

## محاسبه نظری خواص اپتیکی و ساختار الکترونی تیتانات باریوم در فاز مکعبی

حمدا... صالحی<sup>۱</sup>، ناصر شاه‌طهماسبی<sup>۲</sup> و سید محمد حسینی<sup>۲</sup>

۱. گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران اهواز  
۲. گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی، مشهد-ایران

(دریافت مقاله: ۸۳/۳/۲۶ ؛ دریافت نسخه نهایی: ۸۳/۸/۱۱)

### چکیده

در این مقاله ساختار الکترونی و طیف اپتیکی در تیتانات باریوم مکعبی مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) هوهنبرگ، کوهن و شم با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انجام گرفته است. نتایج حاصل، سازگاری خوبی با نتایج تجربی و تئوری دست آمده از روشهای دیگر دارد.

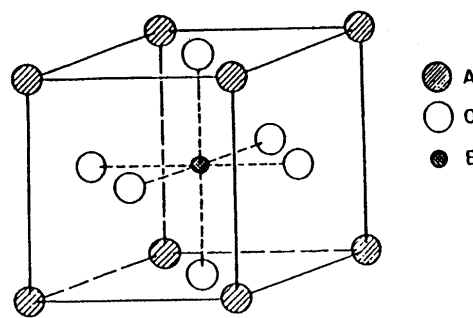
واژه‌های کلیدی: ساختار الکترونی، تیتانات باریوم، FP-LAPW، نظریه تابعی چگالی، GGA

### ۱. مقدمه

تتراگونال با استفاده از روش ترکیب اربیتالهای خطی با تقریب چگالی موضعی و استفاده از پتانسیل تبادل-همبستگی<sup>۱</sup> مطالعه نمودند و سازگاری خوبی برای گاف انرژی به دست آوردند. با این وجود ساختارها در تابع دی الکتریک وابسته به فرکانس،  $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + \epsilon_2(\omega)$  خیلی نزدیک به داده‌های تجربی است. ساها و همکارانش [۱۰،۹] با استفاده از روش TB-LMTO با پتانسیل تبادل-همبستگی بارت-هیدین (Barth-Hedin) فاز مکعبی تیتانات باریوم را مطالعه نمودند و علاوه بر این،  $\epsilon(\omega)$  را محاسبه نمودند، هر چند که در این حالت سازگاری خوبی بین خواص اپتیکی و گاف نواری محاسبه شده با داده‌های تجربی وجود نداشت. با این وجود یک تفاوت مهمی بین نتایج محاسبه شده برای فاز تتراگونال و مکعبی تیتانات باریوم وجود داشت، هر چند که نسبت  $c/a$  در

تیتانات باریوم یکی از مواد سرامیکی مفید برای کاربردهای خازنی و آشکارسازهای مادون قرمز می‌باشد.  $\text{BaTiO}_3$  فروالکتریکی با دمای کوری  $120^\circ\text{C}$  می‌باشد. در دمای بالای  $120^\circ\text{C}$  دارای ساختار پرووسکیت نوع مکعبی است، در حالی که در دمای بین  $5^\circ\text{C}$  تا  $120^\circ\text{C}$  دارای فاز تتراگونال است. مطالعات تجربی روی  $\text{BaTiO}_3$  شامل اندازه‌گیری طیف مادون قرمز [۱]، طیف جذب اشعه X [۲،۳] و خواص اپتیکی [۴،۵] می‌باشد و همچنین شامل تحقیقات ساختاری، خواص الاستیکی و گرمایی می‌باشد [۶]. سهم نظری ساختار الکترونی تیتانات باریوم به وسیله تعدادی محاسبه شد [۷]. اخیراً ساختار الکترونی و خواص اپتیکی تیتانات باریوم به وسیله باگایوکو (Bagayoko) و همکارانش [۸] و ساها (saha) و همکارانش [۱۰،۹] محاسبه شد. باگایوکو و همکارانش ساختار الکترونی  $\text{BaTiO}_3$  را در فاز

۱. Ceperley- Alder



شکل ۱. سلول واحد تیتانات باریوم با ساختار مکعبی پرووسکیت.

