بررسی خواص اپتیکی Sr_2NiWO_6 با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی

حمداله صالحی[۱]، راضیه میرسالاری[۲]، پیمان امیری[۳]

گروه فیزیک، دانشکدهٔ علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

چکیده – در این مقاله خواص اپتیکی ترکیب Sr_2NiWO_6 از جمله سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، ضریب شکست، ضریب خاموشی، تابع اتلاف انرژی و ضریب بازتاب در فاز ساختاری تتراگونال مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافتهٔ خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی با تقریب GGA و GGA+U و با استفاده از نرم‌افزار Wien2k صورت گرفته است.

کلید واژه- خواص اپتیکی، ضریب شکست، نظریهٔ تابعی چگالی.

Investigation of the Optical properties of Sr_2NiWO_6 using Density Functional Theory

Hamdallah Salehi[1], Raziyeh Mirsalari[2], Peiman Amiri[3]

Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University,of Ahvaz, Ahvaz, Iran.

Abstract- In this paper optical properties in tetragonal phase of Sr_2NiWO_6 such as real and imaginary part of dielectric function, refractive index, extinction index, electron energy loss Spectroscopy (EELS), reflectivity index. were studied by using full potential–linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method in the framework density functional theory (DFT) with the different approximations such as GGA and GGA+U by Wien2k Package.

Key words: Optical properties, refractive index, density functional theory

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-15]

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

۱- مقدمه

اکسیدهای پروسکیت با فرمول شیمیایی ABO_3 دارای ترکیبات متنوعی هستند، اگر مکان B توسط دو کاتیون مختلف B و 'B اشغال شود پروسکیت مضاعف با فرمول شیمیایی $A_2BB'O_6$ تشکیل می‌شود، ویژگی‌های پروسکیت‌های مضاعف عمدتاً توسط مکان B و 'B به‌دست می‌آید[۱]. Sr_2NiWO_6 عضوی از خانوادهٔ پروسکیت‌های مضاعف است که در دمای اتاق دارای ساختار بلوری تتراگونال است و گاف نواری این ترکیب ۳/۱ الکترون ولت می‌باشد. بسیاری از پروسکیت‌های مضاعف به دلیل ماهیت d^0 کاتیون‌های 'B عایق هستند. چنین ترکیباتی می‌توانند دی‌الکتریک‌های خوبی باشند و البته پروسکیت-های مضاعف دارای ثابت دی‌الکتریک بالا هستند. همچنین این ترکیبات در دی‌الکتریک‌های ماکروویو، سلول‌های خوشیدی، خازن‌ها و طراحی حافظه‌ها و .... کاربرد دارند.

۲- روش انجام محاسبات

در مطالعات نظری حاضر خواص اپتیکی با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی (DFT) [۲] و روش امواج تخت بهبود یافتهٔ خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) [۳] و با استفاده از کد محاسباتی Wien2k بررسی شده است[۴]. ثابت‌های شبکه را پس از بهینه‌سازی بر حسب آنگستروم مقادیر a=b=6.6237 و c=7.9182 در نظر گرفتیم. RKmax که میزان ماتریس همگرایی را مشخص می‌کند برابر با ۷ و تعداد نقاط فضای k برای انتگرال‌گیری در منطقهٔ اول بریلوئن ۵۰۰ نقطه در نظر گرفته شد. انرژی جدایی ۶- ریدبرگ را برای جداسازی حالت‌های ظرفیت از حالت‌های مغزه مبنا قرار دادیم. محاسبات را با دو تقریب GGA و GGA+U (اعمال پارامتر هابارد) انجام دادیم. میزان U اعمال شده در محاسبات ۶ الکترون ولت بوده است. سرانجام با تعیین مبنای همگرایی ۰/۰۰۰۱ برای انرژی به انجام محاسبات خودسازگار پرداخته شد. به دلیل اینکه Sr_2NiWO_6 در راستاهای مختلف نسبت به خواص اپتیکی رفتار همسانگرد از خود نشان می‌دهد فقط راستای x بررسی شده است.

