بررسی ساختار الکترونی، خواص مغناطیسی و اپتیکی نیم‌رسانای $Sn_{1-x}Co_xO_2$ با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی

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

دریافت ۹۳/۶/۱۸ پذیرش ۹۴/۴/۸

چکیده

در این مقاله ساختارالکترونی و خواص مغناطیسی و اپتیکی نمونه‌های خالص SnO_2 و آلاییدهٔ $Sn_{1-x}Co_xO_2$ (۰/۰۶۲۵، ۰/۱۲۵، ۰/۱۸۷۵ و x=۰/۲۵) با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی بررسی می‌شوند. 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 می‌شود. بررسی فاز پایدار مغناطیسی نمونه‌های آلاییده نشان داد که در آلایش‌های ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ فاز پایدار شبکه فرومغناطیس است. حضور تهی‌جای اکسیژن در نمونهٔ فرومغناطیسی $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_{0.9375}$ نزدیک به یون کبالت منجر به افزایش گشتاور مغناطیسی یون‌های کبالت می‌شود. بررسی خواص اپتیکی نمونهٔ خالص و نمونه‌های آلاییده با ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ کبالت نشان داد که با افزایش غلظت آلایش تا ۱۲/۵٪، گاف نواری اپتیکی کاهش و سپس با افزایش بیش‌تر آن تا ۲۵٪، گاف نواری اپتیکی افزایش می‌یابد. با افزایش آلایش تا ۱۲/۵٪، شدت مربوط به اولین قله‌ها در طیف تابع دی‌الکتریک نمونه‌ها، هم‌چنین ضرایب درآشامی و خاموشی افزایش و شدت مربوط به قله‌های ظاهر شده در محدودهٔ انرژی‌های بالاتر از ۶eV کاهش می‌یابند. با توجه به طیف‌های بازتابندگی و ضریب درآشامی مشخص شد که با افزایش غلظت آلایش تا ۱۲/۵٪ میزان عبور فوتون در ناحیهٔ مرئی کاهش می‌یابد.

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

مقدمه

اکسید قلع (SnO_2) یک اکسید نیم‌رسانای شفاف نوع n با ساختار چهارگوشی روتایل و گاف نواری پهن ۳/۶ eV (در دمای اتاق) و مقاومت ویژهٔ کم ($2-4/3\times10^{-24}\ \Omega.Cm$) است [۱]. در ترکیب خالص اکسید روی حضور تهی‌جاهای 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، دیودهای نور گسیل، الکترودهای شفاف برای تهیهٔ نمایشگرهای صفحه 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، Fe و Co منجر به تولید نیم‌رسانای مغناطیسی رقیق شده می‌شود که از آن می‌توان برای

*نویسندهٔ مسئول: Ebrahim_ghazi@yahoo.com

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]

ساخت قطعات اسپینترونیکی استفاده کرد [۵]. نتایج تجربی گزارش شده بیان‌گر این واقعیت است که در نیم‌رساناهای مغناطیسی رقیق شده، خاصیت مغناطیسی نمونه‌ها به‌روش آماده‌سازی آن‌ها بستگی دارد [۶]، [۷]. به‌عنوان مثال برای گشتاور مغناطیسی نمونه‌های SnO_2 آلاییده با Co که با روش‌های مختلفی سنتز شده‌اند، مقادیر متفاوتی گزارش شده است. گروه اوگل و همکاران برای لایه‌های نازک SnO_2 آلاییده با Co فاز فرومغناطیسی در دمای کوری K ۶۵۰ گزارش کرده‌اند. گشتاور مغناطیسی این نمونه‌ها در حدود $۷/۵\ \mu_B$ به‌ازای آلایش ۵٪ کبالت گزارش شده است [۸]. هم‌چنین نتایج تحقیقات تجربی نشان داده است که نمونه‌های SnO_2 آلاییده با Co که با استفاده از روش رسوب لیزر پالسی لایه‌نشانی شده‌اند، رفتار فرومغناطیسی در دمای اتاق نشان می‌دهد [۹]، [۱۱]. گروه یان، بررسی تجربی خواص مغناطیسی لایه‌های نازک $Sn_{0.95}Co_{0.05}O_2$ که با استفاده از روش رسوب لیزر پالسی روی زیرلایهٔ Si(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 $۱/۳\left(\mu_B/Co\right)$ 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 $۰/۵۴\left(\mu_B/Co\right)$ 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 SnO_2 آلاییده با Co روی زیرلایه‌های سیلیکونی را گزارش کردند [۱۲]. نتایج اندازه‌گیری‌های 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 SnO_2 آلاییده با Co، $۰/۸۳\left(\mu_B/Co\right)$ به‌دست آمد [۱۲]. بررسی خواص مغناطیسی نانو ذرات SnO_2 آلاییده با ۳/۳۷٪ کبالت که به‌روش 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 SnO_2 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 SnO_2 آلاییده با Co تا میزان ۱۲٪، ابتدا یک جابه‌جایی قرمز و سپس به‌ازای غلظت‌های بیش‌تر، یک جاب‌جایی آبی نشان داد [۱]. در نمونه‌های نانوذرات SnO_2 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 SnO_2 آلاییده با ۱۰، ۲۰ و ۳۰ درصد کبالت تهیه شده به‌روش سل ژل مشخص شد که با افزایش آلایش Co، عبور اپتیکی کاهش می‌یابد [۱۵].

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]

در این مقاله ساختار الکترونی، خواص مغناطیسی و اپتیکی نمونه‌های حجمی $Sn_{1-x}Co_xO_2$ (۰/۰۶۲۵، ۰/۱۲۵، ۰/۱۸۷۵ و x=۰/۲۵) با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی در قالب نرم افزار WIEN2k 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 به‌عنوان متغیر اصلی در نظر گرفته شده و معادلهٔ بس ذره‌ای به تعدادی معادلهٔ تک ذره تبدیل می‌شود. سپس این معادلات تک ذره‌ای با استفاده از روش‌های تقریبی حل می‌شوند. امروزه استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی در حل مسائلی نظیر 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 [۱۶]. گام اول در نظریهٔ تابعی چگالی تعیین هامیلتونی کل دستگاه شامل جملات مربوط به جفت‌شدگی کولنی بین ذرات، اعم از الکترون‌ها و هسته‌ها و جملات ناشی از انرژی جنبشی الکترون‌ها و هسته‌ها است. سپس جواب‌های معادلهٔ شرودینگر با توجه به تقریب‌های اعمال شده در تعیین هامیلتونی به‌دست می‌آید [۱۷]. بر مبنای تقریب کوهن- شم، از حل معادلات تک ذره‌ای کوهن- شم برای الکترون‌ها، می‌توان تمام خواص حالت پایه و هم‌چنین انرژی کل دستگاه را محاسبه کرد [۱۹]، [۱۸]. برای حل این 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 این‌که اندازهٔ این انرژی در مقایسه با انرژی‌های دیگر موجود در دسته معادلات کوهن شم کوچک است می‌توان 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 به‌کمک روش FL-LAPW می‌پردازد. 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) تقسیم‌بندی بلور (سلول واحد) به دو ناحیه با عنوان ناحیهٔ کره‌های مافین تین (کره‌های بدون هم‌پوشانی) و ناحیهٔ بین جایگاهی (فضای بین این کرات) است. در روش FL-LAPW مجموعهٔ پایهٔ معرفی شده در داخل کرهٔ مافین‌تین با شعاع R_{mt}، 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 $\vec{K}$ در نواحی مافین تین تا K_{max} و در نواحی بین جایگاهی تا G_{max} (بردارموج قطع) انجام می‌گیرد [۱۸]. دراین کار مقدار پارامتر $R_{mt}.K_{max}$ برابر با ۷ انتخاب شد. پارامتر R_{mt} برای Sn، O 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].

