

## Calculation of electronic and structure properties of the semi-conductor MgSe by using the FP-LAPW method

H. Salehi\*, H. Nazari

*Department of Physics, Shahid Chamran University, Ahvaz*

(Received: 24/3/2009, in revised form: 4/6/2009)

**Abstract:** In this paper, electronic structure, energy band structure and electronic density in cubic phase for semi-conductor MgSe are studied using WIEN2k package. This employs the Full Potential-Linearized augmented Plane Wave (FP-LAPW) method in the framework of Density Functional Theory (DFT) with generalize different approximations. The results showed a band gap of 2.4 eV at  $\Gamma$  point in the Birrouin zone. The calculated band structure and electronic structure of MgSe agree with the previous experimental and theoretical reports, as do the charge distribution indicated that the bond the Mg and Se is ionic with the one of the properties MgSe.

**Keywords:** *bulk module, energy band structure, FP-LAPW, MgSe*

---

\* Corresponding author, Tel.: +98 (0611) 3331040, Fax: +98 (0611) 3331040, E-mail: Salehi\_h@scu.ac.ir



## محاسبه خواص ساختاری و الکترونی نیمرسانای منیزیم سلنید (MgSe) با استفاده از امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW)

حمداله صالحی\*، حسن نظری

گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران، اهواز

(دریافت مقاله: ۸۷/۱۲/۸، نسخه نهایی: ۸۸/۳/۱۵)

**چکیده:** در این مقاله خواص ساختاری و الکترونی از جمله ثابت شبکه، مدول حجمی، تراکم پذیری، بهینه‌سازی حجم، ساختار نوارهای انرژی و نیز چگالی حالت‌ها و چگالی ابر الکترونی نیمرسانای منیزیم سلنید (MgSe) در فاز مکعبی برای ساختار  $B_1$  مورد بررسی قرار می‌گیرند. محاسبات با استفاده از امواج تخت تقویت‌شده خطی با پتانسیل کامل، (FP-LAPW)، در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) و با استفاده از نرم افزار WIEN2k صورت گرفته است. نتایج به دست آمده یک گاف نواری مستقیم حدود  $2.4 \text{ eV}$  در نقطه  $\Gamma$  را نشان می‌دهد. همچنین یک ویژگی یونی را برای این ترکیب نشان می‌دهد، که از ویژگی‌های ترکیب‌های II-IV است و با نتایج تجربی و نظری به دست آمده از روش‌های دیگر سازگاری خوبی دارد.

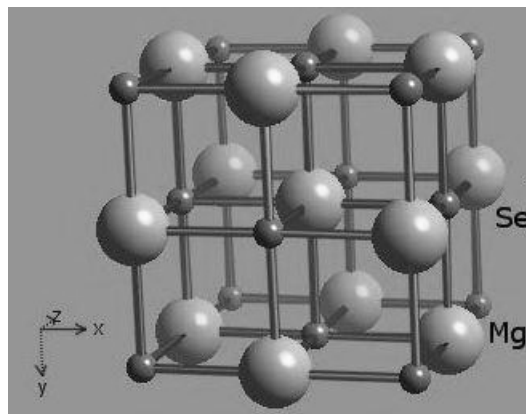
**واژه‌های کلیدی:** مدول حجمی، ساختار نوارهای انرژی، FP-LAPW، MgSe.

### مقدمه

این گذار فازی از ساختار  $B_1$  به ساختار آهن سیلیسیم  $B_{28}$  (FeSi) در فشار  $1.07 \text{ GPa}$  به طور تجربی گزارش شده است [۲]. کارهای تجربی نیز روی رشد لایه‌های نازک آن صورت گرفته است [۳، ۴]. کارهای نظری مختلف با استفاده از روش‌های مختلف همانند تقریب کره اتمی، TB-LMTO، تقریب همبستگی قوی روی خواص کشسانی، الکترونی و ساختاری آن انجام شده است [۱، ۲، ۵، ۶]. این ترکیب در وسایل الکترونیکی نیمرسانا از قبیل لیزرهای تزریقی دیودی و فناوری لیزرهای اپتیکی و ماشین‌های ظریف کاربرد دارد [۷]. شکل ۱ یاخته یک برای این ترکیب را نشان می‌دهند.

