



بیستمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران  
و ششمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران  
۸ تا ۱۰ بهمن ماه ۱۳۹۲ - دانشگاه صنعتی شیراز



## بررسی ویژگی های اپتیکی بتا کوارتز $\text{SiO}_2$ با استفاده از نظریه تابعی چگالی

ثمین بی رشک، هاله کنگرلو و آرش عبداللهی

دانشگاه آزاد اسلامی، واحد ارومیه، گروه فیزیک، ارومیه، ایران

چکیده - در این مقاله خواص اپتیکی بلور  $\text{SiO}_2$  مانند ثابت دی الکتریک، ضریب جذب، تابع اتلاف انرژی و ضریب بازتاب مطالعه شده است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده ی خطی با پتانسیل کامل ( $FP-LAPW$ ) در چهار چوب نظریه ی تابع چگالی و با استفاده از نرم افزار  $WIEN\ 2K$  صورت گرفته است. خواص اپتیکی با تقریب ( $LSDA$ ) و تقریب گرادیان تعمیم یافته ( $GGA$ ) با تابعی  $WC$  محاسبه شده است. نتایج نشان می دهد که ویژگی های اپتیکی در جهت محورهای  $X$  و  $Z$  متفاوت بوده و حول این محور ها ناهمسانگرد می باشند.

کلید واژه: نظریه تابعی چگالی، ویژگی های اپتیکی،  $LSDA$ ،  $\text{SiO}_2$ ،  $WC$ ،  $Wien2k$

## Investigation of the Optical Properties of $\text{SiO}_2$ Using DFT

samin birashk, Haleh Kangarlou, Arash Abdollahi

Islamic Azad University, Urmia Branch, Department of Physics, Urmia, Iran

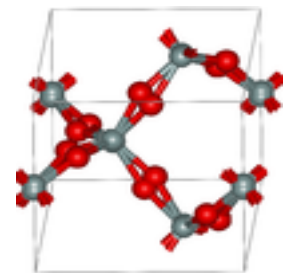
Abstract-In this paper optical properties such as dielectric function, absorption coefficient, energy loss function and reflectivity coefficient of  $\text{SiO}_2$  crystal have been studied. The calculation have been performed using the Full-Potential-Linearised Argumented Plane Waves ( $FP-LAPW$ ) method within the framework density functional theory (DFT) by  $WIEN2K$  package.

Optical properties is calculated by ( $LSDA$ ) approximations and ( $GGA$ ) approximation with  $WC$  functional. The results revealed that optical properties are anisotropic along  $x$  and  $z$  directions.

Keywords: Optical Properties,  $\text{SiO}_2$ , DFT,  $LSDA$ ,  $WIEN2k$

## ۱- مقدمه

کوارتز، ترکیبی شیمیایی ساخته شده از یک قسمت سیلیسیم و دو قسمت اکسیژن ( $\text{SiO}_2$ ) است [۱] که به صورت خالص و یا به صورت ترکیب در کانی های سیلیکاته حدوداً ۶۰ درصد پوسته جامد زمین را تشکیل می دهد [۲]. دانه های بلوری سیلیس از لحاظ مولکولی متبلور با شبکه های بدون اتصال الکترونی است. کوارتز قادر است اشعه مفلوق بنفش را از خود عبور دهد این کانی دارای خاصیت پیزوالکتریک است و در اثر اعمال فشار مکانیکی تولید بار الکتریکی می کند. بتا کوارتز از دماهای ۵۷۳ درجه سانتی گراد تا ۸۷۰ درجه سانتی گراد مقاوم است این نوع کوارتز به شکل گپ بلورهای در پورفیرهای کوارتز، گرانیات گرافیتی دیده می شود [۳]. کوارتز دما بالا در سیستم هگزاگونال رده ۶۲۲ به صورت بلورهای منشوری متبلور می شود [۴]. در شکل ۱ سلول قرار دادی بتا کوارتز  $\text{SiO}_2$  نشان داده شده است.