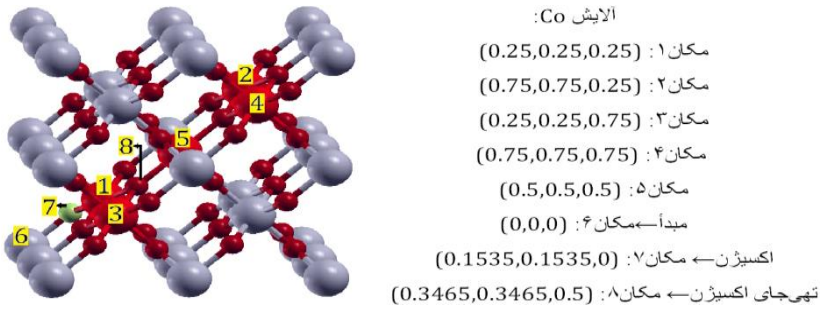
[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]

مقدار G_{max} برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیهٔ بین جایگاهی برابر با ($a.u.^{-1}$) ۱۷ انتخاب شد. با توجه به ساختار بلوری SnO_2 (روتایل تتراگونال با گروه فضایی P42/mnm و ثابت‌های تجربی a=b=۴/۷۳۷Å و c=۳/۱۸۶Å) جایگاه اتم‌های Sn در (۰,۰,۰) و (۰/۵,۰/۵,۰/۵) و جایگاه اتم‌های O نیز در (۰,۵ و ۰/۵–u و ۰/۵+u) و (u, u,۰) با u=۰/۳۰۷ انتخاب شدند [۲۱]، [۲۳]. محاسبات مربوط به ساختار SnO_2 آلاییده با ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪، ۱۸/۷۵٪ و ۲۵٪ کبالت در یک ابریاختهٔ ۲×۲×۲ انجام شد. لازم به ذکر است که جانشین‌سازی یک، دو، سه و چهار یون Co در ابریاختهٔ میزبان به‌ترتیب منجر به ایجاد ساختار اکسید قلع آلاییده با مقادیر آلایش مذکور می‌شود. برای مقادیر آلایش ۶/۲۵٪ و ۱۸/۷۵٪ به‌دلیل فرد بودن تعداد اتم‌های آلایش یافته در ابریاختهٔ ۲×۲×۲ محاسبات مربوط به فاز پادفرومغناطیس (AFM) امکان‌پذیر نیست، بنابراین بررسی ساختار الکترونی برای این دو نمونه، در فاز فرومغناطیس (FM) انجام شد. بررسی خواص اپتیکی نمونه‌های آلایش یافته با غلظت‌های ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ کبالت نیز برای فاز فرومغناطیس انجام شد.

نتایج و بحث

۱- محاسبات خواص الکترونی و مغناطیسی نمونه‌های $Sn_{1-x}Co_xO_2$

در شکل (۱) جایگاه‌های اتم‌های Co انتخابی برای آلایش در ابریاختهٔ ۲×۲×۲ نشان داده شده است. چنان‌که در این شکل نشان داده شده است برای آلایش ۶/۲۵٪، جانشین‌سازی یون مغناطیسی در جایگاه (۱) برای آلایش ۱۲/۵٪ جایگاه‌های (۵,۱)، برای آلایش ۱۸/۷۵٪ جایگاه‌های (۵,۳,۱) و برای آلایش ۲۵٪ جایگاه‌های (۴,۳,۲,۱) درنظر 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 SnO_2 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 SnO_2 برای فاز فرومغناطیس در جدول (۲) گزارش شده است. مقایسهٔ نتایج 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].

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]

نتایج به‌دست آمده نشان می‌دهند که فاز پایدار سیستم فرومغناطیس است. گشتاور مغناطیسی در واحد یون Co نمونه‌های $Sn_{15}CoO_{32}$ را گروه ونگ و همکاران و هم‌چنین گروه زانگ و همکاران با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی (DFT) به‌ترتیب برابر ۰/۷۶ μ_B و ۰/۷۴ μ_B گزارش کرده‌اند [۷]، [۶]. انتخاب جایگاه‌های مربوط به دو اتم Co در شکل(۱)، که در وضعیت نزدیک‌ترین همسایهٔ دوم نسبت به هم واقع شده‌اند، منجر به جفت‌شدگی فرومغناطیسی با زاویهٔ پیوند ۱۳۴/۸۵ درجه می‌شود 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 تبادل مستقیم است [۲۱]. بررسی نتایج به‌دست آمده نشان می‌دهد مقدار تفاوت انرژی بین حالت‌های فرومغناطیس و پادفرومغناطیس برابر ۱۷/۶۷meV- است که با نتایج گزارش شده توسط گروه‌های تحقیقاتی دیگر در توافق است [۷]، [۲۴].

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

آلایش	E_{FM}(Ry)	E_{AFM}(Ry)	E_{PM}(Ry)	E_{FM}-E_{AFM}(Ry)	فاز پایدار
٪۶/۲۵	-۱۹۲۸۷۶/۵۴۴۸۷	___	-۱۹۲۸۷۶/۵۲۵۶	___	FM
٪۱۲/۵	-۱۸۳۳۰۸/۰۰۲۹۵	-۱۸۳۳۰۸/۰۰۱۶۵	-۱۸۳۳۰۷/۹۷۲۵	-۰/۰۰۱۳	FM
٪۱۸/۷۵	-۱۷۳۷۳۹/۵۹۴۰۲	___	-۱۷۳۷۳۹/۵۴۲۸۵	___	FM
٪۲۵	-۱۶۴۱۷۱/۱۰۸۸۲	-۱۶۴۱۷۱/۰۹۴۱۵	-۱۶۴۱۷۱/۰۸۲۱۵	-۰/۰۱۴۶	FM

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٪.

