بیستمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و ششمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۸ تا ۱۰ بهمن ماه۱۳۹۲ - دانشگاه صنعتی شیراز

بررسی خواص اپتیکی نیترید تیتانیوم (TiN) براساس نظریه تابعی چگالی و با استفاده از تقریب های LDA و GGA

نوشین بااختیار سلمانی پاک و هاله کنگرلو

گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد ارومیه، ارومیه

چکیده - با توجه به خواص اپتیکی جالب توجه وکاربردهای فراوان نیترید تیتانیوم *(TiN)* در صنعت در این مقاله خواص اپتیکی ساختار نیترید تیتانیوم مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده ی خطی (*LAPW*) بر اساس نظریه تابعی چگالی (*DFT*) و کد محاسباتی *WIEN2k* انجام شده است. برای بدست آوردن خواص اپتیکی این ترکیب از جمله، قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضریب شکست و ضریب خاموشی، تابع اتلاف انرژی و رسانندگی اپتیکی از تقریب چگالی موضعی(*LDA*) و تقریب گرادیان تعمیم یافته *(GGA)* و تابعی های *LDA*, *GGA-PBE* و *GGA-PBEsol* بهره گرفته شده و در نهایت نتایج با هم مقایسه شده اند. نتایج بدست آمده برای ثابت شبکه سازگاری خوبی با نتایج تجربی دارد.

کلید واژه- تابعی چگالی، نیترید تیتانیوم، ***GGA*، *LSDA*، *WIEN2k***

Study of Optical Properties of Titanium Nitride (TiN) Based on DFT Calculation and using by LDA and GGA approximation

Nooshin Baekhtyar salmani pak and Haleh Kangarlou

Department of physics, Islamic Azad University of Urmia, Urmia

Abstract- According to Interesting optical properties and many uses of Titanium Nitride (TiN) in the industry in this paper, the optical properties of TiN have been investigated. These investigations are done by using the linearized augmented plane wave method (LAPW) within density functional theory (DFT) with WIEN2k package.To obtain the optical properties of this composition such as real and imaginary part of dielectric function, refractive index and the extinction coefficient, energy loss function and optical conductivity have been used local spin density approximation (LDA) and generalized gradient approximation (GGA) and LDA, GGA-PBE and GGA-PBEsol functional, and finally the results have been compared. Obtained results for lattice parameters are in good agreement with experimental results.

Keywords: DFT, GGA, LAPW, LSDA, WIEN2k

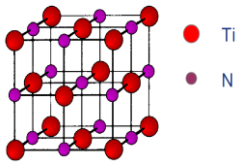
[Downloaded from opsi.ir on 2026-01-30]

۱- مقدمه

نیترید تیتانیوم به عنوان یک ماده با خواص مکانیکی بسیار عالی (سختی زیاد و مقاومت بسیار خوب در برابر خوردگی)، مقاومت الکتریکی بسیار پایین، پایداری شیمیایی و حرارتی بالا، خواص اپتیکی جالب توجه (تنوع رنگ از طلایی تا قهوه ای تیره) شناخته شده است[۳-۱]. این ماده به دلیل دارا بودن ویژگی های خاص، کاربردهای وسیعی در صنعت دارد که از آن جمله میتوان به افزایش طول عمر مفید قطعات و ابزار، ایجاد مقاومت در برابر خوردگی، استفاده در صنعت نیمه هادی ها به عنوان سد رسانایی بین یک فلز رسانا و سیلیکون، پوشش های حفاظتی و تزیینی و ساخت جواهرات، همچنین به دلیل غیر سمی بودن و سازگاری خوب با بدن انسان در ساخت پروتزهای پزشکی و دندانپزشکی اشاره کرد[۵-۴].

۲- روش محاسبات

در محاسبات نظری حاضر، خواص اپتیکی بلور نیترید تیتانیوم (TiN) با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل(FP-LAPW) درچارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) [۶] توسط کد محاسباتی WIEN2k [۷] انجام شده است. در این محاسبات از تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) با تابعی های GGA-PBE و GGA-PBEsol و تقریب چگالی موضعی (LDA) با تابعی LDA بهره گرفته شده است. محاسبات با اعمال پارامترهای یکسان انجام گردیده است. شعاع کره های مافین تین با توجه به طول پیوند آنها و بیشینه بار درون کرات برای تیتانیوم و نیتروژن به ترتیب۲/۱۵۰۰ و ۱/۸۵۰۰ (در واحد اتمی) انتخاب شده اند. پارامتر هم گرایی RK_{max} (R کوچکترین شعاع مافین-تین و K_{max} بردار موج قطع است) برابر۷ در نظر گرفته شده است. برای جدا سازی حالت های ظرفیت از حالات مغزه انرژی جدایی ۶-ریدبرگ را مبنا قرار دادیم. در اجرای برنامه بازه هم گرایی انرژی را در حدود ۰/۰۰۰۱ Ry قرار دادیم و به هم گرایی رسیدیم. برای محاسبات تعداد نقاط در نظرگرفته شده در منطقه اول بریلیون ۲۵۶ نقطه بود که بازای آن یک شبکه ۲۰×۲۰×۲۰ ایجاد شده است. نیترید تیتانیوم دارای ساختار NaCl گونه است محاسبات برای این بلور در فاز مکعبی Fcc و گروه فضایی(Fm-3m) و$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ انجام شده است. شکل ۱ نمایی از این ساختار را در فضای حقیقی نشان میدهد



