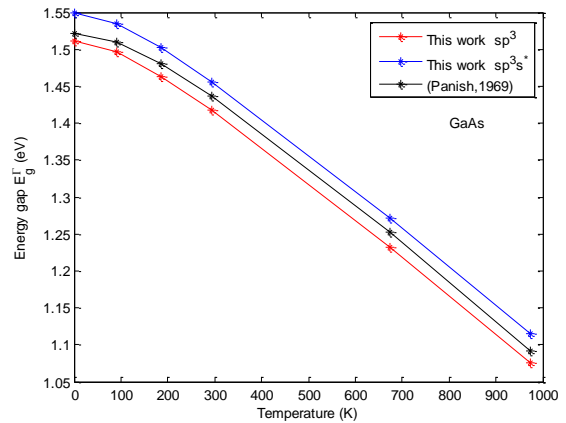
بعد استخدام معادلة Varshni وإيجاد فجوة الطاقة للبلورات GaSb و GaP و GaAs كدالة لدرجة الحرارة عند نقاط التماثل العالية  $\Gamma$ ،  $L$ ،  $X$ ،  $K$  و قمنا بأجراء مقارنة بين الحسابات التي تم الحصول عليها في الدراسة الحالية لفجوة الطاقة مع نتائج Panish [17] و Bellani [18] وكما مبين في الجدول (13) والموضحة في الأشكال (19)، (20) و (21). حيث اعتمدنا  $E_g^{\Gamma}$  لبلورة GaAs و GaSb كفجوة طاقة مباشرة وباستخدام النموذجين  $sp^3$  و  $sp^3s^*$  كما هو مبين في الأشكال (1)، (2)، (4) و (5) على التوالي. بينما اعتمدنا  $E_g^X$  لبلورة GaP كفجوة طاقة غير مباشرة عند استخدام النموذج  $sp^3s^*$  كما موضح في الشكل (6)، في حين يوضح الشكل (3) بأن أقل قيمة لفجوة الطاقة لبلورة GaP تكون عند النقطة  $\Gamma$  عند استخدام النموذج  $sp^3$  لأن هذا النموذج لا يعطي وصف دقيق لحزمة التوصيل. حيث اظهرت النتائج ان نموذج  $sp^3s^*$  يعطي نتائج افضل من النموذج  $sp^3$  وذلك نتيجة لزيادة حجم مصفوفة الهاميلتون H.

**الجدول (13):** تغير فجوة الطاقة مع درجة الحرارة عند بعض نقاط التماثل العالية باستخدام معادلة Varshni للبلورات GaP و GaSb، GaAs

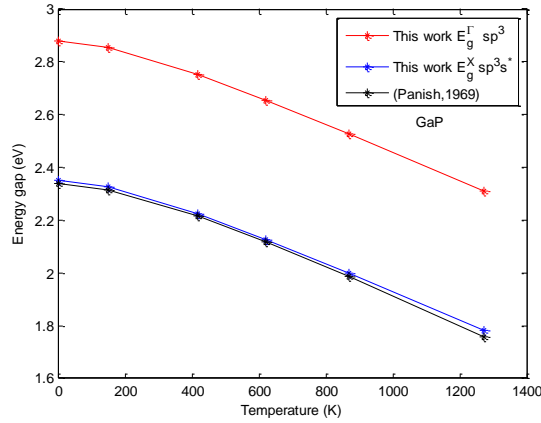
Crystal	Energy gap (eV)	Model	Temperature (K)						Ref.
			0	90	185	294	673	973	
GaAs	$E_g^\Gamma$	$sp^3$	1.5109	1.4960	1.4633	1.4171	1.2318	1.2318	This work
		$sp^3s^*$	1.5500	1.5351	1.5024	1.4562	1.2709	1.1152	This work
			1.522	1.510	1.481	1.437	1.252	1.091	[17]
Crystal	Energy gap (eV)	Model	Temperature (K)						Ref.
			0	60	120	183	240	300	
GaSb	$E_g^\Gamma$	$sp^3$	0.8596	0.8521	0.8365	0.8164	0.7964	0.7743	This work
		$sp^3s^*$	0.7799	0.7724	0.7568	0.7367	0.7167	0.6946	This work
			0.81	0.805	0.791	0.771	0.748	0.723	[18]
Crystal	Energy gap (eV)	Model	Temperature (K)						Ref.
			0	150	417	620	868	1273	
GaP	$E_g^\Gamma$	$sp^3$	2.8792	2.8543	2.7520	2.6556	2.5286	2.3107	This work
	$E_g^X$	$sp^3s^*$	2.3500	2.3251	2.2228	2.1264	1.9994	1.7815	This work
			2.338	2.315	2.215	2.117	1.986	1.758	[17]