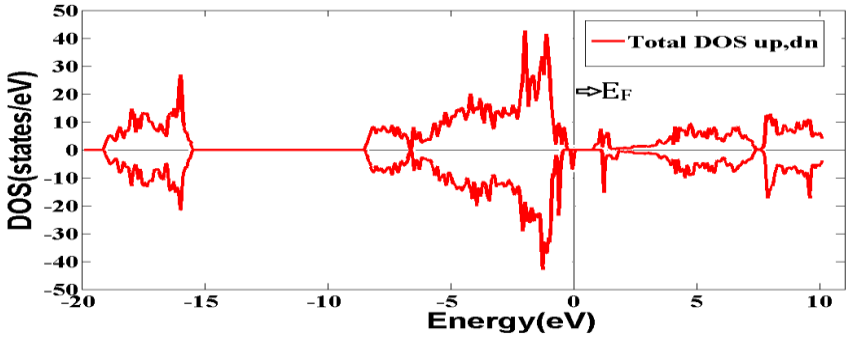
درصد آلایش	M_{tot} (μ_B)	M_{Co1} (μ_B)	M_{Co2} (μ_B)	M_{Co3} (μ_B)	M_{Co4} (μ_B)	M_{Co5} (μ_B)	گشتاور بین‌جایگاهی
٪۶/۲۵ ; فاز فرومغناطیس	۰/۹۹۹۴	۰/۷۲۱۹	___	___	___	___	۰/۰۷۰۸
٪۱۲/۵ ; فاز فرومغناطیس	۲/۱۱۳۷	۰/۸۶۱۹	___	___	___	۰/۶۸۰۳	۰/۱۷۶۷
٪۱۸/۷۵ ; فاز فرومغناطیس	۴/۲۸۷۴	۱/۲۴۴۳	___	۱/۲۴۴۳	___	۰/۷۵۷۲۷	۰/۲۷۴۰
٪۲۵ ; فاز فرومغناطیس	۸/۰۹۰۲۶	۱/۵۷۷۷	۱/۵۶۱۸	۱/۵۹۶۹	۱/۶۰۴۲	___	۰/۴۹۸۶
٪۱۲/۵ ; فاز پاد فرومغناطیس	۰/۰۰۱۱	۰/۷۳۳۵	___	___	___	-۰/۶۸۷۲۵	۰/۰۰۳۴
٪۲۵ ; فاز پادفرومغناطیس	-۰/۱۴۶۳	۱/۴۷۷۳	-۱/۳۱۳۸	۱/۴۵۷۸	-۱/۵۳۴۴	___	۰/۰۰۴۳

۲- چگالی‌حالت‌ها و ساختار نواری

رفتار چگالی حالت‌های (DOS) کلی بر حسب انرژی برای فاز فرومغناطیس نمونه $Sn_{0.9375}Co_{0.0625}O_2$ در شکل (۲) نشان داده شده است. این بررسی نشان می‌دهد چگالی حالت‌های اسپین پایین در تراز فرمی، غیرصفر است در

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]

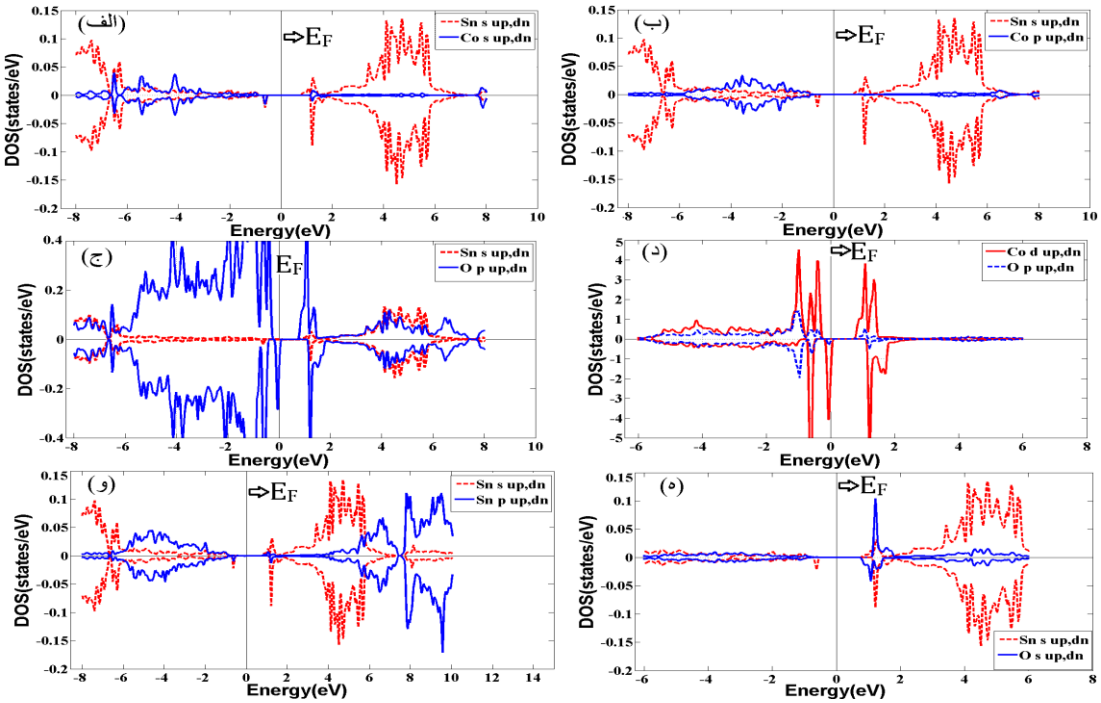
حالی که چگالی حالت‌های اسپین بالا صفر است. از این رو، به نظر می‌رسد این نمونه دارای خاصیت نیم‌فلزی باشد. این نتیجه با نتایج حاصل از کارهای نظری انجام شده گروه‌های دیگر موافق است [۶]، [۷]، [۲۱]، [۲۵].



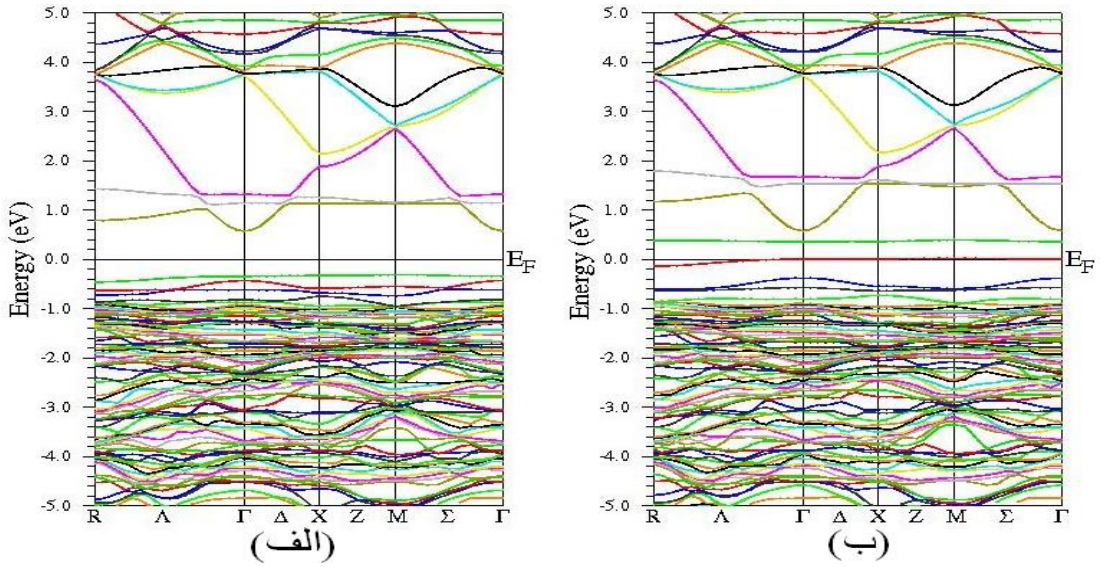
شکل۲: نمودار چگالی حالت‌های کلی محاسبه شده برای فاز فرومغناطیس نمونه $Sn_{0.9375}Co_{0.0625}O_2$

