بررسی ساختار الکترونی، خواص مغناطیسی و اپتیکی نیمرسانای۔Sn ی با استفادہ از نظریهٔ تابعی چگالی xCo_xO₂

منا رستمی، محمدابراهیم قاضی*، مرتضی ایزدیفر؛ دانشگاه شاهرود، دانشکدهٔ فیزیک

دریافت ۹۳/۶/۱۸ پذیرش ۹۴/۴/۸

چکیدہ

در این مقاله ساختارالکترونی و خواص مغناطیسی و اپتیکی نمونههای خالص SnO2 و آلاییده SnO2 و آلاییده یا (۸۰/۰۶۲۵)، ۲/۱۸۵، ۷/۱۲۵ و ۲/۵=X) با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی بررسی می شوند. اثر تهی جای اکسیژن روی خواص ساختاری و مغناطیسی نمونهها نیز بررسی شد. با بررسی خواص مغناطیسی نمونههای آلاییده مشخص شد که افزایش غلظت آلایش سبب افزایش چگالی ترازهای انرژی مربوط به اوربیتالهای Co-۳d در نزدیکی تراز فرمی می شود. بررسی فاز پایدار مغناطیسی نمونههای آلاییده نشان داد که در آلایشهای ۱/۱۲۸٪ و ۲۵٪ فاز پایدار شبکه فرومغناطیس است. حضور تهیجای اکسیژن در نمونهٔ فرومغناطیسی Sno2000. و ۲۵٪ فاز پایدار شبکه فرومغناطیس است. حضور تهیجای اکسیژن در نمونهٔ فرومغناطیسی Sno2000. و ۲۵٪ فاز پایدار شبکه فرومغناطیس گشتاور مغناطیسی یونهای کبالت می شود. بررسی خواص اپتیکی نمونهٔ خالص و نمونههای آلاییده با ۲۵/۵٪، ۱/۵٪ و ۲۵ می تور مغناطیسی یونهای کبالت می شود. بررسی خواص اپتیکی نمونهٔ خالص و نمونههای آلایده با ۲۵/۵٪، ۱/۵٪ و ۲۵٪ می می این داد که با افزایش غلظت آلایش تا ۱/۵٪، گاف نواری اپتیکی کاهش و سپس با افزایش بیش تر آن تا نمونهها، هم چنین ضرایب درآشامی و خاموشی افزایش آلایش تا ۱/۵٪، شدت مربوط به اولین قلهها در طیف تابع دی الکتریک از Set می می باند. با توجه به طیفهای بازتابندگی و ضرب درآشامی مشخص شد که با افزایش غلظت آلایش تا ای Set می می باند. با توجه به طیفهای بازتابندگی و ضریب درآشامی مشخص شد که با افزایش علی تایش تا ۱۲/۵٪ می می بوز فوتون در ناحیهٔ مرئی کاهش می بید.

واژههای کلیدی: نظریهٔ تابعی چگالی، خواص مغناطیسی، اکسید قلع آلاییده با کبالت، خواص اپتیکی، تهیجا

مقدمه

اکسید قلع (SnO₂) یک اکسید نیم_ارسانای شفاف نوع n با ساختار چهارگوشی روتایل و گاف نواری پهن ۳/۶ eV (در دمای اتاق) و مقاومت ویژهٔ کم (Ω.*Cm) ²⁴*Ω.²⁴ – 2) است [۱]. در ترکیب خالص اکسید روی حضور تهی جاهای اکسیژن بهعنوان دهندهٔ نوع n عمل میکنند. بهدلیل این ویژگیها، این ترکیب پتانسیل بسیار خوبی برای کاربردهای متنوع الکتریکی و اپتیکی دارد. بهعنوان مثال از این ترکیب میتوان در ساخت سلولهای خورشیدی، کاربردهای متنوع الکتریکی و اپتیکی دارد. بهعنوان مثال از این ترکیب میتوان در ساخت سلولهای خورشیدی، کاربردهای متنوع الکتریکی و اپتیکی دارد. بهعنوان مثال از این ترکیب میتوان در ساخت سلولهای خورشیدی، کاربردهای متنوع الکتریکی و اپتیکی دارد. بهعنوان مثال از این ترکیب میتوان در ساخت سلولهای خورشیدی، کاربردهای متنوع الکتریکی و اپتیکی دارد. بهعنوان مثال از این ترکیب میتوان در ساخت سلولهای این ورشیدی، کاربردهای مادون قرمز، حسگرهای عفصه تخت، آشکارسازهای مادون قرمز، حسگرهای گازی و ترانزیستورهای لایه نازک فروالکتریک استفاده کرد [۲]، [۴]. از سوی دیگر آلایش اکسید قلع با درصد کمی از عناصر واسطهٔ نظیر Mn و OS منجر به تولید نیم_ارسانای مغناطیسی رقیق شده میشود که از آن میتوان برای ^{*}نویسندهٔ مسؤوان

ساخت قطعات اسپینترونیکی استفاده کرد [۵]. نتایج تجربی گزارش شده بیان گر این واقعیت است که در نیمرساناهای

مغناطیسی رقیق شده، خاصیت مغناطیسی نمونهها بهروش أمادهسازی أنها بستگی دارد [۶]، [۷]. بهعنوان مثال برای گشتاور مغناطیسی نمونههای SnO₂ آلاییده با Co که با روشهای مختلفی سنتز شدهاند، مقادیر متفاوتی گزارش شده است. گروه اوگل و همکاران برای لایههای نازک SnO₂ آلاییده با Co فاز فرومغناطیسی در دمای کوری ۶۵۰ K گزارش کردهاند. گشتاور مغناطیسی این نمونهها در حدود μ_B ۷/۵ بهازای آلایش ۵٪ کبالت گزارش شده است [۸]. همچنین نتایج تحقیقات تجربی نشان داده است که نمونههای SnO₂ آلاییده با Co که با استفاده از روش رسوب لیزر پالسي لايهنشاني شدهاند، رفتار فرومغناطيسي در دماي اتاق نشان ميدهد [٩]، [١١]. گروه يان، بررسي تجربي خواص ${
m Si}_{1}$ مغناطیسی لایههای نازک ${
m Sn}_{0.95}{
m Co}_{0.05}{
m O}_2$ که با استفاده از روش رسوب لیزر پالسی روی زیرلایهٔ (۱۰۰ لایهنشانی شدند، انجام دادهاند [۱۰]. نتایج این بررسی نشان داد که این نمونهها، خاصیت فرومغناطیسی در دمای اتاق داشته و گشتاور مغناطیسی آنها در حدود $1/ au(\mu_B/Co)$ است. حضور تهیجاهای اکسیژن بهعنوان عامل مؤثر در بهبود خاصیت مغناطیسی سیستم معرفی شده است [۱۰]. نتایج بررسی گروه کیم و همکاران نشان داد که نمونههای اکسید قلع آلایش یافته با ۱۰٪ کبالت که با روش رسوب لیزر پالسی تهیه شدهاند، دارای خاصیت فرومغناطیسی با گشتاور مغناطیسی $f(\mu_B/Co)$ ۰/۵۴ در دمای اتاق هستند. برای نمونههای آلایش یافته با غلظت ۲۰٪ کبالت نیز خاصیت فرومغناطیسی در دمای اتاق گزارش شده است [۱۱]. گروه اکس- اف- لیو خواص مغناطیسی نمونههای SnO₂ آلاییده با Co روی زیرلایههای سیلیکونی را گزارش کردند [۱۲]. نتایج اندازه گیریهای این گروه نشان میدهد، همهٔ نمونههای رشد داده شده در راستاهای مختلف بلوری خاصیت فرومغناطیسی در دمای اتاق دارند. همچنین نمونههایی که دارای نقصهای ساختاری بیشتری هستند، گشتاور مغناطیسی اشباع شدهٔ بزرگتری دارند. این بررسی نشان داد که با افزایش زمان باز پخت به دلیل کاهش نقصهای شبکهای خاصیت بلورینگی نمونهها بهبود یافته و خاصیت فرومغناطیسی نمونهها کاهش مییابد. مغناطش اشباع میانگین، برای نمونهٔ SnO2 ألاییده با Co، آلاييده با ٣/٣٣٪ بهدست آمد [١٢]. بررسی خواص مغناطیسی نانو ذرات SnO_2 آلاییده با ٣/٣٣٪ کبالت که بهروش $^{\prime\prime}$ سلژل هیدروگرمایی سنتز شدند، نشان داد که این نمونهها نیز در دمای اتاق خاصیت فرومغناطیسی دارند [۱۳]. گروه فانگ و همکاران خواص اپتیکی و ساختاری نانو ذرات SnO2 آلاییده با Co رشد داده شده با روش سل ژل را بررسی کردند و نشان دادند که با افزایش غلظت Co تا ۲۰٪، اندازهٔ بلورکها افزایش یافته و لبهٔ جذب در ناحیهٔ طیف مرئی و فرابنفش یک جابهجایی قرمز نشان میدهد [۱۴]. براساس نتایج گزارش شده گروه لیو، لبهٔ جذب در لایههای نازک SnO2 آلاییده با Co تا میزان ۱۲٪، ابتدا یک جابهجایی قرمز و سپس بهازای غلظتهای بیشتر، یک جابجایی آبی