منیزیم سلنید (MgSe) یک آلیاژ نیمرسانا با گاف نواری پهن است که در صنعت الکترونیک و بررسی‌های فیزیک نظری جایگاه ویژه‌ای دارد و جزء دسته مواد قلیایی خاکی chalcogenid به شکل (AEC, AE = Mg, C = Sr) است. این ماده با ساختار مکعبی fcc دارای دو فاز، C, O, Se است. این ماده با ساختار مکعبی fcc دارای دو فاز، نمک طعام  $B_1$  با ثابت شبکه  $a = 5.451 \text{ \AA}$  و ساختار روی  $B_3$  با ثابت شبکه  $a = 5.89 \text{ \AA}$  است [۱]. ساختار نمک طعام  $B_1$  ساختار پایدار این ماده در شرایط کنترل شده است. ساختار  $B_3$  ساختار پایدار در دمای اتاق است که تحت فشار  $377 \text{ Kbar}$  یک گذار از فاز  $B_3$  به  $B_1$  دارد و نیز چنین امکان گذار به فازهایی با ساختارهای دیگر هم وجود دارد. علاوه بر

\* نویسنده مسئول، تلفن: ۳۳۳۱۰۴۰ (۰۶۱۱) ۹۸، شماره: ۳۳۳۱۰۴۰ (۰۶۱۱) ۹۸، پست الکترونیکی: Salehi\_h@scu.ac.ir



شکل ۱ یاخته یکه ساختار  $MgSe (B_1)$  [۸].

### روش کار

محاسبات با استفاده از روش FP-LAPW در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) و تقریب چگالی موضعی (LDA) انجام گرفت، و با توجه به این که در تقریب شیب تعمیم یافته شکل کلی انرژی تبادلی-همبستگی به صورت زیر است:

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(r)] = \int \rho(r) \epsilon_x^{unif}[\rho(r)] F_x(s) d^3r \quad (1)$$

چگونگی انتخاب  $F_x$  به تقریب‌های مختلف منجر می‌شود، و تفاوت در تقریب‌های GGA۹۶ و GGA۹۱ در انتخاب تابعی  $F_x$  است [۹-۱۲]. پارامترها به صورت  $R_{MT}(Mg) = 2.0$  a.u. و  $R_{MT}(Se) = 2.2$  a.u. انتخاب شده‌اند که در آنها میانگین شعاع کره‌های مافین-تین است که این انتخاب با توجه به شعاع کره اتمی و طول پیوندها انتخاب شدند. برای جداسازی حالت‌های ظرفیت از حالت‌های مغزی، انرژی ۶- ریدبرگ را مبنا قرار دادیم که این انرژی با توجه به آرایش الکترونی و پیکربندی ترکیب در مورد الکترون‌های ظرفیت، مغزی و شبه مغزی انتخاب شده است، و با توجه به این انرژی، چگونگی تقسیم الکترون‌های مغزی، شبه مغزی و ظرفیت در جدول (۱) آمده است.

در اجرای برنامه، همگرایی انرژی را در نظر گرفتیم که با ۷ چرخه و با اختلاف انرژی ۰/۰۰۰۱ ریدبرگ به همگرایی مورد نظر رسیدیم. برای این همگرایی ۳۵۸ موج تخت تولید شده‌اند. تعداد نقاط در نظر گرفته شده ۱۶۵ نقطه بود که تعداد  $k$ ها با توجه به برنامه انتخاب شده‌اند و به ازای آنها یک شبکه (mesh)  $4 \times 4 \times 4$  (k) ایجاد شد. پارامتر همگرایی  $RK_{max}$  را برابر با ۸ انتخاب کردیم که  $K_{max}$  بیشینه مقدار بردار شبکه وارون است

این پارامتر تعداد پایه‌ها را در محاسبات کنترل می‌کند. ثابت شبکه که به صورت تجربی اندازه‌گیری شده است برابر با  $\text{\AA}$  ۵/۴۵۱ است که در محاسبات از آن استفاده شد [۱].

