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

# تحلیل و مقایسه خواص الکترواپتیکی دو ترکیب دی‌الکتریک $Bi_{0.5}Na_{0.5}TiO_3$ و $Bi_{0.5}Na_{0.5}ZrO_3$

سمانه غلام پور، جواد باعدی و فرشید قلعه‌نوی

سبزوار، دانشگاه حکیم سبزواری، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک

**چکیده – خواص الکترواپتیکی ترکیب‌های *BNT* و *BNZ* در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی *(DFT)* با استفاده از روش پتانسیل کامل و امواج تخت افزوده خطی شده *(FP-LAPW)* و با بکارگیری تقریب شیب تعمیم یافته *(GGA)* مورد بررسی و مقایسه قرار گرفت. گاف‌های الکترونیکی و اپتیکی برای *BNT* به ترتیب مقادیر *1.9 eV* و *2.2 eV* بدست آمد؛ در حالی که برای ترکیب *BNZ* گاف الکترونیکی *1.45 eV* و گاف اپتیکی *1.8 eV* حاصل شد. در هر دو ترکیب از لحاظ اپتیکی یک ناهمسانگردی دیده شد که منجر به خاصیت دوشکستی برای این ترکیبات می‌شود.**

کلید واژه- انرژی گاف، خواص الکترواپتیکی، BNT، BNZ

# Analysis and comparison of the electro-optical properties in two dielectric compounds $Bi_{0.5}Na_{0.5}TiO_3$ and $Bi_{0.5}Na_{0.5}ZrO_3$

Samane Gholampour, Javad Baedi, and Farshid Ghalenovi

Physics department, school of sciences, Hakim Sabzevari University, Sabzevar

Abstract- The electro-optical properties of BNT and BNZ compounds were studied in density functional theory (DFT) frame using full potential and linearized augmented plane wave (FP-LAPW) and generalized gradiant approximation (GGA). The electronic and optical gaps of BNT were obtained 1.9 eV and 2.2 eV respectively; but in BNZ compound, the values 1.45 eV for electronic gap and 1.8 eV for optical gap were achieved. Anisotropy for optical properties was seen in both compounds which results in birefringence characteristic for these compounds.

Keywords: BNT, BNZ, electro-optical properties, gap energy

[ Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-03 ]

## ۱- مقدمه

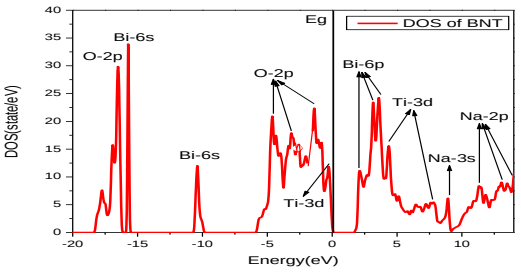
امروزه سرامیک‌های بدون سرب به طور گسترده در دستگاه‌های الکترونیکی مانند فعال کننده‌ها، حسگرها، مبدل‌ها و غیره مورد استفاده قرار می‌گیرند [۱] چرا که هیچ سربی برای آلودگی محیط نداشته و همچنین بعضی از آنها ویژگی‌های پیزوالکتریکی، دی‌الکتریکی و فروالکتریکی خوبی از خود نشان می‌دهند. بنابراین مطالعه و بهبود این خواص یک زمینه‌ی کاری بسیار مورد توجه برای محققان محسوب می‌شود. از جمله‌ی این مواد ترکیب $Bi_{0.5}Na_{0.5}TiO_3$ (BNT) است که اولین بار توسط اسمولنسکی و همکارانش کشف شد[۲]. این ترکیب در سه فاز رومبوهدرال، تتراگونال و مکعبی دیده شده است که در فاز فروالکتریک دارای قطبش پسماند زیاد $P_r = 38\mu C/cm^2$ و نیز دمای کوری بالاست [۳تا۵]. در مقایسه با سرامیک BNT تک بلور آن دارای خواص پیزوالکتریکی خوب و خواص اپتیکی عالی می‌باشد[۵تا۹]. بنابراین در این پژوهش خواص الکترواپتیکی بلور BNT در فاز تتراگونال مورد بررسی قرار می‌گیرد. ترکیب دیگری که نیز در اینجا مورد بررسی قرار گرفته است بلور $Bi_{0.5}Na_{0.5}ZrO_3$ (BNZ) می‌باشد که فاقد سرب بوده و اولین بار در سال ۲۰۰۷ توسط ک. لیلی و همکارانش معرفی شد[۱۰و۱۱]. همچنین در ادامه ویژگی‌های این دو ترکیب با یکدیگر مقایسه شده است.