نشان داد [۱]. در نمونههای نانوذرات SnO2 آلاییده با CO که با روش رسوب شیمیایی بهوسیلهٔ گروه سیتی اسیلان و همکاران سنتز شدند، افزایش غلظت آلایش تا ۵٪، منجر به یک جابهجایی قرمز در نواحی طیف مرئی و فرابنفش شد [۲]. همچنین درلایههای SnO2 آلاییده با ۱۰، ۲۰ و ۳۰ درصد کبالت تهیه شده بهروش سل ژل مشخص شد که با افزایش آلایش CO، عبور ایتیکی کاهش می بابد [۱۵]. در این مقاله ساختار الکترونی، خواص مغناطیسی و اپتیکی نمونههای حجمی Sn_{1-x}Co_xO₂ (۸/۰۶۲۵، ۱۲۵۵، در این مقاله ساختار الکترونی، خواص مغناطیسی و اپتیکی نمونههای حجمی wienzl (۲۵ (۱۸۷۵) در ۱۸۷۵ و ۱۰ (۲۵ (۲۵ مطالعه شده و اثر تهیجای اکسیژن روی خواص ساختاری و مغناطیسی این نمونهها بررسی شده است.

روش انجام محاسبات

برای انجام این پژوهش از کد محاسباتی WIEN2k که بر پایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی استوار است، استفاده شد. استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی راه حل مناسبی برای حل معادلهٔ شرودینگر است. در این نظریه، تابعی چگالی الکترونی به عنوان متغیر اصلی در نظر گرفته شده و معادلهٔ بس ذرهای به تعدادی معادلهٔ تک ذره تبدیل می شود. سپس این معادلات تک ذرهای با استفاده از روشهای تقریبی حل میشوند. امروزه استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی در حل مسائلی نظير محاسبهٔ انرژی بستگی مولکولها و محاسبهٔ ساختار نواری جامدات و همچنین مسائل مربوط به ابررسانایی و خواص مغناطیسی مواد به امری رایج تبدیل شده است [18]. گام اول در نظریهٔ تابعی چگالی تعیین هامیلتونی کل دستگاه شامل جملات مربوط به جفت شدگی کولنی بین ذرات، اعم از الکترون ها و هسته ها و جملات ناشی از انرژی جنبشی الکترونها و هستهها است. سپس جوابهای معادلهٔ شرودینگر با توجه به تقریبهای اعمال شده در تعیین هاميلتوني بهدست مي أيد [١٧]. بر مبناي تقريب كوهن- شم، از حل معادلات تك ذرهاي كوهن- شم براي الكترونها، مي توان تمام خواص حالت پايه و همچنين انرژي كل دستگاه را محاسبه كرد [۱۹]، [۱۸]. براي حل اين معادلات و تعیین پتانسیل و چگالی حالت نهایی باید مقدار تابعی تبادلی- همبستگی را با در نظر گرفتن اسپین الکترون مشخص نمود. با توجه به این که اندازهٔ این انرژی در مقایسه با انرژیهای دیگر موجود در دسته معادلات کوهن شم کوچک است می توان آن را تقریب زد که در این کار از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) استفاده شده است. برای حل معادلات کوهن – شم روشهای تقریبی زیادی وجود دارد که از جمله میتوان بهروش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل (FL-LAPW) اشاره کرد. نرمافزار WIEN2k از طریق دو مرحله مجزای آمادهسازی و حل خود سازگار به حل دسته معادلات کوهن- شم به کمک روش FL-LAPW می پردازد. بعد از حل کامل این معادلات مجموعهای از توابع موج تکالکترونی بهدست میآید که با استفاده از این توابع میتوان چگالی الکترونی جدید را محاسبه کرد. یکی از روشهای مناسب برای انتخاب توابع موج پایهٔ مناسب (توابع موج تکالکترونی) تقسیم.بندی بلور (سلول واحد) به دو ناحیه با عنوان ناحیهٔ کرههای مافین تین (کرههای بدون هم پوشانی) و ناحیهٔ بین جایگاهی (فضای بین این کرات) است. در روش FL-LAPW مجموعهٔ پایهٔ معرفی شده در داخل کرهٔ مافین تین با شعاع R_m، تلفیق خطی از توابع شعاعی (هارمونیکهای کروی) است و مجموعهٔ پایهٔ معرفی شده در ناحیهٔ بین جایگاهی، توابع موج مربوط به امواج تخت است. بسط بردارموج K در نواحی مافین تین تا $K_{
m max}$ و در نواحی بین جایگاهی تا $G_{
m max}$ (بردارموج قطع) انجام می گیرد [۱۸]. دراین کار مقدار پارامتر R_{mt}.K_{max} برابر با ۷ انتخاب شد. پارامتر R_{mt} برای O ،Sn و Co متناسب با شعاع اتمی مربوط به این عناصر، بهترتیب برابر (a.u) ۱/۹، ۱/۶۵ و ۱/۷۶ در نظر گرفته شدند [۲۰].