### نتایج

#### الف: پارامترهای ساختاری

یکی از پارامترهای مهم در این محاسبات ثابت شبکه است، این ثابت به صورت تجربی اندازه‌گیری شده و در دسترس است، ولی با این وجود برای تایید نظری مسئله باید محاسبه شود. برای این منظور انرژی حالت پایه نیمرسانای  $MgSe$  به ازای حجم‌های مختلف، پیرامون حجم تعادلی محاسبه شد و با تغییرات جزئی در اطراف حجم تعادلی وردش داده می‌شود. تغییرات انرژی بر حسب حجم از طریق معادله حالت مورناگون داده می‌شود که به صورت زیر است [۱۳]:

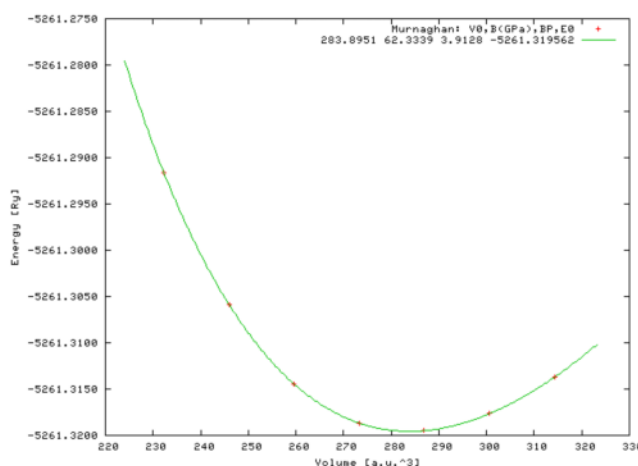
$$E(V) = E_0 + \frac{B_0 V_0}{B'} \left[ \frac{V}{V_0} + \frac{\left(\frac{V}{V_0}\right)^{1-B'}}{B' - 1} - B' \right] \quad (2)$$

با استفاده از این معادله، انرژی کمینه را برای  $MgSe$  با تقریب‌های مختلف به دست آوردیم. در این معادله  $B_0$  مدول حجمی،  $B'$  مشتق آن و  $E_0$  انرژی حالت پایه در دما و فشار صفر است که یکی از نتایج در شکل ۲ برای این ترکیب رسم شده است.

در ادامه محاسبات، کمیت‌های دیگری مثل ثابت شبکه، مدول حجمی، مشتق مدول حجمی نسبت به فشار و تراکم-پذیری با تقریب‌های چگالی موضعی و شیب تعمیم یافته برای فاز  $B_1$  محاسبه، و مقایسه شدند. در جدول (۲) نتایج به دست آمده با داده‌های تجربی و نظری دیگران مقایسه شده‌اند.

جدول ۱ تفکیک الکترون‌های ترکیب MgSe.

اتم	آرایش الکترونی مغزه	آرایش الکترونی شبه مغزه	آرایش الکترونی ظرفیت
Mg	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup>
Se	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>



شکل ۲ نمودار انرژی بر حسب حجم برای ترکیب MgSe با تقریب GGA96.

جدول ۲ پارامترهای ساختاری محاسبه شده در این کار پژوهشی و مقایسه آن با نتایج دیگران برای فاز B<sub>1</sub>.

پارامتر	تقریب	FP- LAPW GGA <sup>۹۶</sup>	FP- LAPW GGA <sup>۹۱</sup>	FP- LAPW ALD	نتایج تجربی [۱]	نتایج نظری [۱۴]
ثابت شبکه a(Å)		۳,۴۷۷	۳,۴۷۵	۳,۴۰۳	۵,۴۵۱	۵,۴۰۶
مدول حجمی B(Gpa)		۶۲,۳	۶۲,۱	۶۹,۴	-	۶۲,۷
مشتق مدول حجمی B'		۳,۹۱	۴,۰	۴,۲	-	۳,۵
K تراکم‌پذیری ( $\frac{m^2}{N}$ )		$۱,۶۱ \times ۱۰^{-۱۱}$	$۱,۶۰ \times ۱۰^{-۱۱}$	$۱,۴۴ \times ۱۰^{-۱۱}$	-	$۱,۵۹ \times ۱۰^{-۱۱}$

شعاع مافین تین است. از این دو جدول مشاهده می‌شود که در تقریب GGA نسبت به تقریب LDA بار ظرفیت برای دو اتم تشکیل دهنده بیشتر است.

