

بررسی خواص اپتیکی $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ با استفاده از نظریه تابعی چگالیبرزوئی^۱، مریم^۱؛ قربانی^۱، شعبان رضا^۱؛ واحدی فخرآباد^۱، داوود^۲؛ عربی^۱، هادی^۱

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

گروه فیزیک، دانشگاه نیشابور، نیشابور

چکیده

در این مقاله خواص اپتیکی ترکیب $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ بررسی شده است. قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضریب های شکست و خاموشی، تابع اتلاف انرژی و بازتابندگی با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریه تابعی چگالی و بر اساس تقریب شیب تعمیم یافته تعیین شده اند. با استفاده از نتایج بدست آمده برای طیف عبور فوتون، انرژی هایی که رفتار شفاف ماده در آن مشاهده می شود مشخص شدند و ضریب شکست ماده محاسبه شد. نتایج محاسبات نشان داد که خواص اپتیکی ترکیب $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ ناهمسانگرد است.

واژه های کلیدی: نظریه تابعی چگالی، ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ ، خواص اپتیکی، کوانتوم اسپرسو

Optical properties of $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ by density functional theoryBarzoei, Maryam¹; Ghorbani, ShabanReza¹; Vahedi Fakhrabad, Davoud²; Arabi, Hadi¹¹Department of Physics, Faculty of Science, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad²Department of Physics, Nyshabur University, Nyshabur

Abstract

In this article, optical properties of $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ such as real and imaginary part of dielectric function, refractive index and extinction, energy loss and reflectivity have been investigated by using pseudo-potential method within the framework of density functional theory (DFT) with the generalized gradient approximation (GGA). The refractive index and the transparent regions in photon spectrum were specified. The results of calculations show that the properties of $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ are anisotropic.

Keywords: density functional theory, $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$, Optical properties, Quantum Espresso

خواص اپتیکی ترکیب $FeSe_{1-x}Te_x$ برای $x=0$ و $x=1$ بررسی شده است [۴و۵]. در این مقاله خواص این ترکیب برای $x=0.5$ بررسی می گردد.

روش محاسبات

بررسی ساختار اتمی و خواص اپتیکی ترکیب $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ با استفاده از نظریه تابعی چگالی بر مبنای روش شبه پتانسیل بر پایه موج تخت [۵] به کمک کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام شده است. شبه پتانسیل مورد استفاده از نوع شیب تعمیم یافته (GGA) می باشد. تقسیم بندی منطقه بریلوئن به روش منخورست-پک

مقدمه

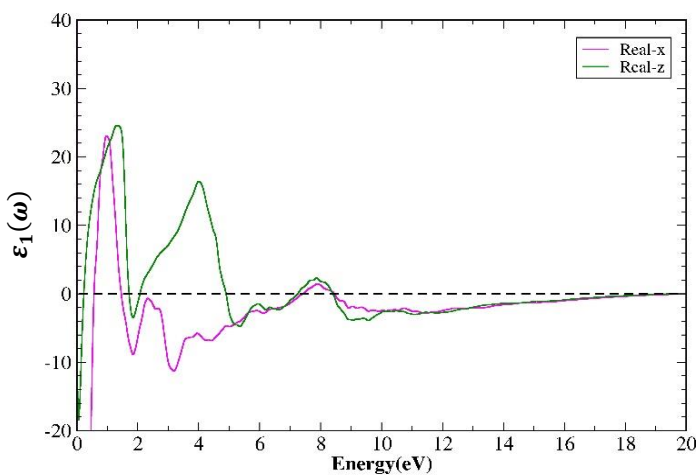
کشف $LaOFeAs$ در سال ۲۰۰۸، به عنوان یک ابررسانا دمای بالا، سرآغازی جهت مطالعات ابررساناهای پایه آهن شد [۱]. ترکیب $FeSe - \alpha$ ساده ترین ساختار را در بین ابررساناهای پایه آهن دارد. مطالعات تجربی انجام شده نشان داد که در ترکیب $FeSe_{1-x}Te_x$ با افزایش Te دمای بحرانی افزایش می یابد به طوری که ترکیب $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ با $T_c = 15K$ بیشترین دمای بحرانی را دارد. همچنین مشاهده شده است که افزایش بیشتر Te باعث کاهش دمای بحرانی می شود [۲].