شکل ۱: سلول قرار دادی  $\text{SiO}_2$

## ۲- روش محاسبات

بلور بتا کوارتز سیلیکا دارای گروه فضایی  $P6_2 22$  و  $\alpha=\beta=90^\circ$  و  $\gamma=120^\circ$  در فاز هگزاگونال است. محاسبات با استفاده از نرم افزار WIEN2K صورت گرفته که توسط بالاها و کورکز توسعه یافته است [۵]. در این نرم افزار از موج تحت تقویت شده خطی (LAPW) [۶] در چهار چوب نظریه تابع چگالی (DFT) [۷] استفاده شده است. در این محاسبات از تقریب LSDA و تقریب GGA [8] با سه تابعی PBE و PBEsol و WC [۹، ۱۰، ۱۱] استفاده شده است. تابعی WC تابعی جدیدی بر پایه تابعی PBE است که در آن قسمت تابعی تبدالی در مقایسه با تابعی PBE چنان تغییر کرده است که تا چهارمین مرتبه بسط گرادیان انرژی تبدالی در نظر گرفته شده است. شعاع کره موافین تین برای اتم های تشکیل دهنده ی این ترکیب به ترتیب برای سیلیکون و اکسیژن  $1/8 \text{ au}$  و  $1/4 \text{ au}$  قرار داده شده است. برای جداسازی حالت های ظرفیت از حالت های مغزه انرژی ۶- ریذبرگ را برگزیدیم و بازه ی همگرایی انرژی را از مرتبه  $0.0001$  انتخاب کرده ایم.

برای رسیدن به این همگرایی  $Rk_{max}$  برابر ۷ انتخاب شده است. برای محاسبات تعداد نقاط در نظر گرفته شده در منطقه اول بریلوین ۱۲ نقطه بود که به ازاء آن یک شبکه  $4 \times 4 \times 4$  ایجاد شده است.

## ۲-۱- نتیجه محاسبات

برای کمینه سازی بتا کوارتز تعدادی ساختار با پارامترهای شبکه  $a$  و  $c$  حول نقطه ی کمینه تجربی به فاصله ی  $0.2/0$  آنگستروم تغییر داده شد به شکلی که برای هر یک از مقادیر ثابت  $a$ ، مقدار ثابت  $c$  تغییر کند و این عمل با ثابت های دیگر  $a$  مرتباً تکرار شد و در میان این نتایج کمترین مقدر انرژی به عنوان کمینه انرژی و ساختار معلل با آن به عنوان ساختار بهینه بدست آمد. که بهینه سازی صورت گرفته بر روی ثابت شبکه بلور بتا کوارتز سیلیکا با توجه به تابعی های به کار رفته در جدول شماره ۱ آمده است.

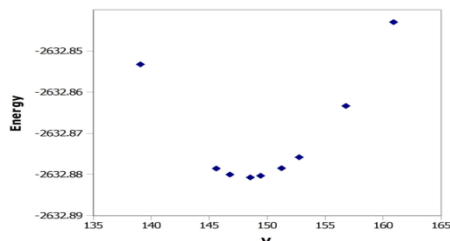
جدول ۱: بهینه سازی ثابت شبکه با استفاده از تابعی های مختلف

تابعی	ثابت شبکه $a=b$	ثابت شبکه $c$
تابعی (PBE)	۵/۱۵۳	۵/۶۲۱
تابعی (LSDA)	۵/۱۴۳	۵/۶۱۶
تابعی (WC)	۵/۱۳۶	۵/۶۰۸
به روش تجربی	۵/۰۱	۵/۴۷

[۱۲]

همان طور که از جدول ۱ مشهود است بهترین هماهنگی بین نتیجه تجربی و نتوری مربوط به تابعی WC می باشد.