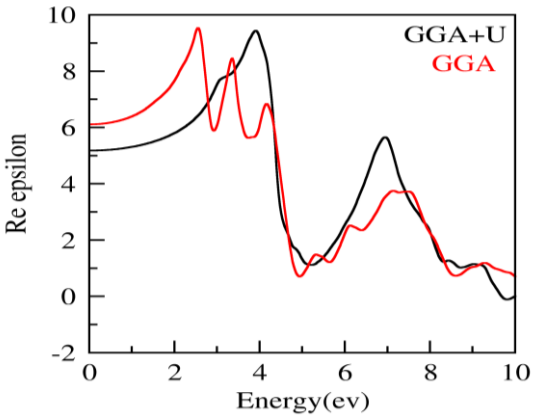
۳- نتایج

۳-۱- تابع دی‌الکتریک

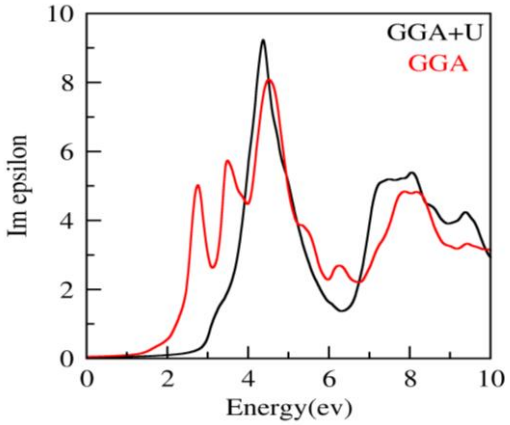
طیف اپتیکی منبع وسیعی از اطلاعات را برای مطالعهٔ ساختار نواری، خواص الکترونی، برانگیختگی‌ها و نوسانات شبکه در اختیار ما قرار می‌دهد. یکی از مهم‌ترین کمیت-های اپتیکی، تابع دی‌الکتریک مختلط است که توصیف‌گر خواص نوری یک ترکیب است و به صورت معادلهٔ زیر بیان می‌شود.

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \qquad (۱)$$

تابع دی‌الکتریک دارای دو سهم درون‌نواری و بین‌نواری است، از گذارهای بین‌نواری غیر مستقیم که سهم کوچکی در خواص نوری مواد دارند و در برگیرندهٔ پراکندگی فونونی می‌باشند صرف‌نظر می‌کنیم [۶،۵]. با داشتن تغییرات سهم موهومی، بر اساس تبدیلات کرامرزکرونیک [۷] می‌توانیم تغییرات سهم حقیقی را به‌دست آوریم. سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک برای Sr_2NiWO_6 با اعمال پارامتر هابارد و بدون پارامتر هابارد در شکل (۱) نشان داده شده است.



شکل۱ الف: سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک ترکیب Sr_2NiWO_6



شکل۱ب: سهم موهومی تابع دی‌الکتریک ترکیب Sr_2NiWO_6

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

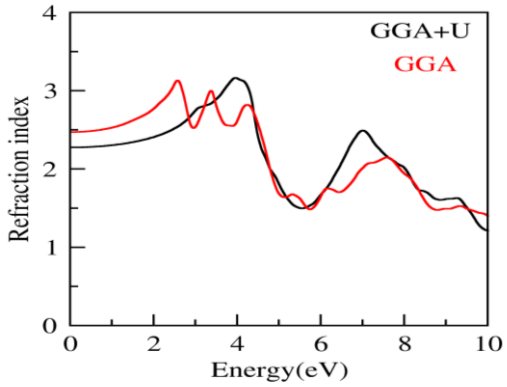
[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-15]

از سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک، مقدار دی‌الکتریک استاتیک که مقدار تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر است، به‌دست می‌آید. در شکل (۱الف) مشاهده می‌شود که ثابت دی‌الکتریک استاتیک با اعمال پارامتر هابارد (GGA+U)، ۵/۱ به‌دست آمده است. که این ثابت دی‌الکتریک استاتیک بدون اعمال پارامتر هابارد (GGA) ۶/۱ است. تابع دی‌الکتریک دارای دو سهم گذار بین نواری و درون نواری می‌باشد، همان‌طور که در شکل (۱ب) مشاهده می‌شود مقدار موهومی تابع دی‌الکتریک با اعمال پارامتر هابارد تا مقادیر ۲/۷ الکترون ولت به صورت آرام است این بدان معناست که در این ناحیه صرفاً گذارهای درون نواری رخ دهد. اما بعد از این انرژی این سهم ناگهانی زیاد می‌شود که بیانگر جذبی است که به دنبال آن گذارهای بین نواری اتفاق می‌افتد. از نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک می‌توان گاف اپتیکی ماده را تشخیص داد و با توجه به گاف تجربی ترکیب که ۳/۱ الکترون ولت است می‌توان گفت که سهم موهومی تابع دی‌الکتریک گاف اپتیکی خوبی را نشان می‌دهد. اما گاف اپتیکی بدون اعمال U ۱/۵ الکترون ولت می‌باشد. پس اعمال پارامتر هابارد باعث افزایش گاف اپتیکی می‌شود.

