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

بررسی ویژگی های اپتیکی بتا کوارتز با استفاده از نظریه تابعی چگالی و تابعی های PBE و PBEsol

ثمین بیرشک و هاله کنگرلو

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

چکیده – در این مقاله خواص اپتیکی بلور *SiO2* 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 ، SiO2 ، WIEN2K

Investigation of the Optical Properties of SiO2 Using DFT and PBE Functional and PBEsol Functional

Samin, birashk and Haleh, Kangarlou

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

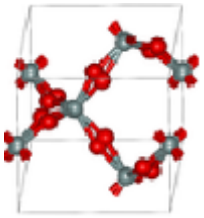
Abstract-In this paper optical properties such as dielectric function, absorption coefficient، energy loss function and reflectivity coefficient of SiO2 crystal have been studied. The calculation have been performed using the Full-Potential-Linearrised Argumented Plane Waves (FP-LAPW) method within the 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, SiO2, WIEN2k

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-05]

مقدمه

کوارتز، ترکیبی شیمیایی ساخته شده از یک قسمت سیلسیوم و دو قسمت اکسیژن (SiO_2) است[۱]که به صورت خالص و یا به صورت ترکیب در کانی های سیلیکاته حدودا 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، گرانیت 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 SiO_2 نشان داده شده است.



شکل1 : سلول قرار دادی SiO_2

2- روش محاسبات

بلور بتا کوارتز سیلیکا دارای گروه فضایی $P6_222$ $\alpha=\beta=90$ و $\gamma=120$ 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 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 تبادلی در مقایسه با تابعی PBE چنان تغییر کرده است که تا چهارمین مرتبه بسط گرادیان انرژی تبادلی در نظر گرفته شده است.

شعاع کره موفین تین برای اتم های تشکیل دهنده ی این ترکیب به ترتیب برای سیلیکون و اکسیژن a.u ۱/۸ و a.u ۱/۱ 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 بریلوئین ۱۲ نقطه بود که به ازاء آن یک شبکه ۴*۴*۴ ایجاد شده است.

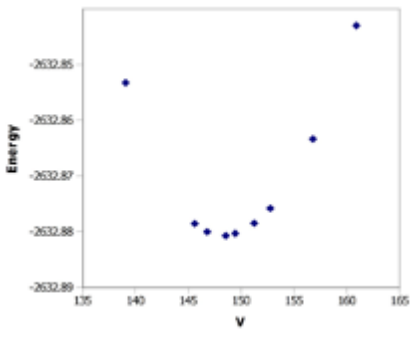
2-1- نتیجه محاسبات

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 مرتبا 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

ثابت شبکه c	ثابت شبکه a=b	
۵/۶۲۱	۵/۱۵۳	تابعی (PBE)
۵/۵۹	۵/۱۲۲	تابعی (PBEsol)
۵/۶۰۸	۵/۱۳۶	تابعی (WC)
۵/۴۷	۵/۰۱	به روش تجربی[۱۲]

همان طور که از جدول ۱ مشهود است بهترین هماهنگی بین نتیجه تجربی وتئوری مربوط به تابعی WC می باشد. در شکل 2 نتیجه بهینه سازی انرژی نسبت به حجم ترسیم شده است.

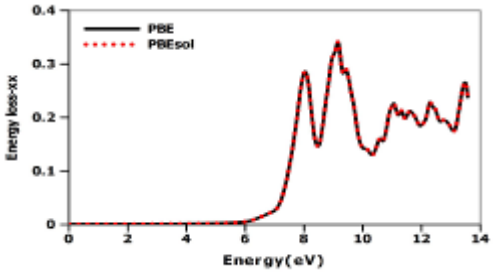


شکل2: بهینه سازی انرژی نسبت به حجم

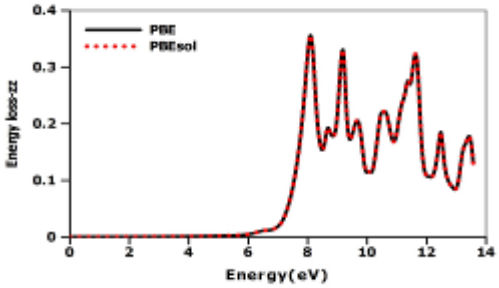
[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-05]

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 3: تابع اتلاف انرژی بتا کوارتز در راستای x