مقدار _{max} برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیهٔ بین جایگاهی برابر با (¹- a.u.) ۱۷ انتخاب شد. با توجه به ساختار بلوری SnO₂ (روتایل تتراگونال با گروه فضایی P42/mnm و ثابتهای تجربی SnO₂ (و ساخ/۰ و u+۵/۰) و ساختار بلوری SnO₂) جایگاه اتمهای SnO₂ (روتایل تتراگونال با گروه فضایی P42/mnm و ثابتهای تجربی SnO₂ (۵.۰ و u–۵/۰) و (۰/۵.۰/۵.۴) (u. u. u.) کنیز در (۵.۰ و u–۵/۰ و u+۵/۰) و (u. u. u.) با ۳۰۰/۳۰۷ (u. u.) انتخاب شدند [۲۱]، [۲۳]. محاسبات مربوط به ساختار SnO₂ آلاییده با ۲/۵/*٪، ۱/۵/۰/۰ (u. u.) (u. u.) با ۲۰۰۷ (u. u.) با ۲۰۰۷ (u. u.) در یک ایجاه شد. لازم به ذکر است که جانشین سازی یک، دو، سه و چهار یون (۱۸/۵۰ و ۲۵/۰ <i>ز* و ۲۵/۰ کرالت در یک ابریاختهٔ ۲×۲×۲ انجام شد. لازم به ذکر است که جانشین سازی یک، دو، سه و چهار یون Co در ابریاختهٔ میزبان بهترتیب منجر به ایجاد ساختار اکسید قلع آلاییده با مقادیر آلایش مذکور می شود. برای مقادیر آلایش ۲۵/۶/۰ و ۲۵/۱۰ از ۲۵/۱۰ به دلیل فرد بودن تعداد اتمهای آلایش یافته در ابریاختهٔ ۲×۲×۲ محاسبات مربوط به فاز آلایش مذکور می شود. برای مقادیر آلایش ۲۵/۶/۰ و ۲۵/۱۰ به دریان بهترتیب منجر به ایجاد ساختار اکسید قلع آلاییده با مقادیر آلایش مذکور می شود. برای مقادیر آلایش مذکور می شود. برای مقادیر آلایش می از ۲۵/۱۰ و ۲۵/۱۰ از ۲۵/۱۰ به دلیل فرد بودن تعداد اتمهای آلایش یافته در ابریاختهٔ ۲×۲×۲ محاسبات مربوط به فاز آلایش ۲۵/۱۰ و ۲۵/۱۰ به دلیل فرد بودن تعداد اتمهای آلایش یافته در ابریاختهٔ ۲×۲۰ محاسبات مربوط به فاز (FM) انجام شد. بررسی (AFM) امکان پذیر نیست، بنابراین بررسی ساختار الکترونی برای این دو نمونه، در فاز فرومغناطیس پادفرومغناطیس (FM) انجام شد. بررسی خواص اپتیکی نمونههای آلایش یافته با غلظتهای ۲/۶/۰، ۲/۵/۱۰ و ۲۵/۰ کرالت نیز برای فاز فرومغناطیس فرومغناطیس انجام شد.

نتايج و بحث

Sn₁-xCoxO2 محاسبات خواص الكترونى و مغناطيسى نمونه هاى 2 Sn₁-xCoxO2

در شکل (۱) جایگاههای اتمههای Co انتخابی برای آلایش در ابریاختهٔ ۲×۲×۲ نشان داده شده است. چنان که در این شکل نشان داده شده است برای آلایش ۵/۲۱٪ جانشین سازی یون مغناطیسی در جایگاه (۱) برای آلایش ۱۲/۵٪ جایگاههای (۱۲٫۱) در نظر گرفته جایگاههای (۵٫۱)، برای آلایش ۱۸/۷۵٪ جایگاههای (۵٫۳٫۱) در نظر گرفته شدند. نتایج حاصل از محاسبات مربوط به انرژی حالت پایهٔ فازهای مختلف مغناطیسی در نمونههای آلاییده با Co در جدول ۱ گزارش شده است.





شکل۱. ساختار ابریاختهٔ ۲×۲×۲ SnO₂ با نمایش جایگاههای آلایش کبالت.

مقادیر مربوط به گشتاورهای بینجایگاهی، گشتاورهای مغناطیسی کل ابریاخته (M_{tot}) و همچنین گشتاور مغناطیسی یونهای کبالت (M_{Co}) جانشانی شده در نقاط مختلف ساختار بلوری SnO₂ برای فاز فرومغناطیس در جدول (۲) گزارش شده است. مقایسهٔ نتایح بهدست آمده نشان میدهد که با افزایش آلایش کبالت، گشتاور مغناطیسی کل و گشتاور مغناطیسی یونهای کبالت افزایش مییابد که با نتایج نظری گروه ونگ و همکاران در توافق است [۲۴]. نتایج بهدست آمده نشان میدهند که فاز پایدار سیستم فرومغناطیس است. گشتاور مغناطیسی در واحد یون Co نمونههای Sn₁₅CoO₃₂ را گروه ونگ و همکاران و همچنین گروه زانگ و همکاران با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی (DFT) بهترتیب برابر *μμ μ*/۶۷، و *μμ ۲*/۷۴ گزارش کردهاند [۷]، [۶]. انتخاب جایگاههای مربوط به دو اتم Co در شکل(۱)، که در وضعیت نزدیک ترین همسایهٔ دوم نسبت به هم واقع شدهاند، منجر به جفتشدگی فرومغناطیسی با زاویهٔ پیوند ۱۳۴/۸۵ درجه می شود که فاصلهٔ بین یونهای Co در این حالت ۳/۵۸۷۵Å است [۲۱]. جفتشدگی فرومغناطیسی بین اتمهای Co که در وضعیت نزدیک به هم واقع شدهاند، از نوع جفتشدگی فرومغناطیسی با مکانیزم نرومغناطیسی بین اتمهای Co که در وضعیت نزدیک به هم واقع شدهاند، از نوع جفتشدگی فرومغناطیسی با مکانیزم پادفرومغناطیسی بین اتمهای Co که در وضعیت نزدیک به هم واقع شدهاند، از نوع جفتشدگی فرومغناطیسی با مکانیزم رومغناطیسی بین اتمهای Co که در وضعیت نزدیک به هم واقع شدهاند، از نوع جفتشدگی فرومغناطیسی با مکانیزم پادفرومغناطیس برابر ۱۳۶۶ در توافق است آمده نشان می دهد مقدار تفاوت انرژی بین حالتهای فرومغناطیس و پادفرومغناطیس برابر ۱۷۶۷meV– است که با نتایج گزارش شده توسط گروههای تحقیقاتی دیگر در توافق است [۲].

آلايش	E _{FM} (Ry)	E _{AFM} (Ry)	E _{PM} (Ry)	E _{FM} - E _{AFM} (Ry)	فاز پايدار
·/.۶/۲۵	-197878/04487		-197878/2728		FM
7.17/0	- ۱۸۳۳•۸/••۲۹۵	-1833.4.4.4.4.4.4.4.4.4.4.4.4.4.4.4.4.4.4.	-1887.4/9720	-•/••١٣	FM
%.NA/YA	- 173789/296 • 2		- 178789/34883		FM
7.40	-1841111.0881	-184111/•9410	-184111/•2210	-•/•149	FM

جدول۱: مقادیر انرژی کل ساختار آلایشیافته با Co در فازهای مغناطیسی مختلف.

جدول۲: مقادیر مربوط به گشتاور مغناطیسی کل و گشتاور مغناطیسی یونهای Co در فاز فرومغناطیس برای آلایش ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪، ۱۸/۷۵٪ و ۲۵٪ و در فاز پادفرومغناطیس برای آلایش های ۱۲/۵٪ و ۲۵٪.

