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 نقره با استفاده از نظریه تابعی چگالی

فاطمه دلنواز بردیزی و هاله کنگرلو

گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد ارومیه، ارومیه

چکیده –در این مقاله خواص اپتیکی نقره از جمله قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، تابع اتلاف انرژی، ضریب شکست و ضریب خاموشی محاسبه شده است. این خواص با بکارگیری نظریه تابعی چگالی و رهیافت امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل*(FP-LAPW)* و با تقریب گرادیان تعمیم یافته*(GGA)* و تقریب چگالی موضعی*(LDA)* مورد مطالعه قرار گرفته است. در محاسبات از تابعی *PBE* و *LDA* استفاده شده است. نتایج با هم مقایسه شده اند که نشان می دهد در توافق خوبی با مقادیر تجربی و نتایج تئوری حاصل از کار های پیشین است.

کلید واژه- تابع دی الکتریک، خواص اپتیکی، نظریه تابعی چگالی، PBE،LDA.

Study of optical properties of silver by using DFT

Fatemeh Delnavaz Bardizi,and Haleh Kangarlou

Department of physics, Islamic Azad University of Urmia, Urmia

Abstract-In this paper optical properties of Silver such as the real and imaginary part of dielectric function, energy loss function, refractive index and extinction coefficient are calculated. These properties have been calculated by employing density functional theory and Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave (FP-LAPW) method with Generalized Gradient Approximation (GGA) and Local Density Approximation (LDA). For calculations we used PBE and LDA functional. Results are discussed and shown to be in reasonable agreement with the experimental values and theoretical results by earlier workers.

Keywords: DFT, Dielectric function, LDA, optical properties, PBE.

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

۱- مقدمه

نقره فلزی نادر(بی اثر) می باشد به دلیل اینکه در مقابل اکسیداسیون و خوردگی، هر چند نه به خوبی طلا، مقاوم است. ضد میکروبی و ضد سمی بودن نقره آن را برای مصنوعات پزشکی مفید می سازد. یکی از کابردهای به شدت در حال گسترش نقره، کاربرد آن در سلول های فتوولتانیک برای تولید انرژی خورشیدی می باشد. از نقره در لایه های بازتابش کننده فروسرخ در قطعات نوری مانند شیشه های کم گسیل و سیستم های کنترل نور خورشید برای حفظ یا بازیابی حرارت و یا برای آینه های با توان بازتاب بالا استفاده می شود[1,2]. در سال های اخیر نانو ذرات طلا و نقره در صنعت های گوناگون [3] و کاربردهای بیولوژی و پزشکی[4,5] مورد توجه زیادی قرار گرفته است. بویژه خواص اپتیکی تشدیدی نانو ذرات برای طراحی تراشه هاو حسگرهای زیستی به کار رفته است[6,7].

۲- روش تهیه مقاله

نقره دارای ساختار FCC و گروه تقارنی Fm-3m است. در این تحقیق محاسبات با استفاده از تقریب چگالی موضعی(LDA) و تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) با روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی با استفاده از کد Wien2k انجام گرفته است[8,9]. در این محاسبات از دو تابعی PBE و LDA استفاده شده است که در مطالعات فراوانی برای بدست آوردن ثابت شبکه در جامدات به کار رفته است[10,11].شعاع کره مافین تین برابر ۲.۴ واحد اتمی در نظر گرفته شده است. برای جداسازی حالت های ظرفیت از حالت های مغزه انرژی ۶- ریدبرگ را برگزیدیم، که هر چه انرژی جدایی بیشتر باشد محاسبات دقیق تر است. با تعیین مبنای همگرایی ۰.۰۰۰۱ برای بار، به انجام محاسبات خودسازگار پرداخته شد. از تقسیم ۵۰×۵۰×۵۰ در منطقه اول بریلوئن ۳۱۰۷ نقطه بدست آمده است. پارامتر همگرائی $Rk_{\max}$ برابر ۷ انتخاب گردیده است.