در شکل ۱ نتیجه بهینه سازی انرژی نسبت به حجم



شکل ۱: بهینه سازی انرژی نسبت به حجم

## ۲-۲- تابع اتلاف انرژی الکترون

اسپکتروسکوپی اتلاف انرژی الکترون روش قدرتمندی در تجزیه و تحلیل حالات اشغال شده بالای تراز فرمی یا تفکیک جزئی است. این طیف در بردارنده تحریک دسته جمعی الکترون های ظرفیت (پلاسمون ها) به داخل حالات اشغال شده در نوار رسانش است. شاخص ترین قله در تابع اتلاف انرژی الکترون به عنوان پیک پلاسمونی شناخته می شود که بیانگر برانگیختگی جمعی چگالی بار الکترونی در بلور است. بیشترین اتلاف انرژی بلور در راستای  $X$  (راستای بردار  $a$ )،  $5/70$  الکترون ولت و در راستای  $Z$  (راستای بردار  $c$ )،  $6$  الکترون ولت می باشد. نمودار اتلاف انرژی  $\text{SiO}_2$  در شکل زیر نشان داده شده است.

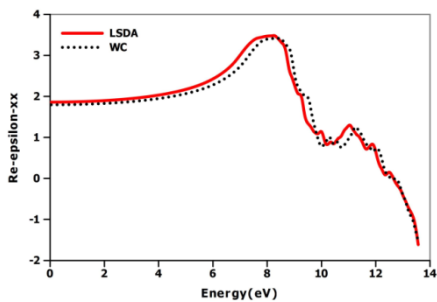
## ۲-۴- تابع دی الکتریک

برای مشاهده پاسخ مواد به امواج الکترومغناطیسی (نور)، تابع دی الکتریک ماده را بررسی می کنند. تابع دی الکتریک دارای دو سهم درون نوری و بین نوری است که سهم درون نوری برای فلزات به کار می رود. تابع دی الکتریک یک تابع مختلط است که به صورت

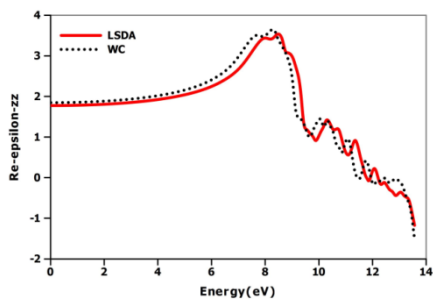
$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (2)$$

نشان داده می شود. با داشتن تغییرات  $\varepsilon_2(\omega)$ ، براساس تبدیلات کرلمرز-کرونیک می توانیم تغییرات  $\varepsilon_1(\omega)$  را بدست آوریم. ریشه های  $\varepsilon_1(\omega)$  مفهوم فیزیکی دارند و در واقع شرط لازم برای پلاسمون های حجمی در ماده هستند ولی شرط کافی برای آنها، وجود اتلاف انرژی است. همچنین در ناحیه ای که  $\varepsilon_1(\omega)$  منفی است، امواج منتشر نمی شوند و فرآیندهای جذب و اتلاف صورت می گیرد.

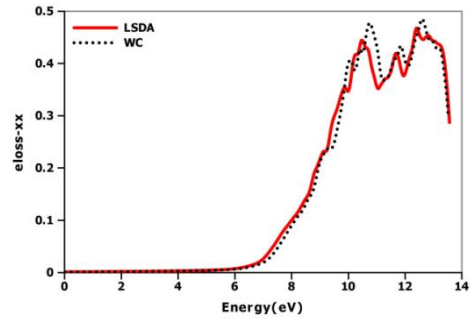
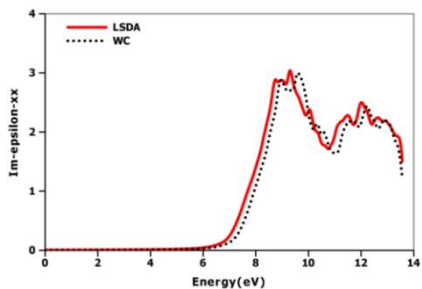
بخش حقیقی تابع دی الکتریک بتا کوارتز  $\text{SiO}_2$  در راستای X و Z یعنی راستاهای بردارهای a و c ساختار شش گوشه، برای تابعی های LSDA و WC در شکل های ۵ و ۶ آمده است و بخش موهومی این تابع در شکل های ۷ و ۸ نشان داده شده است.