درصد آلایش	$\begin{array}{c} M_{tot} \\ (\mu_B) \end{array}$	$M_{ m Co1}$ ($\mu_{ m B}$)	M _{Co2} (μ _B)	M _{Co3} (μ _B)	$M_{Co4} \ (\mu_B)$	M_{Co5} (μ_B)	گشتاور بینجایگاهی
۶/۲۵٪ ; فاز فرومغناطيس	•/٩٩٩۴	•/٧٢١٩					•/•V•A
١٢/۵٪ ; فاز فرومغناطيس	۲/۱۱۳۷	۰/٨۶١٩				•/۶٨•٣	•/\Y&Y
۱۸/۷۵٪ ; فاز فرومغناطیس	4/2716	1/7447		1/2662		·/VAVTV	•/774•
۲۵٪ ; فاز فرومغناطيس	٨/•٩•٢۶	1/2777	١/۵۶١٨	١/۵٩۶٩	1/8087		•/4986
۱۲/۵٪ ; فاز پاد	•/•• • • •	•/٧٣٣۵				-•/۶۸۷۲۵	•/••٣۴
فرومغناطيس							
۲۵٪ ; فاز پادفرومغناطیس	-•/1498	1/4774	-1/773	۱/۴۵۷۸	-1/0744		•/••۴٣

۲- چگالیحالتها و ساختار نواری

رفتار چگالی حالتهای (DOS) کلی بر حسب انرژی برای فاز فرومغناطیس نمونه Sn0.9375Co0.0625O2 در شکل (۲) نشان داده شده است. این بررسی نشان میدهد چگالی حالتهای اسپین پایین در تراز فرمی، غیرصفر است در

حالی که چگالی حالتهای اسپین بالا صفر است. از این رو، به نظر میرسد این نمونه دارای خاصیت نیمفلزی باشد. این نتیجه با نتایج حاصل از کارهای نظری انجام شده گروههای دیگر موافق است [۶]، [۲]، [۲۱]، [۲۵].



شکل۲: نمودار چگالی حالتهای کلی محاسبه شده برای فاز فرومغناطیس نمونه Sn0.9375C00.0625O2

نمودار چگالی حالتهای جزئی محاسبه شده برای هریک از اتمهای نمونهٔ اکسید قلع آلاییده با ۲/۵٪ کبالت در شکل (۳) نشان داده شده است. مقایسهٔ چگالی حالتهای محاسبه شده نشان میدهد بیش ترین سهم در نوارهای شکل (۳) نشان داده شده است. مقایسهٔ چگالی حالتهای محاسبه شده نشان میدهد بیش ترین سهم در نوارهای ظرفیتی نزدیک به تراز فرمی به ترتیب مربوط به اوربیتالهای ۲۵–O و ۲۵–O و ۲۵–O و ۲۵–C و ۵۵–R است. با توجه به موقعیت اتمهای نشان داده شده در ساختار بلوری (شکل ۱) میتوانیم بگوییم که چگالی حالتهای جزئی اوربیتال ال موقعیت اتمهای نشان داده شده در ساختار بلوری (شکل ۱) میتوانیم بگوییم که چگالی حالتهای جزئی اوربیتال ال موقعیت اتمهای نشان داده شده در ساختار بلوری (شکل ۱) میتوانیم بگوییم که چگالی حالتهای جزئی اوربیتال ال موقعیت اتمهای نشان داده شده در ساختار بلوری (شکل ۱) میتوانیم بگوییم که چگالی حالتهای جزئی اوربیتال ال موقعیت اتمهای نشان داده شده در ساختار بلوری (شکل ۱) میتوانیم بگوییم که چگالی حالتهای جزئی اوربیتال ال موقعیت اتمهای نشان داده شده در ساختار بلوری (شکل ۱) میتوانیم بگوییم که چگالی حالتهای جزئی اوربیتال ای ماتهای ای مای در نزدیک ترین همسایه به اتم OO (جایگاه ۷) است، از این و هیبریداسیون حالتهای CO-C0 در نواحی ایندین مایسته به اتم OO (جایگاه ۷) است، از این و هیبریداسیون حالتهای ال OC (شکل ۳–۵) نمیزن در نزدیک ترین همسایه به اتم OC (جایگاه ۷) است، از این و هیبریداسیون حالتهای واقع در (شکل ۳–۵) نسبت به هیبریداسیون حالتهای CD-C0 و ۵۵–۲ و و ۲۵–۶) قویتر است. هیبریداسیون حالتهای CO-C0 و شکل ۳–۵) قویت در نیدی محالی واقع در (شکل ۳–۵) و مرح – 0 و مرح – 0 و مرح – 0 و مرح – 0 در خایگاه کا این می موده چگالی حالتهای اسپین باد و باید واری محاسبه شده برای کان مان میده جرای مای موازی محاسبه شده برای حالتهای اسپین باد و ای برد و چگاهی حالتهای مرد شان می دو می در فرک (۴) نشان می ده در ای و O (در جایگاه ۷) است. مان می ده در ای و O (در جایگاه ۷) است. ماختار نواری محاسبه شده برای مربوط به اتمهای مربوط به اتمهای میون (200–2000 مروز ترا) در مرد و حاوی تر می و می و O - 0 و مرح – 0 (در جایگاه ۷) است. ماختار نواری محاسبه شده برای و O مرول و مان می موند در و می و مرد و O مروز و کرو می مرول و مان می مربول و مان می مودن درای حالتهای اسپین بالا بیشینه نوار



شکل ۳: نمودار مربوط به چگالی حالتهای جزئی عناصر نمونهٔ Sn:s (می دمودار مربوط به چگالی حالتهای جزئی عناصر نمونهٔ Sn:s، ب) Sn:s، ب) Sn:s، ب) دربوط به چگالی حالتهای جزئی عناصر نمونهٔ Sn:p، Sn:s، و) د) Sn:p، Sn:s، ب) Sn:p، Sn:s، ب) Sn:p، Sn:s، ب)



شكل۴: نمودار ساختار نواری نمونه Sn0.9375C00.0625O2. ا لف) حالتهای اسپین بالا ب) حالتهای اسپین پایین.

نمودار چگالی حالتهای کلی محاسبه شده برای فاز فرومغناطیس نمونه $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_2$ در شکل (۵) نشان داده شده است. چگالی حالتها نزدیک به تراز فرمی (لبهٔ نوار ظرفیت)، بهطور عمده متشکل ازحالتهای مربوط به اوربیتالهای TD–OD و TD–O است. با توجه به حضور چگالی حالتهای اسپین پایین در تراز فرمی، این ترکیب نیز خاصیت نیمفلزی دارد. نمودار ساختار نواری نمونه $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_2$ برای حالتهای اسپین بالا و پایین در شکل (۶) نشان داده شده است. بررسی نمودار مربوط به حالتهای اسپین بالا نشان می دهد بیشینهٔ نوار ظرفیت در نقطهٔ Γ قر_{ار ندار}د. چنان که در شکل (۶- ب) مشاهده می شود نوار انرژی مربوط به حالتهای Co-۳d در تراز فرمی است و منشأ رفتار نیم فلزی این ترکیب به حالتهای اسپین پایین وابسته است.



شکل۶: نمودار ساختار نواری نمونه Sn_{0.875}Co_{0.125}O2 برای حالتهای الف) اسپین بالا ب) اسپین پایین.

نمودار چگالی حالتهای کلی محاسبه شده برای فاز فرومغناطیس نمونه Sn0.875C00.125O2 در شکل (۷) نشان داده شده است. حضور چگالی حالتها در تراز فرمی برای حالتهای اسپین بالا و پایین، میتواند منجر به بروزخاصیت فلزی در این نمونه شود. چگالی حالتها در نزدیکی تراز فرمی عمدتاً متشکل از حالتهای CO-7d و CP-O است. نمودار ساختار نواری مربوط به حالتهای اسپین بالا و پایین این نمونه در شکل (۸) نشان داده شده است. ترازهای انرژی مربوط به حالتهای CO-7d که از تراز فرمی عبور میکند منجر به خاصیت فلزی این نمونه میشوند.



شکل ۸ : نمودارساختار نواری نمونه Sn0.8125C00.1875O2 برای: الف) حالتهای اسپین بالا ب) حالتهای اسپین پایین.