۲-۱- بحث و نتایج

ثابت های شبکه پس از بهینه سازی برای تابعی PBE برابر ۴.۱۲۲ آنگستروم و برای تابعی LDA برابر۳.۹۸۶ آنگستروم بدست آمده اند که خواص اپتیکی برای ساختار بهینه محاسبه شده اند. در جدول ۱ مقادیر بهینه سازی شده ثابت شبکه با دو تابعیPBE و LDA و کارهای تحقیقاتی پیشین درج شده است.

جدول۱: نتایج بهینه سازی شده ثابت شبکه(آنگستروم)

نوع تقریب	کار حاضر	کار دیگران[12]	تجربی[12]
PBE	۴.۱۲۲	۴.۱۵۲	۴.۰۶۲
LDA	۳.۹۸۶	۴.۰۰۷	۴.۰۶۲

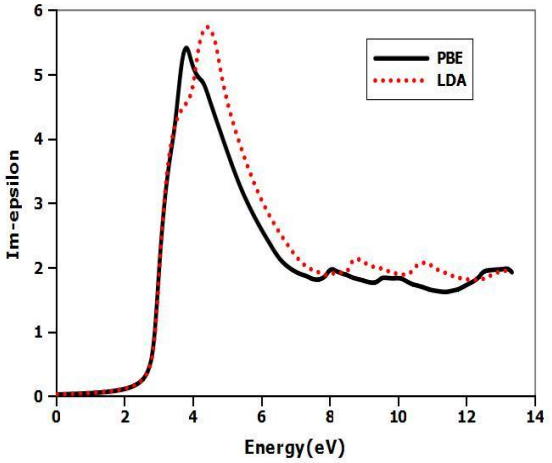
۲-۲- تابع دی الکتریک

تابع دی الکتریک یک تابع مختلط است که بیان کننده پاسخ ماده به میدان الکترومغناطیسی اعمال شده به آن می باشد.تابع دی الکتریک دارای دو سهم درون نواری و بین نواری است که سهم درون نواری برای فلزات به کار می رود.این تابع به صورت:

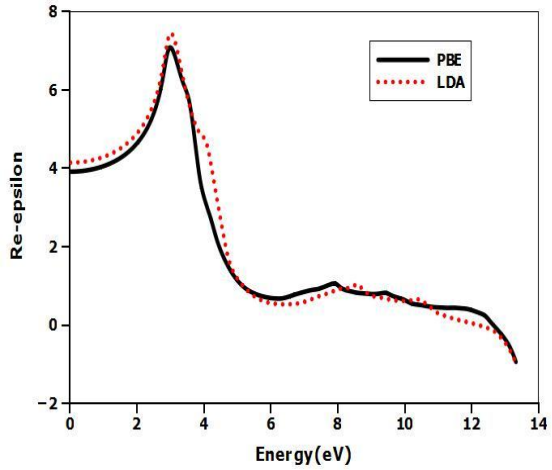
$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \qquad (۱)$$

نشان داده می شود.ریشه های تابع دی الکتریک دارای مفهوم فیزیکی بوده و شرط لازم برای پلاسمون های حجمی در ماده می باشند ولی شرط کافی برای آنها وجود اتلاف انرژی است. اگر در ناحیه ای تابع دی الکتریک منفی شد امواج انتشار پیدا نکرده و فرایند جذب و اتلاف صورت می گیرد. در اینجا قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک به صورت مجزا با دو تابعی مقایسه شده است. از آنجا که ساختار نقره مکعبی است تغییرات در دو راستای x و z یکسان می باشد. در شکل های ۱ و ۲ این تغییرات نشان داده شده است. دو تابعی دارای نتایج تقریبا یکسانی می باشند با این تفاوت که در فرکانس های بالا، یکی از نمودارها نسبت به دیگری در راستای انرژی اندکی جابه جا شده است.