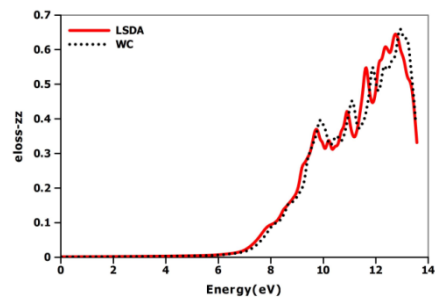
شکل ۵: قسمت حقیقی تابع دی الکتریک بتا کوارتز در راستای X



شکل ۶: قسمت حقیقی تابع دی الکتریک بتا کوارتز در راستای Z



شکل ۸: تابع اتلاف انرژی بتا کوارتز در راستای X



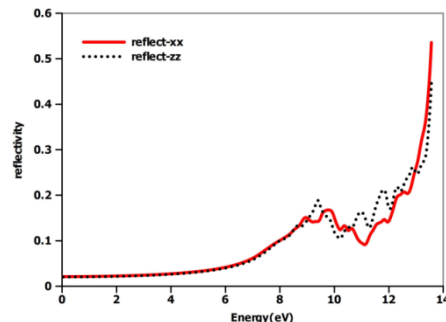
شکل ۹: تابع اتلاف انرژی بتا کوارتز در راستای Z

بر اساس مدل الکترون آزاد، انرژی پلاسمون از رابطه ی (۱)

بدست می آید که در آن چگالی الکترون های آزاد در حجم یاخته،  $m_0$  جرم الکترون و  $e$  واحد بار الکتریکی است.

## ۲-۳- ضریب بازتاب

ضریب بازتاب یا ضریب انعکاس در شرایطی مطرح می شود که موجی در حال انتشار در یک محیط ناپیوسته باشد. ضریب بازتاب مشخص کننده ی دامنه یا شدت موج بازتابیده نسبت به موج پیشامد است. ضریب بازتاب رابطه نزدیکی با ضریب انتقال دارد. همانطور که مشاهده می شود برای انرژی های بیشتر از گاف، طیف بازتاب مربوط به این ترکیب دارای پایداری است.



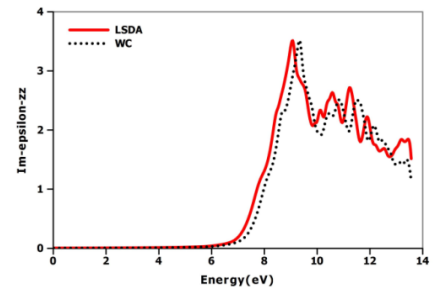
شکل ۱۰: ضریب بازتاب بتا کوارتز در راستای X و Z

دیده می شود نتایج نشان می دهد که ساختار بتا کوارتز بسته به اینکه امواج فرودی در راستای بردارهای  $a$  و  $c$  باشند خواص اپتیکی متفاوتی از خود نشان می دهند و این موضوع در مورد ساختارهای غیر مکعبی از اهمیت بالایی برخوردار است.