نمودار چگالی حالتهای کلی محاسبه شده برای فاز فرومغناطیس نمونه Sno.75Coo.25O2 در شکل (۹) نشان داده شده است. برای این نمونه فاز فرومغناطیس بهعنوان حالت پایهٔ ساختار تعیین و تفاوت انرژی بین حالتهای فرومغناطیس و پادفرومغناطیس برابر با ۱۹۸/۵۶meV- بهدست آمد. چنان که در شکل (۹) دیده می شود حضور چگالی حالتها در تراز فرمی منجر به خاصیت فلزی این ترکیب می شود. مقایسهٔ نمودارهای چگالی حالتهای کلی برای ساختارهای آلایش یافته با درصدهای ۶/۶٪، ۱۲/۵٪، ۱۸/۷۵٪ و ۲۵٪ کبالت، نشان می دهد که افزایش غلظت ناخالصی Co و همچنین افزایش میزان هیبریداسیون اوربیتالهای Mo-O و ۲۹-O در نوار ظرفیت و نوار رسانش سبب افزایش چگالی حالتها در مجاورت لبهٔ نوار ظرفیت و لبهٔ نوار رسانش و همچنین در تراز فرمی می شود. نمودار ساختار نواری مربوط به حالتهای اسپین بالا و پایین این نمونه در شکل (۱۰) نشان داده شده است. حضور نوارهای ناخالصی Co-C در تراز فرمی منجر به خاصیت فلزی در این ترکیب می شود.



شکل۱۰: نمودارهای ساختار نواری نمونه Sno75C00.25O2. الف) حالتهای اسپین بالا ب) حالتهای اسپین پایین.

۳- محاسبهٔ ساختار الکترونی نمونه Sn0.875C00.125O0.9375 در حضور تهیجاهای اکسیژن

در این کار ساختار الکترونی نمونه اکسید قلع آلاییده با ۱۲/۵٪ کبالت در فاز فرومغناطیس با حضور تهیجای اکسیژن نیز بررسی شد. با توجه به شکل ۱ موقعیت آلایش اتمهای کبالت در ساختار نمونه Sn0.875C00.125O0.9375 مشابه موقعیت آلایش این اتمها در ساختار نمونه Sn0.875C00.125O2 در نظر گرفته شد (جایگاههای ۵٫۱). موقعیت مشابه موقعیت آلایش این اتمها در ساختار نمونه Sn0.875C00.125O2 در نظر گرفته شد (جایگاههای ۵٫۱). موقعیت تهیجای اکسیژن نیز در جایگاه ۸ انتخاب شد. بررسیها نشان میدهند که تهیجاهای اکسیژن تمایل دارند که در مجاورت اتمهای کبالت قرار گیرند و حضور این تهیجاها سبب افزایش گشتاور مغناطیسی یونهای کبالت و همچنین موجب جفتشدگی فرومغناطیسی بلندبرد بین دو یون کبالت میشوند [۷]، [۲۱]، [۲۵]. حضور هر تهیجای اکسیژن نزدیک به یک اتم کبالت سبب میشود که تفاوت بار الکتریکی بین ^{*۹} Sn⁰ و^{+۲} کاب برداشتن یک اکسیژن در شبکهٔ هشت وجهی اطراف یون کبالت، برطرف شود [۲۱]. نتایج حاصل از محاسبهٔ گشتاور مغناطیسی کل، گشتاور مغناطیسی یونهای OO و انرژی کل در فاز فرومغناطیس نمونه Sn0.875C00.125O2 در جدول (۳) گزارش شده است. مقایسهٔ نتایج حاصل از آلایش ۵/۱۲٪ کبالت در دو سیستم Sn0.875C00.125O2 در جدول (۳) گزارش شده است. مقایسهٔ (جدولهای ۲و۳) نشان می دهد که حضور تهی جای اکسیژن سبب افزایش گشتاور مغناطیسی یونهای کبالت می شود. مقادیر به دست آمده برای گشتاورهای مغناطیسی با مقادیر گزارش شده توسط ونگ و همکاران در توافق است [۲۱]. نمودار چگالی حالتهای کلی به همراه چگالی حالتهای جزئی اوربیتالهای Co-d مربوط به هر دو اتم کبالت، در شکل (۱۱) نشان داده شده است. این بررسی نشان می دهد چگالی حالتها در نزدیکی تراز فرمی مربوط به اوربیتالهای Co-۳d است.

جدول۳: مقادیر مربوط به گشتاور مغناطیسی کل، گشتاور مغناطیسی یونهای Co و انرژی کل در فاز فرومغناطیس مربوط به نمونه Sn_{0.875}CO_{0.125}O_{0.9375}.

آلايش	$M_{tot}(\mu_B)$	$M_{Col}(\mu_B)$	$M_{Co2}(\mu_B)$	E(Ry)
سيستم فرومغناطيس	31/9311	1/48278	1/42119	-184108/•47•78
Sn0.875C00.125O0.19375				



شکل۱۱: نمودار چگالی حالتهای کلی فاز فرومغناطیس نمونه Sn_{0.875}Co_{0.125}O_{0.9375}.

بررسی خواص اپتیکی

۱- تابع دیالکتریک

در ادامهٔ این کار خواص اپتیکی ساختار اکسید قلع (راستای [۱۰۰]) آلاییده با غلظتهای مختلف کبالت، بررسی شد. رفتار الکتریکی هر ماده با تابع دیالکتریک آن، مشخص میشود. تابع دیالکتریک، پاسخ نمونه به یک میدان الکترومغناطیسی اعمال شده با انرژی $\hbar \omega$ است. معادلات کرامرز-کرونیگ برای دو مؤلفه از تابع دیالکتریک مختلط با روابط (۱) و (۲) داده میشوند که در این روابط P بیانگر مقدار اصلی انتگرال کوشی است [۲۶]. (ω) و $(\omega)_2$ و $(\omega)_2$ و ($\omega)_2$ و ($\omega)_2$ و ($\omega)_2$ و ($\omega)_3$ و ($\omega)_2$ و ($\omega)_3$ و ($\omega)_2$ و ($\omega)_2$ و ($\omega)_2$ و ($\omega)_3$ و ($\omega)_2$ و ($\omega)_2$ و ($\omega)_3$ و ($\omega)_4$ و (ω) و (

پژوهشهای نوین فیزیک (نشریه علوم دانشگاه خوارزمی)

است [۲۷]. بهازای $0 imes \mathcal{E}_1(\omega) imes 0$ ، مادهٔ رفتار دیالکتریکی و به ازای $0 imes \mathcal{E}_1(\omega)$ ، مادهٔ رفتار فلزی از خود نشان میدهد [۲۳].

