بیست و یکمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و هفتمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۲۳ تا ۲۵ دی ماه ۱۳۹۳، دانشگاه شهید بهشتی

اثر فشار بر خواص اپتیکی ترکیب $Ca_5Al_2Sb_6$

حسین اصغر رهنمای علی آباد[۱]، الهام نظری[۱]، رضا کیانی[۲] ،محمد رضا بنام[۲]، مریم ملایجردی[۱]

[۱]گروه فیزیک دانشگاه حکیم سبزواری

[۲]گروه فیزیک دانشگاه پیام نور مشهد

چکیده – خواص اپتیکی ترکیب $Ca_5Al_2Sb_6$ با ساختار اورترومبیک در گروه فضایی *Pbam* مورد مطالعه قرار گرفت. محاسبات به روش امواج تخت تقویت شده خطی در چارچوب نظریه تابعی چگالی با تقریب شیب تعمیم یافته انجام شده است .نتایج بدست آمده نشان می دهند که این ترکیب خواص چند ضریب شکستی دارد و با افزایش فشار ثابت دی الکتریک و ضریب شکست استاتیک افزایش می یابند.

کلید واژه- خواص اپتوالکترونیک، $Ca_5Al_2Sb_6$، فشار، ثابت دی الکتریک، ضریب شکست

The effect of pressure on optical properties of $Ca_5Al_2Sb_6$ compound

Hossein Asghar Rahnamaye Aliabad[۱], Elham Nazari[۱], Reza Kiani[۲], Mohammad Reza Benam[۲] and Maryam Malaijerdi[۱]

[۱]Department of physics, Hakim Sabzevari University

[۲]Department of physics, Payame Noor University of Mashhad

Abstract- We have studied optical properties of $Ca_5Al_2Sb_6$ compound with orthorhombic structure at Pbam space group. The calculations were performed in the frame of density functional theory (DFT), using the full potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method with the generalized gradient approximation (GGA). Obtained results show that this compound has birefringence properties and with increasing of pressure the static dielectric constant and refractive index increase.

Keywords: optoelectronic properties, $Ca_5Al_2Sb_6$, pressure, dielectric constant, refractive index

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-04]

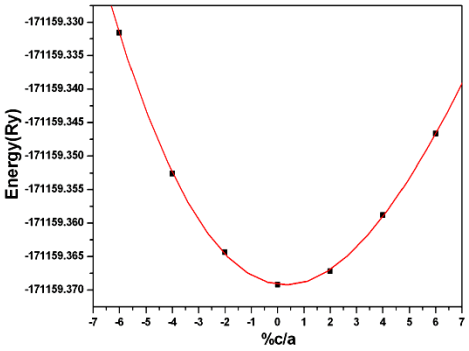
این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

۱- مقدمه

ترکیب $Ca_5Al_2Sb_6$ ماده ارزانی است و در طبیعت به وفور یافت می شود و می توان از آن جهت جلوگیری از اتلاف حرارت استفاده کرد. این ترکیب یک ماده ی ترموالکتریک است. ماده ی ترموالکتریک ماده ای است که الکتریسیته را به طور مستقیم به گرما یا سرما تبدیل می کند, در نتیجه در کاهش مصرف انرژی بسیار موثر است [۱].این ماده جزء ترکیبات زینتل است, این ترکیبات از مواد ترموالکتریکی ارزان و غیر سمی تشکیل شده اند [۲]. فرمول شیمیایی یک ترکیب زینتل به صورت $A_5B_2C_6$ می باشد که A می تواند از بین عناصر Ca, Sr, Ba؛ B از بین عناصر Al, In, Ga و Sn و C از بین عناصر P, As, Sb و Bi انتخاب شوند. ترکیبات زینتل شامل پیوندهای کوالانسی و یونی هستند. این ترکیبات مثل $(CsBi_4Te_6, Yb_{14}MnSb_{11}, Ca_2AlSb_3, AZn_2Sb_6)$ بازده ترموالکتریکی بالایی دارند [۳،۴]. یکی از جالب ترین خواص ترکیبات زینتل چگالی حامل های بار متحرک بالا و گشتاورهای مغناطیسی جایگزیده است و خواص اپتیکی و الکتریکی خوبی دارند [۵،۶]. آشنایی کامل از گاف و خواص اپتیکی می تواند برای طراحی و مطالعه ی وسایل مهم باشد. ترکیب $Ca_5Al_2Sb_6$ یک نیمه رساتا با گاف انرژی ۰,۵ eV است و تعداد حامل ها ی بار در نوار ظرفیت حدود $n=5\times10^{19}$ cm^{-3} می باشد. بنابراین با توجه به خصوصیات این ترکیب و با مطالعه و بررسی آن سعی بر این است تا یک ترکیب مفیدی به صنعت معرفی گردد.