بخشهای حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک را به هم مربوط می‌کند و تمام ثابتهای اپتیکی می‌توانند از اینها به دست آیند. یکی از پارامترهای مهم در محاسبات ساختار نوارهای انرژی ثابت شبکه است. این پارامتر به‌طور تجربی اندازه‌گیری شده و در دسترس می‌باشد که معمولاً مورد استفاده قرار می‌گیرد. با این وجود، برای تأیید نظری مسئله نیز باید محاسبه گردد. برای این منظور، انرژی حالت پایه  $BaTiO_3$  به ازای حجمهای مختلف اطراف حجم تعادلی برای هر مورد محاسبه گردیده است و با تغییرات جزئی در حوالی حجم تعادلی وردش داده می‌شود. در برنامه محاسباتی مورد نظر ما، تغییرات انرژی برحسب حجم از طریق معادله حالت مورناگون داده می‌شود.

## ۲. روش محاسبات

ساختار الکترونی تیتانات باریوم در فاز مکعبی به‌طور تجربی و نظری با استفاده از روشهای مختلفی مطالعه شده است [۸ و ۱۱-۱۵] فاز پارا الکتریک مکعبی و متعلق به گروه فضایی  $Pm-3m$  می‌باشد (شکل ۱). سلول واحد مکعبی شامل یک ملکول است که اتم  $Ba$  در مکان  $a(0,0,0)$ ، اتم  $Ti$  در مرکز  $a(0,0,0)$ ،  $a(0,0,0)$  و سه اتم اکسیژن در سه مرکز وجوه با مختصات  $a(0,0,0)$ ،  $a(0,0,0)$ ،  $a(0,0,0)$  و  $a(0,0,0)$  قرار گرفته‌اند. ثابت شبکه  $7.57 \text{ \AA}$  است [۱۶، ۱۱].

محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی هوهنبرگ، کوهن وشم با تقریب شیب تعمیم یافته با پتانسیل تبادل-همبستگی (Perdew) [۱۷] و با نرم افزار WIEN2k-02 انجام گرفته است [۱۸]. این محاسبات به ازای پارامترهای زیر انجام شده است.

$$G_{min} = 7/78 \text{ و } R_{MT}(Ti) = 1/4 \text{ a.u. , } R_{MT}(O) = 1/8 \text{ a.u.}$$

$$R_{MT}(Ba) = 2/2 \text{ a.u. , } G_{max} = 14, R_{kmax} = 7$$

با توجه به این که این برنامه توانایی استفاده از سه نوع تقریب را برای محاسبه پتانسیل همبستگی - تبادل دارا می‌باشد و به خاطر فراهم آوردن زمینه‌ای برای مقایسه میزان تأثیر این

فاز تتراگونال خیلی نزدیک به واحد است. با این حال در هیچ کدام از این محاسبات پتانسیل کامل نبود. لذا در اینجا انجام یک محاسبه دقیق برای خواص اپتیکی تیتانات باریوم لازم می‌باشد. ما این محاسبات را با استفاده از روش FP-LAPW که در آن هیچ تقریبی روی پتانسیل اعمال نمی‌شود انجام دادیم. در این روش حالت‌های مغزه رفتار کاملاً نسبیته و حالت‌های والانس رفتار شبه نسبیته دارند. رفتار اپتیکی جامدات تنها به الکترونهای آزاد بستگی ندارد، بلکه متأثر از همه الکترونهای موجود در جامد است. تابع دی الکتریک به گونه حساسی به ساختار نواری الکترونی بلور بستگی دارد و بررسیهای تابع دی الکتریک، با استفاده از طیف نمایی اپتیکی، در تعیین ساختار نواری کلی بلور بسیار سودمند است. در حقیقت، طیف نمایی اپتیکی در دهه اخیر به عنوان مهمترین وسیله تجربی برای تعیین ساختار نواری گسترش یافت. در ناحیه‌های طیفی فروسرخ، مرئی و فرابنفش، بردار موج تابش در مقایسه با کوتاهترین بردار شبکه وارون بسیار کوچک است و از این رو این بردار موج را معمولاً می‌توان صفر فرض کرد. در نتیجه با بخشهای حقیقی  $\epsilon_1$  و موهومی  $\epsilon_2$  تابع دی الکتریک که به صورت  $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$  نیز نوشته می‌شود، سروکار خواهیم داشت. سهم موهومی تابع دی الکتریک،  $\epsilon(\omega)$ ، مستقیماً ناشی از گذارهای بین نواری است واز فرمول کوبو-گرین‌وود (Kubo-Greenwood) به دست می‌آید [۸].