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{{\omega'}^2 - \omega^2} d\omega' \tag{1}$$

$$\varepsilon_{2}(\omega) = -\frac{2}{\omega\pi} P_{0}^{\infty} \frac{\omega'^{2} [\varepsilon_{1}(\omega') - 1]}{\omega'^{2} - \omega^{2}} d\omega'$$
(Y)

نمودار قسمت حقیقی تابع دیالکتریک برحسب انرژی در شکل (۱۲– الف) نشان داده شده است. مقادیر ثابت دیالکتریک استاتیک $(\omega = 0)_1 3$ ، برای نمونهٔ خالص و نمونههای آلاییده با غلظتهای 8/7، 8/7، 17/8، و ۲۵٪ و ۲۵٪ بهترتیب ۳/۵، 7/6، 7/6، 7/6 بهدست آمده نشان میدهد که ثابت بهترتیب ۳/۵، 7/6، 10/7 و ۲۵٪ استاتیک در نمونههای آلاییده از نمونهٔ خالص بزرگتر است. با افزایش غلظت آلایش تا 10/۵٪، قسمت حقیقی تابع دیالکتریک استاتیک در نمونههای آلاییده از نمونهٔ خالص بزرگتر است. با افزایش غلظت آلایش تا 10/۵٪، قسمت ما دیالکتریک استاتیک در نمونههای آلاییده از نمونهٔ خالص بزرگتر است. با افزایش غلظت آلایش تا 10/۵٪، قسمت آمد. مقایسهٔ ثابتهای دیالکتریک بهدست آمده نشان میدهد که ثابت دیالکتریک استاتیک در نمونههای آلاییده از نمونهٔ خالص بزرگتر است. با افزایش غلظت آلایش تا 10/۵٪، قسمت حقیقی تابع دیالکتریک افزایش و سپس با افزایش بیشتر آلایش تا ۲۵٪، مجدداً کاهش مییابد. برای نمونههای آلاییده با 10/۲۴eV، 10/۲۴eV و ۲۵٪ کبالت تابع دیالکتریک مربوطه بهترتیب از انرژیهای 10/7، 10/7، 10/7، و 10/۲۰، الم 10/۲۴eV، مجدداً کاهش مییابد. برای 10/۲۴eV و 10/۲۴eV، 10/۲۴eV، 10/۲۴eV و 10/۲۴eV، 10/۲۴eV و 10/۲۴eV، 10/۲۴eV و 10/۲۴eV، 10/۲۴eV، 10/۲۴eV و 10/۲۰۰۰ و 10/۰٪ کبالت تابع دیالکتریک مربوطه بهترتیب از انرژیهای 10/7۰۰، 10/۲۴eV و 10/۲۰۰۰، 10/۲۴eV و 10/۲۴eV.

در شکل (۱۲–ب) نمودار بخش موهومی تابع دیالکتریک، ${\cal E}_2(\omega)$ ، برحسب انرژی نشان داده شده است. گذار از حالت O-۲p به حالت Sn-۵s که در نمونهٔ خالص در انرژی ۶٬۹۷eV رخ میدهد، در نمونههای آلائیده با ۶٬۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ کبالت ، بهترتیب در انرژیهای ۶/۵۱eV، ۶/۵۱eV و ۷eV، اتفاق میافتد. یعنی یک جابهجایی قرمز در موقعیت قلههای مربوط به نمونههای آلاییده با غلظتهای ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪، نسبت به نمونهٔ خالص شاهد هستیم. همچنین در انرژیهای کمتر از ۶eV، یک جابهجایی قرمز در موقعیت قلههای مربوط به نمونهٔ آلاییده با غلظت ۱۲/۵٪. نسبت به نمونهٔ آلاییده با غلظت ۶/۲۵٪ مشاهده می شود. مقایسهٔ طیفهای بهدست آمده نشان می دهد که موقعیت قلههای مربوط به آلایش ۲۵٪ کبالت نسبت به موقعیت قلههای مربوط به آلایشهای ۶/۲۵٪ و ۱۲/۵٪ یک جابهجایی آبی نشان می دهد. از اینرو انتظار داریم که در مورد دومین قلهها ابتدا یک جابهجایی قرمز و سپس یک جابهجایی آبی رخ دهد. با افزایش غلظت آلایش تعداد ترازهای انرژی مربوط به حالتهای Co-۳d در نزدیکی تراز فرمی افزایش مییابد، بنابراین قلههای مربوط به جذب اپتیکی، ناشی از گذارهایی است که ترازهای ناخالصی در ایجاد آنها نقش دارند. قلههای مشاهده شده در طیف نمونههای آلاییده از گذارهای مستقیم و غیرمستقیم ناشی میشوند. با افزایش غلظت الایش کبالت تا ۲۵٪، شدت وابسته به قلههای مربوط به گذارهای O-۲p ،Sn-۵s به O-۲p، Sn-۵s به Sn-۵s و Co-۳d به Sn-۵p کاهش مییابند که این پدیده میتواند ناشی از افزایش گذارهای غیرمستقیم از نوار ظرفیت به نوار رسانش باشد [۲۸]. سایر قلههای مربوط به نمونههای آلاییده با ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ کبالت، که در بازهٔ انرژی حدود ۳eV-۲ ظاهر میشوند، ممکن است مربوط به گذار از حالتهای ناخالصی Co-۳d به حالتهای ا Sn-۵s باشند. در مورد این گذارها مشاهده میشود که با افزایش غلظت آلایش، شدت قلهها افزایش مییابد. در

انرژیهای خیلی کم مشاهده می شود که اولین قله ابتدا در نمونهٔ آلاییده شامل ۱۲/۵٪ و سپس به ترتیب در نمونههای آلاییده آلاییده شامل ۲۵٪ و ۲/۵٪ کبالت ظاهر می شود و برای نمونهٔ خالص قلهای مشاهده نمی شود. برای نمونههای آلاییده اولین قلهها را می توان مربوط به گذار از حالتهای Co-۳d به حالتهای Sn-۵s دانست. این در حالی ست که در نمونهٔ خالص اولین گذار از حالتهای Po-O - به Sn-۵۵ به حالتهای Sn-۵۶ دانست. این در حالی ست که در نمونههٔ خالص اولین گذار از حالتهای Sn-۵۲ - به Sn-۵۵ رخ می دهد. لبهٔ جذب اپتیکی به دلیل کاهش گاف نواری در نمونههای آلاییده (تا ۲/۱۸٪) نسبت به نمونهٔ خالص به سمت انرژیهای کوچک تر (جابه جایی قرمز) جابه جا می شود. کوچک تر شدن لبهٔ جذب اپتیکی در نمونه های آلاییده نسبت به نمونهٔ خالص را می توان به اولین گذار مرتبط دانست، چنان چه در نمودارهای چگالی حالتها و ساختار نواری نواری مربوط به نمونههای آلاییده نیز مشاهده نمودیم که تراز فرمی به طور عمده متشکل از حالتهای Co-۳d است. نتایج مشاهده شده با نتایج تجربی گزارش شده توسط گروههای دیگر در توافق است [۱]، [۲]، [۲].

۲- ضریب در آشامی

ضریب درآشامی ، (
$$M(\omega)$$
، نیز با اطلاع از (ω) و $\varepsilon_1(\omega)$ و $\varepsilon_2(\omega)$ از رابطهٔ (۳) بهدست میآید [۲۷]:

$$I(\omega) = \sqrt{2}(\omega/c) \left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{b.5}$$
(3)