از جمله پارامترهای دیگری که در بررسی خواص ساختاری مورد توجه است بار موثر اتم‌های تشکیل دهنده ترکیب است. میزان این بار و نوع انحراف از فرمول اسمی می‌تواند نوع پیوند را مشخص کند. در جدول (۵) این مقادیر محاسبه شده است.

داده‌های جدول حاکی از این است که در ترکیب مورد بررسی به طور متوسط برای هر اتم Mg،  $\frac{۲}{۳}$  الکترون و برای هر اتم Se،  $\frac{۱}{۵}$  الکترون وجود دارد. بنابراین فرم یونی آن به صورت  $Mg^{2/3} Se^{1/5}$  نوشته می‌شود که با مقایسه فرمول اسمی آن  $Mg^{+2} Se^{-2}$ ، این انحراف می‌تواند ناشی از پیوند یونی بین آنها باشد.

از جدول ۲ پیداست که پارامترهای محاسبه شده با تقریب GGA در بسیاری از موارد سازگاری خوبی با نتایج تجربی و نتایج به دست آمده توسط دیگران دارد. با توجه به این که تراکم‌پذیری عکس مدول حجمی است و نشان دهنده سختی بلور است، هرچه تراکم‌پذیری بیشتر باشد استحکام بیشتر است و با توجه به اینکه مدول حجمی این نیم‌رسانا نسبت به دیگر نیم‌رسانای این دسته کوچکتر است، می‌توان گفت که از استحکام بیشتری برخوردار است.

داده‌های مربوط به تجزیه بار اتم منیزیم و سلنید در جدول-های (۳ تا ۴) آمده‌اند.

نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که مافین تین به گونه-ای مناسب انتخاب شده است به طوری که کمترین مقدار بار بیرون کره مافین تین قرار می‌گیرد و تاییدی بر انتخاب بهینه

جدول ۳ تجزیه بار اتم Mg با تقریب‌های مختلف برای ترکیب MgSe.

نوع تقریب	FP -LAPW GGA۹۶	FP - LAPW GGA۹۱	FP - LAPW LDA
بار اسمی	۱۲	۱۲	۱۲
بار داخل کره مافین تین	۱۰٫۶۷۳	۱۰٫۶۷۶	۱۰٫۶۸۸
بار مغزه برای Mg	۲٫۰۸۱۰۵۹	۲٫۰۵۳۴۲۳	۲٫۴۲۲۶۸۶
بار ظرفیت برای Mg	۸٫۵۹۱۹۴۱	۸٫۶۲۲۵۷۷	۸٫۲۶۵۳۱۴
بار بیرون کره مافین تین	۱٫۳۲۶	۱٫۳۲۳	۱٫۳۱۱
مجموع بار داخل و خارج کره مافین تین	۱۱٫۹۹۹۹	۱۱٫۹۹۹۹	۱۱٫۹۹۹۷

جدول ۴ تجزیه بار اتم Se با تقریب‌های مختلف برای ترکیب MgSe.

نوع تقریب	FP -LAPW GGA۹۶	FP -WLAP GGA۹۱	FP - LAPW LDA
بار اسمی	۳۴	۳۴	۳۴
بار داخل کره مافین تین	۳۱٫۸۹۸	۳۱٫۹۰۴	۳۱٫۶۵۵
بار مغزه برای Se	۱۷٫۶۶۰۲۴۶	۱۷٫۶۵۶۶۱۲	۱۷٫۶۶۳۵۰۱۶
بار ظرفیت برای Se	۱۴٫۲۳۷۷۵۴	۱۷٫۲۴۷۳۳۸	۱۷٫۰۱۴۹۹۸۴
بار بیرون کره مافین تین	۲٫۱۰۱	۲٫۰۹۵	۲٫۳۴۴
مجموع بار داخل و خارج کره مافین تین	۳۴٫۰۰۰	۳۴٫۰۰۰	۳۴٫۰۰۰

