

مطالعه خواص اپتیکی ترکیبات چهارتایی AlInGaN

ثمین ابراهیمی^{1*}، سید علی هاشمی زاده عقداء²

1. کارشناس ارشد، فیزیک، دانشگاه پیام نور

2. استادیار، فیزیک، دانشگاه پیام نور

تاریخ پذیرش: 1395/06/09

تاریخ دریافت: 1395/01/16

The Study of Optical properties of AlInGaN Quaternary Compounds

S. Ebrahimi^{*1}, S.A. Hashemizadeh-aghda²

1. MSc., Physics, Payame Noor University

2. Assistant Professor, Physics, Payame Noor University

Received: 2016/04/04

Accepted: 2016/08/30

Abstract

In this article, optic properties of AlInGaN compounds such as real and imaginary part of dielectric function, optical conductivity, refractive index and extinction index have been investigated. Calculation have performed using Full Potential Linear Approximation Plane Wave method in Density Functional Theory framework by WIEN2K package.

Finally, the optical properties of these compounds were examined which confirmed the results of the electronic and band structures. We also noticed that the VBM of these alloys is higher than the GaN in the fixed band gap. So it is expected that these alloys are doped much easier than P-type semiconductors.

Keywords

Optical Propertiest, Density Functional Theory, Advanced Linear Plane Wave Method with Full Potential, Aluminum Indium Gallium Nitride.

چکیده

در این مقاله خواص اپتیکی ترکیب AlInGaN از جمله قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، رسانندگی اپتیکی، ضریب شکست، ضریب خاموشی و تابع اتلاف انرژی مورد بررسی و محاسبه قرار گرفته اند. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی WIEN2k صورت گرفته است.

در نهایت نیز خواص اپتیکی این ترکیبات بررسی شد که نتایج به دست آمده از ساختار الکترونی و نواری را تأیید کرد. همچنین متوجه شدیم که VBM این آلیاژها از GaN در گاف نوار ثابت بالاتر است؛ بنابراین انتظار می رود این آلیاژها خیلی راحت تر به عنوان نیم رساناهای نوع p آلیایده شوند.

واژگان کلیدی

خواص اپتیکی، نظریه تابعی چگالی، روش امواج تخت به ساخته خطی با پتانسیل کامل، آلومینیوم ایندیم گالیم نیتريد.

* نویسنده مسئول: ثمین ابراهیمی

ایمیل نویسنده مسئول:

*Corresponding Author: sakine.ebrahimi@yahoo.com

مقدمه

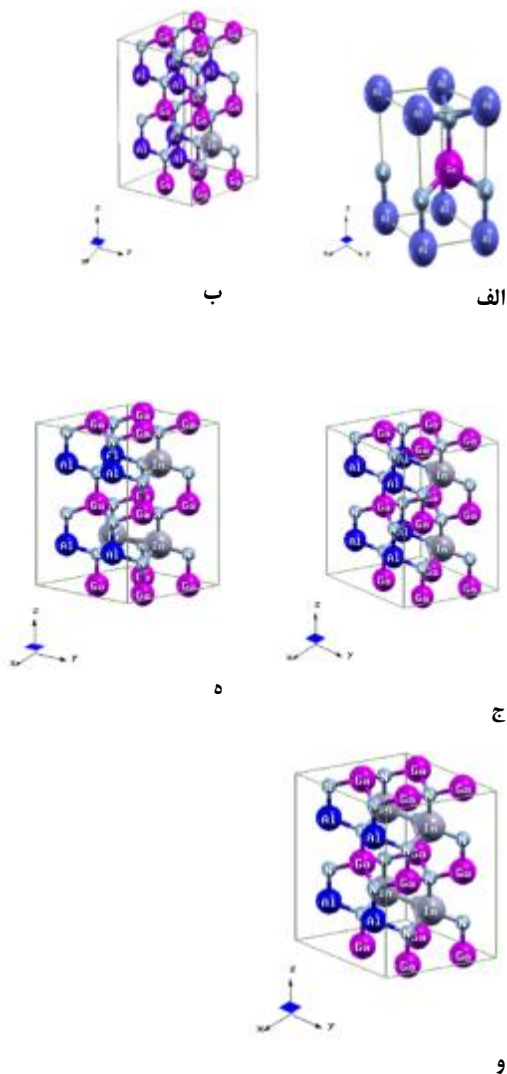
نیمه رساناهای نیتريدی گروه سوم جدول تناوبی AlN ، GaN و InN و آلیاژهای سه تایی آنها $AlGaIn$ و $GaInN$ مورد توجه تحقیقات گسترده‌ای بوده‌اند [1]-[5]؛ زیرا گاف نواری آنها محدوده‌ای از 0.7eV تا 6.1eV را پوشش می‌دهد که آنها را برای کاربردهایی مانند دیودهای گسیلنده نور فرابنفش و آبی و ترانزیستورهای اثر میدان چندلایه توان/دما بالا مناسب می‌سازد.