قسمت حقیقی تابع دی الکتریک هم از رابطه کرامرز-کرونیک به دست می‌آید، بنابراین روابط کرامرز-کرونیک

جدول ۱. پارامترهای ساختاری محاسبه شده در کار حاضر و مقایسه آن با نتایج دیگران برای تیتانات باریوم مکعبی.

	FP-LAPW GGA۹۶	FP-LAPW GGA۹۱	FP-LAPW LDA	تجربی [۱۷، ۱۶، ۹]	نظری [۲۱]LDA	تجربی [۲۰، ۱۹]	pseudopotential [۱۵]
a (au)	۷/۵	۷/۶۱	۷/۴۴	۷/۵۷	۷/۴۵	۷/۵۶	۷/۴۵۶
B(Gpa)	۱۸۸/۶۲۲۶	۱۸۴/۶۳۷۷	۱۴۵/۷۷۷۰	۱۷۳	۱۹۵	-	-
B'(Gpa)	-۲/۷۸۰۴	-۱/۹۷۸۰	-۱/۹۱۴۳	-	-	-	-
k(m <sup>۲</sup> /N)	۵/۳×۱۰ <sup>-۱۴</sup>	۵/۴×۱۰ <sup>-۱۴</sup>	۶/۹×۱۰ <sup>-۱۴</sup>	۶/۴×۱۰ <sup>-۱۴</sup>	۵/۱×۱۰ <sup>-۱۴</sup>	-	-
E <sub>0</sub> (Ry)	-۱۸۴۳۸/۶۳	-۱۸۴۴۱/۶۴	-۱۸۴۱۹/۸۹	-	-	-	-

پذیری، انرژی حالت پایه بلور و مشتق مدول حجمی نسبت به فشار با دو تقریب چگالی موضعی و شیب تعمیم یافته محاسبه شد و نتایج مقایسه شدند این نتایج در جدول ۱ با داده‌های تجربی و نظری دیگران مقایسه شده است. در این جدول، مشاهده می‌شود که مدول تراکمی در تقریب شیب تعمیم یافته به مقادیر تجربی و نظری نزدیکتر می‌باشد در حالی که در تقریب چگالی موضعی، اختلاف قابل توجهی با مقادیر تجربی و نظری دارد. این جدول، همچنین گویای آن است که ثابت شبکه‌ای که با استفاده از روش FP-LAPW و با تقریب چگالی موضعی به دست آمده است کمتر از مقادیر تجربی است که این امر به کاهش حجم در این روش نسبت به روشهای مذکور مربوط می‌شود.

همان طور که در جدول ۱ مشاهده می‌شود، ثابت شبکه‌ای که با استفاده از روش FP-LAPW و با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA۹۶) به دست آوردیم به مقدار تجربی نزدیکتر است. شاید این تفاوت را بتوان به فشار مجازی نسبت داد.

نتایج مربوط به مقادیر نظری و تجربی طول پیوند در جدول ۲ ارائه شده است. نتایج این جدول بیانگر آن است که نزدیکترین فاصله بین اتمها در تمام تقریبه‌ها در حالتی که با استفاده از ثابت شبکه تجربی محاسبه شده‌اند بدون توجه به نوع تقریب یکسان می‌باشد و همین موضوع برای حالتی که با استفاده از ثابت شبکه نظری محاسبه شده‌اند صادق است یعنی نزدیکترین فاصله بین اتمها به نوع تقریب اعمالی برای پتانسیل تبدیلی - همبستگی وابسته نیست و تنها به ثابت‌های شبکه بستگی دارد.