نتایج به دست آمده برای قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی-الکتریک تعیین کرد.

نمودار قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک در راستای X و Z به ترتیب در شکل های ۲ و ۳ رسم شده است. نتایج نشان می-دهد که بخش های موهومی و حقیقی تابع دی الکتریک در دو راستای X و Y بر هم منطبق اند. بنابراین این ساختار در صفحه X-Y همسانگرد است.

بخش موهومی تابع دی الکتریک $\epsilon_2(\omega)$ جذب نور را نشان می-دهد و قله های موجود در نمودار آن نشان دهنده گذارهای اپتیکی بین نواری است. اولین قله $\epsilon_2(\omega)$ نشان دهنده اولین گذار از نوار ظرفیت به نوار رسانش است که در راستای محور X در انرژی ۱.۲۶۱ eV و در راستای محور Z در انرژی ۱.۵۹۴ eV ظاهر شده است. قسمت موهومی تابع دی الکتریک در انرژی های بالاتر از 18 eV صفر می شود بنابراین در این نواحی ماده تاریک است و هیچ موج الکترومغناطیس در آن نفوذ نمی کند و می توان از این ماده در این انرژی ها به عنوان یک ماده جاذب استفاده کرد.

با توجه به شکل ۲ نمودار سهم حقیقی تابع دی الکتریک در بازه-های زیادی از انرژی منفی است. در ناحیه هایی که $\epsilon_1(\omega)$ منفی است امواج منتشر نمی شوند و فرآیندهای جذب و اتلاف صورت می گیرد.



شکل ۲: قسمت حقیقی تابع دی الکتریک ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ در جهت محورهای X و Z

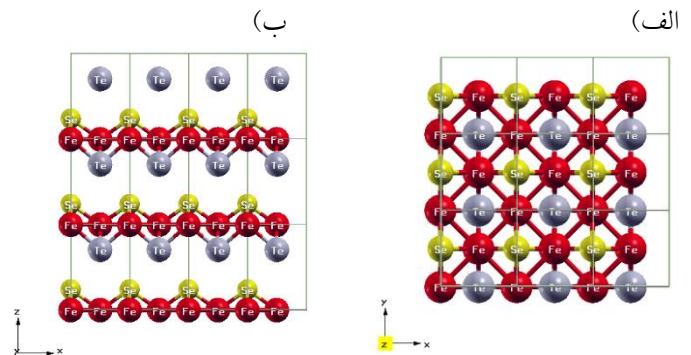
انجام شد. تعداد نقاط k بهینه برابر $14 \times 14 \times 10$ و انرژی قطع بهینه برابر 75 Ry در محاسبات مورد استفاده قرار گرفته است. بازه انرژی جهت بررسی خواص اپتیکی از صفر تا 20 eV در نظر گرفته شده است.

نتایج و بحث

سلول واحد $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ با گروه فضایی P4/nmm دارای دو اتم آهن، یک اتم تلوریم و یک اتم سلنیم است. نتایج پارامترهای شبکه بهینه شده این ساختار در جدول ۱ آمده است که در توافق با نتایج نظری [۶] و تجربی [۷] بدست آمده توسط دیگران است. ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ پس از واهلش در شکل ۱ نمایش داده شده است.

جدول ۱: پارامترهای شبکه ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$

پارامتر شبکه	نتایج این پژوهش	نتایج نظری [۶]	نتایج تجربی [۷]
a (Å)	۳/۷۲۵۶	۳/۷۱۱۵	۳/۷۹۱۳
c (Å)	۵/۴۰۰۳	۵/۷۱۱۸	۵/۹۷۸۴