## مراجع

- [۱] Papier Eugene, "Absorption on Silica Surfaces", Marcek Dekker, New York, 2000
- [۲] P.J. Grunthner, M. H. Hecht, F.J. Grunthner and N.M.Johnson; "The localization and crystallographic dependence of Si suboxide species at the  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  interface"; J. Appl.Phys. 61, 629 (1987)
- [۳] R.L. Bates and J.A. Jackson; "GLOSSARY OF GEOLOGY"; Second Edition, American Geology Institute (1980)
- [۴] "Crystal Data Determinative Tables"; ACA Monograph No. 5, American Crystallographic Association, 1963
- [۵] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz; "WIEN2k, An augmented plane wave plus local orbitals program For calculating crystal properties"; Vienna University of Technology, Austria, 2001.
- [۶] D. J. Singh, "Plane Waves, Pseudopotential and the LAPW Method"; Kluwer Academic Publisher, Boston, Dortrecht, London, (1994).
- [۷] P. Hohenberg, W. Kohn; "Inhomogeneous Electron Gas"; Physical Review Letters, 136, B864-B871 (1964)
- [۸] Hammer B, Hansen LB, Norskov JK; "Improved Adsorption Energetics within Density, Functional Theory Using Revised Perdew-Burke-Emzerhof Functionals"; Physical Review B Condensed Matter. 59(11): 7413-7421.
- [۹] John P. Perdew, Kieron Burke, Matthias Emzerhof; "Generalized Gradient Approximation Made Simple"; Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1987)
- [۱۰] J.P. Perdew, A. Ruzsinszky, G.I. Csonka, L.A. Constantin, X. Zhou, O.A. Vydrov, G.E. Scuseria, and K. Burke; "Restoring the Gradient Expansion for Exchange in Solids and Surfaces"; Physical Review Letters 100, 136406 (2008); ibid. 102, 039902 (2009)
- [۱۱] Y. Zhao and D. G. Truhlar; ibid. 78, 197101 (2008)
- [۱۲] D. Allan and M. Teter, "Nonlocal pseudopotentials in molecular-dynamical density-functional theory: application to  $\text{SiO}_2$ ."; Physical Review Letters, vol. 59, p. 1136, 1987.

شکل ۷: قسمت موهومی تابع دی الکتریک بتا کوارتز در راستای X



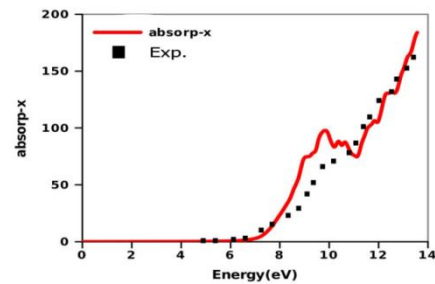
شکل ۸: قسمت موهومی تابع دی الکتریک بتا کوارتز در راستای Z

از مقایسه دو تابعی LSDA و WC در شکل ها تفاوت اندکی بین نتایج دو تابعی مشاهده می شود چنانکه با افزایش فرکانس، مقادیر، اندکی نسبت به هم جابه جایی شوند.

## ۲-۵- ضریب جذب

ضریب جذب یکی از عواملی است که نشان دهنده ی میزان کاهش و اتلاف شدت صوت در هنگام عبور از یک محیط می باشد و با استفاده از اطلاعات آن می توان ضریب شکست آن را محاسبه نمود.

طبق محاسبات انجام شده بر روی بتا کوارتز با دو تابعی LSDA و WC برای ضریب جذب و مقایسه نمودار آن با نموداری که به روش تجربی بدست آمده است متوجه تطابق نزدیک نمودار حاصل از محاسبات توسط تابعی WC با نمودارهای تجربی می شویم که خود تأییدی بر نتیجه تعلق نزدیک ثابت شبکه برآمده از تابعی WC با نتایج تجربی می باشد شکل ۹ ترکیب نتایج تئوری و تجربی را برای ضریب جذب نشان می دهد.



شکل ۹: مقایسه نتایج تجربی و محاسباتی ضریب جذب در راستای محور X

## ۳- نتیجه گیری

با توجه به کاربرد بتا کوارتز در صنعت فیبرهای نوری و سنسورهای نوری، در این تحقیق خواص اپتیکی بتا کوارتز به وسیله نرم افزار Wein2k با تابعی های LSDA و WC بررسی و با مقادیر تجربی در دسترس مقایسه شده است. داده های بدست آمده توافق خوبی با مقادیر تجربی دارند طبق مقایسه ی نمودارهای تابع دی الکتریک در راستای X و Z برای دو قسمت حقیقی و موهومی به این نتیجه رسیدیم که محاسبات برای دو تابعی LSDA و WC تفاوت اندکی دارد چنانکه با افزایش فرکانس، مقادیر، اندکی نسبت به هم جابه جایی شوند در مورد ضریب جذب نیز سازگاری خوبی بین تجربه و محاسبات