تقریبه‌ها، کلیه محاسبات ساختار الکترونی در چار چوب هر سه تقریب انجام گردید که نتایج دلالت بر موفقیت بیشتر روش GGA۹۶ دارد. بنابراین، این نتایج زمینه خوبی را برای تصمیم گیری در مورد انتخاب روش محاسباتی بهینه برای ساختار الکترونی تیتانات باریوم در فازهای مورد نظر به دست می‌دهد.

### ۳. نتایج

#### الف- ساختار الکترونی و خواص ساختاری

در این روش نظری، تعداد نقاط k مورد استفاده در ناحیه اول بریلوئن برابر ۴۰۰ است که این با استفاده از یک k-mesh ۷×۷×۷، مطابق با ۲۰ نقطه k در منطقه کاهش یافته برای این ساختار می‌باشد. پارامتر همگرایی، Rk<sub>max</sub>، برابر ۷ انتخاب شده است. همگرایی را بر مبنای انرژی قراردادده‌ایم که با ۹ تکرار از مرتبه ۰/۰۰۰۱۶ ریدیرگ به همگرایی رسیدیم.

یکی از پارامترهای مهم در محاسبات ما ثابت شبکه است که برای تایید نظری مسئله نیز باید محاسبه گردد. برای این منظور، انرژی حالت پایه BaTiO<sub>۳</sub> به ازای حجمهای مختلف اطراف حجم تعادلی برای هر مورد محاسبه گردیده است و با تغییرات جزئی در حوالی حجم تعادلی وردش داده می‌شود. در این جا تغییرات انرژی بر حسب حجم از طریق معادله حالت مورناگون داده می‌شود. در این رشته محاسبات، ابتدا با استفاده از معادله حالت مورناگون وابستگی انرژی به حجم برای تقریبه‌های مختلف محاسبه گردید.

سپس با به کار بردن معادله مورناگون برای ساختار مکعبی (در تقریبه‌های مختلف)، ثابت شبکه، مدول حجمی، تراکم

جدول ۲. مقایسه نزدیکترین فاصله بین اتم‌ها (برحسب au) برای تیتانات باریوم مکعبی.

	FP-LAPW GGA۹۶ با ثابت نظری	FP-LAPW GGA۹۶ با ثابت تجربی	FP-LAPW GGA۹۱ با ثابت نظری	FP-LAPW GGA۹۱ با ثابت تجربی	FP-LAPW LDA با ثابت نظری	FP-LAPW LDA با ثابت تجربی	تجربی [۸]
Ba-O	۵/۳۰۳۳	۵/۳۵۲۸۰	۵/۳۰۳۳	۵/۳۵۲۸۰	۵/۳۰۳۳	۵/۳۵۲۸۰	۵/۳۵۴۸
Ti-O	۳/۷۵	۳/۷۸۵	۳/۷۵	۳/۷۸۵	۳/۷۵	۳/۷۸۵	۳/۷۹۱
O-Ti	۳/۷۵	۳/۷۸۵	۳/۷۵	۳/۷۸۵	۳/۷۵	۳/۷۸۵	۳/۷۹۱

جدول ۳. تجزیه بار اتم Ba در تقریبهای مختلف برای باریوم تیتانات مکعبی.

	FP-LAPW GGA۹۶ با ثابت نظری	FP-LAPW GGA۹۶ با ثابت تجربی	FP-LAPW GGA۹۱ با ثابت نظری	FP-LAPW GGA۹۱ با ثابت تجربی	FP-LAPW LDA با ثابت نظری	FP-LAPW LDA با ثابت تجربی
بار کل Ba	۵۶	۵۶	۵۶	۵۶	۵۶	۵۶
بار داخل کره مافین-تین برای Ba	۵۲/۰۰۲۱۳	۵۲/۰۰۲۱۳	۵۲/۰۰۳۴۳	۵۲/۰۰۳۴۳	۵۱/۹۹۷۹۶	۵۱/۹۹۷۹۶
بار مغزه برای Ba	۴۵/۸۴۹۳۳۱۷	۴۵/۸۵۷۷۷۳	۴۵/۸۴۹۵	۴۵/۸۷۳۶۰۹	۴۵/۸۶۴۳۴۸	۴۵/۸۸۴۳۴۸
بار والانس برای Ba	۶/۱۵۲۸۱۳	۶/۱۴۴۳۵۷	۶/۱۵۳۹۳۰	۶/۱۲۹۸۲۱	۶/۱۳۳۶۱۲	۶/۱۱۳۶۱۲
بار خارج از کره مافین-تین برای Ba	۳/۹۹۸۱۶	۳/۹۹۸۱۶	۳/۹۹۶۸۶۸	۳/۹۹۶۸۶	۴/۰۰۲۲۳	۴/۰۰۲۲۳
مجموع بار داخل و خارج کره مافین-تین برای Ba	۵۶/۰۰۰۲۹	۵۶/۰۰۰۲۹	۵۶/۰۰۰۲۹	۵۶/۰۰۰۲۹	۵۶/۰۰۰۱۹	۵۶/۰۰۰۲۹
$LM_{max}$	۵	۵	۵	۵	۵	۵