## ۲- روش محاسبات

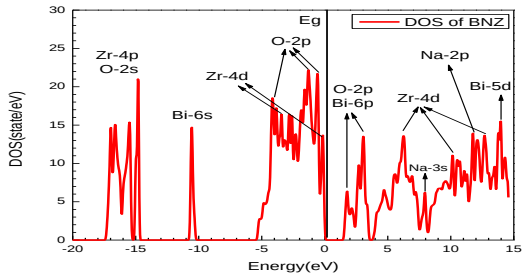
به منظور محاسبه‌ی خواص الکترونیکی و اپتیکی بلور مورد نظر، ابتدا می‌بایست معادله‌ی شرودینگر برای سیستم بس الکترونی در پتانسیل آن شبکه حل شود. برای این منظور از تقریب‌های مختلف و کدهایی محاسباتی در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) استفاده می‌شود. از جمله آنها، روش پتانسیل کامل با امواج تخت افزوده خطی (FP-LAPW) و تقریب شیب تعمیم یافته GGA (Perdew–Burke–Ernzerhof) است که در اینجا به کار گرفته شده‌اند. برای ثابت‌های شبکه‌ی بلوری a، b و c یک بار از مقادیر تجربی[۱۲و۱۳] و بار دیگر از مقادیر بهینه شده‌ی آنها که موجب کمینه شدن انرژی می‌شوند استفاده شده است.

## ۳- بحث و نتایج

چگالی حالت‌های کلی جهت توصیف برخی خواص اپتیکی لازم اند که در شکل‌های ۱ و ۲ برای دو ساختار BNT و BNZ در گستره‌ی انرژی ۲۰ eV- تا ۱۴ eV نشان داده شده است. انرژی صفر نشان دهنده‌ی مکان تراز فرمی است. از آرایش اتمی پیداست که اوربیتال‌های O-2p عمدتا زیر تراز فرمی قرار دارند اما به علت همپوشانی با اوربیتال‌های Bi و Na و Zr و تشکیل اوربیتال‌های هیبرید می‌توان الکترون‌های اوربیتال O-2p را بالای تراز فرمی نیز مشاهده کرد و بالعکس؛ یعنی اوربیتال‌های Na-3s و Zr-4d و Bi-6p که در بالای سطح فرمی بعد از انرژی گاف تشکیل می شوند زیر تراز فرمی هم درست در جایی که O-2p حضور دارد وجود دارند و این به طور قوی بیان می‌کند که اوربیتال‌های هیبرید جدیدی تشکیل شده است. اوربیتال های مغزه اتم‌های O و Bi و Na در فاصله‌ی دوری از تراز فرمی به طور جایگزیده تشکیل شده‌اند.