نمودار چگالی حالت‌های جزئی محاسبه شده برای هریک از اتم‌های نمونهٔ اکسید قلع آلاییده با ۶/۲۵٪ کبالت در شکل (۳) نشان داده شده است. مقایسهٔ چگالی حالت‌های محاسبه شده نشان می‌دهد بیش‌ترین سهم در نوارهای ظرفیتی نزدیک به تراز فرمی به‌ترتیب مربوط به اوربیتال‌های Co-۳d و O-۲p اختصاص دارد. هم‌چنین بیش‌ترین سهم در نوارهای رسانشی نزدیک به لبهٔ نوار به‌ترتیب مربوط به اوربیتال‌های Co-۳d و O-۲p و Sn-۵s است. با توجه به موقعیت اتم‌های نشان داده شده در ساختار بلوری (شکل۱) می‌توانیم بگوییم که چگالی حالت‌های جزئی اوربیتال d-Co مربوط به اتم کبالتی است که در جایگاه ۱ قرار می‌گیرد. همچنین چگالی حالت‌های جزئی اوربیتال O-p، مربوط به اتم اکسیژن در نزدیک‌ترین همسایه به اتم Co (جایگاه ۷) است، از این‌رو هیبریداسیون حالت‌های Co-۳d (شکل۳-د) نسبت به هیبریداسیون حالت‌های O-۲p و Sn-۵s (شکل۳-ج) قوی‌تر است. هیبریداسیون حالت‌های Co -۳d و O -۲p در نواحی بیشینهٔ نوار ظرفیت به روش شکافتگی تبادلی وابسته به حالت‌های ناخالصی واقع در گاف نواری SnCoO انجام می‌شود [۶]، [۲۱]. این بررسی نشان می‌دهد چگالی حالت‌های جزئی محاسبه شده برای Sn ، مربوط به اتم‌های Sn واقع در جایگاه (۰، ۰، ۰) در مجاورت اتم‌های Co (در جایگاه ۱) و O (در جایگاه ۷) است. ساختار نواری محاسبه شده برای نمونه $Sn_{0.9375}Co_{0.0625}O_2$ برای حالت‌های اسپین بالا و پایین در شکل (۴) نشان داده شده است. نمودارهای مربوط نشان می‌دهند برای حالت‌های اسپین بالا بیشینهٔ نوار ظرفیت در نقطهٔ Γ قرار ندارد. در ناحیهٔ تراز فرمی در نمودار چگالی حالت‌های اسپین پایین حالت‌های انرژی مربوط به اوربیتال‌های Co -۳d مشاهده می‌شود.

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]



شکل ۳: نمودار مربوط به چگالی حالت‌های جزئی عناصر نمونهٔ $Sn_{0.9375}Co_{0.0625}O_2$. الف) Sn:s، Co:s، ب) Sn:s، Co:p، ج) Sn:s، O:p، د) Co:d، O:p، ه) Sn:s، Sn:p، و) Sn:s، O:s.

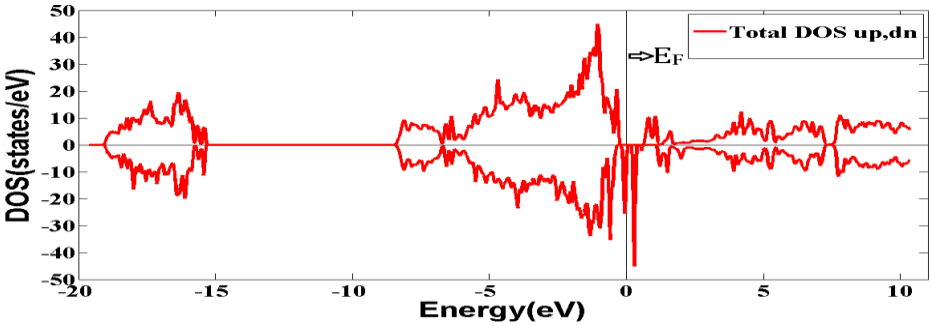


شکل۴: نمودار ساختار نواری نمونه $Sn_{0.9375}Co_{0.0625}O_2$. ا لف) حالت‌های اسپین بالا ب) حالت‌های اسپین پایین.

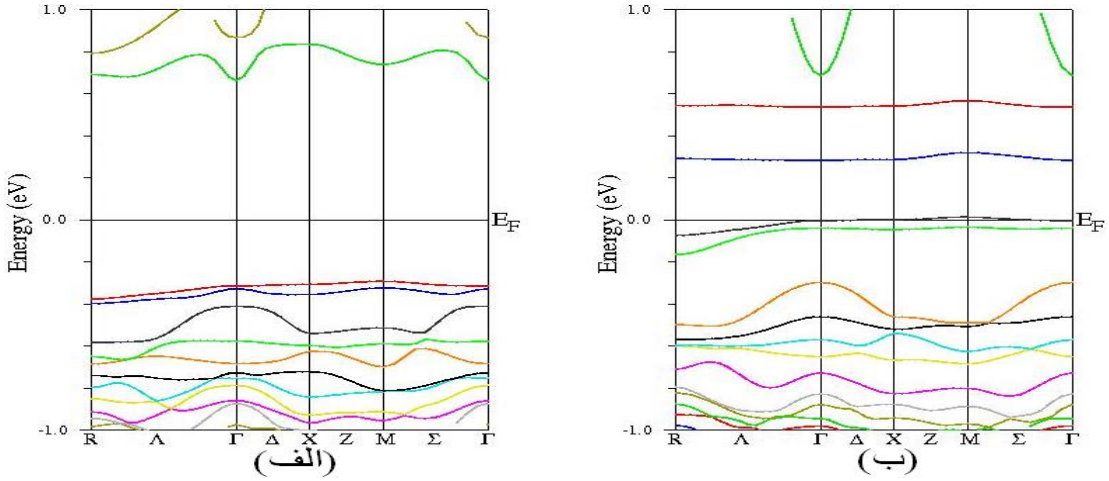
نمودار چگالی حالت‌های کلی محاسبه شده برای فاز فرومغناطیس نمونه $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_2$ در شکل (۵) نشان داده شده است. چگالی حالت‌ها نزدیک به تراز فرمی (لبهٔ نوار ظرفیت)، به‌طور عمده متشکل ازحالت‌های مربوط به اوربیتال‌های Co-۳d و O-۲p است. با توجه به حضور چگالی حالت‌های اسپین پایین در تراز فرمی، این 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 می‌دهد بیشینهٔ نوار ظرفیت در نقطهٔ Γ

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]

قرار ندارد. چنان‌که در شکل (۶- ب) مشاهده می‌شود نوار انرژی مربوط به حالت‌های Co-۳d در تراز فرمی است و منشأ رفتار نیم‌فلزی این ترکیب به حالت‌های اسپین پایین وابسته است.