اخیراً اما آلیاژهای چهارتایی $Al_xIn_yGa_{1-x-y}N$ مورد توجه بسیاری قرار گرفته‌اند؛ زیرا برخلاف آلیاژهای سه تایی، گاف نواری و ثابت شبکه این نوع آلیاژها می‌تواند به صورت مستقل تنظیم شود [6]-[9]؛ به طور مثال این امکان وجود دارد که آلیاژی با ثابت شبکه در حد GaN داشت و به طور هم‌زمان گاف نواری آلیاژ را تغییر داد.

این کار در کاهش نقص‌ها، در رفتگی‌های نامتجانس و میدان‌های پیزوالکتریک در مهندسی گاف نواری از طریق تشکیل ساختارهای چندلایه $Al_xIn_yGa_{1-x-y}N/GaN$ میسر است. برای شبیه‌سازی آلیاژهای $In_xAl_yGa_{1-x-y}N$ از ساختار ایه GaN اسپایه GaN و GaN دارای ساختار ورتسایت با گروه تقارنی $P6_3mc$ است که در آن $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$ است. ثوابت شبکه این ترکیب به ترتیب $3/18$, $3/18$ و $5/166$ آنگستروم است.

این ساختار دارای دو اتم پایه است که اتم گالیم در جایگاه $x=1/3$, $y=2/3$, $z=0$ و اتم نیتروژن در جایگاه $x = \frac{1}{3}$, $y = \frac{2}{3}$, $z = 0.385$ قرار دارد. برای به دست آوردن نسبت‌های مناسب برای x و y یک ابر شبکه با ابعاد $2 \times 2 \times 2$ از GaN ایجاد کرده که به سبب آن سلول واحد دارای 16 اتم نیتروژن و 16 اتم گالیم گردید.

سپس برای به دست آوردن نسبت‌های دلخواه اتم‌های آلومینیوم و ایندیوم را به جای گالیم در شبکه قرار دادیم. شکل سلول واحد این آلیاژها در زیر آمده است:



شکل 1. ساختار بلوری الف) $Al_{0.5}Ga_{0.5}N$ (ب)

ج) $In_{0.0625}Al_{0.4375}Ga_{0.5}N$ (د) $In_{0.125}Al_{0.375}Ga_{0.5}N$

و) $In_{0.1875}Al_{0.3125}Ga_{0.5}N$ (و) $In_{0.25}Al_{0.25}Ga_{0.5}N$

روش و جزئیات محاسبات

محاسبات این مقاله با استفاده از کد نرم‌افزاری WIEN2K انجام شده است. این کد نرم‌افزار بر پایه نظریه تابعی چگالی به حل دسته معادلات کان - شم به روش امواج تخت بهبود یافته خطی به علاوه اوربیتال‌های موضعی $(L)APW+Io$ [10] می‌پردازد. در این روش تابع‌های پایه‌ای که درون کره‌های موافین‌تین استفاده می‌شود، دارای

بیشینه عدد کوانتومی مداری I_{max} را برابر 10 قرار داده‌ایم. پارامتر $R_{MT}K_{max}$ در محاسبات مربوط به این ترکیب‌ها برابر با 7 است. همچنین با استفاده از روش همگرایی انرژی تعداد نقاط در فضای بریلوئن و معادل کاهش ناپذیر آن را محاسبه کرده‌ایم.