جدول ۵ بار موثر محاسبه شده برای اتم‌های ترکیب MgSe

نوع تقریب اتم نوع	FP-LAPW GGA۹۶	FP- LAPW GGA۹۱	FP- LAPW LDA	بار اسمی
اتم Mg	۲٫۳	۲٫۳	۲٫۱	۲
اتم Se	۱٫۵	۱٫۵	۱٫۴۶	۲

## ب: تاثیر فشار

اکنون به بررسی تاثیر فشار بر ساختار MgSe می‌پردازیم. برای این منظور نخست وابستگی حجم به فشار را از معادله (۲) به دست می‌آوریم. با مشتق‌گیری از معادله (۲) نسبت به حجم و با استفاده از رابطه ترمودینامیکی  $dE = -PdV$ ، وابستگی حجم به فشار به صورت معادله ۳ به دست می‌آید.

$$V(P) = V_0 \left[ \left( \frac{B'}{B} \right) P + 1 \right]^{-\frac{1}{B'}} \quad (3)$$

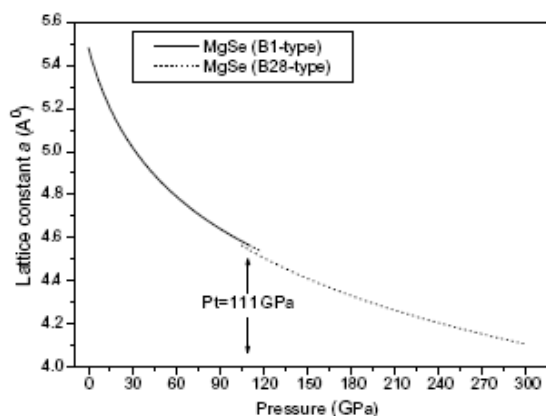
اگر از طریق حجم، ثابت شبکه را به دست آوریم، نمودار وابستگی ثابت شبکه به فشار برای این نیمرسانا در فاز  $B_1$  به صورت شکل ۳ است.

از این نمودار پیداست که با افزایش فشار حجم یاخته یکه کاهش و در نتیجه ثابت شبکه نیز کم می‌شود و یک گذار فاز

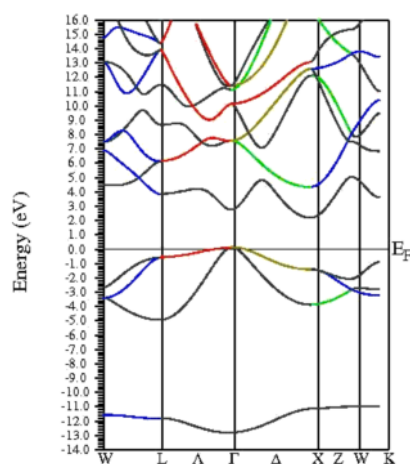
نیز در این شکل دیده می‌شود که در فشار ۱۱۱ GPa رخ می‌دهد و به گذار از ساختار  $B_1$  به ساختار آهن سیلسیم  $B_{28}$  وابسته است، و در حدود ۳۷ با نتایج تجربی اختلاف دارد.

## ج: نوارهای انرژی

با محاسبه ساختار نوارهای انرژی هر ترکیب می‌توان به خواص ساختاری، الکترونی و... آن ماده پی برد. ساختار نوارهای انرژی MgSe در راستای خطوط تقارنی مختلف و با تقریب GGA96 در شکل ۴ رسم شده است. در همه این نمودارها، انرژی فرمی به عنوان مبدا مقیاس (صفر انرژی) انتخاب شده و مقیاس انرژی بر حسب الکترون ولت است. در شکل ۴ تغییرات انرژی بر حسب بردار موج الکترونی برای ترکیب MgSe رسم شده است، و نمودار نوارهای انرژی در راستای خطوط تقارنی را خود برنامه رسم می‌کند.