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



شکل۱: قسمت موهومی تابع دی الکتریک با استفاده از تابعی های PBE و LDA



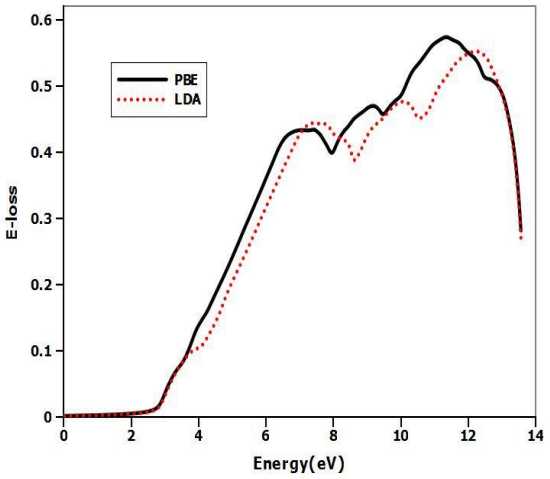
شکل۲: قسمت حقیقی تابع دی الکتریک با استفاده از تابعی های PBE و LDA

۲-۳- تابع اتلاف انرژی

تابع اتلاف انرژی از رابطه زیر محاسبه می شود:

$$L_{\alpha\beta}(\omega) = -\mathrm{Im}(\frac{1}{\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega)}) \qquad (۲)$$

که با استفاده از انرژی اتلاف می توانیم ساختار الکترونی ماده را بررسی کنیم.در انرژی های متوسط اتلاف انرژی مربوط به برانگیختگی های تک الکترونی و تحریک دسته جمعی الکترون ها (پلاسمون ها)می باشد. پیک نمودار، نشان دهنده انرژی پلاسمون می باشد که می توان با استفاده از آن انرژی پلاسمون ها را محاسبه کرد. پیک نمودار با استفاده از تابعی PBE برابر 11.288 eV و برای تابعی LDA برابر 12.173 eV بدست آمده است.



شکل۳: تابع اتلاف انرژی با استفاده از تابعی های PBE و LDA

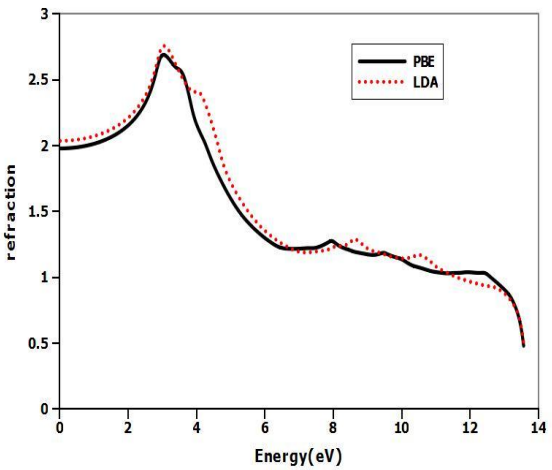
۲-۴- ضریب شکست و خاموشی

بازتاب اپتیکی را می توان از رابطه زیر محاسبه کرد:

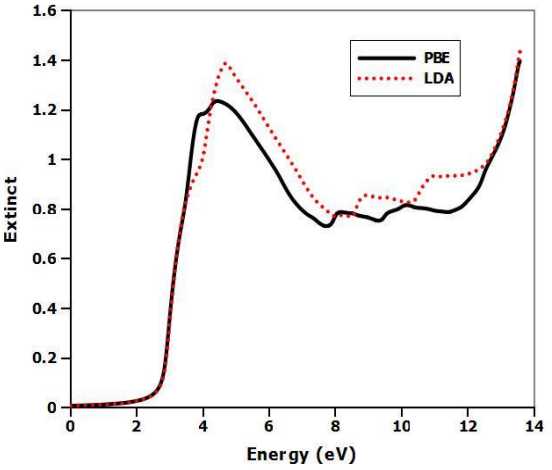
$$R_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \qquad (۳)$$

ضریب شکست تابعی مختلط است که n مشخصه ی قسمت حقیقی و k مشخصه ی قسمت موهومی ضریب آن می باشد که همان ضریب خاموشی است. شکل ۴ نشان دهنده تغییرات ضریب شکست و شکل ۵ نشان دهنده تغییرات ضریب خاموشی با استفاده از نتایج بدست آمده از دو تابعی PBE و LDA می باشد. با توجه به شکل ۵ در ناحیه ی انرژی های کوچک، ضریب خاموشی هم کوچک می باشد. در شکل ۴ پیک نمودارها تقریبا با هم برابر است و در دو نمودار همخوانی مقادیر در فرکانس ها ی کم به خوبی دیده می شود. تنها با افزایش فرکانس یکی از نمودارها نسبت به دیگری در راستای انرژی اندکی جابه جا شده است.