۲- روش انجام محاسبات

در این تحقیق محاسبات بر اساس نظریه تابعی چگالی تحت تقریب گرادیان تعمیم یافته با روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی انجام شده است .انرژی جدایی بین الکترونهای ظرفیت و مغزی برای ترکیب برابر ۶- ریدبرگ در نظر گرفته شده است. ترکیب $Ca_5Al_2Sb_6$. دارای ساختار فضایی اورترومبیک و گروه فضایی Pbam است. شعاع کره مافین تین به گونه ای انتخاب میشود که انبساط و انقباض ترکیب در اثر اعمال فشار منجر به همپوشانی ابر الکترونی اتم های همسایه نگردد و مقدار آن برای عناصر Ca، Al و Sb به ترتیب برابر ۲,۵ ، ۲,۳۳ و ۲,۵ بر حسب واحد اتمی انتخاب شدند. در اولین منطقه بریلوئن، برای محاسبات الکترونیکی تعداد نقاط k ، ۴۰۰ نقطه و برای محاسبات اپتیکی ۱۲۰۰ نقطه منظور شده است .همچنین معیار همگرایی ۰,۰۰۰۱ ریدبرگ در نظر گرفته شده است. ساختار بلوری در ابتدا بهینه شده وپارامترهای شبکه بدست می آیند که تغییرات انرژی شبکه بر حسب درصد تغییرات c/a در شکل ۱ آورده شده است. مقادیر بدست آمده برای پارامترهای شبکه به ترتیب عبارت است از a= ۱۲,۰۵ Å b= ۱۴,۰۲ Å, c= ۴,۴۹ Å .در این تحقیق محاسبات خواص اپتوالکترونیکی با پارامترهای بهینه انجام شده و مقادیر فشار اعمال شده از صفر تا ۲۵ گیگا پاسکال می باشد. اعمال فشارهای بزرگتر از ۲۵ گیگا پاسکال تاثیری بر نتایج نداشته بنابراین حداکثر این مقدار فشار به ساختار بلورین اعمال شده است.