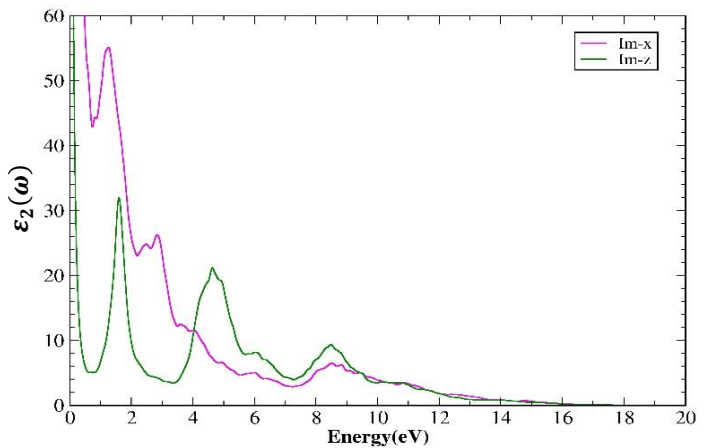
شکل ۱: نمایش ساختار $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ (الف) از نمای بالا (ب) از نمای جانبی

تابع دی الکتریک یک تابع مختلط و توصیف کننده خواص اپتیکی جامدات است و طبق رابطه زیر معرفی می شود:

$$\epsilon = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (1)$$

که قسمت حقیقی و قسمت موهومی توسط روابط کرامز-کرونیگ به هم مربوط می شوند. تمام ثابت های اپتیکی را می توان از روی

افزایش انرژی رو به کاهش است بنابراین ماده پاشندگی ناهنجار دارد و در انرژی های بالاتر از 18 eV از شفافیت کمی برخوردار است. برای انرژی های بالاتر از 18 eV ضریب خاموشی نزدیک به صفر می شود یعنی ماده جاذب خوبی است که با نمودار قسمت موهومی تابع دی الکتریک همخوانی دارد.



شکل ۳: قسمت موهومی تابع دی الکتریک ساختار FeSe_{0.5}Te_{0.5} در جهت محورهای X و Z

ضریب شکست یک تابع مختلط بوده و از رابطه زیر محاسبه می شود:

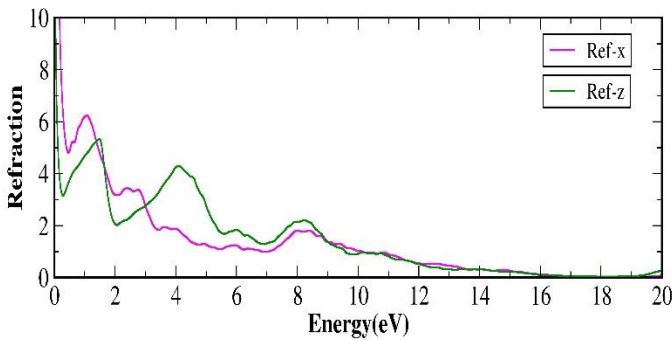
$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \quad (2)$$

که در آن $n(\omega)$ قسمت حقیقی ضریب شکست و $k(\omega)$ قسمت موهومی ضریب شکست یا همان ضریب خاموشی است. ضریب خاموشی معیاری از میزان جذب امواج الکترومغناطیس توسط ماده است. ضریب خاموشی پایین نشان دهنده این است که امواج الکترومغناطیس به آسانی از داخل ماده عبور می کنند [۸]. نتایج بدست آمده برای ضریب های شکست و خاموشی در شکل های ۴ و ۵ رسم شده اند.

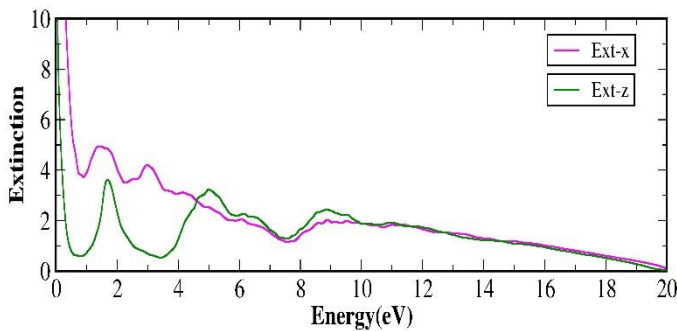
مقدار بخش حقیقی ثابت دی الکتریک در انرژی صفر معرف ثابت دی الکتریک استاتیکی $\epsilon_1(0)$ می باشد که مطابق رابطه ۳ جذر آن را ضریب شکست استاتیکی $n(0)$ می گویند.