جدول 2. مقادیر تعداد نقاط بهینه‌شده برای ترکیبات AlInGaN استفاده‌شده در محاسبات اپتیکی

	In _{0.25} Al _{0.25} Ga _{0.5} N	In _{0.1875} Al _{0.3125} Ga _{0.5} N	In _{0.125} Al _{0.375} Ga _{0.5} N	In _{0.0625} Al _{0.4375} Ga _{0.5} N	Al _{0.5} Ga _{0.5} N
k-point	5000	5000	5000	5000	5000
k-points generated	473	2426	2426	2426	2426
Ndiv	11×21×21	11×21×21	11×21×21	11×21×21	11×21×21

همچنین واهلش اتم‌ها را برای تمام ترکیب‌ها با استفاده از تقریب Engel-Vosko انجام دادیم و نیروهای وارد بر اتم‌ها را تا 1 mRy/bohr، کمینه کردیم. همان‌طور که از ساختارهای نواری رسم شده این ترکیبات پیداست، گاف نواری در همه این آلیاژها مستقیم بوده است و بیشین، نوار ظرفیت و کمینه نوار رسانش بر روی نقطه Γ رخ می‌دهد.

انعطاف بیشتری نسبت به روش APW هستند؛ زیرا از دو تابع شعاعی برای بسط ویژه تابعها استفاده شده است. همچنین در این روش به دلیل اینکه ضریب‌های بسط در مخرج صفر نمی‌شوند، با مشکل مجانبی برای ضریب‌های بسط روبه‌رو نخواهیم شد. اما برای آنکه بتوان از روش LAPW درون کره‌ها نتیجه‌هایی به خوبی روش APW به دست آورد، باید مجموعه تابع‌های پایه را با انتخاب تعداد بیشتری پایه افزایش دهیم. این امر به همگرایی کندتر LAPW ناشی از بیشتر بودن تابع‌های پایه می‌انجامد [11]. با این وجود هیچ تردیدی وجود ندارد که این روش، روش وابسته به انرژی APW را تا حد زیادی بهبود بخشیده است. شعاع کرات مافین - تین چنان انتخاب شده‌اند که علاوه بر رعایت شرط نداشتن همپوشانی کرات، کمترین نشت بار از کرات مافین - تین را داشته باشیم. بر این اساس شعاع کرات در جدول شماره 1 آمده‌اند.

جدول 1. مقادیر شعاع کره مافین تین برای ترکیبات InAlGaN

	In _{0.25} Al _{0.25} Ga _{0.5} N	In _{0.1875} Al _{0.3125} Ga _{0.5} N	In _{0.125} Al _{0.375} Ga _{0.5} N	In _{0.0625} Al _{0.4375} Ga _{0.5} N	Al _{0.5} Ga _{0.5} N
R_{MT}^{In} (bohr)	1/99	1/99	1/99	1/99	-
R_{MT}^{Al} (bohr)	1/86	1/86	1/86	1/86	1/86
R_{MT}^{Ga} (bohr)	1/95	1/95	1/95	1/95	1/95
R_{MT}^N (bohr)	1/63	1/63	1/63	1/63	1/63
نشت بار اتم N برحسب بار الکترون	0/000001	0/000001	0/000001	0/000003	0/000002

خواص اپتیکی

خواص اپتیکی جامدات، یکی از مهم‌ترین موضوعات برای تحقیق و پژوهش است و کاربردهای فراوانی در صنعت دارد. به‌عنوان مثال، زمانی که دربارهٔ سرچشمه اصلی فرآیندهای برانگیختگی الکترون‌ها در جامدات مطالعه می‌کنیم، خواص اپتیکی در بسیاری ابزارهای الکترواپتیکی به توصیف برهم‌کنش‌های مختلف الکترون - فونون می‌پردازد. علاوه بر آن، روش‌های اپتیکی برای تعیین ویژگی‌های ساختار نواری در جامدات نیز کاربردهای فراوانی دارند. ثابت دی‌الکتریک¹ یکی از مهم‌ترین کمیت‌های اپتیکی است که با تعیین آن می‌توان سایر پارامترهای اپتیکی را نیز به‌درستی به دست آورد.

تابع دی‌الکتریک $\epsilon(\omega, \mathbf{q})$ گاز الکترون که وابستگی آن به بردار موج (\mathbf{q}) و بسامد (ω) قوی است، پیامدهای چشمگیری در مورد ویژگی‌های فیزیکی جامدات دربر دارد. در یک حد، $(\mathbf{q} = 0)$ یعنی $\epsilon(\omega, \mathbf{q})$ ، برانگیختگی‌های جمعی دریای فرمی، یعنی پلاسمون‌های حجمی و سطحی را توصیف می‌کند. در حد دیگر $(\omega = 0)$ یعنی $\epsilon(0, \mathbf{q})$ استتار الکتروستاتیکی برهم‌کنش‌های الکترون - الکترون، شبکه و الکترون - ناخالصی در بلورها را توصیف می‌کند.