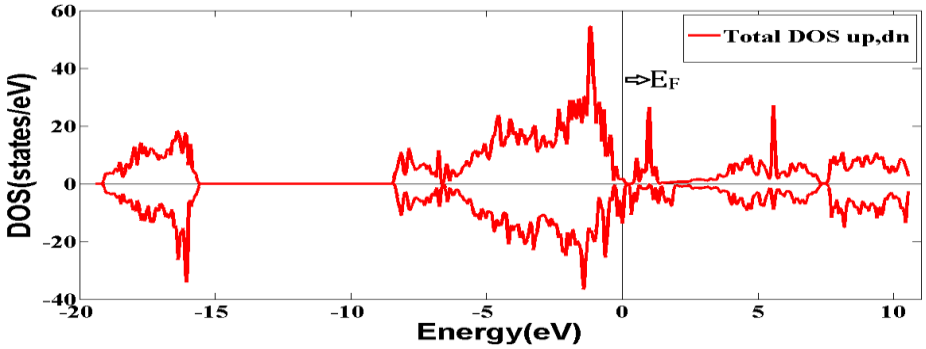
شکل۵: نمودار چگالی حالت‌های کلی نمونه $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_2$ در فاز فرومغناطیس.



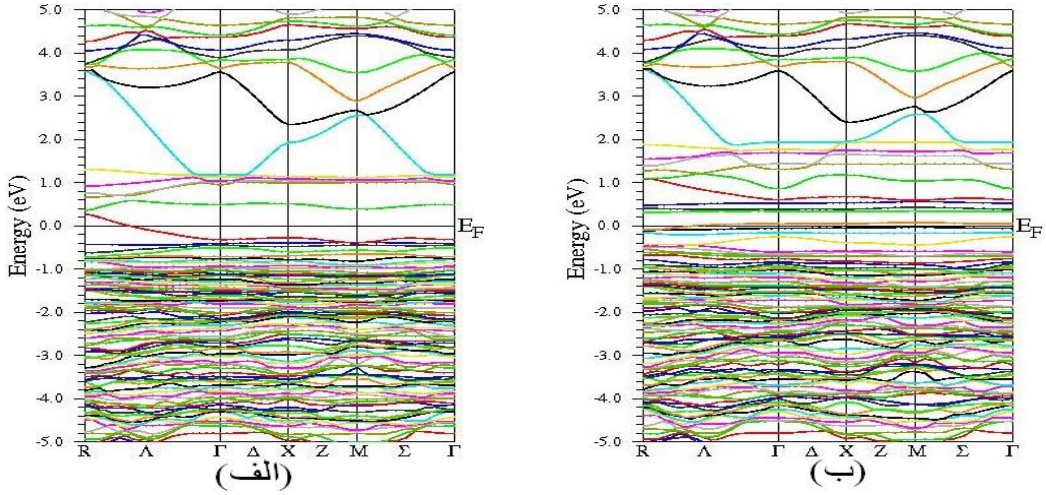
شکل۶: نمودار ساختار نواری نمونه $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_2$ برای حالت‌های الف) اسپین بالا ب) اسپین پایین.

نمودار چگالی حالت‌های کلی محاسبه شده برای فاز فرومغناطیس نمونه $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_2$ 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-۳d و O-۲p 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-۳d که از تراز فرمی عبور می‌کند منجر به خاصیت فلزی این نمونه می‌شوند.

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]



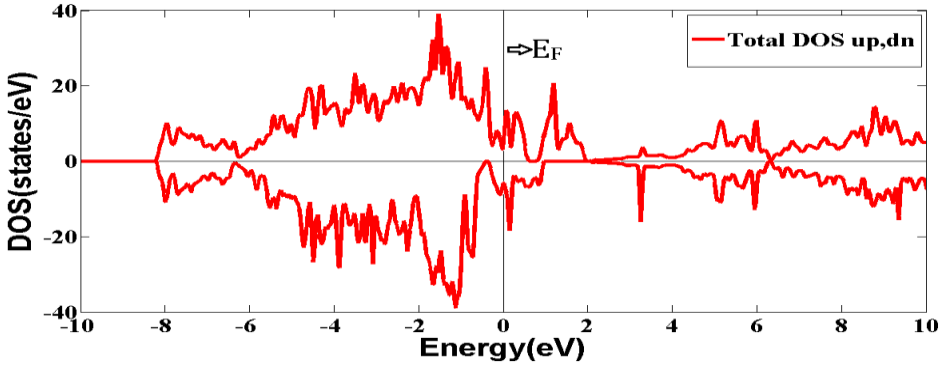
شکل۷: نمودار چگالی حالت‌های کلی نمونهٔ $Sn_{0.8125}Co_{0.1875}O_2$ در فاز فرومغناطیس.



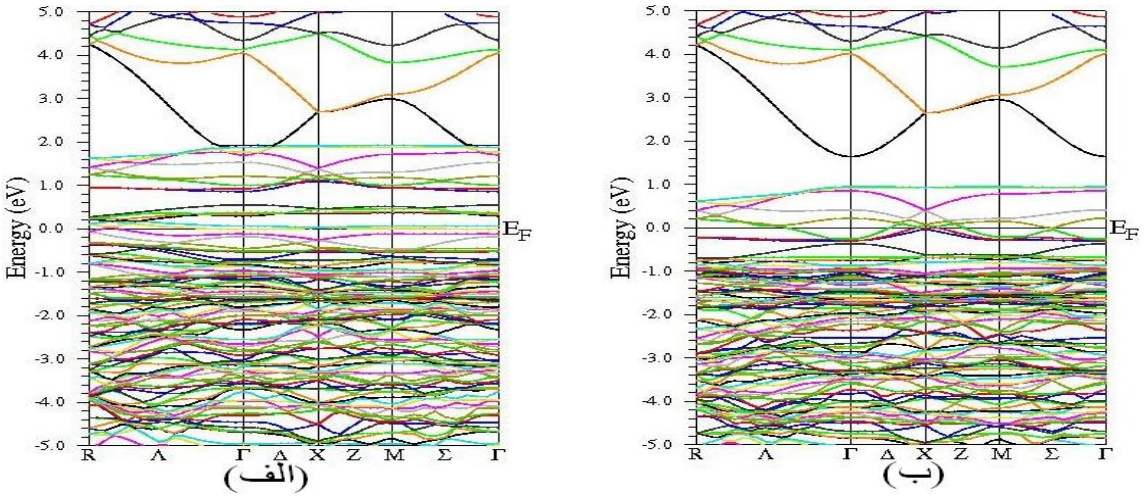
شکل ۸ : نمودارساختار نواری نمونه $Sn_{0.8125}Co_{0.1875}O_2$ برای: الف) حالت‌های اسپین بالا ب) حالت‌های اسپین پایین.