شکل ۳ نمودار تغییرات حجم بر حسب فشار.



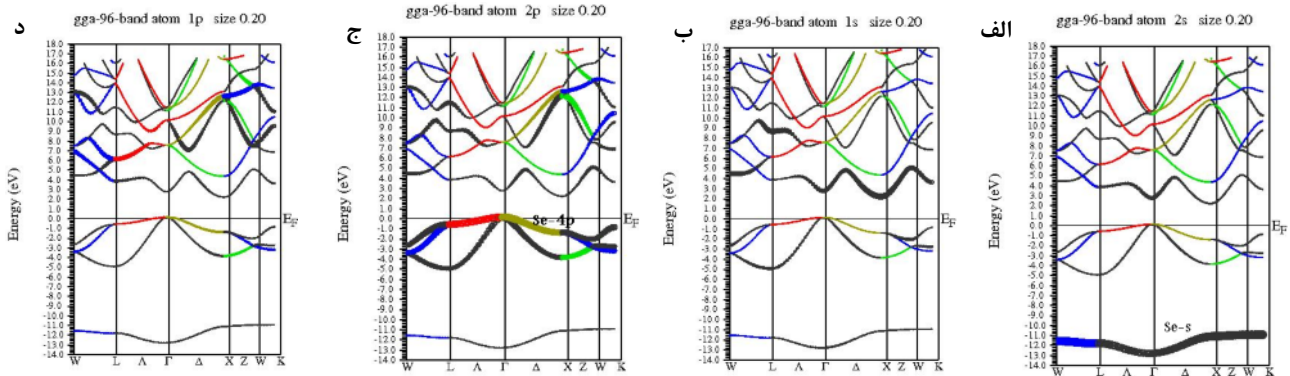
شکل ۴ ساختار نوارهای انرژی برای فاز B<sub>1</sub> در تقریب GGA 96.

رسانش است و مشارکت ناچیزی نیز در بالای نوار ظرفیت دارد (شکل ۵ ب).

همچنین مشارکت بیشتر مدارهای p اتم Se در بالای نوار ظرفیت است و مشارکت اندکی نیز در نوار رسانش دارد (شکل ۵ ج). در حالی که مشارکت بیشتر مدارهای p اتم Mg در نوار رسانش است (شکل ۵ د). این می‌تواند وجود دوگانگی بین مدارهای p هر دو اتم را در نوار رسانش بیان کند. همچنین توزیع بارهای جزئی بیانگر این است که در اتم Mg مشارکت مدارهای s نسبت به p بیشتر است و در اتم Se هم این وضعیت برقرار است. از طرف دیگر با توجه به این که چگالی حالتها، چگونگی توزیع انرژی را در ترکیب بیان می‌کند می‌توان با آن چگونگی نحوه مشارکت مدارهای مختلف را در ترکیب مشاهده کرد که محاسبات انجام شده تأییدی بر مشاهدات در ساختار نواری است.

چنانکه در شکل دیده می‌شود نوارهای انرژی سطح فرمی را قطع نمی‌کنند و یک گاف نواری مستقیم  $2.4 \text{ eV}$  در نقطه  $\Gamma$  دارد. پهنای نوار ظرفیت از  $0 \text{ eV}$  تا  $-13 \text{ eV}$  است که به مشارکت اتمهای مختلف مربوط است. برای بررسی چگونگی مشارکت مدارهای مختلف، با رسم ساختار نوارهای انرژی به ازای مدارهای مختلف، می‌توان در نواحی دور از سطح فرمی ناحیه مغزی و شبه مغزه را تعیین کرد و تفکیک نوارها بر این اساس صورت می‌گیرد که مشارکت مدارهای مختلف را مورد بررسی قرار داد. در شکل (الف، ب، ج، د) چگونگی مشارکت مدارهای مختلف اتمهای تشکیل دهنده MgSe در فاز مکعبی - نشان داده شده است. در شکل (الف) ساختار نوارهای انرژی مدارهای s اتم Se رسم شده است. از این شکل پیداست که بیشتر مشارکت مدارهای s اتم Se در ته نوار ظرفیت است در حالی که عمده مشارکت اربیتالهای s اتم Mg در ته نوار

در جدول ۶ گاف انرژی با تقریب‌های مختلف محاسبه و با کار دیگران مقایسه شده است.



