

## بررسی ساختار الکترونی، خواص مغناطیسی و اپتیکی نیم‌رسانای $\text{Sn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_2$ با استفاده از نظریه تابعی چگالی

منارستمی، محمدابراهیم قاضی\*، مرتضی ایزدی‌فر؛

دانشگاه شاهرود، دانشکده فیزیک

دریافت ۹۳/۶/۱۸ پذیرش ۹۴/۴/۸

### چکیده

در این مقاله ساختار الکترونی و خواص مغناطیسی و اپتیکی نمونه‌های خالص  $\text{SnO}_2$  و آلاییده  $\text{Sn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_2$  (X=۰/۲۵ و ۰/۱۸۷۵، ۰/۱۲۵، ۰/۰۶۲۵) با استفاده از نظریه 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-3d در نزدیکی تراز فرمی می‌شود. بررسی فاز پایدار مغناطیسی نمونه‌های آلاییده نشان داد که در آلایش‌های ۰/۱۲/۵ و ۰/۲۵ فاز پایدار شبکه فرومغناطیس است. حضور تهی جای اکسیژن در نمونه فرومغناطیسی  $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_{0.9375}$  نزدیک به یون کبالت منجر به افزایش گشتاور مغناطیسی یون‌های کبالت می‌شود. بررسی خواص اپتیکی نمونه خالص و نمونه‌های آلاییده با ۰/۱۲/۵ و ۰/۲۵ کبالت نشان داد که با افزایش غلظت آلایش تا ۰/۱۲/۵، گاف نواری اپتیکی کاهش و سپس با افزایش بیش‌تر آن تا ۰/۲۵، گاف نواری اپتیکی افزایش می‌یابد. با افزایش آلایش تا ۰/۱۲/۵، شدت مربوط به اولین قله‌ها در طیف تابع دی‌الکتریک نمونه‌ها، هم‌چنین ضرایب درآشامی و خاموشی افزایش و شدت مربوط به قله‌های ظاهر شده در محدوده انرژی‌های بالاتر از ۶eV کاهش می‌یابند. با توجه به طیف‌های بازتابندگی و ضریب درآشامی مشخص شد که با افزایش غلظت آلایش تا ۰/۱۲/۵ میزان عبور فوتون در ناحیه مرئی کاهش می‌یابد.

واژه‌های کلیدی: نظریه تابعی چگالی، خواص مغناطیسی، اکسید قلع آلاییده با کبالت، خواص اپتیکی، تهی جا

### مقدمه

اکسید قلع ( $\text{SnO}_2$ ) یک اکسید نیم‌رسانای شفاف نوع n با ساختار چهارگوشی روتایل و گاف نواری پهن ۳/۶ eV (در دمای اتاق) و مقاومت ویژه کم ( $2-4/3 \times 10^{-24} \Omega \cdot \text{cm}$ ) است [۱]. در ترکیب خالص اکسید روی حضور تهی‌جای اکسیژن به‌عنوان دهنده نوع n عمل می‌کنند. به‌دلیل این ویژگی‌ها، این ترکیب پتانسیل بسیار خوبی برای کاربردهای متنوع الکترونیکی و اپتیکی دارد. به‌عنوان مثال از این ترکیب می‌توان در ساخت سلول‌های خورشیدی، دیودهای نور گسیل، الکترودهای شفاف برای تهیه نمایشگرهای صفحه تخت، آشکارسازهای مادون قرمز، حس‌گرهای گازی و ترانزیستورهای لایه نازک فروالکترونیک استفاده کرد [۲]، [۴]. از سوی دیگر آلایش اکسید قلع با درصد کمی از عناصر واسطه نظیر Mn، Fe و Co منجر به تولید نیم‌رسانای مغناطیسی رقیق شده می‌شود که از آن می‌توان برای