نمودار چگالی حالت‌های کلی محاسبه شده برای فاز فرومغناطیس نمونه $Sn_{0.75}Co_{0.25}O_2$ 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 meV۱۹۸/۵۶- به‌دست آمد. چنان‌که در شکل (۹) دیده می‌شود حضور چگالی حالت‌ها در تراز فرمی منجر به خاصیت فلزی این ترکیب می‌شود. مقایسهٔ نمودارهای چگالی حالت‌های کلی برای ساختارهای آلایش یافته با درصدهای ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪، ۱۸/۷۵٪ و ۲۵٪ کبالت، نشان می‌دهد که افزایش غلظت ناخالصی Co و هم‌چنین افزایش میزان هیبریداسیون اوربیتال‌های Co-۳d و O-۲p در نوار ظرفیت و نوار رسانش سبب افزایش چگالی حالت‌ها در مجاورت لبهٔ نوار ظرفیت و لبهٔ نوار رسانش و هم‌چنین در تراز فرمی می‌شود. نمودار ساختار نواری مربوط به حالت‌های اسپین بالا و پایین این نمونه در شکل (۱۰) نشان داده شده است. حضور نوارهای ناخالصی Co-۳d در تراز فرمی منجر به خاصیت فلزی در این ترکیب می‌شود.

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]



شکل۹: نمودار چگالی حالت‌های کلی فاز فرومغناطیس نمونه $Sn_{0.75}Co_{0.25}O_2$.



شکل۱۰: نمودارهای ساختار نواری نمونه $Sn_{075}Co_{0.25}O_2$. الف) حالت‌های اسپین بالا ب) حالت‌های اسپین پایین.

۳- محاسبهٔ ساختار الکترونی نمونه $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_{0.9375}$ در حضور تهی‌جاهای اکسیژن

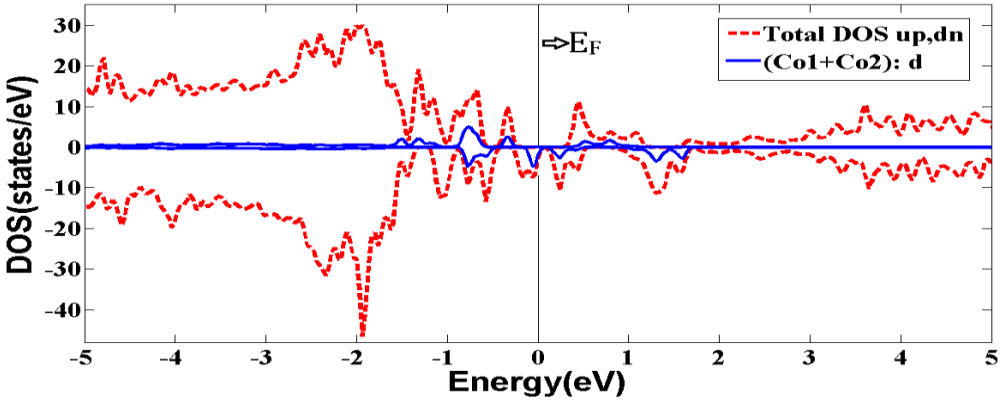
در این کار ساختار الکترونی نمونه اکسید قلع آلاییده با ۱۲/۵٪ کبالت در فاز فرومغناطیس با حضور تهی‌جای اکسیژن نیز بررسی شد. با توجه به شکل ۱ موقعیت آلایش اتم‌های کبالت در ساختار نمونه $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_{0.9375}$ مشابه موقعیت آلایش این اتم‌ها در ساختار نمونه $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_2$، در نظر گرفته شد (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 Sn^{4+} و Co^{2+} با برداشتن یک اکسیژن در شبکهٔ هشت وجهی اطراف یون کبالت، برطرف شود [۲۱]. نتایج حاصل از محاسبهٔ گشتاور مغناطیسی کل، گشتاور مغناطیسی یون‌های Co و انرژی کل در فاز فرومغناطیس نمونه $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_{0.9375}$ در جدول (۳) گزارش شده است. مقایسهٔ نتایج حاصل از آلایش ۱۲/۵٪ کبالت در دو سیستم $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_2$ و $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_{0.9375}$

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]

(جدول‌های۲و۳) نشان می‌دهد که حضور تهی‌جای اکسیژن سبب افزایش گشتاور مغناطیسی یون‌های کبالت می‌شود. مقادیر به‌دست 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 می‌دهد 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 $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_{0.9375}$.

آلایش	$M_{tot}(\mu_B)$	$M_{Co1}(\mu_B)$	M_{Co2} (μ_B)	E(Ry)
سیستم فرومغناطیس $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_{0.19375}$	۳/۹۳۸۱۴	۱/۴۸۲۷۸	۱/۴۲۱۱۹	-۱۸۳۱۵۸/۰۳۷۰۲۶



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]. $\varepsilon_1(\omega)$ و $\varepsilon_2(\omega)$ به‌ترتیب قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک هستند. بخش حقیقی تابع دی الکتریک توصیف‌کنندهٔ میزان قطبش محیط و جریان حامل بار در حضور میدان خارجی است [۲۶]. بخش موهومی تابع دی الکتریک اختلال وابسته به زمان برای حالت‌های الکترونی در وضعیت پایه است و برای توصیف برهم‌کنش الکترون با فوتون یک شاخص مؤثر

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]

است [۲۷]. به‌ازای $\varepsilon_1(\omega)\succ 0$، مادهٔ رفتار دی‌الکتریکی و به ازای $\varepsilon_1(\omega)\prec 0$، مادهٔ رفتار فلزی از خود نشان می‌دهد [۲۳].

$$\varepsilon_1(\omega)=1+\frac{2}{\pi}P\int_0^\infty \frac{\omega'\varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2-\omega^2}d\omega' \qquad (۱)$$

$$\varepsilon_2(\omega)=-\frac{2}{\omega\pi}P\int_0^\infty \frac{\omega'^2\left[\varepsilon_1(\omega')-1\right]}{\omega'^2-\omega^2}d\omega' \qquad (۲)$$

نمودار قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک برحسب انرژی در شکل (۱۲- الف) نشان داده شده است. مقادیر ثابت دی‌الکتریک استاتیک $\varepsilon_1(\omega=0)$، برای نمونهٔ خالص و نمونه‌های آلاییده با غلظت‌های ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ به‌ترتیب ۳/۵، ۵/۴، ۱۱/۲۳و ۸/۸۴ به‌دست 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 ۱۲/۵٪، قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک افزایش و سپس با افزایش بیش‌تر آلایش تا ۲۵٪، مجدداً کاهش می‌یابد. برای نمونه‌های آلاییده با ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ کبالت تابع دی‌الکتریک مربوطه به‌ترتیب از انرژی‌های ۱۰/۲۴eV، ۱۰/۲۴eV و ۱۱/۴۱eV به بعد منفی می‌شود.