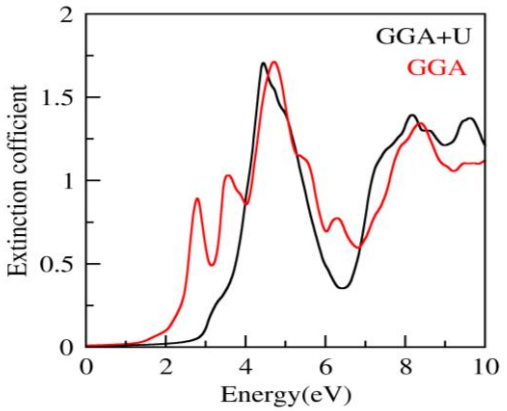
۲-۳- ضریب شکست و ضریب خاموشی

ضریب شکست پارامتر فیزیکی مهمی است که وابسته به اثر متقابل میکروسکوپیک اتمی می‌باشد، ضریب خاموشی برای یک ماده نیز سنجشی از میزان جذب پرتوی الکترومغناطیسی توسط آن ماده است. اگر ضریب خاموشی در یک بلور پایین باشد موج الکترومغناطیس به آسانی از آن عبور می‌کند. نمودار ضریب شکست و ضریب خاموشی در شکل (۲) نشان داده شده است.

با نگاه به نمودارهای ضریب شکست و ضریب خاموشی می‌توان به تشابه آن‌ها با نتایج حاصل از تابع دی‌الکتریک پی برد. مشاهده می‌شود که ضریب شکست رفتاری مشابه با بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک، و ضریب خاموشی رفتاری مشابه با بخش موهومی تابع دی‌الکتریک دارد. جذر سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر منجر به ضریب شکست می‌شود، با توجه به شکل (۱الف) در نمودار GGA+U محور عمودی در نقطهٔ ۵/۱ قطع شده است و ضریب شکست جذر این عدد را نشان می‌دهد. در تقریب GGA+U ضریب شکست در بازهٔ صفر تا ۴ الکترون ولت مقادیر بیشتری را به خود اختصاص می‌دهد در حالی که این امر در محدودهٔ ۴ تا ۶ الکترون ولت کاملاً برعکس عمل می‌کند. هرچه مقدار ضریب خاموشی کمتر باشد، عبور امواج الکترومغناطیسی از بلور آسان‌تر پیش‌بینی می‌شود. در شکل (۲ب) مشاهده می‌شود که با استفاده از تقریب GGA+U ضریب خاموشی کمتر محاسبه شده است.



شکل ۲ الف: ضریب شکست ترکیب Sr_2NiWO_6



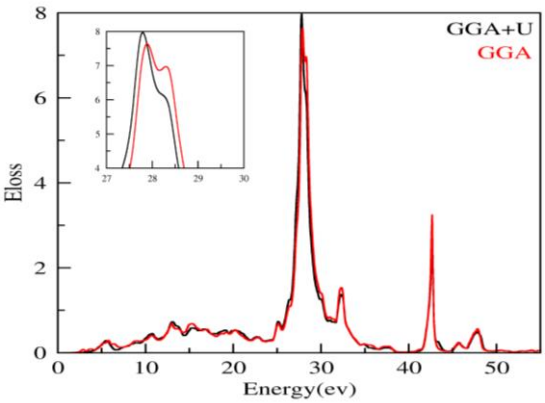
شکل۲ ب: ضریب خاموشی ترکیب Sr_2NiWO_6

۳-۳ تابع اتلاف انرژی

اسپکتروسکوپی اتلاف انرژی الکترون روش قدرتمندی در تجزیه و تحلیل حالتهای اشغال شده در بالای تراز فرمی یا تفکیک جزئی است. این طیف دربردارندهٔ تحریک دسته جمعی الکترون‌های ظرفیت (پلاسمون‌ها) به داخل حالات اشغال شده در نوار رسانش است.