ساخت قطعات اسپینترونیکی استفاده کرد [۵]. نتایج تجربی گزارش شده بیان‌گر این واقعیت است که در نیم‌رساناهای مغناطیسی رقیق شده، خاصیت مغناطیسی نمونه‌ها به‌روشنی آماده‌سازی آن‌ها بستگی دارد [۶]، [۷]. به‌عنوان مثال برای گشتاور مغناطیسی نمونه‌های  $\text{SnO}_2$  آلیایده با Co که با روش‌های مختلفی سنتز شده‌اند، مقادیر متفاوتی گزارش شده است. گروه اوگل و همکاران برای لایه‌های نازک  $\text{SnO}_2$  آلیایده با Co فاز فرومغناطیسی در دمای کوری  $650 \text{ K}$  گزارش کرده‌اند. گشتاور مغناطیسی این نمونه‌ها در حدود  $7/5 \mu_B$  به‌ازای آرایش  $5\%$  کبالت گزارش شده است [۸]. هم‌چنین نتایج تحقیقات تجربی نشان داده است که نمونه‌های  $\text{SnO}_2$  آلیایده 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  $\text{Sn}_{0.95}\text{Co}_{0.05}\text{O}_2$  که با استفاده از روش رسوب لیزر پالسی روی زیرلایه  $\text{Si}(100)$  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  $1/3 (\mu_B/\text{Co})$  است. حضور تهی‌جاها 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 آرایش یافته با  $10\%$  کبالت که با روش رسوب لیزر پالسی تهیه شده‌اند، دارای خاصیت فرومغناطیسی با گشتاور مغناطیسی  $0/54 (\mu_B/\text{Co})$  در دمای اتاق هستند. برای نمونه‌های آرایش یافته با غلظت  $20\%$  کبالت نیز خاصیت فرومغناطیسی در دمای اتاق گزارش شده است [۱۱]. گروه اکس-اف-لیو خواص مغناطیسی نمونه‌های  $\text{SnO}_2$  آلیایده با Co روی زیرلایه‌های سیلیکونی را گزارش کردند [۱۲]. نتایج اندازه‌گیری‌های این گروه نشان می‌دهد، همه 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 شده 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 نمونه  $\text{SnO}_2$  آلیایده با Co،  $0/83 (\mu_B/\text{Co})$  به‌دست آمد [۱۲]. بررسی خواص مغناطیسی نانو ذرات  $\text{SnO}_2$  آلیایده با  $37/3\%$  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  $\text{SnO}_2$  آلیایده با Co رشد داده شده با روش سل‌ژل را بررسی کردند و نشان دادند که با افزایش غلظت Co تا  $20\%$ ، اندازه بلورک‌ها افزایش یافته و لبه جذب در ناحیه طیف مرئی و فرابنفش یک جابه‌جایی قرمز نشان می‌دهد [۱۴]. براساس نتایج گزارش شده گروه لیو، لبه جذب در لایه‌های نازک  $\text{SnO}_2$  آلیایده با Co تا میزان  $12\%$ ، ابتدا یک جابه‌جایی قرمز و سپس به‌ازای غلظت‌های بیش‌تر، یک جابه‌جایی آبی نشان داد [۱]. در نمونه‌های نانو ذرات  $\text{SnO}_2$  آلیایده با Co که با روش رسوب شیمیایی به‌وسیله گروه سیتی اسیلان و همکاران سنتز شدند، افزایش غلظت آرایش تا  $5\%$ ، منجر به یک جابه‌جایی قرمز در نواحی طیف مرئی و فرابنفش شد [۲]. هم‌چنین در لایه‌های  $\text{SnO}_2$  آلیایده با  $10$ ،  $20$  و  $30$  درصد کبالت تهیه شده به‌روش سل‌ژل مشخص شد که با افزایش آرایش Co، عبور اپتیکی کاهش می‌یابد [۱۵].

در این مقاله ساختار الکترونی، خواص مغناطیسی و اپتیکی نمونه‌های حجمی  $\text{Sn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_2$  (۰/۰۶۲۵، ۰/۱۲۵، ۰/۱۸۷۵ و  $x=0/25$ ) با استفاده از نظریه 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