**الشكل (20):** تغير فجوة الطاقة مع درجة الحرارة عند نقطة التماثل  $\Gamma$  باستخدام معادلة Varshni لبلورة GaSb للنموذجين  $sp^3s^*$  و  $sp^3$  ومقارنتها مع [18]



**الشكل (19):** تغير فجوة الطاقة مع درجة الحرارة عند نقطة التماثل  $\Gamma$  باستخدام معادلة Varshni لبلورة GaAs للنموذجين  $sp^3s^*$  و  $sp^3$  ومقارنتها مع [17]



الشكل (21): تغير فجوة الطاقة مع درجة الحرارة عند نقطة التماثل  $\Gamma$  و  $X$  باستخدام معادلة Varshni لبلورة GaP للنموذجين  $sp^3$  و  $sp^3s^*$  ومقارنتها مع [17]

### 5. تغير معامل الانكسار للبلورات GaAs، GaSb و GaP مع درجة الحرارة

#### Variation of refractive index of GaAs, GaSb and GaP crystals with temperature

يتغير معامل الانكسار للبلورات GaAs، GaSb و GaP مع تغير درجة الحرارة ولمدى درجات الحرارة المستخدمة في هذه الدراسة، إذ تم استخدام علاقة Moss لإيجاد معامل الانكسار بالنسبة لهذه البلورات عند درجات حرارة مختلفة وكما موضح في الجدول (14) وحسب الصيغة الآتية [19]:

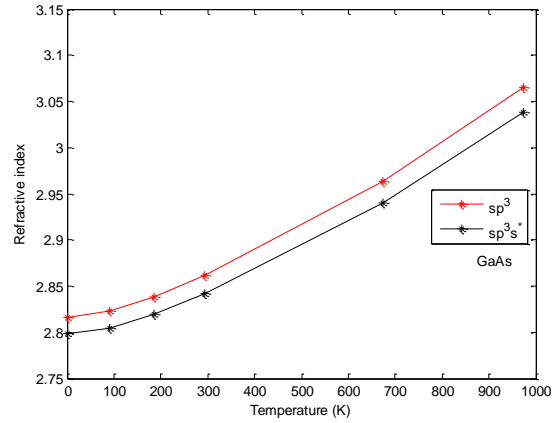
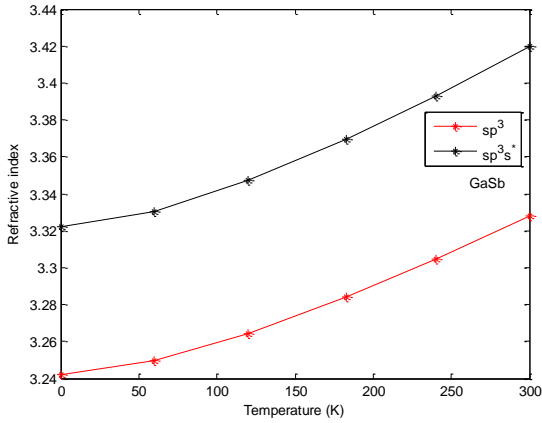
$$n^4 = \frac{95}{E_g} \quad (13)$$

اذ نلاحظ بان معامل الانكسار سوف يزداد بشكل تدريجي مع زيادة درجات الحرارة وكما موضح في الاشكال (22)، (23) و (24) لبلورات GaAs، GaSb و GaP على التوالي.

الجدول (14): قيمة معامل الانكسار للبلورات GaAs، GaSb و GaP باستخدام صيغة Moss عند درجات حرارة مختلفة

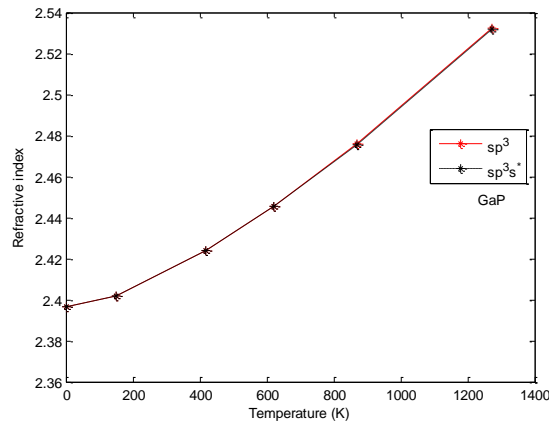
Crystal	Refractive Index	Model	Temperature (K)						Ref.
			0	90	185	294	673	973	
GaAs	n	$sp^3$	2.8159	2.8166	2.8174	2.8183	2.8213	2.8238	3.30 [19]
		$sp^3s^*$	2.7980	2.7988	2.7995	2.8004	2.8034	2.8058	2.85 [20]
Crystal	Refractive Index	Model	Temperature (K)						Ref.
			0	60	120	183	240	300	
GaSb	n	$sp^3$	3.2423	3.2429	3.2436	3.2441	3.2447	3.2453	3.79 [19]
		$sp^3s^*$	3.3222	3.3227	3.3233	3.3240	3.3245	3.3253	3.29 [20]
Crystal	Refractive Index	Model	Temperature (K)						Ref.
			0	150	417	620	868	1273	
GaP	n	$sp^3$	2.3967	2.3978	2.3997	2.4012	2.4030	2.4060	2.90 [19]
		$sp^3s^*$	2.3965	2.3977	2.3996	2.4011	2.4029	2.4059	2.55 [20]