نمودار ضریب درآشامی (ω) محاسبه شده بر حسب انرژی در شکل (۱۳) نشان داده شده است. چنان که در این طیف دیده می شود برای انرژی های تا حدود ۴/۸eV با افزایش غلظت آلایش میزان جذب افزایش مییابد و سپس افزایش غلظت آلایش میزان جذب افزایش مییابد و سپس افزایش غلظت آلایش میزان جذب افزایش مییابد و سپس افزایش غلظت آلایش میزان جذب افزایش مییابد و سپس افزایش غلظت آلایش میزان جذب افزایش مییابد و سپس افزایش غلظت آلایش میزان جذب افزایش می در جذب امواج الکترومغناطیسی می شود. موقعیت قلهٔ متناظر با انرژی ۷/۱۴eV مشاهده شده در نمونهٔ خالص یک جابه جایی قرمز در نمونه های آلاییده با غلظت های ۶/۲۵٪ و ۱۲/۵٪ و یک جابه جایی مشاهده شده در نمونهٔ خالص یک جابه جایی قرمز در نمونه های آلاییده با غلظتهای ۶/۲۵٪ و ۱۲/۵٪ و یک جابه جایی آبی در نمونهٔ آلاییده با غلظتهای ۱۲۰۶٪ و ۱۲/۵٪ و ۱۲۸۰٪ و یک جابه جایی نمونهٔ خالص و آبی در نمونهٔ آلاییده با غلظتهای ۱۲۹۰۵٬۰۰۰ برای نمونهٔ خالص و آبی در نمونه آلاییده با غلظتهای ۱۲۹۰۵٬۰۰۰ برای نمونهٔ خالص و آبی در نمونهٔ آلاییده با غلظتهای آلاییده با غلظتهای ۱۲۹۰۵٬۰۰۰ برای نمونهٔ خالص و آبی در نمونه آلاییده با غلظتهای ۱۲۹۰۵٬۰۰۰ برای نمونهٔ خالص و آبی در نمونهٔ آلاییده با غلظتهای ۱۸۹۵٬۰۰۰ برای نمونهٔ خالص و آبی در نمونههای آلاییده با ازای انرژی ۱۹۵۲٬۰۰۰ برای نمونهٔ خالص و نمونه های آلاییده با غلظتهای ۱۸۹۵٬۰۰۰ برای با ۲۹۵۵٬۰۰۰ می شونهٔ خالص و ۲۰۸۱۹٬۰۰۰ می مونه های ۵۹۱۵٬۰۰۰ می می در نمونه های آلاییده نسبت به نمونهٔ خالص به سمت انرژی مهای کمتر کشیده می شود.



شکل۱۲: نمودار تابع دیالکتریک برحسب انرژی برای نمونه Sn_{1-x}Co_xO₂ در راستای [۱۰۰]، الف) بخش حقیقی

تابع دىالكتريك. ب) بخش موهومى تابع دىالكتريك



شکل ۱۳: نمودار ضریب در آشامی برحسب انرژی برای نمونه Sn_{1-x}Co_xO₂ در راستای [۱۰۰].

۳- ضریب شکست و ضریب خاموشی

چگونگی انتشار امواج الکترومغناطیسی در یک محیط به ضریب شکست n و ضریبخاموشی k بستگی دارد [۲۹]. ضریب شکست $n(\omega)$ ، میزان انتشار امواج و ضریبخاموشی k پاشندگی امواج را نشان میدهند [۳۰]. ضریب شکست حقیقی n و ضریب خاموشی (یا شاخص میرایی) k، با استفاده از رابطه (۴) داده می شود [۳۱]:

$$n = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\varepsilon_1 + \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} \right)}, k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(-\varepsilon_1 + \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} \right)}$$
(4)

نمودارهای ضریب شکست و ضریب خاموشی نمونههای خالص و آلاییده در شکلهای (۱۴- الف و ب) نشان داده شده است. مقادیر ضریب شکست استاتیک برای نمونههای آلاییده با غلظتهای ۱۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ کبالت، به ترتیب برابر با ۲/۳۰، ۳/۲۸ و ۲/۹۷ بهدست آمد. چنان که در این شکل دیده می شود، در محدودهٔ انرژی V۵- ۲/۶۸ برای نمونهٔ خالص و نمونههای آلاییده با غلظتهای ۲/۶۸٪، ۱۲/۵٪ و ۲/۹۲ بهدست آمد. چنان که در این شکل دیده می شود، در محدودهٔ انرژی V۵- ۲/۶۸ برای نمونهٔ خالص و نمونههای آلاییده با غلظتهای ۲۲/۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۰٪ کبالت، به برای نمونهٔ خالص و نمونههای آلاییده با غلظتهای ۲/۶٪، ۱۲/۵٪ با افزایش درصد آلایش، ضریب شکست ماده افزایش و در محدودهٔ انرژیهای بالاتر از آن، با افزایش درصد آلایش درصد آلایش، ضریب شکست ماده مشاهده شده روی منحنی ضریب خاموشی، منطبق بر قلههای مربوط به نمودار ضریب درآشامی است که مشابه رفتار مشاهده شده روی منحنی ضریب خاموشی، منطبق بر قلههای مربوط به نمودار ضریب درآشامی است که مشابه رفتار (ω) $_23$ و $(\omega)I$ ، با افزایش علظت آلایش تا ۱۲/۵٪، برای قلههای متناظر یک جابهجایی قرمز و با افزایش غلظت آلایش تا ۲۵٪، یک خابهجایی قرمز و با افزایش ملطت آلایش، ترش تا ۲۵٪، برای قلههای مداخ (ω) مدهد که با افزایش آلایش، محدودهٔ انرژی که جابهجایی آبی از خود نشان میدهند. بررسی طیف (۱۴ – ب) نشان می دهد که با افزایش آلایش، جذب ماده در محدودهٔ انرژی ۷۳۵ – ۱۲/۵٪، یک جابهجایی آبی از خود نشان می دهند. بررسی طیف (۱۴ – ب) نشان می دهد که با افزایش آلایش، جذب ماده در محدودهٔ انرژی ۵۳ – ۱۲/۵٪ افزایش و سپس از محدودهٔ انرژی ۵۷ که داده نفوذ می کنند [۳۲].

۴- بازتابندگی

بازتابندگی اپتیکی $R(\omega)$ در برخورد عمود موج الکترومغناطیس به فصل مشترک دو محیط، با رابطهٔ (۵) داده میشود [۲۹]:

$$R(\omega) = \frac{(1-n)^2 + k^2}{(1+n)^2 + k^2}$$
(5)

> ۵- رسانندگی اپتیکی رسانندگی اپتیکی ماده با رابطه (۶) داده می شود [۳۱] : $\sigma(\omega) = (i\omega/4\pi)(1 - \varepsilon(\omega))$ (6)

نمودار رسانندگی اپتیکی برحسب انرژی برای نمونههای خالص و آلاییده اکسید قلع در شکل (۱۵–ب) نشان داده شده است. بررسی این طیف نشان گر حضور سه قلهٔ اصلی در انرژیهای بالاتر از ۶eV برای هر یک از نمونهها است. قله متناظر با انرژی ۷eV در نمونهٔ خالص، متناظر با انرژی ۶/۵۴eV در نمونهٔ آلاییده با غلظت ۲۵/۶٪، با انرژی ۷۵/۶ در نمونهٔ آلاییده با غلظت ۱۲/۵٪ و با انرژی ۷/۰۳eV در نمونهٔ آلاییده با غلظت ۲۵٪ می باشد. چنان که در شکل (۱۵–ب) دیده میشود بیشترین جریان رسانشی برای نمونههای خالص و آلاییده با غلظتهای ۶/۶٪، ۵/۱۲٪ و ۲۵٪ به ترتیب در انرژیهای ۹/۶۷eV، ۹/۲۳eV و ۹/۲۳eV و ۹/۸۳eV رخ میدهد.



شکل۱۴: الف) نمودار ضریب شکست برحسب انرژی در ترکیب Sn_{1-x}Co_xO₂ در راستای [۱۰۰]. ب) نمودار



شکل۱۵: الف) نمودار بازتابندگی برحسب انرژی در ترکیب Sn_{1-x}Co_xO₂ در راستای [۱۰۰]. ب) نمودار رسانندگی اپتیکی برحسب انرژی در ترکیب Sn_{1-x}Co_xO₂ در راستای [۱۰۰].