شکل ۱: چگالی حالت‌های کل ترکیب *BNT*



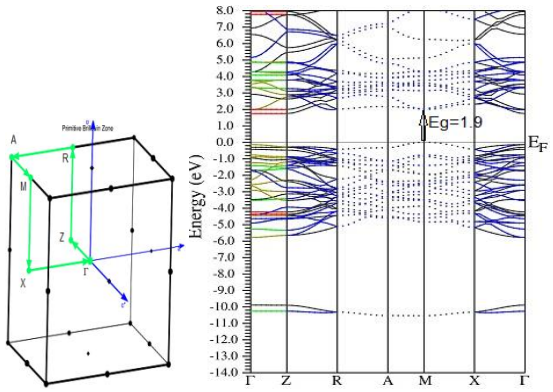

شکل۲: چگالی حالت‌های کل ترکیب *BNZ*

ساختار نوارهای انرژی برای ترکیب‌های BNT و BNZ در فاز تتراگونال در نقاط و امتدادهایی با تقارن بالا در اولین منطقه‌ی بریلوئن در تقارن P4bm در محدوده‌ی انرژی۱۴eV- تا ۸eV در شکل‌های ۳ و ۴ مشاهده می‌شود. گاف الکترونیکی محاسبه شده برای BNT، همان‌طور که در شکل مشخص شده است ۱/۹eV می‌باشد و برای BNZ، ۱/۴۵ eV بدست آمده است که این مقادیر می‌توانند از داده‌های تجربی کمتر باشند. همان طور که مشاهده می‌شود با جایگزین شدن Zr به جای Ti گاف

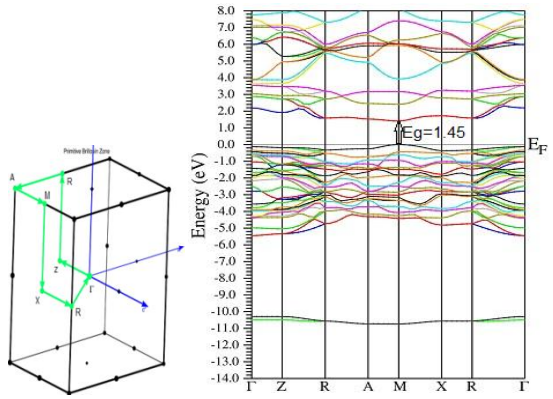


[ Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-03 ]

انرژی کاهش می‌یابد که نشان‌دهنده‌ی این است که سهم الکترون‌های Zr-4d در کاهش گاف بیشتر است و این با بزرگ بودن شعاع یونی Zr در توافق است.

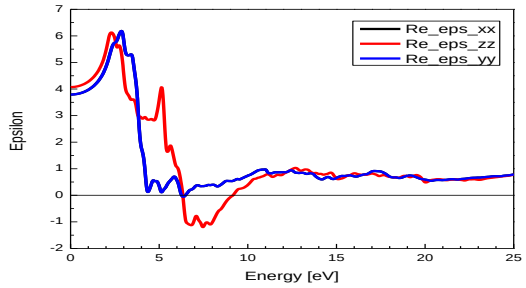



شکل۳: ساختار نوارهای انرژی ترکیب *BNT* در راستاها و مسیرهای مختلف در اولین منطقه ی بریلوئن و تعیین نقاط با تقارن بالا

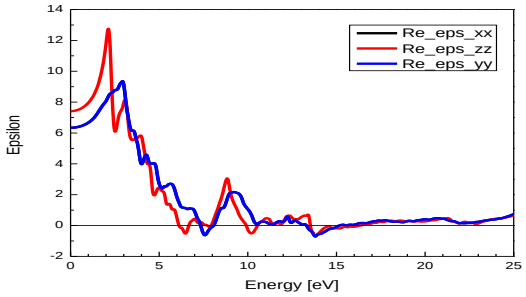



شکل۴: ساختار نوارهای انرژی ترکیب*BNZ* در راستاها و مسیرهای مختلف در اولین منطقه ی بریلوئن و تعیین نقاط با تقارن بالا

شکل های ۵ و ۶ قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک را برای دو ترکیب نشان می‌دهند. صفرهای این تابع، انرژی فرکانس مربوط به پلاسمون‌ها را مشخص می‌کند. همانطور که از نمودارها مشاهده می‌شود دو راستای X و Y کاملا همسانگرد هستند یعنی نمودارهای هر دو راستا دقیقاً روی هم افتاده است. تعداد ریشه‌ها برای ترکیب BNT، ۶ تا هستند که در هر دو راستای X و Y در انرژی‌های ۶/۲۷ eV و ۶/۴۸ eV و در راستای Z در انرژی‌های ۶/۳۲ eV و۹/۱۵ eV می‌باشد و برای ترکیب BNZ، ۱۷ریشه داریم که در هر دو راستای X و Y در انرژی های ۷/۳۳ eV و ۷/۸۵ eV و ۱۳/۳۷ eV و ۱۴/۸۷ eV و در راستای Z در انرژی های ۶/۱۹ eV و ۶/۶۲ eV و ۹/۸۳ eV و ۱۰/۳۵ eV و ۱۳/۵۳ eV و ۱۴/۲۷ eV و ۱۴/۷۸ eV و ۱۵/۴۴ eV و ۱۵/۶۶ eV قرار دارند.