الشكل (22): تغير معامل الانكسار مع درجة الحرارة عند نقطة التماثل  $\Gamma$  باستخدام صيغة Moss لبلورة GaAs للنموذجين  $sp^3$  و  $sp^3s^*$

الشكل (23): تغير معامل الانكسار مع درجة الحرارة عند نقطة التماثل  $\Gamma$  باستخدام صيغة Moss لبلورة GaSb للنموذجين  $sp^3$  و  $sp^3s^*$



الشكل (24): تغير معامل الانكسار مع درجة الحرارة عند نقطة التماثل  $\Gamma$  باستخدام صيغة Moss لبلورة GaP للنموذجين  $sp^3$  و  $sp^3s^*$

## 6. المناقشة والاستنتاجات

تم حساب تركيب حزم الطاقة الإلكترونية في مواد أشباه الموصلات المركبة III-V للبلورات GaAs، GaSb و GaP عند درجات حرارة مختلفة باستخدام طريقة الربط المحكم والنموذجين  $sp^3$  و  $sp^3s^*$ ، إذ تعتبر هذه الطريقة من الطرائق التجريبية الدقيقة والمناسبة لحساب تركيب حزم الطاقة نظراً لانخفاض التكاليف الحسابية، وقد بينت النتائج من خلال هذا البرنامج تطابقاً جيداً مع البحوث المنشورة ومن خلال النتائج تم استنتاج ما يأتي:

عند حساب تركيب الحزم الإلكترونية للبلورات GaAs، GaSb و GaP ذات تركيب ZB تحت تأثير درجة الحرارة، لاحظنا وجود ازاحة طفيفة في حزم التوصيل نحو الأسفل في الأشكال (7)، (8)، (9)، (10)، (11) و (12). وبذلك نحصل على انخفاض في قيم فجوة الطاقة مع زيادة درجة الحرارة. عند حساب تأثير درجة الحرارة للبلورات GaAs، GaSb و GaP وجدنا ان فجوة الطاقة تقل مع ارتفاع درجة الحرارة، وهذا يتوافق مع النمط العام لسلوك تغير فجوة الطاقة مع درجة الحرارة لأشباه الموصلات. عند استخدام معادلة Varshni لإيجاد فجوة الطاقة للبلورات GaAs، GaSb و GaP عند نقاط التماثل العالية L، X، K و  $\Gamma$  لاحظنا وجود توافق بين

[17] Panish الحسابات التي تم الحصول عليها في الدارسة الحالية لفجوة الطاقة عند النقطة  $\Gamma$  لبلورة GaSb و GaAs مع نتائج [18] Bellani من النقطة  $\Gamma$  عند استخدام النموذج  $sp^3$ ، في حين ان نتائج فجوة الطاقة لبلورة GaP عند النقطة X عند استخدام النموذج  $sp^3s^*$  تكون اكثر توافقاً مع نتائج [18] Bellani من النقطة  $\Gamma$  عند استخدام النموذج  $sp^3$ ، وذلك لان بلورة GaP تمتلك فجوة طاقة غير مباشرة في حين أن البلورتين GaSb و GaAs فإننا لا نلاحظ هذا الاختلاف عند استخدام النموذجين وذلك لانهما يمتلكان فجوة طاقة مباشرة. من خلال نتائج تركيب حزم الطاقة مع درجة الحرارة تم حساب تغير معامل الانكسار n مع درجة الحرارة باستخدام صيغة Moss حيث بينت النتائج التي تم الحصول عليها زيادة معامل الانكسار مع ارتفاع درجة الحرارة.

#### 7. شكر و تقدير

يتقدم الباحثان بالشكر والتقدير الى جامعة الموصل وكلية التربية للعلوم الصرفة وقسم الفيزياء على دعم البحث.