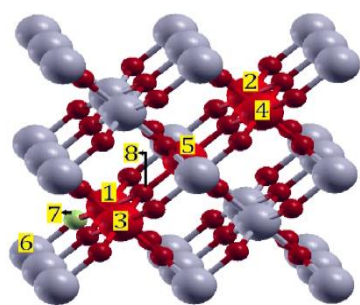
برای انجام این پژوهش از کد محاسباتی WIEN2k که بر پایه نظریه تابعی چگالی استوار است، استفاده شد. استفاده از نظریه تابعی چگالی راه حل مناسبی برای حل معادله شرودینگر است. در این نظریه، تابعی چگالی الکترونی به‌عنوان متغیر اصلی در نظر گرفته شده و معادله بس ذره‌ای به تعدادی معادله تک ذره تبدیل می‌شود. سپس این معادلات تک ذره‌ای با استفاده از روش‌های تقریبی حل می‌شوند. امروزه استفاده از نظریه تابعی چگالی در حل مسائلی نظیر محاسبه انرژی بستگی مولکول‌ها و محاسبه ساختار نواری جامدات و همچنین مسائل مربوط به ابررسانایی و خواص مغناطیسی مواد به امری رایج تبدیل شده است [۱۶]. گام اول در نظریه 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 معادله 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 تبدیلی-هم‌بستگی را با در نظر گرفتن اسپین الکترون مشخص نمود. با توجه به این‌که اندازه 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 به روش 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 پایه مناسب (توابع موج تک‌الکترونی) تقسیم‌بندی بلور (سلول واحد) به دو ناحیه با عنوان ناحیه کره‌های مافین تین (کره‌های بدون هم‌پوشانی) و ناحیه بین جایگاهی (فضای بین این کرات) است. در روش FL-LAPW مجموعه پایه معرفی شده در داخل کره مافین تین با شعاع  $R_{mt}$ ، تلفیق خطی از توابع شعاعی (هارمونیک‌های کروی) است و مجموعه پایه معرفی شده در ناحیه بین جایگاهی، توابع موج مربوط به امواج تخت است. بسط بردار موج  $\bar{K}$  در نواحی مافین تین تا  $K_{max}$  و در نواحی بین جایگاهی تا  $G_{max}$  (بردار موج قطع) انجام می‌گیرد [۱۸]. در این کار مقدار پارامتر  $R_{mt} \cdot K_{max}$  برابر با ۷ انتخاب شد. پارامتر  $R_{mt}$  برای O، Sn و Co متناسب با شعاع اتمی مربوط به این عناصر، به ترتیب برابر ۱/۹، ۱/۶۵ و ۱/۷۶ در نظر گرفته شدند [۲۰].

مقدار  $G_{max}$  برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه بین جایگاهی برابر با  $17 \text{ (a.u.}^{-1}\text{)}$  انتخاب شد. با توجه به ساختار بلوری  $\text{SnO}_2$  (روتایل تتراگونال با گروه فضایی  $P42/mnm$  و ثابت‌های تجربی  $a=b=4.737 \text{ \AA}$  و  $c=3.186 \text{ \AA}$ ) جایگاه اتم‌های Sn در  $(0,0,0)$  و  $(0.5,0.5,0.5)$  و جایگاه اتم‌های O نیز در  $(0.5,0.5,u)$  و  $(0.5,0.5,u)$  و  $(0.5,0.5,-u)$  و  $(0.5,0.5,-u)$  با  $u=0.307$  انتخاب شدند [۲۱]، [۲۳]. محاسبات مربوط به ساختار  $\text{SnO}_2$  آلیپده با  $12/5\%$ ،  $6/25\%$ ،  $18/75\%$  و  $25\%$  کبالت در یک ابریاخته  $2 \times 2 \times 2$  انجام شد. لازم به ذکر است که جانشین‌سازی یک، دو، سه و چهار یون Co در ابریاخته میزبان به ترتیب منجر به ایجاد ساختار اکسید قلع آلیپده با مقادیر آلیش مذکور می‌شود. برای مقادیر آلیش  $6/25\%$  و  $18/75\%$  به دلیل فرد بودن تعداد اتم‌های آلیش یافته در ابریاخته  $2 \times 2 \times 2$  محاسبات مربوط به فاز پادرومغناطیس (AFM) امکان‌پذیر نیست، بنابراین بررسی ساختار الکترونی برای این دو نمونه، در فاز فرومغناطیس (FM) انجام شد. بررسی خواص اپتیکی نمونه‌های آلیش یافته با غلظت‌های  $6/25\%$ ،  $12/5\%$  و  $25\%$  کبالت نیز برای فاز فرومغناطیس انجام شد.

## نتایج و بحث

### ۱- محاسبات خواص الکترونی و مغناطیسی نمونه‌های $\text{Sn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_2$

در شکل (۱) جایگاه‌های اتم‌های Co انتخابی برای آلیش در ابریاخته  $2 \times 2 \times 2$  نشان داده شده است. چنان‌که در این شکل نشان داده شده است برای آلیش  $6/25\%$ ، جانشین‌سازی یون مغناطیسی در جایگاه (۱) برای آلیش  $12/5\%$  جایگاه‌های (۵، ۱)، برای آلیش  $18/75\%$  جایگاه‌های (۵، ۳، ۱) و برای آلیش  $25\%$  جایگاه‌های (۴، ۳، ۲، ۱) در نظر گرفته شدند. نتایج حاصل از محاسبات مربوط به انرژی حالت پایه فازهای مختلف مغناطیسی در نمونه‌های آلیپده با Co در جدول ۱ گزارش شده است.