در شکل (۱۲-ب) نمودار بخش موهومی تابع دی‌الکتریک، $\varepsilon_2(\omega)$، 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، ۶/۰۳eV 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 می‌شود. مقایسهٔ طیف‌های به‌دست آمده نشان می‌دهد 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 آلایش کبالت تا ۲۵٪، شدت وابسته به قله‌های مربوط به گذارهای O-۲p به Sn-۵s، O-۲p به Sn-۵p، O-۲s 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 Sn-۵s باشند. در مورد این گذارها مشاهده می‌شود که با افزایش غلظت آلایش، شدت قله‌ها افزایش می‌یابد. در

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]

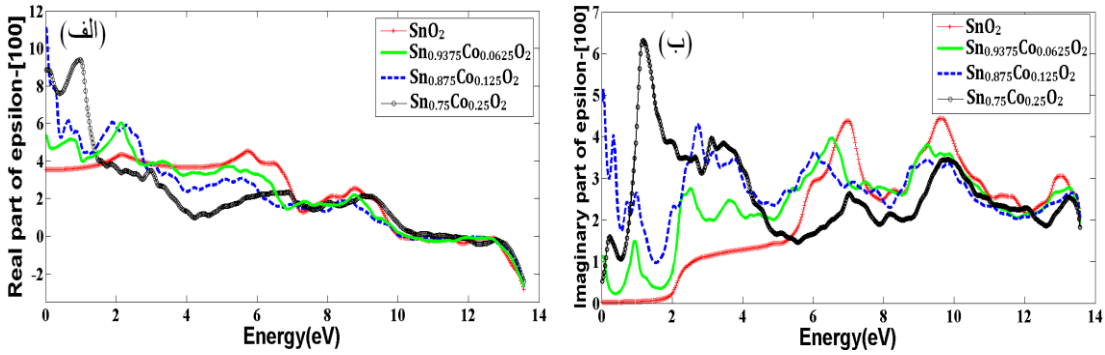
انرژی‌های خیلی کم مشاهده می‌شود که اولین قله ابتدا در نمونهٔ آلاییده شامل ۱۲/۵٪ و سپس به ترتیب در نمونه‌های آلاییده شامل ۲۵٪ و ۶/۲۵٪ کبالت ظاهر می‌شود و برای نمونهٔ خالص قله‌ای مشاهده نمی‌شود. برای نمونه‌های آلاییده اولین قله‌ها را می‌توان مربوط به گذار از حالت‌های Co-۳d به حالت‌های Sn-۵s دانست. این در حالی‌ست که در نمونهٔ خالص اولین گذار از حالت‌های O-۲p - به Sn-۵s، رخ می‌دهد. لبهٔ جذب اپتیکی به دلیل کاهش گاف نواری در نمونه‌های آلاییده (تا ۱۲/۵٪) نسبت به نمونهٔ خالص به سمت انرژی‌های کوچک‌تر(جابه‌جایی قرمز) جابه‌جا می‌شود. کوچک‌تر شدن لبهٔ جذب اپتیکی در نمونه‌های آلاییده نسبت به نمونهٔ خالص را می‌توان به اولین گذار مرتبط دانست، چنان‌چه در نمودارهای چگالی حالت‌ها و ساختار نواری نواری مربوط به نمونه‌های آلاییده نیز مشاهده نمودیم که تراز فرمی به طورعمده متشکل از حالت‌های Co-۳d است. نتایج مشاهده شده با نتایج تجربی گزارش شده توسط گروه‌های دیگر در توافق است [۱]، [۲]، [۱۴].

۲- ضریب درآشامی

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

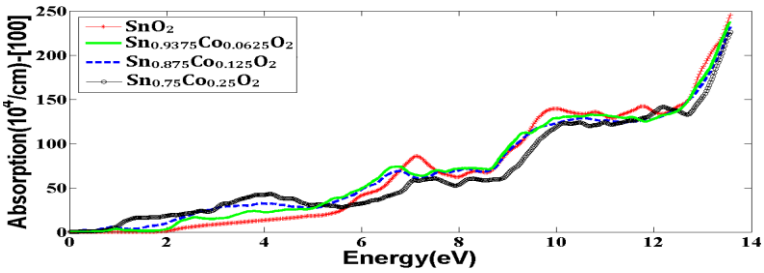
$$I(\omega)=\sqrt{2}(\omega/c)\left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega)+\varepsilon_2^2(\omega)}-\varepsilon_1(\omega)\right]^{0.5} \qquad (3)$$

نمودار ضریب درآشامی $I(\omega)$ محاسبه شده بر حسب انرژی در شکل (۱۳) نشان داده شده است. چنان‌که در این طیف دیده می‌شود برای انرژی‌های تا حدود ۴/۸eV با افزایش غلظت آلایش میزان جذب افزایش می‌یابد و سپس افزایش غلظت آلایش سبب کاهش در جذب امواج الکترومغناطیسی می‌شود. موقعیت قلهٔ متناظر با انرژی ۷/۱۴eV مشاهده شده در نمونهٔ خالص یک جابه‌جایی قرمز در نمونه‌های آلاییده با غلظت‌های ۶/۲۵٪ و ۱۲/۵٪ و یک جابه‌جایی آبی در نمونهٔ آلاییده با غلظت ۲۵٪ را نشان می‌دهد. میزان جذب به ازای انرژی ۰/۲۰۴eV، برای نمونهٔ خالص و نمونه‌های آلاییده با غلظت‌های ۶/۲۵٪ ، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ به‌ترتیب برابر با ۱۲۹cm^{-1}، ۱۸۹۳/۳cm^{-1}، ۱۰۸۱۹/۷cm^{-1} و ۵۶۱۵cm^{-1} است. به‌همین دلیل لبهٔ جذب اپتیکی در نمونه‌های آلاییده نسبت به نمونهٔ خالص به سمت انرژی‌های کم‌تر کشیده می‌شود.



شکل۱۲: نمودار تابع دی‌الکتریک برحسب انرژی برای نمونه $Sn_{1-x}Co_xO_2$ در راستای [۱۰۰]، الف) بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک. ب) بخش موهومی تابع دی‌الکتریک

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]



شکل۱۳: نمودار ضریب درآشامی برحسب انرژی برای نمونه $Sn_{1-x}Co_xO_2$ 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]:

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

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 ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ کبالت، به ترتیب برابر با ۲/۳۳، ۳/۱۳ و ۲/۹۷ به‌دست آمد. چنان‌که در این شکل دیده می‌شود، در محدودهٔ انرژی ۰eV- ۳/۶۸ برای نمونهٔ خالص و نمونه‌های آلاییده با غلظت‌های ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ با افزایش درصد آلایش، ضریب شکست ماده افزایش و در محدودهٔ انرژی‌های بالاتر از آن، با افزایش درصد آلایش کم می‌شود. چنان‌که قبلاً نیز اشاره شد، قله‌های مشاهده شده روی منحنی ضریب خاموشی، منطبق بر قله‌های مربوط به نمودار ضریب درآشامی است که مشابه رفتار $\varepsilon_2(\omega)$ و $I(\omega)$، با افزایش غلظت آلایش تا ۱۲/۵٪، برای قله‌های متناظر یک جابه‌جایی قرمز و با افزایش غلظت آلایش تا ۲۵٪، یک جابه‌جایی آبی از خود نشان می‌دهند. بررسی طیف (۱۴- ب) نشان می‌دهد که با افزایش آلایش، جذب ماده در محدودهٔ انرژی ۵/۲۶-۰/۹۳eV افزایش و سپس از محدودهٔ انرژی ۵/۷۲eV به بعد کاهش می‌یابد یعنی امواج راحت‌تر در ماده نفوذ می‌کنند [۳۲].