شکل ۵ الف: نوارهای انرژی وابسته به مدارهای s اتم Se. ب: نوارهای انرژی وابسته به مدارهای s اتم Mg. ج: نوارهای انرژی وابسته به مدارهای p اتم Se. د: نوارهای انرژی وابسته به مدارهای p اتم Mg.

جدول ۶ محاسبه گاف نوارهای انرژی در این کار و مقایسه با کارهای دیگران.

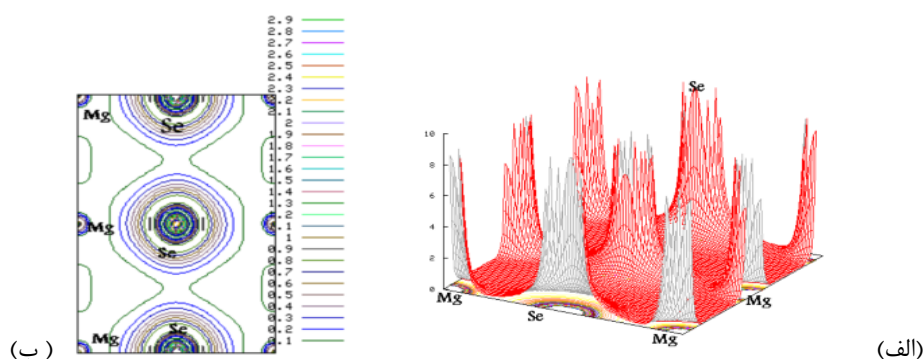
گاف انرژی	کار حاضر			کار دیگران	
	FP-LAPW GGA96	FP-LAPW GGA91	FP-LAPW LDA	روش نظری [۵]	روش تجربی [۱۵]
$\Gamma$	۲٫۴eV	۲٫۲۸eV	۲٫۰۴eV	۱٫۹۵eV	۲٫۴۷eV
$\Gamma \rightarrow X$	غیر مستقیم	غیر مستقیم	غیر مستقیم	-	-
درصد اختلاف	٪۲٫۸	٪۷٫۷	٪۱۷٫۴	٪۲۱٫۱	۰

ترکیب در صفحه (۱۱۰) رسم و در شکل (۶ الف وب) آمده است. توزیع‌های بار الکترون محاسبه شده یک ویژگی یونی پیوندهای Mg-Se را نشان می‌دهد. در هر دو شکل دیده می‌شود که یون Se بزرگتر از Mg است. یک انتقال بار از Mg به Se وجود دارد که می‌تواند به دلیل الکترون‌گاتیوتر بودن Se از Mg باشد. محاسبه بارهای موثر و نیز انحراف از حالت اسمی آن، پیوند یونی آن را تایید می‌کند. مسئله یگانگی تا آنجا که به سرشتی-های بارکل در ساختار و ویژگی‌هایی که به ساختار نواری وابسته باشد، مهم است. میزان یونیده شدن به طور مستقیم به سرشتی پیوندهای شیمیایی وابسته است، و وسیله‌ای را برای توضیح و رده‌بندی سرشتی‌های ترکیب‌های گروه II-IV فراهم می‌آورد. نتایج حاکی از آن است که MgSe یک سرشتی یونی قوی دارد که نشان می‌دهد نسبت به نیمرساناهای گروه II-IV، یک ماده بسیار یونی‌تر است.

آنچه که این جدول نشان می‌دهد این است که محاسبات استفاده از تقریب GGA به نتایج تجربی بسیار نزدیک است و اختلافی در حدود ۲٫۸٪ را دارد، در حالی که در تقریب‌های دیگر این اختلاف بیشتر است. و این می‌تواند ناشی از این باشد که در تقریب شیب تعمیم یافته، شیب چگالی در محاسبات وارد می‌شود و از آزادی بیشتری برای محاسبه انرژی تبدلی-همبستگی می‌توان بهره جست. در تقریب شیب تعمیم یافته از پارامترهای زیاد واز مقادیر بزرگ تجربی برای اتم‌ها و مولکول‌ها استفاده می‌شود و باعث دقیق‌تر شدن انرژی تبدلی-همبستگی می‌شود.