تابع دی‌الکتریک $\epsilon(\omega)$ ، به‌صورت زیر تعریف می‌شود[12]:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (1)$$

به‌وسیله روابط زیر،

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{-2\omega}{\pi} Pr \int_0^\infty d\omega' \frac{\epsilon_1(\omega') - 1}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (2)$$

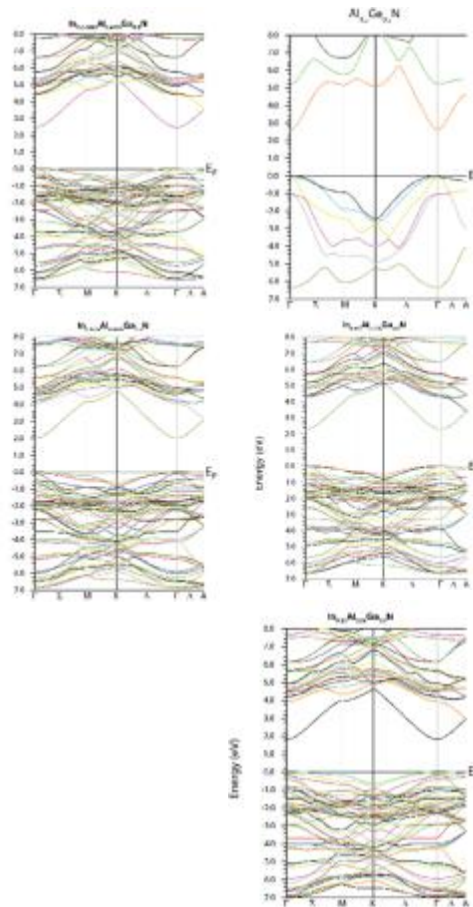
$$\epsilon_1(\omega) \quad (3)$$

$$= 1 + \frac{2}{\pi} Pr \int_0^\infty d\omega' \frac{\omega' \epsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2}$$

$$Pr \int_0^\infty d\omega' \frac{\epsilon_1(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (4)$$

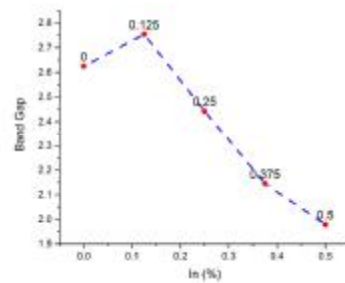
$$= \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[\int_0^{\omega-\delta} d\omega' \frac{\epsilon_1(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} + \int_{\omega+\delta}^\infty d\omega' \frac{\epsilon_1(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} \right]$$

1. Dielectric constant



شکل 2. ساختارهای نواری

همچنین در شکل 3 تغییرات گاف نواری بر حسب غلظت ایندیوم رسم شده که بیانگر تغییرات خطی آن است.



شکل 3. تغییرات گاف نواری بر حسب غلظت ایندیوم

با افزایش غلظت کاتیون‌ها گاف اپتیکی این آلیاژها کاهش می‌یابد و به سمت طول‌موج‌های بلندتر میل می‌کند.

جدول 3. مقادیر ثابت دی‌الکتریک استاتیک

	In _{0.25} Al _{0.25} Ga _{0.5} N	In _{0.1875} Al _{0.3125} Ga _{0.5} N	In _{0.125} Al _{0.375} Ga _{0.5} N	In _{0.0625} Al _{0.4375} Ga _{0.5} N	Al _{0.5} Ga _{0.5} N
$\epsilon_1(0)_{xx}$	4/89086	4/79913	4/94432	5/0087	5/07423
$\epsilon_1(0)_{zz}$	5/1808	5/04251	5/24004	5/31395	5/38956

در انرژی‌های کم دو محور اپتیکی این ترکیبات رفتار تقریباً مشابهی دارند ولی در انرژی‌های بالاتر از 5 الکترون‌ولت این محورها رفتارهای متفاوتی از خود نشان می‌دهند؛ بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که در حوزه نور مرئی این ترکیبات به مانند ترکیباتی با یک محور اپتیکی یکتا عمل می‌کنند.