جدول ۴. تجزیه بار اتم Ti در تقریبهای مختلف برای باریوم تیتانات مکعبی.

	FP-LAPW GGA۹۶ با ثابت نظری	FP-LAPW GGA۹۶ با ثابت تجربی	FP-LAPW GGA۹۱ با ثابت نظری	FP-LAPW GGA۹۱ با ثابت تجربی	FP-LAPW LDA با ثابت نظری	FP-LAPW LDA با ثابت تجربی
بار کل Ti	۲۲	۲۲	۲۲	۲۲	۲۲	۲۲
بار داخل کره مافین-تین برای Ti	۱۹/۲۲۱۱۱	۱۹/۲۲۱۱۱	۱۹/۲۲۲۷۹	۱۹/۲۲۲۷۹	۱۹/۲۱۶۷۳	۱۹/۲۱۶۷۳
بار مغزه برای Ti	۱۰/۰۷۷۶۴۹	۱۰/۰۹۲۷۸۱	۱۰/۰۷۶۷۱	۱۰/۱۲۷۵۵۶	۱۰/۰۸۹۱۶۱	۱۰/۱۱۹۱۶۱
بار والانس برای Ti	۹/۱۴۳۴۶۱	۹/۱۲۸۳۲۹	۹/۱۴۶۰۸۰	۹/۰۹۵۲۳۴	۹/۱۲۷۵۶۹	۹/۰۹۷۵۶۹
بار خارج از کره مافین-تین برای Ti	۲/۷۷۹۰۳	۲/۷۷۹۰۳	۲/۷۷۷۳۵	۲/۷۷۷۳۵	۲/۷۸۳۴۰	۲/۷۸۳۴۱
مجموع بار داخل و خارج کره مافین-تین برای Ti	۲۲/۰۰۰۱۴	۲۲/۰۰۰۱۴	۲۲/۰۰۰۱۴	۲۲/۰۰۰۱۴	۲۲/۰۰۰۱۲	۲۲/۰۰۰۱۴
$LM_{max}$	۵	۵	۵	۵	۵	۵

یونی آن،  $A^{+۲}B^{+۴}O_۳^{-۶}$  پیدا کردیم که این می‌تواند ناشی از هیبریداسیون بین اربیتالهای p اتم اکسیژن و d اتم تیتان باشد که مقداری از بارهای والانس تیتان را گرفته و بار والانس تیتان کمتر از ۴ می‌گردد. بر اساس محاسبات انجام شده در این بخش می‌توان نتیجه گرفت که در بیشتر موارد، روش FP-LAPW با تقریبهای شیب تعمیم‌یافته در مقایسه با روشهای شبه پتانسیل، چگالی موضعی و TB-LMTO می‌تواند به نتایج بهتری منجر شود.

آنچه از این محاسبات بر می‌آید این است که بار مؤثر برای باریوم به مقدار یونی آن نزدیک است و در تمام تقریبها تقریباً یکسان است و همین طور در مورد بار مؤثر اتمهای تیتان و اکسیژن (جداول ۳، ۴ و ۵). بنابر این با در نظر گرفتن محاسبات خود-سازگار، بارهای والانس در محدوده کره‌های اتمی مختلف، فرمول شیمیایی برای این سیستم را می‌توان به صورت  $Ba^{۱/۷۳}Ti^{۲/۰۴}O_۳^{-۱/۷۲}$  نوشت بنابراین ما یک انحراف از فرمول

جدول ۵. تجزیه بار اتم O در تقریبهای مختلف برای باریوم تیتانات مکعبی.