$$n(0) = \sqrt{\epsilon_1(0)} \quad (3)$$

مقادیر به دست آمده برای ثابت دی الکتریک استاتیکی و ضریب شکست استاتیکی در راستای محور X به ترتیب برابر ۱۶۲.۱۲۵ و ۱۲.۷۳۲ و در راستای محور Y برابر ۴.۲۰۶- و ۲.۰۵۰ هستند. اگر ضریب شکست با افزایش فرکانس افزایش یابد این رفتار پاشندگی بهنجار و اگر شیب ضریب شکست منفی باشد پاشندگی ناهنجار گفته می شود [۹]. باتوجه به شکل ۴ ضریب شکست با



شکل ۴: قسمت حقیقی ضریب شکست ساختار FeSe_{0.5}Te_{0.5} در جهت محورهای X و Z



شکل ۵: قسمت موهومی ضریب شکست ساختار FeSe_{0.5}Te_{0.5} در جهت محورهای X و Z

تابع اتلاف انرژی یکی از مهم ترین کمیت ها به منظور بررسی خواص ماکروسکوپی و میکروسکوپی جامدات می باشد. تابع اتلاف انرژی متناسب با احتمال اتلاف انرژی در واحد طول برای یک الکترون در حال عبور از محیط است. رابطه تابع دی الکتریک و تابع اتلاف انرژی به صورت زیر است:

$$L_{ij}(\omega) = -Im\left(\frac{1}{\epsilon_{ij}(\omega)}\right) \quad (4)$$

نتایج به دست آمده برای اتلاف در شکل ۶ نشان داده شده است. همان طور که در شکل ۶ مشاهده می شود چندین قله در تابع اتلاف وجود دارد. شاخص ترین قله در تابع اتلاف به عنوان پیک

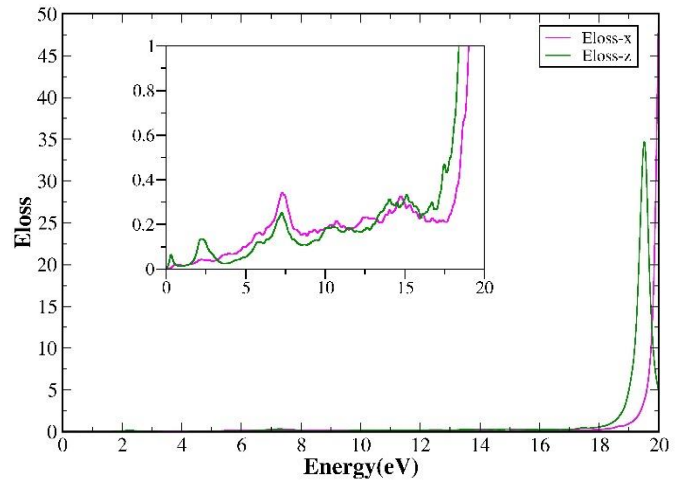
نتیجه گیری

در این پژوهش خواص اپتیکی ساختار $\text{FeSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ در سه راستای x و y و z مطالعه شده است. محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی بر اساس روش شبه پتانسیل با تقریب شبه پتانسیل از نوع شیب تعمیم یافته نشان داد که از ترکیب $\text{FeSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ در انرژی های بالاتر از 18 eV می توان به عنوان ماده جاذب استفاده کرد. ضریب شکست استاتیکی این ترکیب در راستای x برابر 12.732 و در راستای z برابر 2.050 تعیین گردید. پیک پلاسمونی در راستای محور x در انرژی 19.01 eV و در راستای محور z در انرژی 20 eV رخ می دهد. همچنین نتایج به دست آمده نشان دهنده غیرهمسانگردی ماده در راستاهای x و z می باشد.