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



شکل۴: ضریب شکست نقره با استفاده از تابعی های PBE و LDA



شکل۵: ضریب خاموشی نقره با استفاده از تابعی های PBE و LDA

۳- نتیجه‌گیری

دراین مقاله خواص اپتیکی نقره با دو روش PBEو LDA در چارچوب نظریه تابعی چگالی با استفاده از تقریب گرادیان تعمیم یافته و تقریب چگالی موضعی بررسی شده است. نتایج نشان می دهد که با استفاده از دو تابعی هم مقادیر آنها در فرکانس های پایین تقریبا بر هم منطبق اند ولی در انرژی های بالاتر یکی از نمودارها نسبت به دیگری در راستای انرژی اندکی جابه حا شده است. در نهایت با توجه به محاسبات انجام شده در خصوص ثابت شبکه، داده های بدست آمده از دو تابعی هم با مقادیر تجربی همخوانی خوبی دارند.

مراجع

[1] Mashaiekhy Asl J., Shafieizadeh Z., Sabbaghzadeh J., Anaraki M., Study *and Comparison of Silver Mirrors Deposited on Different Substates by Electron-Beam Gun Method*, **AIP Conferenve Procceding**.1325 (2010) 60-62.
[2] Jamshidnejad M., Kazeminejad I., Razeghizadeh A., *Simulation of Silver Thin Films Growth and Influence of Deposition Rate on Final Grain Size under Angle Flux and Standard Situation*, **Int. Nano Lett**. 1, No.1 (2011) 59-61.
[3] Feldheim D. L., Foss C. A., Jr., Eds. *Metal Nanoparticles: Synthesis, Characterization and Applications*, **Marcel Dekker: New York**, 2002.
[4] Schultz DA., *Plasmon resonant particles for biological detection*, **Curr. Opin. Biotechnol** 14 (2003) 13-22.
[5] Parak W. J. & et al, *Biological applications of colloidal nanocrystals*, **Nanotechnology** 14 (2003) 15-27.
[6] Stich N. & et al, *Phage Display Antibody-Based Proteomic Device Using Resonance-Enhanced Detection*, **J. Nanosci.Nanotechnol**. 23 (2002) 75-81.
[7] Serra A. & et al, *Non-functionalized silver nanoparticles for a localized surface Plasmon resonance-based glucose sensor*, **Nanotechnology** 20, 2009.
[8] Wu Z. and Cohen R. E., *More Accurate Generalized Gradient Approximation for Solids*, **Phys. Rev.** B 73, No. 235116 (2006).
[9] Predew J. P., Burke K., Ernzerhof M., *Generalized Gradient Approximation Made Simple*, **Phys. Rev. lett.** 77, No.3865 (1996)
[10] Tran F., Laskowski R., Blaha P., Schwarz K., *Performance on Molecules, Surfaces and Solids of the Wu-Cohen GGA Exchange-Correlation Energy Functional*, **Phys. Rev**. B 75, No. 115131 (2007).
[11] Perdew J. P., Chevary J. A., Vosko S. H., Jacson K. A., Pederson M. R., Singh D. J., Fiolhais C., *Atoms, Molecules, Solids and Surface: Applications of the Generalized Gradient Approximation for Exchange and Correlation*, **Phys. Rev.** B 46, No. 6671(1992).
[12] Haas P., Tran F., Blaha P., *Calculation of the lattice constant of solids with semilocal functional*, **phys. Rev.** B 79, No. 085104 (2009) 1-10.

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