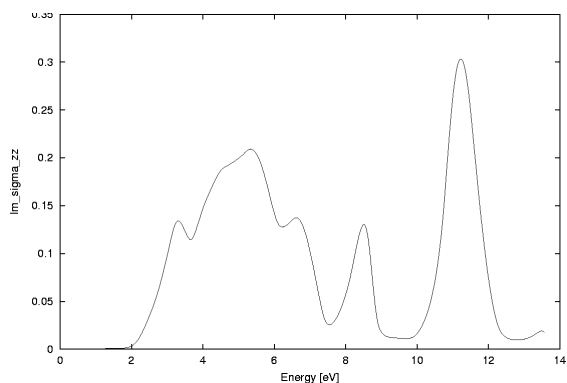
	FP-LAPW GGA96 با ثابت نظری	FP-LAPW GGA96 با ثابت تجربی	FP-LAPW GGA91 با ثابت نظری	FP-LAPW GGA91 با ثابت تجربی	FP-LAPW LDA با ثابت نظری	FP-LAPW LDA با ثابت تجربی
بار کل O	۸	۸	۸	۸	۸	۸
بار داخل کره مافین-تین برای O	۷/۰۳۷۲۸	۷/۰۳۷۲۸	۷/۰۳۹۶۰	۷/۰۳۹۶	۷/۰۲۶۰۵	۷/۰۲۶۰۵
بار مغزه برای O	۱/۲۹۰۷۳۳	۱/۳۰۹۹۴۳	۱/۲۹۰۸۷۹	۱/۳۳۸۵۸۳	۱/۳۱۳۵۰۱	۱/۳۶۱۲۰۵
بار والانس برای O	۵/۷۴۶۵۴۷	۵/۷۲۷۳۳۷	۵/۷۴۸۷۲۱	۵/۷۰۱۰۱۷	۵/۷۱۲۵۴۹	۵/۶۶۴۸۴۵
بار خارج از کره مافین-تین برای O	۰/۹۶۲۷۴	۰/۹۶۲۷۴	۰/۹۶۰۴۲	۰/۹۶۰۴۲	۰/۹۷۳۹۷	۰/۹۷۳۹۷
مجموع بار داخل و خارج کره مافین-تین برای O	۸/۰۰۰۰۲	۸/۰۰۰۰۲	۸/۰۰۰۰۲	۸/۰۰۰۰۲	۸/۰۰۰۰۲	۸/۰۰۰۰۲
LM <sub>max</sub>	۶	۶	۶	۶	۶	۶

### ب- خواص اپتیکی

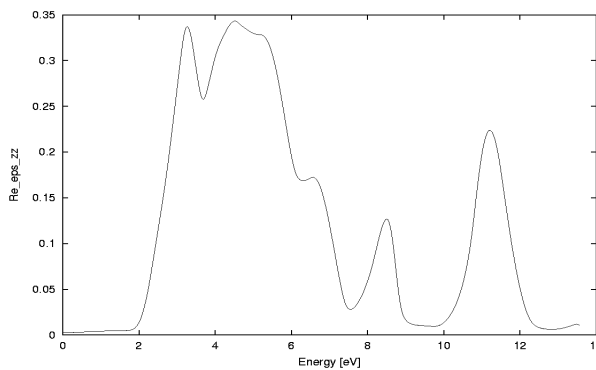
ما محاسبه چگالی حالتی کل را انجام دادیم که سازگاری خوبی با محاسبات کسانی که قبلاً با روشهای دیگر انجام داده‌اند دارد [۹۸]. پهنای باند والانس را  $5/2 \text{ eV}$  برای فاز مکعبی به دست آوردیم که کمتر از مقدار تجربی  $6 \text{ eV}$  [۲] است. قله‌های به دست آمده در چگالی حالتها به صورت زیر است. حالت‌های P اتم باریوم در حدود  $10 \text{ eV}$  زیر تراز فرمی قرار دارند در حالی که اربیتالهای P اتم اکسیژن مشارکت عمده‌ای در بالای نوار والانس دارند و در محدوده بین  $0 \text{ eV}$  تا  $4/7 \text{ eV}$  زیر انرژی فرمی است و هیبریداسیون قوی با حالت‌های d اتم تیتان دارد.