#### 8. المصادر

- [1] O.L. Anderson, H. Oda and D. Isaak, "A model for the computation of thermal expansivity at high compression and high temperatures: MgO as an example", J. Geophysical Research Letters, 19 (19): pp. 1987-1990, 1992. <https://doi.org/10.1029/92GL02145>
- [2] P. Geng, W. Li, X. Zhang, X. Zhang, Y. Deng and H. Kou, "A novel theoretical model for the temperature dependence of band gap energy in semiconductors", J. Applied. Phys., 50 (40): pp. 40LT02, 2017.
- [3] T. Ismail and M. Hussien, "Band Structure of GaAs Crystal Using the Semiempirical Tight Binding Method", appear in Journal of Education and Science, 30(3), 2021.
- [4] A. Di Carlo, "Microscopic theory of nanostructured semiconductor devices: beyond the envelope-function approximation", J. Semiconductor Science and Technology, 18 (1): pp. R1. 2002.
- [5] D. Chadi, "Spin-orbit splitting in crystalline and compositionally disordered semiconductors", J. Phys. Rev. B., 16 (2): pp. 790-796, 1977. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.16.790>
- [6] P. Vogl, H. P. Hjalmarson and J. D. Dow, "A semi-empirical tight-binding theory of the electronic structure of semiconductors", J. Phys. Chem. Sol., 44 (5): pp. 365-378, 1983. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(83\)90064-1](https://doi.org/10.1016/0022-3697(83)90064-1)
- [7] G. Gopir, N. Zulkifli, and A. Othman, "Electronic Structure Calculation of Bulk Semiconductors Using The  $Sp^3s^*$  Empirical Tight Binding Method", Solid State Science and Technology, vol. 13, no. 1 & 2, pp.234-243, 2005.
- [8] W.A. Harrison, *Electronic structure and the properties of solids: the physics of the chemical bond*. Courier Corporation, 2012.
- [9] E. Pierron, D. Parker and J. McNeely, "Coefficient of expansion of gallium arsenide from – 62 to 200° C", J. Acta Crystallographica, 21 (2): pp. 290-290, 1966. <https://doi.org/10.1107/S0365110X66002780>
- [10] H. Detz, "Thermal expansion of III–V materials in atomistic models using empirical Tersoff potentials", J. Electronics Letters, 51 (18): pp. 1455-1457, 2015.
- [11] R. Indolia, "To Study the dependency of linear thermal expansion coefficient and Melting Temperature on Plasmon energy in case of II-VI and III-V groups of binary semiconductors", J. International Journal and Applied Physics, 13 (3): pp. 451-457, 2017.
- [12] K.Y. Cheng, *III–V Compound Semiconductors and Devices: An Introduction to Fundamentals*. Springer Nature, 2020.

- [13] I. Vurgaftman, J.ÁR. Meyer and L.ÁR. Ram-Mohan, "Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys", *J. Applied. Phys.*, 89 (11): pp. 5815-5875, 2001. <https://doi.org/10.1063/1.1368156>
- [14] Y. Sun, S. E. Thompson and T. Nishida, *Strain effect in semiconductors: theory and device applications*. Springer Science & Business Media, 2009.
- [15] C.-C. Li, M. Gong, X.-D. Chen, S. Li, B.-W. Zhao, Y. Dong, G.-C. Guo and F.-W. Sun, "Temperature dependent energy gap shifts of single color center in diamond based on modified Varshni equation", *J. Diamond and Related Materials*, 74: pp. 119-124, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2017.03.002>
- [16] Y.P. Varshni, Temperature dependence of the energy gap in semiconductors, *J. physica*, 34 (1): pp. 149-154, 1967. [https://doi.org/10.1016/0031-8914\(67\)90062-6](https://doi.org/10.1016/0031-8914(67)90062-6)
- [17] M. Panish and Jr. H. Casey, "Temperature dependence of the energy gap in GaAs and GaP", *J. Applied. Phys.*, 40 (1): pp. 163-167, 1969. <https://doi.org/10.1063/1.1657024>
- [18] V. Bellani, S. Di Lernia, M. Geddo, G. Guizzetti, A. Bosacchi, S. Franchi and R. Magnanini, Thermoreflectance study of the direct energy gap of GaSb", *J. Solid state communications*, 104 (2): pp. 81-84, 1997. [https://doi.org/10.1016/S0038-1098\(97\)00277-9](https://doi.org/10.1016/S0038-1098(97)00277-9)
- [19] T. Moss, "Relations between the refractive index and energy gap of semiconductors", *J. physica status solidi*, 131 (2): pp. 415-427, 1985. <https://doi.org/10.1002/pssb.2221310202>
- [20] M. Anani, C. Mathieu, S. Lebid, Y. Amar, Z. Chama and H. Abid, "Model for calculating the refractive index of a III–V semiconductor", 41 (4): pp. 570-575, 2008. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2007.05.023>