آلیش Co:

مکان ۱: (0.25,0.25,0.25)

مکان ۲: (0.75,0.75,0.25)

مکان ۳: (0.25,0.25,0.75)

مکان ۴: (0.75,0.75,0.75)

مکان ۵: (0.5,0.5,0.5)

مبدأ ← مکان ۶: (0,0,0)

اکسیژن ← مکان ۷: (0.1535,0.1535,0)

تهی‌جای اکسیژن ← مکان ۸: (0.3465,0.3465,0.5)

شکل ۱. ساختار ابریاخته  $2 \times 2 \times 2$   $\text{SnO}_2$  با نمایش جایگاه‌های آلیش 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  $\text{SnO}_2$  برای فاز فرومغناطیس در جدول (۲) گزارش شده است. مقایسه نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که با افزایش آلیش 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  $\text{Sn}_{15}\text{CoO}_{32}$  را گروه ونگ و همکاران و هم‌چنین گروه زانگ و همکاران با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) به ترتیب برابر  $0.76 \mu_B$  و  $0.74 \mu_B$  گزارش کرده‌اند [۷]، [۶]. انتخاب جایگاه‌های مربوط به دو اتم Co در شکل (۱)، که در وضعیت نزدیک‌ترین همسایه دوم نسبت به هم واقع شده‌اند، منجر به جفت‌شدگی فرومغناطیسی با زاویه پیوند  $134/85$  درجه می‌شود که فاصله بین یون‌های Co در این حالت  $3.5875 \text{ \AA}$  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  $17/67 \text{ meV}$  است که با نتایج گزارش شده توسط گروه‌های تحقیقاتی دیگر در توافق است [۷]، [۲۴].

جدول ۱: مقادیر انرژی کل ساختار آرایش‌یافته با Co در فازهای مغناطیسی مختلف.

آرایش	$E_{FM}(\text{Ry})$	$E_{AFM}(\text{Ry})$	$E_{PM}(\text{Ry})$	$\frac{E_{FM}-E_{AFM}}{E_{AFM}}(\text{Ry})$	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

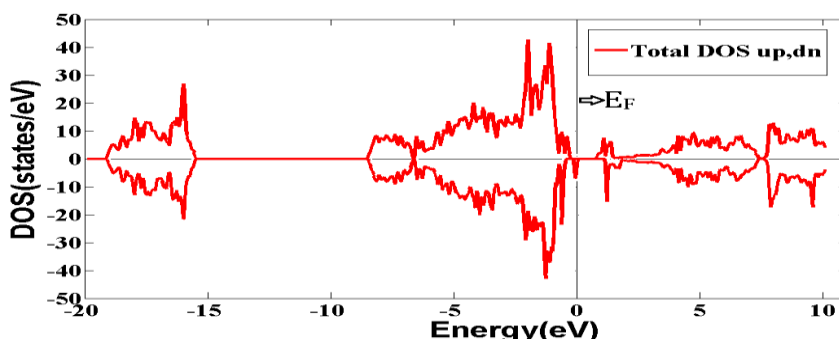
جدول ۲: مقادیر مربوط به گشتاور مغناطیسی کل و گشتاور مغناطیسی یون‌های Co در فاز فرومغناطیس برای آرایش ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪، ۱۸/۷۵٪ و ۲۵٪ و در فاز پادفرومغناطیس برای آرایش‌های ۱۲/۵٪ و ۲۵٪.

درصد آرایش	$M_{\text{tot}} (\mu_B)$	$M_{\text{Co1}} (\mu_B)$	$M_{\text{Co2}} (\mu_B)$	$M_{\text{Co3}} (\mu_B)$	$M_{\text{Co4}} (\mu_B)$	$M_{\text{Co5}} (\mu_B)$	گشتاور بین جایگاهی
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- چگالی حالت‌ها و ساختار نواری