#### ه: چگالی ابر الکترونی

چگالی ابر الکترونی، چگونگی نوع ترکیب را مشخص می‌کند. برای اینکه نوع پیوندهای بین اتم‌های این ترکیب را بدانیم نمودارهای سه بعدی و دو بعدی چگالی ابر الکترونی این



شکل ۶ چگالی ابر الکترونی در صفحه (۱۱۰) الف: سه بعد، ب: دو بعد همراه با درصد مشارکت.

### برداشت

محاسبات با استفاده از روش FP-LAPW در چارچوب نظریه تابعی چگالی انجام گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که در نقطه  $\Gamma$  دارای یک گاف مستقیم به اندازه  $2.4 \text{ eV}$  است که در حدود  $2.8\%$  با مقدار تجربی اختلاف دارد. هم چنین چگالی ابر الکترونی نمایانگر یک پیوند یونی در این ترکیب است که با نتایج تجربی و نظری به دست آمده از روش‌های دیگر سازگاری خوبی دارد.

### مراجع

- [7] Chadi D., James, Zuzuki T., "Semiconductive devices utilizing MgTe, MgSe, ZnSe, ZnTe and alloys thereof", United States Patent 5379313, (1995)
- [8] Greenwood N.N., Earnshaw A., "Chemistry of Elements, 2nd edition", Butterworth, UK (1997).
- [9] Blaha P., Schwartz K., Sorantin P.I., "WIEN'2k: full potential linearized augmented plane wave for calculating crystal properties", Phy.Rev. Commun.59 399 (1990)
- [10] Kohn W., Sham L.J., "Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects", Phy.Rev.A 1133 140 (1965)
- [11] Pedrew J.P., Chevary J.A., Vosko S.H., Jackson K.A., Pederson M.R., Singh D.J., Fiolhais C., "Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation", Phys. Rev. B 46 6671 (1992)
- [12] Hohenberg P., Kohn W., "Inhomogeneous electron gas", Phy.Rev.B 864 136 (1964)
- [13] Murnaghan F.D., "The Compressibility of Media under Extreme Pressures", in Proceedings of the National Academy of Sciences, 302 4-247(1944)
- [14] Lee S., Chang K.J., "First principles study of the structural properties of MgS- MgSe-ZnS and ZnSe-based superlattices", Phys. Rev. B 52 1918 (1995)
- [15] Fleszar A., "LDA, GW, and exact-exchange Kohn-Sham scheme calculations of the electronic structure of sp semiconductors", Phys. Rev. B 64 245204 (2001).
- [1] Kalpana G., Palanivel B., Reena Mary Thomas, Rajagopalan M., "Structural properties of MgS and MgSe", PhysicaB: Condensed Matter 222, 223-228, Issues 1-39 (1995)
- [2] Dinesh V., Kaurav N., Sharma U., Singh R.K., "Phase transformation and elastic behavior of MgSe alkaline earth", Journal of Physics and Chemistry of Solids in Press, Corrected Proof (2007) .
- [3] Prete P., Lovergine N., Tapfer L., Zanotti-Fregonara C., Mancini A.M., "MgSe on (100)GaAs" Journal of Crystal Growth 214/215 119-124 (2000) .
- [4] Korn M., Albert D., NuK mberger J., Faschinger W., "Growth of MgSe superlattices by molecular beam epitaxy", Journal of Crystal Growth 201/202 448-452 (1999)
- [5] Rabah M., Abbar B., Al-Douri Y., Bouhafis B., Sahraoui B., "Calculation of structural optical and electronic properties of ZnS, ZnSe, MgS, MgSe", Science and Engineering 131, 162-168 (2003).
- [6] Sahraoui F.A., Arab F., Zerroug S., Louail L., "First-principles study of structural and elastic properties of MgSe under hydrostatic pressure", in Press, Corrected Proof (2007)