



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 با استفاده از نظریه تابعی چگالی و تابعی های PBEsol و PBE

ثمین بیرشک و هاله کنگرلو

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

چکیده - در این مقاله خواص اپتیکی بلور 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، PBE، PBEsol، SiO_2 ، WIEN2K

Investigation of the Optical Properties of SiO_2 Using DFT and PBE Functional and PBEsol Functional

Samin, birashk and Haleh, Kangarlou

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

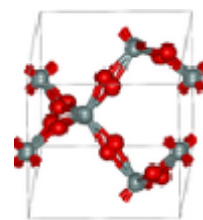
Abstract-In this paper optical properties such as dielectric function, absorption coefficient, energy loss function and reflectivity coefficient of SiO_2 crystal have been studied. The calculation have been performed using the Full-Potential-Linearised Argumented Plane Waves (FP-LAPW) method within the framework density functional theory (DFT) by WIEN2K package.

Optical properties is calculated by (LSDA) approximations and (GGA) approximation with WC functional. The results show that the optical properties of x and z axes are diffirent and around this axis are anisotropic.

Keywords: DFT, Optical Properties, PBE, PBEsol, SiO_2 , WIEN2k

مقدمه

کوارتز، ترکیبی شیمیایی ساخته شده از یک قسمت سیلیسیوم و دو قسمت اکسیژن (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 مافوق 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 بلورهایی در پورفیرهای کوارتز، گرانیث گرافیتی دیده می شود [۳]. کوارتز دما بالا در سیستم هگزائگونال رده ۶۲۲ به صورت بلورهای منشوری متبلور می شود [۴]. در شکل ۱ سلول قرار دای بتا کوارتز SiO_2 نشان داده شده است.

شکل ۱: سلول قرار دای SiO_2

۲- روش محاسبات

بلور بتا کوارتز سیلیکا دارای گروه فضایی $P6_22$ و $\alpha=\beta=90^\circ$ و $\gamma=120^\circ$ در فاز هگزائگونال 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 تخت 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، 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 موپین تین برای اتم های تشکیل دهنده ی این ترکیب به ترتیب برای سیلیکون و اکسیژن ۱/۸ a.u و ۱/۱ a.u قرار داده شده است. برای جداسازی حالت های ظرفیت از حالت های مغزه، انرژی ۶- ریدبرگ را برگزیدیم و بازه ی همگرایی انرژی را از مرتبه ۰/۰۰۰۱ انتخاب کرده ایم.

برای رسیدن به این همگرایی Rkmax 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 ۴*۴*۴ ایجاد شده است.

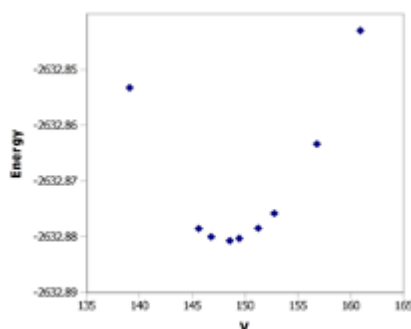
۲-۱- نتیجه محاسبات

برای کمینه سازی بتا کوارتز تعدادی ساختار با پارامترهای شبکه a و c حول نقطه ی کمینه تجربی به فاصله ی ۰/۰۲ 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 مقدار انرژی به عنوان کمینه انرژی و ساختار معادل 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 c	ثابت شبکه a=b
تابعی (PBE)	۵/۶۲۱	۵/۱۵۳
تابعی (PBEsol)	۵/۵۹	۵/۱۲۲
تابعی (WC)	۵/۶۰۸	۵/۱۳۶
به روش تجربی [۱۲]	۵/۴۷	۵/۰۱

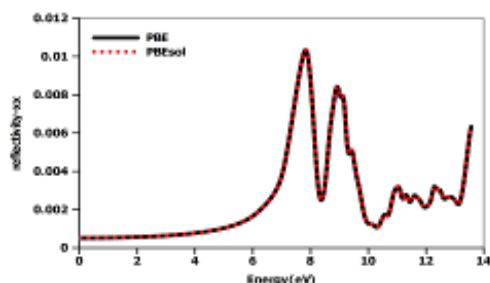
همان طور که از جدول ۱ مشهود است بهترین هماهنگی بین نتیجه تجربی و تئوری مربوط به تابعی WC می باشد. در شکل ۲ نتیجه بهینه سازی انرژی نسبت به حجم ترسیم شده است.



شکل ۲: بهینه سازی انرژی نسبت به حجم

2-2- 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. نمودار اتلاف انرژی SiO₂ در شکل زیر نشان داده شده است.



شکل 5: ضریب بازتاب بتا کوآرتز در راستای x

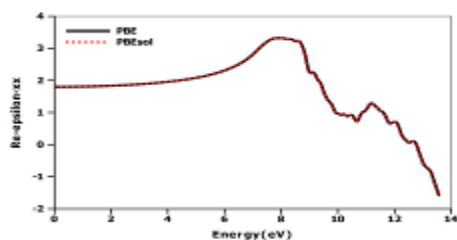
2-4- تابع دی الکتریک

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

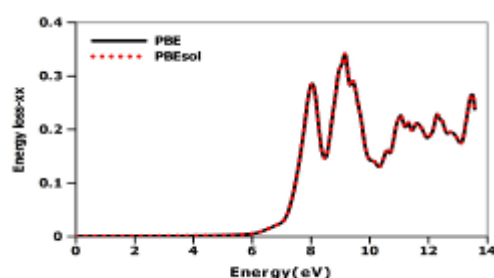
$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (2)$$

نشان داده می شود. با داشتن تغییرات $\varepsilon_2(\omega)$ ، براساس تبدیلات کرامرز-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 جمعی 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.