توابع اپتیکی بین نواری با استفاده از برنامه WIEN۲K در شکل‌های ۲ و ۳ نشان داده شده است. سهم حقیقی تابع دی الکتریک قله‌های بزرگی را در  $3/2 \text{ eV}$ ،  $4/05 \text{ eV}$ ،  $11/57 \text{ eV}$ ،  $8/05 \text{ eV}$  به وجود می‌آورد. قله  $3/2 \text{ eV}$  مشخصه گذار از O<sub>2</sub>P به نوار Ti<sup>3d</sup>-t<sub>2g</sub> و از O<sub>2</sub>P به نوار d-Ti<sup>3e<sub>g</sub></sup> می‌باشد که هر دو در نقطه  $\Gamma$  می‌باشند. قله بزرگ بعدی نیز به دلیل گذار از O<sub>2</sub>P به نوار Ti<sup>3d</sup>-e<sub>g</sub> در نقطه  $\Gamma$  می‌باشد. گذارهای ناشی از فرکانسهای پایین با نتایج تجربی [۵] سازگاری بیشتری دارد و گذارهای ناشی از فرکانس بالا به دلیل این که از نوارهای رسانش با انرژی بالا صرف نظر می‌شود با نتایج تجربی سازگاری مناسبی ندارد. قله‌های بعدی نیز می‌تواند ناشی از گذار در فرکانسهای بالا باشد. لذا ترازهای انرژی در

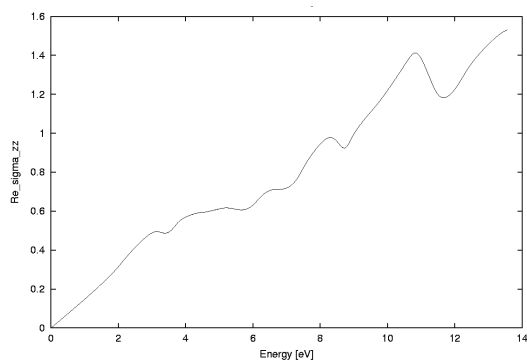
این محدوده دارای رسانندگی اپتیکی بسیار ضعیفی می‌باشند. پیکهای فوق بیانگر این است که در این محدوده رسانندگی اپتیکی بسیار ضعیف است، یعنی رسانندگی اپتیکی با ثابت دی الکتریک نسبت عکس دارد که شکل‌های ۲ و ۳ به نوعی بیانگر این موضوع می‌باشند. در این محدوده که ثابت دی الکتریک دارای پیک است بدان معنا است که انرژی ترازها مانع عبور امواج الکترومغناطیسی و در عوض جذب آن می‌شوند و به فوتون تبدیل می‌گردد و انرژی لایه‌ای بیشتری از خود نشان می‌دهند. یعنی اگر انرژی فوتون تابشی از گاف انرژی ماده کمتر باشد ماده شفاف عمل می‌کند و فوتون‌هایی که دارای انرژی برابر گاف ماده باشند جذب می‌شوند و ماده به صورت کدر عمل می‌کند. سهم موهمی تابع دی الکتریک قله بزرگی را حدود  $3 \text{ eV}$  دارد و قابل مقایسه با نتایج مرجع [۲۲] می‌باشد. خواص به دست آمده برای  $\epsilon_1(\omega)$  و  $\epsilon_2(\omega)$  با استفاده از داده‌های مراجع [۸،۹] سازگاری نسبتاً خوبی با داده‌های تجربی دارد. پیک منحنی  $\epsilon_1(\omega)$  (Re $\epsilon$ ) محاسبه شده توسط ما قابل مقایسه با داده‌های تجربی که در حدود  $4 \text{ eV}$  است می‌باشد. در حالی که مقدار داده‌های مرجع ۹ خیلی کمتر از داده‌های تجربی است. بنابراین برای فاز مکعبی نتایج ما سازگاری بهتری در مقایسه با کار ساها و همکارانش [۹] دارد. لذا می‌توان در مجموع چنین نتیجه گرفت که روش FP-LAPW سازگاری نسبتاً خوبی با مقادیر تجربی به دست آمده برای Re $\epsilon$  و Im $\epsilon$  دارد.