قله‌هایی که در بخش موهومی ثابت دی‌الکتریک مشاهده می‌شود به معنای بیشینه گذار در انرژی خاص است.

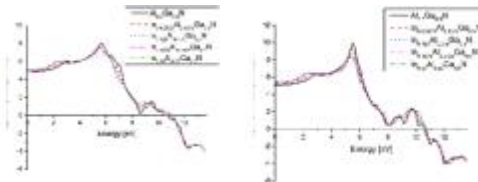
ثابت‌های اپتیکی دیگر مانند ضریب شکست، تابع اتلاف، ضریب بازتاب، رسانندگی اپتیکی و ضریب خاموشی را می‌توان برحسب سهم‌های موهومی و حقیقی تابع دی‌الکتریک مختلط بیان کرد. رابطه ضریب شکست با تابع دی‌الکتریک به صورت زیر است:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{+\epsilon_1(\omega) + \sqrt{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)}}{2}} \quad (6)$$

با این فرض که حد بالا وجود داشته باشد؛ یعنی $\epsilon(\omega)$ در $\omega=0$ تکینگی نداشته باشد رابطه‌های نشان داده شده در معادله‌های 1 و 2 روابط کرامرز - کرونیگ خوانده می‌شود. در مورد فلزات تکینگی در $\omega=0$ جداگانه و اندکی پیچیده‌تر بررسی می‌شود.

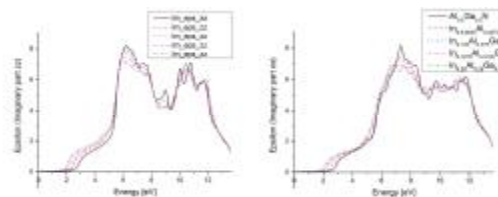
محاسبه سهم گذارهای بین نواری باید با در نظر گرفتن گسسته بودن انرژی بین نواری مختلف، از رابطه‌های کوانتومی استفاده کنیم. در نهایت رابطه زیر برای قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک به دست می‌آید:

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{i,n} \int dk^2 |\langle \epsilon, \vec{p} \rangle|_{i,n}^2 w_n (1 - w_i) \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \quad (5)$$



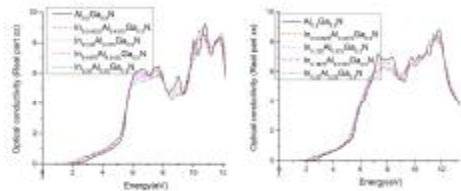
شکل 3. بخش حقیقی ثابت دی‌الکتریک برحسب انرژی فوتون فرودی

ثابت دی‌الکتریک استاتیک $\epsilon_1(0)$ با افزایش مقدار In افزایش می‌یابد، در انرژی‌های کم دو محور اپتیکی این ترکیبات رفتار تقریباً مشابهی دارند ولی در انرژی‌های بالاتر از 5 الکترون‌ولت این محورها رفتارهای متفاوتی از خود نشان می‌دهند و بخش حقیقی ثابت دی‌الکتریک Al_{0.5}Ga_{0.5}N در بازه انرژی بالاتر از 10 الکترون‌ولت منفی شده که نشان‌دهنده بازتابندگی قوی در این ناحیه است.



شکل 4. بخش موهومی ثابت دی‌الکتریک برحسب انرژی فوتون فرودی

گاف نواری در این ترکیبات الکترون در انرژی‌های کمتر از 2 الکترون‌ولت توانایی برانگیختگی به ترازهای رسانش را ندارند ولی به محض اینکه انرژی فوتون فرودی از 2 الکترون‌ولت بیشتر می‌شود، برانگیختگی‌هایی به حالت‌های اشغال نشده نوار رسانش مشاهده می‌شود. با افزایش انرژی فوتون فرودی ابتدا رسانندگی افزایش می‌یابد و سپس کاهش و افزایش می‌یابد که نشان‌دهنده لبه‌های جذب است.

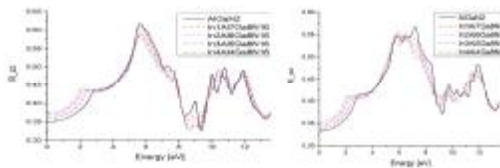


شکل 7. تغییرات بخش حقیقی رسانندگی اپتیکی برحسب انرژی فوتون فرودی

ضرب بازتاب مشخص‌کننده دامنه یا شدت موج بازتابیده نسبت به موج پیشامد است.