شکل ۱: تغییرات انرژی شبکه بر حسب درصد تغییرات c/a

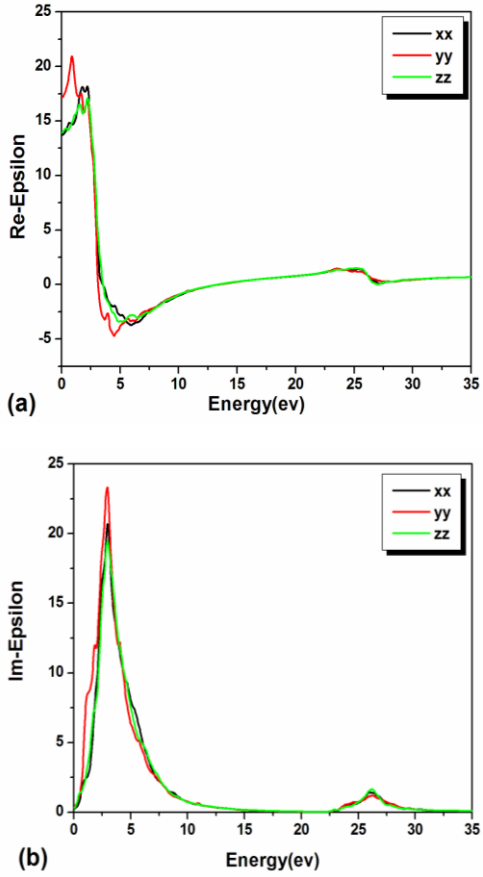
۳- نتایج

۳-۱- تابع دی الکتریک

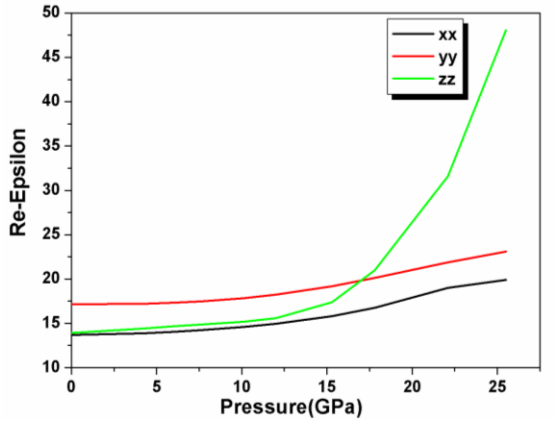
قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک نسبت به انرژی فوتون فرودی در فشار صفر گیگا پاسکال در شکل ۲ نشان داده شده است. خواص کلی تابع دی الکتریک در سه راستای xx، yy وzz متفاوت است. که دلیل این ناهمسانگردی متفاوت بودن پارامترهای شبکه در سه جهت می باشد. تابع دی الکتریک در انرژی صفر, تابع دی الکتریک استاتیک است. منحنی قسمت حقیقی تابع دی الکتریک, تابع دی الکتریک استاتیک را برای راستای x برابر با ۱۳.۷۱ eV , برای راستای y برابر با ۱۷.۱۶ eV و برای راستای z برابر با ۱۳.۹۲ eV نشان می دهد. اندازه پیک اصلی در منحنی قسمت حقیقی تابع دی

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-04]

الکتریک در راستای x برابر با ۱۸.۱ در انرژی ۱.۷۸ eV ، برای راستای y برابر با ۲۰.۹۱ در انرژی ۰.۸۸ eV و برای راستای z برابر با ۱۶.۵۳ در انرژی ۱.۵۶ eV می باشد. قسمت موهومی تابع دی الکتریک به طور جزئی بیانگر انتقال های واقعی بین حالت های اشغال شده و اشغال نشده می باشد. نمودار قسمت موهومی تابع دی الکتریک دارای یک قله در انرژی ۲.۹۵ eV است. مقادیر x ، y و z در این انرژی به ترتیب برابر با ۲۰.۶۸ ، ۲۳.۳۱ و ۱۹.۴۲ می باشند. اولین تغییرات سریع منحنی در انرژی ۰.۳۵ eV مربوط به اولین گذار مستقیم اپتیکی است. در شکل ۳ تغییرات تابع دی الکتریک استاتیک بر حسب فشار رسم شده است. با افزایش فشار این مقدار افزایش پیدا می کند که بیشترین تغییرات مربوط به راستای z است. بنابراین می توان نتیجه گرفت که افزایش فشار بر ساختار بلوری و طول پیوندها در راستای z تاثیر بالای داشته و موجب تغییرا ت سریع تابع دی الکتریک می گردد در این راستا می شود.



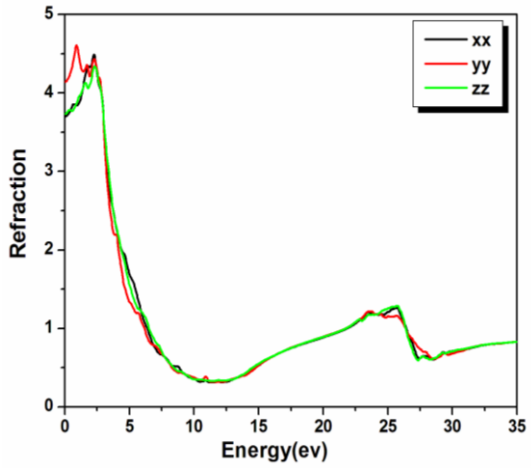
شکل ۲: توابع دی الکتریک حقیقی و موهومی در فشار صفر گیگا پاسکال.