مرجع ها

- [۱] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, H. Hosono, *J. Amer. Chem. Soc.* **130**(2008), 3296
- [۲] K.W. Yeh, H.C. Hsu, T.W. Huang, P.M. Wu, Y.L.Hung, T.K. Chen, J.Y. Luo, and M.K. Wu, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**(2008), 19-22.
- [۳] الحتوشی، احمد موسی؛ قربانی، شعبان رضا؛ عربی، هادی؛ واحدی فخرآباد، داود: «مطالعه نظری خواص اپتیکی ساختار FeTe با استفاده از محاسبات اصول اولیه»، اولین کنفرانس ملی شیمی کاربردی و نانوشیمی، گناباد، مجتمع آموزش عالی گناباد، ۱۳۹۷.
- [۴] جوادالدیری، رافد؛ قربانی، شعبان رضا؛ عربی، هادی؛ واحدی فخرآباد، داود: «مطالعه نظری خواص اپتیکی ساختار FeSe با استفاده از نظریه تابعی چگالی»، اولین کنفرانس ملی شیمی کاربردی و نانوشیمی، گناباد، مجتمع آموزش عالی گناباد، ۱۳۹۷.
- [۵] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev. A*, **140** (1965) 1133-1138.
- [۶] S.Chandra, A.K.M.A. Islam, arXiv:1008.1448v1
- [۷] R.W. Gomez, V. Marquina, J.L. Perez-Mazariego, R. Escamilla, R. Escudero, M. Quintana, J.J. Hernandez-Gomez, R.Ridaura, M.L. Marquina *J Supercond. Nov. Magn.* **23**(2010) 551-557.
- [۸] ریتس؛ میلفورد؛ کریستی: «مبانی نظری الکترومغناطیس» ترجمه جلال صمیمی، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۸۵.
- [۹] پدورتی، فرانک ال؛ پدورتی، لئون اس: «آشنایی با اپتیک»، ترجمه محی الدین شیخ الاسلامی، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۸۲.
- [۱۰] ابراهیمی، ثمنین؛ هاشمی زاده عقدا، سیدعلی: «مطالعه خواص اپتیکی ترکیبات چهارتایی AlInGaN »، فصلنامه اپتوالکترونیک، سال اول، ۲۸-۲۱، تابستان ۱۳۹۵.

پلاسمونی شناخته می شود که نشان دهنده برانگیختگی های جمعی چگالی بار در بلور است [۱۰]. پیک پلاسمونی در راستای محور x در انرژی 19.01 eV و در راستای محور z در انرژی 20 eV قرار دارد.

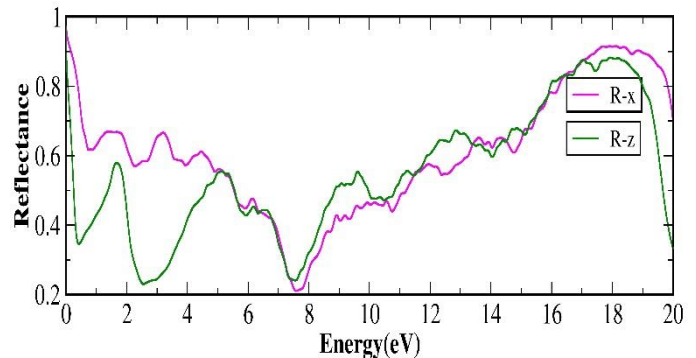


شکل ۶: اتلاف انرژی ساختار $\text{FeSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ در جهت محورهای x و z

ضریب بازتاب نشان دهنده شدت موج بازتابیده نسبت به موج پیشامد است و طبق رابطه زیر به دست می آید:

$$R(\omega) = \frac{|\sqrt{\epsilon(\omega)} - 1|^2}{|\sqrt{\epsilon(\omega)} + 1|^2} \quad (5)$$

نمودار طیف بازتابندگی در شکل ۷ رسم شده است. با مقایسه شکل ۷ و شکل ۲ می توان به این نتیجه رسید در انرژی هایی که تابع دی الکتریک مقداری کمتر از صفر دارد مقدار بازتاب انرژی زیاد است زیرا در این انرژی ها، نور در داخل بلور منتشر نمی شود.



شکل ۷: طیف بازتابی ساختار $\text{FeSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ در جهت محورهای x و z