شکل۱ : ساختار بلوری نیترید تیتانوم

۳- بحث و نتایج

با محاسبه و رسم منحنی انرژی بر حسب حجم، پارامترهای بهینه شده شبکه برای این ترکیب به دست آمده است.

جدول ۱: نتایج بهینه سازی ثابت شبکه با مقایسه تقریب های اعمال شده در این تحقیق، نتایج دیگران و نتایج تجربی

ثابت شبکه (A°)		
نتایج بدست آمده در این تحقیق	GGA-PBE	۴/۲۶۴
	GGA-PBEsol	۴/۲۲
	LDA	۴/۱۹
نتایج نظری سایر محققین [۸]	۴/۲۴۷	
	۴/۱۷۱	
نتایج تجربی	۴/۲۶ [۹]	
	۴/۲۴ [۱۰]	

با توجه به جدول فوق بهترین سازگاری با نتایج تجربی [۱۰-۹] مقدار مربوط به تابعی PBE می باشد.

۱-۲ تابع دی الکتریک

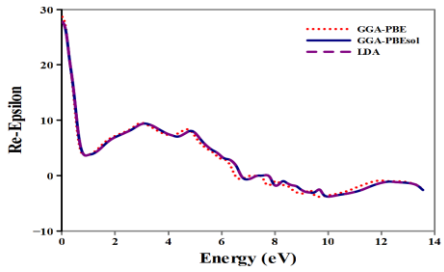
تابع دی الکتریک برای توصیف پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی به کار برده می شود. در یک حد؛ $\varepsilon(\omega,0)$ پلاسمون های حجمی و سطحی را توصیف می کند. در حد دیگر $\varepsilon(0,k)$ و استتار الکترواستاتیکی برهمکنش های الکترون–الکترون، الکترون–شبکه، و الکترون – ناخالصی در بلورها را توصیف می کند. تابع دی الکتریک از دو قسمت حقیقی و موهومی تشکیل یافته است و دارای دوسهم درون نواری و بین نواری است که سهم درون نواری برای فلزات بکار می رود. تابع دی الکتریک یک تابع مختلط است که به صورت زیر نشان داده می شود:

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

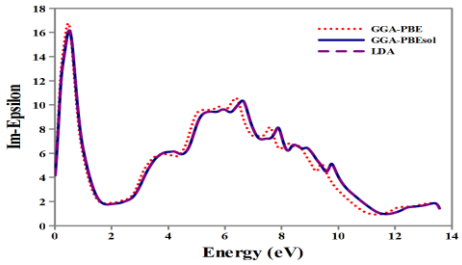
قسمت حقیقی این تابع بیانگر بخش پراکندگی و اتلاف

[Downloaded from opsi.ir on 2026-01-30]

در جسم و نیز اثر آن روی تابع دی الکتریک است. بخش های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک برای TiN درشکل۲ نشان داده شده است.



شکل۲ (الف) : قسمت حقیقی تابع دی الکتریک TiN



شکل ۲ (ب) : قسمت موهومی تابع دی الکتریک TiN

همانطور که در شکل ۲(الف) و ۲(ب) مشاهده می شود نتایج مقادیر با هر سه تابعی در یک راستا می باشند نتایج تابعی های PBEsol و LDA کاملا بر هم منطبق و با افزایش فرکانس در راستای انرژی جابجایی اندکی با تابعی PBE دارد.