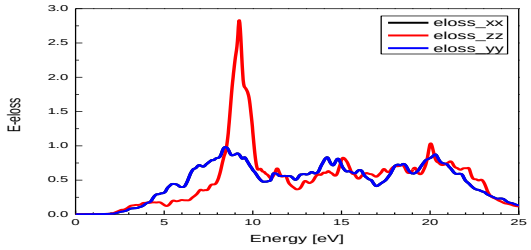

شکل۵: قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک برای ترکیب *BNT*



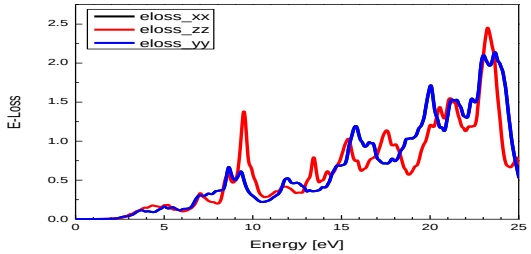

شکل۶: قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک برای ترکیب *BNZ*

مشاهده می شود که نوسانات پلاسمونی در BNZ بیشتر از BNT است.

شکل های ۷ و ۸ تابع اتلاف انرژی را برای دو ترکیب نشان می دهند. با توجه به این شکل‌ها می توان دریافت که قله‌ی پلاسمونی در راستای z برای ترکیب BNT در انرژی ۹/۲۴eV و در ترکیب BNZ در انرژی ۲۲/۹eV ، همچنین در راستای x و y برای ترکیب BNT در انرژی ۸/۵۰eV و در ترکیب BNZ در انرژی ۳۲/۵۳eV رخ داده است، که بیان کننده وجود یکی از فرکانس‌های تحریک پلاسمونی در این انرژی است.




شکل۷:تابع اتلاف انرژی برای *BNT*



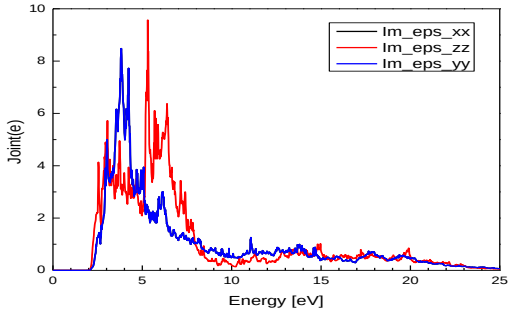

شکل۸:تابع اتلاف انرژی برای *BNZ*



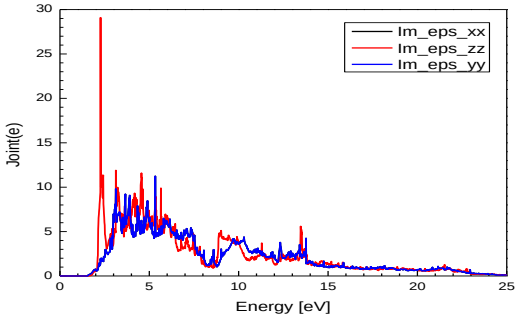
[ Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-03 ]

در شکل‌های ۹ و ۱۰ شدت انتقال بین نواری $J_{ev}(E)$ برای دو ترکیب نشان داده شده است. ماکزیمم شدت انتقال برای ترکیبات BNT و BNZ در راستای x و y برابرند و به ترتیب برابر با ۳/۸۲ و۳/۰۶ هستند همچنین ماکزیمم شدت انتقال برای راستای z به ترتیب عبارت از ۵/۳۰ و۲/۱۹ هستند. حدود انرژی ۲۰ eV، شدت انتقال برای هر دو ساختار کاهش می‌یابد و به صفر نزدیکتر می‌گردد.

مشاهده می‌شود که گاف اپتیکی در ترکیبات BNT و BNZ به ترتیب برابر با ۲/۲eV و ۱/۸eV هستند که از گاف الکترونی آنها که به ترتیب ۱/۹eV و ۱/۴۵eV بودند بزرگتر است.