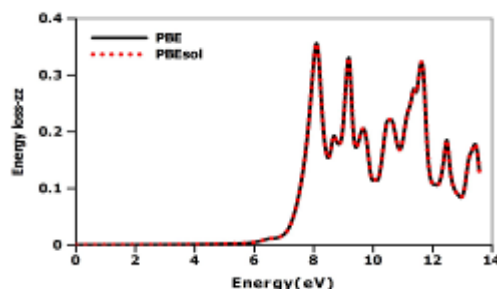
بخش حقیقی تابع دی الکتریک بتا کوآرتز SiO₂ در راستای x و z، یعنی راستاهای بردارهای a و c ساختار شش گوشه، برای تابعی های PBE و PBEsol در شکل های 6 و 7 آمده است و بخش موهومی این تابع در شکل های 8 و 9 نشان داده شده است.



شکل 6: قسمت حقیقی تابع دی الکتریک بتا کوآرتز در راستای x



شکل 3: تابع اتلاف انرژی بتا کوآرتز در راستای x



شکل 4: تابع اتلاف انرژی بتا کوآرتز در راستای z

بر اساس مدل الکترون آزاد، انرژی پلاسمون از رابطه ی

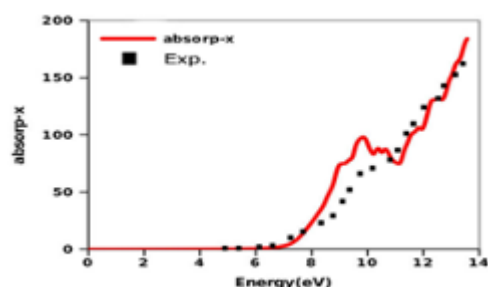
$$E_p = \omega_p = \sqrt{ne^2/m_0\varepsilon_0} \quad (1)$$

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

2-3- 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

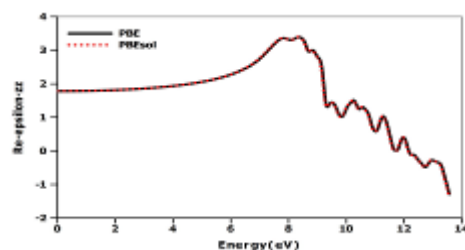
راستای بردارهای a و c باشند خواص اپتیکی متفاوتی از خود نشان می دهند و این موضوع در مورد ساختارهای غیر مکعبی از اهمیت بالایی برخوردار است.



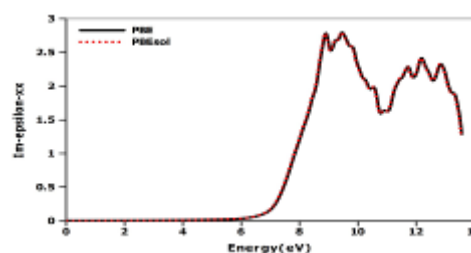
شکل 10: مقایسه نتایج تجربی و محاسباتی ضریب جذب در راستای محور X

مراجع

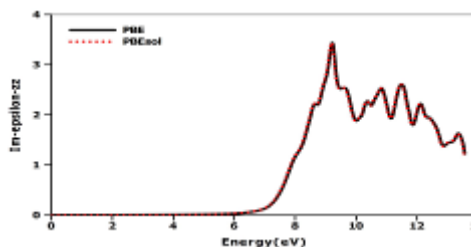
- [۱] Papier Eugene, "Absorption on Silica Surfaces", Marcek Dekker, New York, 2000
- [۲] P. J. Grunthaner, M. H. Hecht, F. J. Grunthaner and N. M. Johnson; "The localization and crystallographic dependence of Si suboxide species at the SiO_2/Si interface"; *J. Appl. Phys.* 61, 629 (1987)
- [۳] R.L. 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-Ernzerhof Functionals"; *Physical Review B Condensed Matter*. 59(11) : 7413-7421.
- [۹] John P. Perdew, Kieron Burke, Matthias Ernzerhof; "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 SiO_2 ."; *Physical Review Letters*, vol. 59, p. 1136, 1987.



شکل 7: قسمت حقیقی تابع دی الکتریک بتا کوارتز در راستای Z



شکل 8: قسمت موهومی تابع دی الکتریک بتا کوارتز در راستای X



شکل 9: قسمت موهومی تابع دی الکتریک بتا کوارتز در راستای Z

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 PBE و PBEsol بررسی و با مقادیر تجربی در دسترس مقایسه شده است. داده های بدست آمده توافق خوبی با مقادیر تجربی دارند. برای مثال همانطور که در جدول ۱ مشاهده می شود ثابت های شبکه در بهترین حالت محاسبه برای $a=b=5/01$ و $a=b=5/136$ بدست آمده و در نتایج تجربی با یکدیگر 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 PBE و PBEsol تفاوت چندانی ندارد، چنانکه با افزایش فرکانس، مقادیر، نسبت به هم جابه جا نمی شوند.

در مورد ضریب جذب نیز سازگاری خوبی بین تجربه و محاسبات در شکل ۱۰ دیده می شود. نتایج نشان می دهد که ساختار بتا کوارتز بسته به اینکه امواج فرودی در