۲-۲- ضریب شکست و ضریب خاموشی

ضریب شکست نیز به مانند تابع دی الکتریک یک تابع مختلط بوده و از رابطه زیر محاسبه می شود:

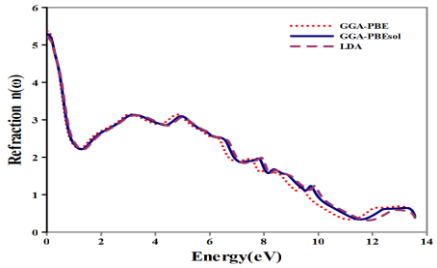
$$n(\omega) = (\omega) + ik(\omega) \qquad (2)$$

که در آن n(ω) قسمت حقیقی ضریب شکست و k(ω) قسمت موهومی ضریب شکست یا ضریب خاموشی است. ضریب خاموشی برای یک ماده، سنجشی از میزان جذب پرتوی الکترومغناطیسی توسط آن ماده است. اگر موج الکترومغناطیسی از داخل آن به آسانی عبور کند ماده ضریب خاموشی پایینی دارد و برعکس اگر پرتویی به سختی داخل ماده نفوذ کند ماده دارای ضریب خاموشی بالاست. قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک از روابط زیر بدست آیند:

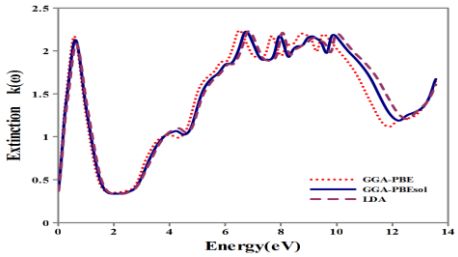
$$n_{ij}(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon_{ij}(\omega)| + \mathrm{Re}\,\varepsilon_{ij}(\omega)}{2}} \qquad (۳)$$

$$k_{ij}(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon_{ij}(\omega)| - \mathrm{Re}\,\varepsilon_{ij}(\omega)}{2}} \qquad (۴)$$

ضریب شکست این ماده با توجه به شکل۳ (الف) برابر ۵/۲ بدست آمد. با توجه به شکل ۳ (ب) مشاهده می شود در فرکانس صفر ضریب خاموشی تقریبا برابر صفر است.



شکل ۳ (الف): قسمت حقیقی تابع ضریب شکست TiN



شکل ۳ (ب): قسمت موهومی تابع ضریب شکست TiN

۲-۳- تابع اتلاف انرژی

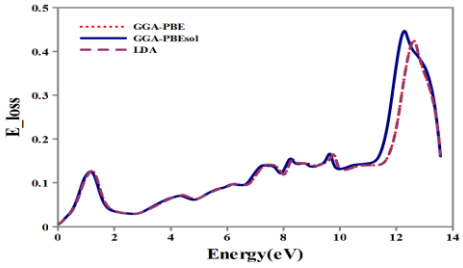
به منظور بررسی بیشتر خواص اپتیکی این ترکیب تابع اتلاف انرژی (EELS) که یکی از مهمترین کمیت ها به منظور بررسی خواص ماکروسکوپی و میکروسکوپی جامدات می باشد محاسبه و در شکل ۴ نشان داده شده است. تابع اتلاف انرژی متناسب با احتمال اتلاف انرژی E در واحد طول، برای یک الکترون در حال عبور از محیط است. رابطه بین تابع دی الکتریک و تابع اتلاف انرژی به صورت زیر است:

$$L_{ij}(\omega) = -\mathrm{Im}\left(\frac{1}{\varepsilon_{ij}(\omega)}\right) \qquad (۵)$$

شاخص ترین پیک در EELS، به عنوان پیک پلاسمونی شناخته می شود که بیانگر برانگیختگی های جمعی چگالی بار الکترونی در بلور است. همانگونه که از شکل

[Downloaded from opsi.ir on 2026-01-30]

پیداست اولین قله در ۱ الکترون ولت دیده می شود و انرژی ماکزیمم اصلی برابر ۱۲/۵ الکترون ولت است. که متناظر با پلاسمون حجمی است، زیرا در این نقطه $\varepsilon_1=0$.



شکل ۵: تابع اتلاف انرژی TiN

۲-۴- رسانندگی اپتیکی

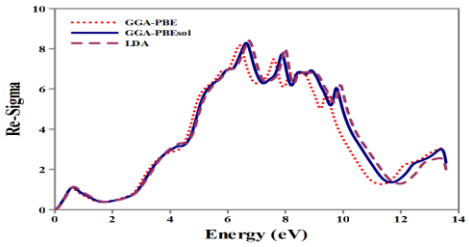
رابطه رسانندگی اپتیکی درون نواری، $\sigma(\omega)$ با بخش موهومی تابع دی الکتریک به صورت زیر است:

$$\sigma(\omega)=(\frac{\omega}{4\pi})\varepsilon_2(\omega) \qquad (۷)$$

تابع رسانندگی یک تابع مختلط است و از رابطه زیر محاسبه می شود:

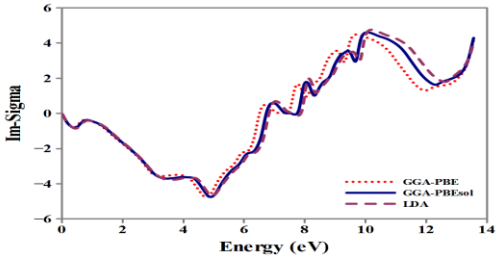
$$\sigma(\omega)=\sigma_1(\omega)+i\,\sigma_2(\omega) \qquad (۸)$$

که در آن $\sigma_1(\omega)$ بخش حقیقی رسانندگی و $\sigma_2(\omega)$ بخش موهومی رسانندگی است. قسمت حقیقی رسانندگی اپتیکی بر حسب انرژی برای ترکیب TiN درشکل ۶ (الف) نشان داده شده است.



شکل ۶ (الف): قسمت حقیقی تابع رسانندگی TiN

با توجه به شکل ۶ (الف) رسانندگی اپتیکی در انرژی حدود ۶/۵ الکترون ولت به مقدار بیشینه خود میرسد که این قله به سبب گذار الکترون ها از حالت های اشغال شده زیر تراز فرمی به اولین قله حالت های اشغال نشده در نوار رسانش می باشد. قسمت موهومی رسانندگی اپتیکی برای TiN درشکل ۶ (ب) نشان داده شده است.



شکل ۶ (ب): قسمت موهومی تابع رسانندگی TiN

با توجه به شکل های تابع رساندگی

۳- نتیجه‌گیری

در این مقاله خواص اپتیکی نیترید تیتانیوم با استفاده از روش LAPW در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از تقریب گرادیان تعمیم یافته و تقریب چگالی موضعی و اعمال تابعی های GGA-PBE و GGA-PBEsol , LDA مورد بررسی قرار گرفت. با مقایسه نتایج مشاهده می شود که خواص اپتیکی با اعمال هر سه تابعی برای ترکیب TiN در یک راستا میباشد. مقادیر در فرکانس های پایین بر هم منطبق و در فرکانس های بالاتر مقادیر قله ها نسبت به هم اندکی جابجایی دارد که این جابجایی متناسب با مقدار فرکانس است. در نهایت با توجه به محاسبات انجام شده در خصوص ثابت شبکه، داده های بدست آمده از هر سه تابعی همخوانی خوبی با نتایج تجربی دارد و بهترین سازگاری با نتایج تجربی مقدار مربوط به تابعی GGA-PBE می باشد.

مراجع

[1] Allmaier H., Chioncel L. and Arrigoni E., *Titanum Nitride – acorrelated metal at the threshold of a Mott transition*, **cond-mat.str-el**, 2, 2009.
[2]Yeh T.S., Wu J. M. and Hu L. J., *The ptoperties of TiN thin films deposited by pulsed direct current magnetron sputtering*, **Thin Solid Films Journal**,Vo. 516, No.21 (2008).
[3] Saoul N., Henda K., Kesri R., *Influence of Nitrogen Content on the Structural and Mechanical Properties of TiN Thin Film*, **Plasma Fusion Re, Journal**, 8, (2009).
[4] Al Jabbari Y.S., Fehrman J., Barnes A. C., Zapf A. M., Zinelis S. and Berzins D. W., *Titanium Nitride and Nitrogen Ion Implanted Coated Dental Materials*, **Coatings 2079**, (2012) 160-178
[5] Chen H. C., Tseng B. H., Houng N. P. and Wang Y. H., *Titanium nitride diffusion barrier for copper metallization On gallium arsenide*, **thin solid films Journal**, 445 (2003) 112-11.
[6] Gross E. K. U. and Kohn W., Local *Density-Functional Theory of Frequency-Dependent Linear Response*, **Phys. Rev. Lett journal**, 2008.
[7]Blaha, P., Schwarz K., Madsen G., Kavanicka D. and Luita J., *WIEN2k, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*, **Techn. Universitat Wien**, ISBN 3-9501031-1-2, (2008).
[8] Hao P., Fang Y., Sun J., Csonka G. I., Philipsen P. H.T., and Perdew J. P., *Lattice constants from semilocal density functionals with zero-point phonon correction*, **Phys. Rev.** B 85, 2012.
[9] Stampfl C., Mannstadt W., Asahi R., and Freeman A. J., *Electronic structure and physical properties of early transition metal mononitrides: Density-functional theory LDA, GGA, and screened-exchange LDA FPLAPW calculation*, **Physical Review** B 63, issue 15, 155106-155106-11, (2001)
[10] Nagakura S., Kusunoki T., Kakimoto F. and Hirotsu Y., *Lattice parameter of the non-stoichiometric compound TiN_x*, **Applied Crystallography journal**, 8 (1975) 65-66.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-01-30]