شکل 4: تابع اتلاف انرژی بتا کوارتز در راستای z

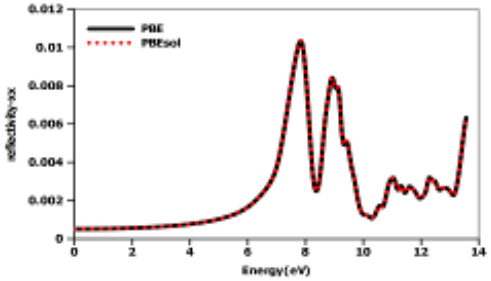
بر اساس مدل الکترون آزاد، انرژی پلاسمون از رابطه ی

$$E_{\mathrm{p}} = \omega_{\mathrm{p}} = \sqrt{ne^2}/m_o\varepsilon_o \qquad (۱)$$

بدست می آید که در آن n چگالی الکترون های آزاد در حجم یاخته، m_o 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 پاشیدگی است.



شکل 5: ضریب بازتاب بتا کوارتز در راستای x

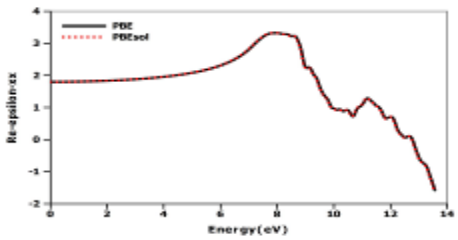
۲-۴- تابع دی الکتریک

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

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + \imath\varepsilon_2(\omega) \qquad (۲)$$

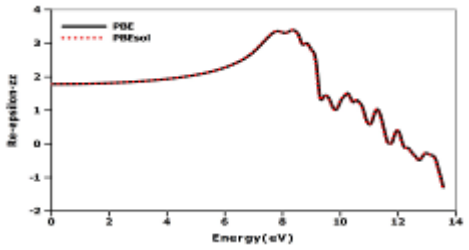
نشان داده می شود. با داشتن تغییرات $\varepsilon_2(\omega)$، براساس تبدیلات کرامرز-کرونیک می توانیم تغییرات $\varepsilon_1(\omega)$ را بدست آوریم. ریشه های $\varepsilon_1(\omega)$ مفهوم فیزیکی دارند و در واقع شرط لازم برای پلاسمون های حجمی در ماده هستند ولی شرط کافی برای آنها، وجود اتلاف انرژی است. همچنین 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 SiO2 در راستای x و z، یعنی راستاهای بردارهای a و c ساختار شش گوشی، برای تابعی های PBE و PBEsol در شکل های 6 و7 آمده است و بخش موهومی این تابع در شکل های 8 و 9 نشان داده شده است.

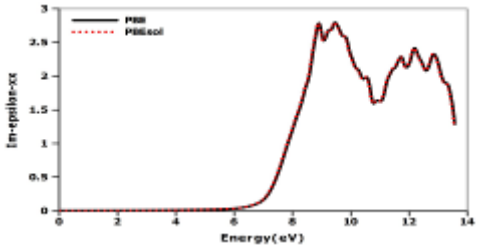


شکل 6: قسمت حقیقی تابع دی الکتریک بتا کوارتز در راستای x

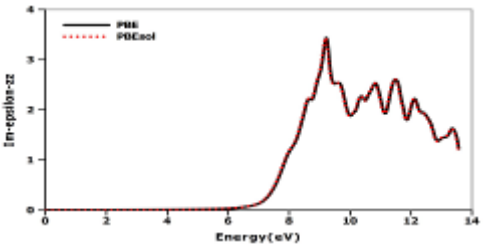
[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-05]



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



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



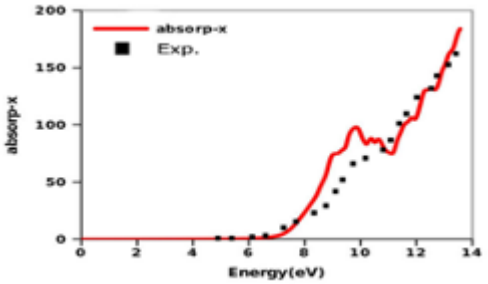
شکل 9: قسمت موهومی تابع دی الکتریک بتا کوارتز در راستای z

۳-نتیجه‌گیری

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، ۵/۱۳۶ بدست آمده ودر نتایج تجربی a=b=5/01 حاصل شده که توافق نزدیکی 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 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, Peudopotential 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. Zhaoand D. G. Truhlar; ibid. 78, 197101 (2008)*

[۱۲] *D. Allan and M. Teter, "Nonlocal pseudopotentials in molecular-dynamical density-functional theory: application to SiO2."; Physical Review Letters, vol. 59, p. 1136, 1987.*

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-05]