شکل ۳: تغییرات تابع دی الکتریک استاتیک بر حسب فشار.

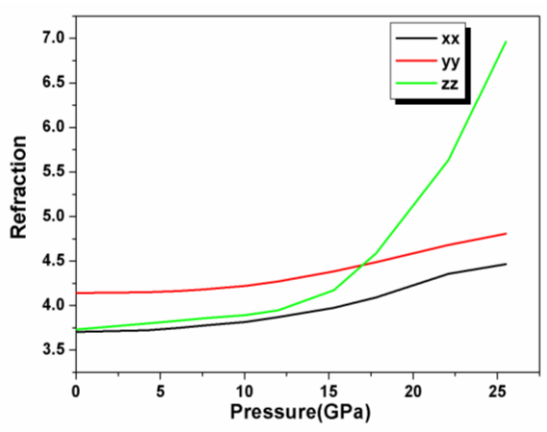
۳-۲- ضریب شکست

در شکل ۴ تغییرات ضریب شکست بر حسب انرژی فوتون فرودی در فشار صفر گیگا پاسکال نشان داده شده است. اندازه ضریب شکست محاسبه شده در سه راستای x ، y و z به ترتیب برابر ۳,۷ ، ۴,۱۴ و ۳,۷۳ می باشد این مقادیر برابر با جذر تابع دی الکتریک استاتیک هستند. نتایج فوق نشان می دهند که ترکیب فوق خاصیت چند ضریب شکستی دارد. در شکل ۵ تغییرات ضریب شکست استاتیک بر حسب فشار رسم شده است. با افزایش فشار این مقدار افزایش پیدا می کند که در اینجا نیز بیشترین تغییرات مربوط به راستای z است. نمودار فوق نشان میدهد که برای بدست آوردن بیشترین ضریب شکست در فشارهای بالا بایستی راستای z را انتخاب نماییم.



شکل ۴: ضریب شکست در فشار صفر گیگا پاسکال.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-04]



شکل ۵: تغییرات ضریب شکست استاتیک بر حسب فشار.

۴- نتیجه‌گیری

در این تحقیق محاسبات بر اساس نظریه تابعی چگالی تحت تقریب گرادیان تعمیم یافته با روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی انجام شده است.پارامترهای شبکه ی این ترکیب بهینه گردید و اثر فشار بر خواص اپتیکی این ساختار بررسی شد. نتایج بدست آمده نشان می دهند که خواص اپتیکی به شدت به اعمال فشار تا ۲۵ گیگا پاسکال حساس بوده و بیشترین تغییرات مر بوط به راستای z است

۵- سپاسگزاری

از آقای پرفسور پیتر بلاها و گروه آنها در دانشگاه وین اتریش به خاطر تهیه کد محاسباتی WIEN۲k کمال تشکر را داریم.

۶- مراجع

[۱] L.Bell, **Science** ۳۲۱, ۱٤٥۷(۲۰۰۸)
[۲] E.S.Toberer, A.F.May, and G.J.Snyder, **Chem Mater**. ۲۲،٦۲٤(۲۰۱۰)
[۳] D.-Y.Chung, T.P.Hogan, M.Rocci-Lane, P.Brazis, J.R.Ireland, C.R.Kannewurf, M.Bastea, C.Vher, and M.G.Kanatzidis, **J.Am.Chem.Soc**.۱۲٦, ٦٤۱٤(۲۰۰٤)
[٤] E.S.Toberer, A.F.May, B.C.Melot, E.Flage-Larsen, and G.J.Snyder, **Dalton Trans**. ۳۹, ۱۰٤٦(۲۰۱۰)
[٥]J.Jiang,M.M.Olmstead,S.M.Kauzlarich, **Inorg.Chem**.٤٤(۲۰۰٥)۱۳۲۲

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-04]