نتيجهگيري

در این کار ساختار الکترونی و خواص مغناطیسی و اپتیکی نمونههای خالص SnO2 و آلاییده Sn_{1-x}Co_xO₂ و آلاییده Sn_{1-x}Co_xO₂ و آلاییده مشخص شد که خواص ساختاری و مغناطیسی نمونهها نیز بررسی شد. با بررسی خواص مغناطیسی نمونههای آلاییده مشخص شد که افزایش غلظت آلایش سبب افزایش چگالی ترازهای انرژی مربوط به اوربیتالهای TM یون کبالت در نزدیکی تراز فرمی می شود. بررسی فاز پایدار مغناطیسی نمونههای آلاییده نشان داد که در آلایشهای T/۱/۷ و ۲۵٪ فاز پایدار شبکه فرومغناطیس است. حضور تهیجای اکسیژن در نمونه فرومغناطیسی خواص میناطیسی نمونههای آلاییده مشخص شد که می شود. بررسی فاز پایدار مغناطیسی نمونههای آلاییده نشان داد که در آلایشهای T/۱٪ و ۲۵٪ فاز پایدار شبکه منجر به افزایش گستاور مغناطیسی یونهای کبالت می شود. بررسی خواص ایتیکی نمونهٔ خالص و نمونههای آلاییده با منجر به افزایش گستاور مغناطیسی یونهای کبالت می شود. بررسی خواص ایتیکی نمونهٔ خالص و نمونههای آلاییده با افزایش بیش تر آن تا ۲۵٪، گاف نواری ایتیکی افزایش می یابد. با افزایش آلایش تا ۲۵/۱٪، شدت مربوط به اولین قلهها در محدودهٔ انرژیهای بالاتر از ۶۹۷ کاهش می یابند. با توجه به طیفهای بازتابندگی و ضرب درآشامی مشخص شد که با افزایش غلظت آلایش تا ۲۵٪، میزان عبور فوتون در ناحیهٔ مرئی کاهش می یابد.

منابع

- Xiaohua Liu, Shaojun Chen, Ming Li, Xiaodong Wang, Thin Solid Films 515 (2007) 6744-6748.
- Sathyaseelan B., Senthilnathan K., Alagesan T., Jayavel R., Sivakumar K., Materials Chemistry and Physics 124 (2010)1046-1050.
- 3. Matthias Batzill, Ulrike Diebold, Progress in Surface Science 79 (2005) 47-154.
- Heo Y. W., Kelly J., Norton D. P., Hebard A. F., Pearton S. J., Zavada J. M. and Boatner L.
 A., "Electrochemical and Solid-State Letters", 7 (12) (2004) G309-G312.
- He Jiang, Xiao Fang Liu, Zhi Yu Zou, Zhang Ben Wu, Bo He, RongHai Yu; Applied Surface Science 258 (2011) 236-241.
- 6. Chang-wen Zhang and Shi-shen Yan, Journal of Applied Physics 106 (2009) 063709.
- Hongxia Wang, Yu Yan, Y.Sh. Mohammed, Xiaobo Du, Kai Li, Hanmin Jin, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 321(2009) 3114-3119.

- Ogale S. B., Choudhary R. J., Buban J. P., Lofland S. E., Shinde S. R., Kale S. N., Kulkarni V. N., Higgins J., Lanci C., Simpson J. R., Browning N. D., Das Sarma S., Drew H. D., Greene R. L., and Venkatesan T., Phys. Rev. Lett. 91, 077205 (2003).
- Fitzgerald C. B., Venkatesan M., Dorneles L. S., Gunning R., Stamenov P., and Coey J. M. D., Physical Review B 74 (2006) 115307.
- 10. Yan L., Pan J.S., Ong C.K., Materials Science and Engineering B 128 (2006) 34-36.
- 11. Hyun-Suk Kim, Lei Bi, Dionne G. F., and Ross C. A., Physical Review B 77 (2008) 214436.
- 12. Liu X. F., JavedIqbal W.M., He B., Yu R. H., Thin Solid Films 517 (2009) 6091-6095.
- 13. Weibing Chen and Jingbo Li, Journal of Applied Physics, 109 (2011) 083930.
- Fang L. M., Zu X. T., Li Z. J., Zhu S., Liu C. M., Wang L. M., Gao F., J Mater Sci, Mater Electron, 19 (2008) 868-874.
- ۱۵. هداوند زهرا، قاضی محمدابراهیم، ایزدیفرد مرتضی، بهرامیان بهرام، *اولین کنفرانس ملی نوآوریها در پردازش لایههای نازک و مشخصههای آنها*، مرکز بینالمللی علوم و تکنولوژی پیشرفته و علوم محیطی (۱۳۹۰).
- Klaus Capelle, July, "A Bird's-Eye View of Density-Functional Theory", fourth revision (2005).
- 17. John M.Wills, Mebarek Alouani, Per Andersson, Anna Delin, Olle Eriksson, Oleksiy Grechnyev, "Full-Potential Electronic Structure Method", Springer Series in solid-state sciences.
- 18. Cottenier S., August 6, "Density Functional Theory and the Family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction" (2004).
- Zenebe Assefa Tsegaye, "Density Functional Theory Studies of Electronic and Optical Properties of ZnS Alloyed with Mn and Cr", Norwegian University of Science and Technology; Department of Physics (2012).

۲۰. چارلز کیتل، *آشنایی با فیزیک حالت جامد*، ویراست هشتم، ترجمهٔ اعظم پورقاضی، مهدی صفا اصفهانی؛ جمشید عمیقیان؛ چاپ اول، مرکز نشر دانشگاهی (۱۳۸۸).

 Hongxia Wang, Yu Yan, Y. Sh. Mohammed, Xiaobo Du, Kai Li, Hanmin Jin, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 321 (2009) 337-342.

Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2024-05-10

- 22. Guanglei Zhang, Guoqiang Qin, Gang Yu, Qianku Hu, Hua Fu, Changtao Shao, Thin Solid Films 520 (2012) 5965-5970.
- 23. Ali M. A., Islam A. K. M. A., Physica B407 (2012) 1020-1026.
- 24. Wang X. L., Zeng Z., and Zheng X. H., Journal of Applied Physics, 101(2007) 09H104.
- Wang X. L., Dai Z. X., and Zeng Z., J. Phys.: Condens. Matter 20,045214, doi:10.1088/ 0953-8984/20/04/045214 (2008).
- 26. Victor Antonov, Bruce Harmon, Alexander Yaresko, "Electronic Structure and Magneto-Optical Properties of Solids", Kluwer Academic Publishers; New York, Boston, Dordrecht, London, Moscow, chapter1(2004).
- LU Peng-Fei, SHEN Yue, YU Zhong-Yuan, ZHAO Long, LI Qiong-Yao, MA Shi-Jia, HAN Li-Hong, LIU Yu-Min, Commun, Theor. Phys. 57 (2012) 145-150.
- Yao Lu, Pei-Ji Wang, Chang-Wen Zhang, Xian-Yang Feng, Lei Jiang, Guo-Lian Zhang, Physica B 406 (2011) 3137-3141.
- 29. John R. Reits, Frederick J. Milford, Robert W. Christy, Addison-Wesley, "Foundations of Electromagnetic Theory Fourth Edition", chapter 19 (1993).
- Jasprit Singh, "Semiconductor Optoelectronics Physics and Thechnology", University of Michigan, Mc Graw-Hill, Inc, chapter 2 (2003).
- 31. Solid state physics, Ashcroft, Neil W; chapter 1, The Drude theory of Metals (c1976) 1-25.
- 32. S. M. Hosseini, "Optical properties of cadmium telluride in zinc-blende and wurzite structure"; Physica B 403 (2008) 1907-1915.