شکل۹: شدت انتقال بین نواری در *BNT*




شکل۱۰: شدت انتقال بین نواری در *BNZ*

همچنین سهم برانگیختگی‌ها در انرژی‌های پایین بیشتر مربوط به راستای z می باشد زیرا چیدمان اتم‌ها در راستای z به گونه‌ای است که اکسیژن در راستای [001] کمی از سطح صفحه بالاتر قرار گرفته است و این منجر به این شده است که فاصله‌ی پیوند بین اکسیژن و تیتانیوم کمتر شود. بنابراین الکترون‌ها آزادی بیشتری برای تحرک دارند که این موضوع باعث می شود که خواص اپتیکی این ترکیب بیشتر در راستای Z اهمیت پیدا کند. این موضوع برای انرژی‌های پایین صحیح به نظر می‌رسد اما همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود در انرژی‌های بالا اختلاف رفتار این دو جهت خیلی زیاد نیست. این موضوع نشان می‌دهد که این ترکیب برای انرژی‌های بالا آثار غیرهمسانگردی کمتری نسبت به انرژی‌های پایین دارد.

## ۴- نتیجه‌گیری

چگالی حالت‌های کل و توابع دی‌الکتریک، اتلاف انرژی و دیگر خواص الکترواپتیکی ترکیب‌های BNT و BNZ مورد بررسی و مقایسه قرار گرفت. گاف بدست آمده در ترکیب BNT، ۱/۹eV است اما در ترکیب BNZ گاف به ۱/۴۵eV تقلیل می یابد که نشان می‌دهد سهم الکترون‌های Zr-4d در کاهش گاف بیشتر است و این از طرفی با بزرگ بودن شعاع یونی Zr در توافق است. همچنین مشاهده شد که گاف اپتیکی در ترکیبات BNT و BNZ به ترتیب برابر با ۲/۲eV و۱/۸eV هستند که این مقادیر از گاف الکترونی آنها بیشتر است.

## مراجع


[1] R del J., Klaus W.J., Seifert T.P., AntonE.M. and Granzow T., Perspective On the Development of Lead Free.Piezoceramics, *J. Am. Ceram. Soc.*, 2009;92(6): 1153-1177.

[2] Smolensky G. A., Isupov V. A., Agranovskaya A. I., and Krainik N. N.,Sov. Phys. Solid State 2 (1961) 2651.

[3] Vakhrushev S. B., Isupov V. A., Kvyatkovsky B. E., Okuneva N. M., Pronin I. P., Smolensky G. A., and Syrnikov P. P., Ferroelectrics 63 (1985) 153.

[4] Suchanicz J. and Kwapulin'ski J., Ferroelectrics 165 (1995) 249.

[5] Park S. E., Chung S. J., and Kim I. T., Ceram J. Am., Soc.79 (1996) 1290.

[6] Hosono Y., Harada K., and Yamashita Y., Jpn. J. Appl. Phys., Part 1 40 (2001) 5722.

[7] Xu G., Duan Z., Wang X., and Yang D., Cryst J., Growth 275 (2005) 113.

[8] Ge W. *et al.*, Alloys Compd J., 462 (2008) 256.

[9] Yia X., Chen H., Cao W., Zhao M., Yang D., Ma G., Yang C., and Han J., Cryst J., Growth 281 (2005) 364.

[10] Lily K., Prasad K., Yadav K. L., Dielectric and impedance study of lead-free ceramic:(Na0.5Bi0.5)ZrO3, J. Mater. Sci 42 (2007) 6252-9.

[11] Prasad K., Lily K., Kumari K., Yadav K. L.,Hoping type of conduction in (Na0.5Bi0.5)ZrO3, J. Phys. Chem. Solid 68 (2007) 1508-14.

[12] Jones G. O. and Thomas P. A.,ISSN 0108 (2000) 7681.

[13] P. Jaiban1, S. Jiansirisomboon 1, 2, A. Watcharapasorn. Journal of the Microscopy Society of Thailand 5 (1-2), (2012) 42-45.




[ Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-03 ]