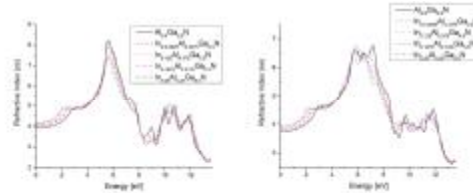
$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon(\omega)} + 1} \right|^2 = \frac{[n - 1]^2 + [K]^2}{[n + 1]^2 + [K]^2} \quad (8)$$

از بررسی نمودارها نتیجه می‌گیریم که تفاوت میزان بازتاب برای راستای ZZ با راستاهای XX و YY در بعضی از ساختارها ناهمسان گردی بازتاب را برای این ترکیبها بیان می‌کند و همچنین در بازه‌های انرژی که بخش موهومی تابع دی‌الکتریک زیاد است، ضرب بازتاب نیز افزایش می‌یابد.



شکل 8. تغییرات ضرب بازتاب برحسب انرژی فوتون فرودی

نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که ضرب شکست استاتیک با افزایش غلظت کاتیون به تدریج افزایش می‌یابد.

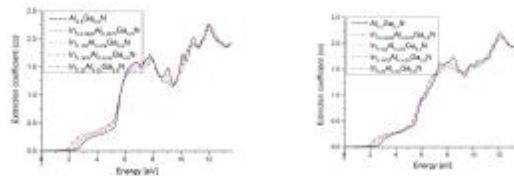


شکل 5. تغییرات ضرب شکست برحسب انرژی فوتون فرودی

بخش موهومی ضرب شکست که آن را با $k(\omega)$ نشان می‌دهند، نشان‌دهنده ضرب خاموشی، از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$K(\omega) = \sqrt{\frac{-\varepsilon_1(\omega) + \sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}}{2}} \quad (7)$$

با توجه به نمودارها و مقایسه نتیجه‌های آن می‌توان گفت از آنجایی که بخش موهومی تابع دی‌الکتریک نشان‌دهنده جذب است، می‌بینیم که نمودار شاخص خاموشی شباهت بسیار زیادی با نمودارهای بخش موهومی ثابت دی‌الکتریک دارد.



شکل 6. تغییرات ضرب خاموشی برحسب انرژی فوتون فرودی رسانندگی اپتیکی گذارهای بین نوار را نشان می‌دهد که دارای به مقدار آستانه است که مقدار آن برابر گاف نواری است. از بررسی نمودارهای رسانندگی اپتیکی درمی‌یابیم که در انرژی‌های کم دو محور اپتیکی این ترکیبات تقریباً رفتار یکسانی از خود نشان می‌دهند اما با افزایش انرژی فوتون فرودی رفتار بلور در جهات متفاوت باهم فرق می‌کند. از بررسی رسانندگی چنین برداشت می‌شود که به دلیل وجود

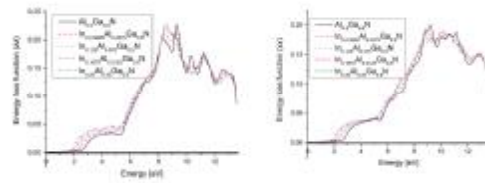
بحث و نتیجه‌گیری

نتایج نشان می‌دهد که اگر در ترکیبات $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ نسبت x/y در حدود $4/7$ باشد ثابت شبکه این ترکیبات در حدود ثابت شبکه GaN خواهد بود. همچنین اگر نسبت x/y برابر $1/8$ باشد، گاف نواری این ترکیبات در حدود گاف نواری GaN خواهد بود. به تدریج با افزایش غلظت ایندیوم گاف نواری کاهش پیدا می‌کند و به گاف نواری گالیم نیتريد نزدیک می‌شود؛ بنابراین می‌توان با ثابت نگه‌داشتن گاف نواری ثابت شبکه را تغییر داد و به مقدار دلخواه رسید. همچنین از بررسی ساختار نواری به این نتیجه می‌رسیم که بیشینه نوار ظرفیت و کمینه نوار رسانش در این ترکیبات به شدت در جایگاه‌های InN جایگزین شده است که نشان می‌دهد چرا شدت PL در ترکیبات چهارتایی افزایش می‌یابد. به عنوان یک نتیجه، بیشینه نوار ظرفیت این آلیاژ با همان گاف نواری GaN در سطح بالاتری از GaN قرار دارد که نشان می‌دهد آلیاژ نوع p در آلیاژهای چهارتایی باید نسبتاً ساده‌تر از GaN باشد.