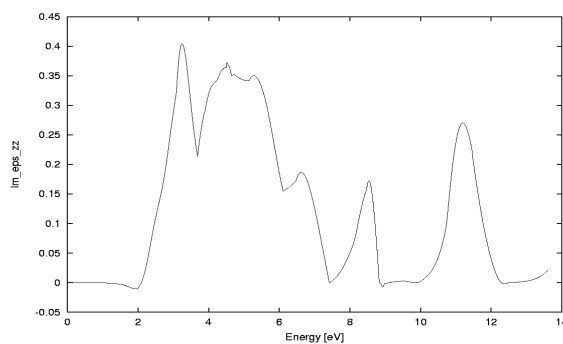
(الف)



(الف)



(ب)



(ب)

شکل ۳. رسانندگی اپتیکی بر حسب انرژی برای  $BaTiO_3$  مکعبی در فاز پارالکتریک. (الف) قسمت موهومی رسانندگی  $Im\sigma$  (ب) قسمت حقیقی رسانندگی،  $Re\sigma$ .

شکل ۲. طیف اپتیکی از تابع دی الکتریک،  $\epsilon$ ، به عنوان تابعی از انرژی برای  $BaTiO_3$  مکعبی. (الف) قسمت حقیقی،  $Re\epsilon$ ، از تابع دی الکتریک و (ب) قسمت موهومی،  $Im\epsilon$ ، تابع دی الکتریک.

### مراجع

1. W G Spitzer et al., *Phys. Rev.* **126** (1962)1710; J L Servoin et al., *Phys. Rev. B* **22** (1980) 5501.
2. P Pertosa et al., *Phys. Rev. B* **18** (1978) 5177.
3. P G Perkins and D M Winter, *J. Phys. C* **16** (1983) 3481.
4. M Cardona, *Phys. Rev.* **A140** (1965) 651
5. D Bauerle, W Braun, G Sprussel and EE Koch, *Phys. B* **29** (1978) 179.
6. T Mitsui and W B Westphal, *Phys. Rev.* **124** (1961) 1354.
7. D Bagayoko, GL Zhao, J D Fan and J T Wang, *J. Phys. Condens Matter* **10** (1998) 5645-5655; S Shah and T P Sinha et al., *Phys. Rev B* **62** (2000-I) 8828.
8. D Bagayoko, GL Zhao, J D Fan and J T Wang, *J. Phys. Condens. Matter* **10** (1998) 5645-5655.
9. S Shah and T P Sinha et al., *Phys. Rev B* **62** (2000-I) 8828.
10. S Saha et al., *J. Phys. Condens. Matter* **12** (2000) 3325.
11. S H Wemple, *Phys. Rev. B* **2** (1970) 79.
12. D C Langreth and J P Perdew, *Phys. Rev.* **B21** (1980) 5469.
13. D C Langreth and J P Perdew, *Phys. Rev.* **B15** (1997) 2884.
14. D Balzar, H Ledbetter, P W Stephens, E T Park and J L Routbort, *Phys. Rev.* **B59** (1999) 5.
15. R D King-Smith and D Vanderbilt, *Phys. Rev.* **B49** (1994) 5828.
16. R E Cohen and H Krakaur, *Phys. Rev.* **B42** (1990) 6416.
17. J P Perdew and A Zunger, *Phys. Rev. B* **23** 5 (1981) 48.
18. P Blaha, K Schwarz, *WIEN2k*, Vienna University Of Technology Austria (2002).
19. P H Ghosez, X Gonze and J P Michenaud, *Ferroelectric* **153** (1994) 91-96.
20. P-Pertosa and F M Michel-calendini, *Phys. Rev.* **B17**, **2** (1978) 11.
21. P H Ghosez, X Gonze and J P Michenaud, *Ferroelectric* **164** (1995) 113-121.
22. C Manuel, *Phys. Rev. A* **140** (1965) 651.