۴- بازتابندگی

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

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

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]

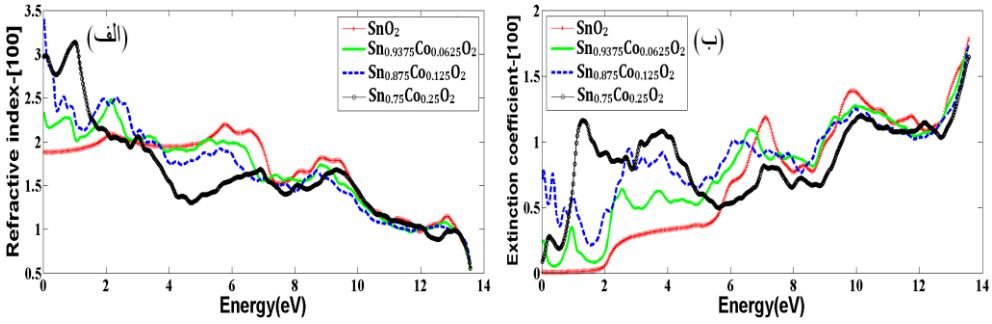
نمودار طیف بازتابندگی برحسب انرژی برای نمونه‌های خالص و آلاییده با کبالت در شکل (۱۵-الف)، نشان داده شده است. چنان‌که در این شکل دیده می‌شود، با افزایش آلایش، بازتابندگی در محدودهٔ انرژی ۰/۳۶eV-۴/۵۸ افزایش می‌یابد. با مقایسه طیف های مربوطه مشاهده می‌شود که با افزایش غلظت آلایش تا ۲۵٪ میزان جذب و بازتابندگی در ناحیهٔ مرئی افزایش می‌یابند. هم‌چنین در محدودهٔ انرژی ۱۲/۲۰eV-۱۳/۶ بازتابندگی نمونه‌ها افزایش می یابد. میزان بازتابندگی نمونه‌های خالص و آلاییده با غلظت‌های ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪، در انرژی ۱۳/۵۶eV به‌ترتیب در حدود ۶۰٪، ۵۹٪، ۵۶٪ و ۵۶٪ هستند.

۵- رسانندگی اپتیکی

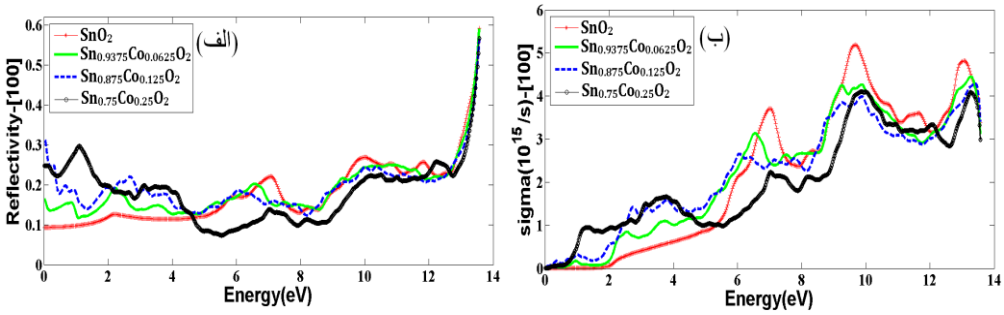
رسانندگی اپتیکی ماده با رابطه (۶) داده می شود [۳۱] :

$$\sigma(\omega)=(i\omega/4\pi)(1-\varepsilon(\omega)) \qquad (6)$$

نمودار رسانندگی اپتیکی برحسب انرژی برای نمونه‌های خالص و آلاییده اکسید قلع در شکل (۱۵-ب) نشان داده شده است. بررسی این طیف نشان‌گر 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 ۶/۲۵٪، با انرژی ۶/۰۵eV 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 ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ به ترتیب در انرژی‌های ۹/۶۷eV، ۹/۲۳eV، ۹/۲۳eV و ۹/۸۳eV رخ می‌دهد.



شکل۱۴: الف) نمودار ضریب شکست برحسب انرژی در ترکیب $Sn_{1-x}Co_xO_2$ در راستای [۱۰۰]. ب) نمودار ضریب‌خاموشی برحسب انرژی در ترکیب $Sn_{1-x}Co_xO_2$ در راستای [۱۰۰].



شکل۱۵: الف) نمودار بازتابندگی برحسب انرژی در ترکیب $Sn_{1-x}Co_xO_2$ در راستای [۱۰۰]. ب) نمودار رسانندگی اپتیکی برحسب انرژی در ترکیب $Sn_{1-x}Co_xO_2$ در راستای [۱۰۰].

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]

نتیجه‌گیری

در این کار ساختار الکترونی و خواص مغناطیسی و اپتیکی نمونه‌های خالص SnO2 و آلاییده $Sn_{1-x}Co_xO_2$ (۰/۰۶۲۵، ۰/۱۲۵، ۰/۱۸۷۵ و x=۰/۲۵) با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی بررسی شدند. اثر تهی‌جای 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 ۳d یون کبالت در نزدیکی تراز فرمی می‌شود. بررسی فاز پایدار مغناطیسی نمونه‌های آلاییده نشان داد که در آلایش‌های ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ فاز پایدار شبکه فرومغناطیس است. حضور تهی‌جای اکسیژن در نمونه فرومغناطیسی $Sn_{0.875}Co_{0.125}O_{0.9375}$ نزدیک به یون کبالت منجر به افزایش گشتاور مغناطیسی یون‌های کبالت می‌شود. بررسی خواص اپتیکی نمونهٔ خالص و نمونه‌های آلاییده با ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ کبالت نشان داد که با افزایش غلظت آلایش تا ۱۲/۵٪، گاف نواری اپتیکی کاهش و سپس با افزایش بیش‌تر آن تا ۲۵٪، گاف نواری اپتیکی افزایش می‌یابد. با افزایش آلایش تا ۱۲/۵٪، شدت مربوط به اولین قله‌ها در طیف تابع دی‌الکتریک نمونه‌ها، هم‌چنین ضرایب درآشامی و خاموشی افزایش و شدت مربوط به قله‌های ظاهر شده در محدودهٔ انرژی‌های بالاتر از ۶eV کاهش می‌یابند. با توجه به طیف‌های بازتابندگی و ضریب درآشامی مشخص شد که با افزایش غلظت آلایش تا ۲۵٪ میزان عبور فوتون در ناحیهٔ مرئی کاهش می‌یابد.

منابع

1. Xiaohua Liu, Shaojun Chen, Ming Li, Xiaodong Wang, Thin Solid Films 515 (2007) 6744-6748.
2. 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.
4. 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.
5. 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.
7. Hongxia Wang, Yu Yan, Y.Sh. Mohammed, Xiaobo Du, Kai Li, Hanmin Jin, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 321(2009) 3114-3119.

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]

[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]

8. 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).

9. 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.

14. 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).

16. 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).

19. 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).

21. 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 2025-12-22]

[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]

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.

25. 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).

27. 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.

28. 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).

30. 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.

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2025-12-22]

[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.13]