به‌طور کلی نمودار تابع اتلاف انرژی تلف‌شده در هر محیط را نشان می‌دهد. قله‌هایی که در نمودار تابع اتلاف دیده می‌شود، تشدید پلاسمایی را نشان می‌دهند؛ بنابراین بسامد متناظر با آن‌ها بسامد تشدید پلازما است.

$$L(\omega) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} \quad (9)$$

همان‌طور که از نمودارها پیداست پیک پلاسمونیک با افزایش غلظت کاتیون‌ها به سمت انرژی‌های پایین انتقال پیدا می‌کند و همچنین یکی از پیک‌ها به تدریج از بین می‌رود.



شکل 9. تابع اتلاف برحسب انرژی فوتون فرودی

منابع

- [1] C.A.M. Fabien, B.P. Gunning, J.J. Merola, E.A. Clinton, and W. A. Doolittle, "Large-area III-nitride double-heterojunction solar cells with record-high in-content InGaN absorbing layers," in Photovoltaic Specialist Conference (PVSC), 2015 IEEE 42nd, 2015, pp. 1–3.
- [2] Y.-H. Cho, "(Invited) Nitride Semiconductor Quantum Structures for Novel Nanophotonic Devices," in PRiME 2016/230th ECS Meeting (October 2-7, 2016), 2016.
- [3] J. Zhang and N. Tansu, "Optical gain and laser characteristics of InGaN quantum wells on ternary InGaN substrates," IEEE Photonics J., vol. 5, no. 2, p. 2600111, 2013.
- [4] D.F. Feezell, J. S. Speck, S. P. DenBaars, and S. Nakamura, "Semipolar InGaN/GaN light-emitting diodes for high-efficiency solid-state lighting," J. Disp. Technol., vol. 9, no. 4, pp. 190–198, 2013.
- [5] Y.J. Hwang, C.H. Wu, C. Hahn, H.E. Jeong, and P. Yang, "Si/InGaN core /shell hierarchical nanowire arrays and their photoelectrochemical properties," Nano Lett., vol. 12, no. 3, pp. 1678–1682, 2012.
- [6] Y.V. Kuznetsova, V.N. Jmerik, D.V. Nechaev, A.M. Kuznetsov, and M.V. Zamoryanskaya, "Specific features of the cathodoluminescence spectra of AlInGaN QWs, caused by the influence of phase separation and internal electric fields," Semiconductors, vol. 50, no. 7, pp. 904–909, 2016.
- [7] P.Y.B. and T.B. and M.F.R. and F.C. and M.F. and R. Goldhahn, "Electroreflectance characterization of AlInGaN/GaN high-electron mobility heterostructures," Semicond. Sci. Technol., vol. 30, no. 8, p. 85014, 2015.
- [8] F. Wang, S.S. Li, J.B. Xia, H.X. Jiang, J.Y. Lin, J. Li, and S.H. Wei, "Effects of the wave function localization in AlInGaN quaternary alloys," Appl. Phys. Lett., vol. 91, no. 6, p. 061125, 2007.
- [9] N. H. A. Raof, S. S. Ng, H. A. Hassan, Z. Hassan, M. Rusop, and T. Soga, "The Study

- of Energy Band Gap of In_xAl_yGa_{1-x-y}N Quaternary Alloys using UV-VIS Spectroscopy,” in AIP Conference Proceedings, 2009, pp. 176–180.
- [10] G. Madsen, P. Blaha, K. Schwarz, E. Sjöstedt, and L. Nordström, “Efficient linearization of the augmented plane-wave method,” Phys. Rev. B, vol. 64, no. 19, p. 195134, Oct. 2001.
- [11] D.D. Koelling and G.O. Arbman, “Use of energy derivative of the radial solution in an augmented plane wave method: application to copper,” J. Phys. F Met. Phys., vol. 5, no. 11, pp. 2041–2054, Nov. 1975.
- [12] E. Hecht, “Optics, 4th,” Int. Ed. Addison-Wesley, San Fr., vol. 3, 2002.