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

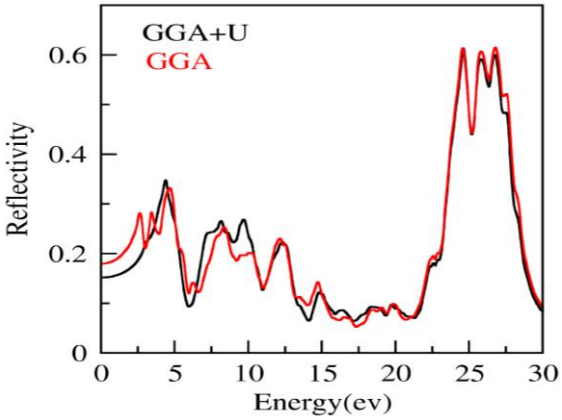
[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-15]



شکل۳: نمودار تابع اتلاف انرژی ترکیب Sr_2NiWO_6

اتلاف انرژی الکترون در این ساختار در هر دو تقریب تقریبا مشابه هم است. در تقریب GGA+U اتلاف انرژی الکترون در این ساختار از ۵ الکترون ولت شروع شده و در ۲۷٫۷۶ الکترون ولت به بیشترین مقدار خود رسیده است. همچنین در انرژی ۴۲٫۲۴ الکترون ولت نیز دارای اتلاف انرژی زیادی است. شاخص‌ترین قله در تابع اتلاف انرژی الکترون به عنوان قلهٔ پلاسمونی شناخته می‌شود که بیان-گر برانگیختگی جمعی چگالی بار الکترونی در بلور است. انرژی پلاسمون حجمی در این ترکیب با اعمال پارامتر هابارد، ۲۷٫۷۶ الکترون ولت است.

۴-۳ ضریب بازتاب



شکل۴: نمودار ضریب بازتاب ترکیب Sr_2NiWO_6

ضریب بازتاب مشخص کنندهٔ دامنه یا شدت موج بازتابیده نسبت به موج پیشامد است. ضریب بازتاب ترکیب Sr_2NiWO_6 در شکل (۴) نشان داده شده است. در تقریب GGA+U در انرژی ۲۶٫۷۶ ضریب بازتاب دارای بیشترین مقدار است.

نتیجه‌گیری

محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافتهٔ خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی با تقریب‌های GGA و GGA+U و با استفاده از نرم‌افزار Wien2k صورت گرفته است. ضریب دی-الکتریک استاتیک با اعمال پارامتر هابارد (GGA+U) ۵٫۱ به‌دست آمده است. که این مقدار بدون اعمال پارامتر هابارد (GGA) ۶٫۱ است. ضریب شکست در تقریب GGA+U در بازهٔ صفر تا ۴ الکترون ولت مقادیر بیشتری را به خود اختصاص می‌دهد در حالی که این امر در محدودهٔ ۴ تا ۶ الکترون ولت کاملاً برعکس عمل می‌کند. با استفاده از تقریب GGA+U ضریب خاموشی کمتر محاسبه شده است. اتلاف انرژی الکترون در این ساختار در هر دو تقریب تقریباً مشابه هم است. در تقریب GGA+U اتلاف انرژی الکترون در ۲۷٫۷۶ الکترون ولت به بیشترین مقدار خود رسیده است. اعمال پارامتر هابارد در بررسی خواص اپتیکی ترکیب نقش تأثیرگذاری را ایفا می‌کند.

مراجع

[1] T. Hashemifar, A. Mokhtari, V. Soleimanian," Electronic, Structural and Magnetic Properties of the Sr_2CoWO_6 Double Perovskite Using GGA(+U)" , Springer Science +Business Media, 2016.

[2] S. Cottenier, "Density Functional Theory and the Family of (L) APW-Method: a step-by-step Introduction", Instituutvoor Kern-en Stralingsfysica, KU Leuven, Belgium 2002.

[3] J. C. Slater, " Wave Function in periodic potential ", Phys. Rev. Vol. 57, pp.846, 1973.

[4] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz," WIEN2K, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties", Karlheinz Schwarz, Techn. Universit€at Wien, Vienna, Austria, 2013.

[5] J. S. Tell, Phys. Rev. 104 (1956) 1760.

[6] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, "Electrodynamic in Continuous Media, Pergamon ", press, Oxford, 1960.

[7] H. A. Kramers, Collected, "Science Papers", North Holland, Amsterdam,1956.

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-15]