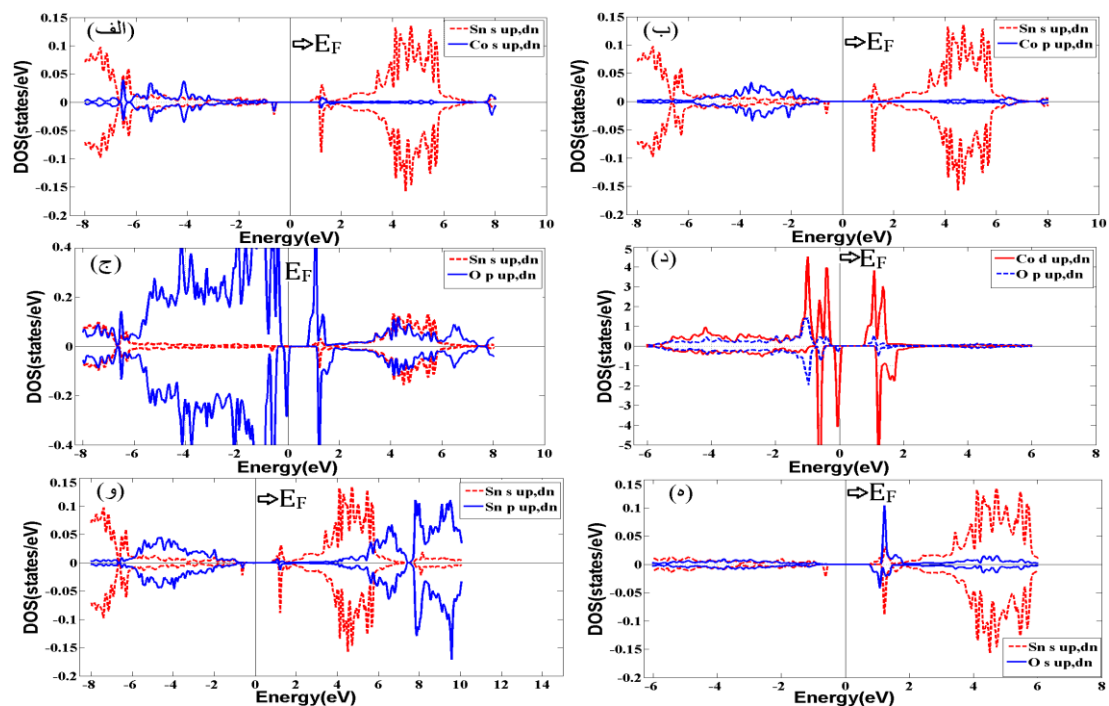
رفتار چگالی حالت‌های (DOS) کلی بر حسب انرژی برای فاز فرومغناطیس نمونه  $\text{Sn}_{0.9375}\text{Co}_{0.0625}\text{O}_2$  در شکل (۲) نشان داده شده است. این بررسی نشان می‌دهد چگالی حالت‌های اسپین پایین در تراز فرمی، غیر صفر است در

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]، [۷]، [۲۱]، [۲۵].

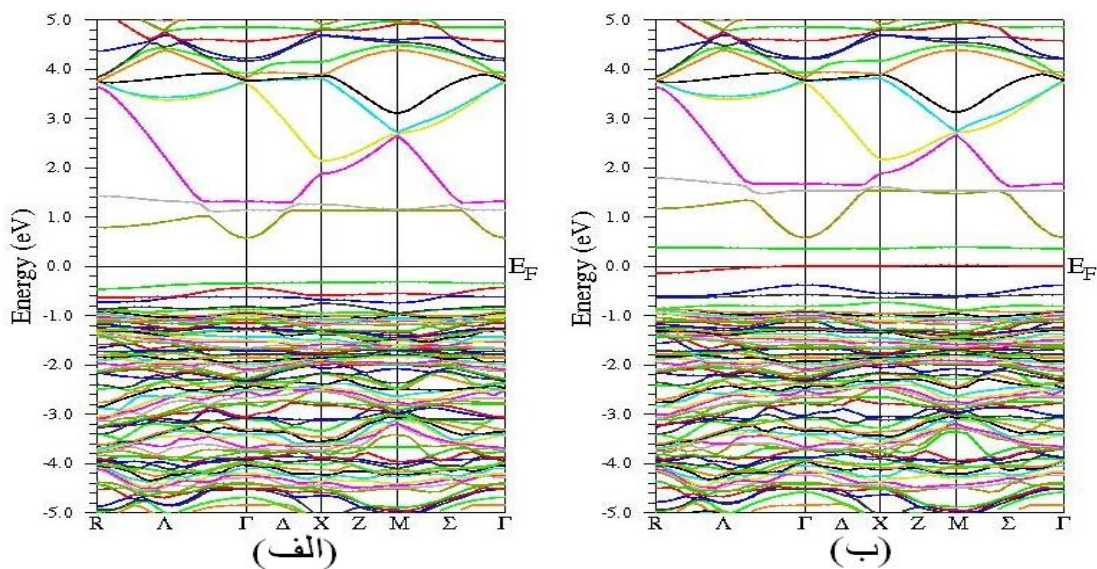


شکل ۲: نمودار چگالی حالت‌های کلی محاسبه شده برای فاز فرومغناطیس نمونه  $\text{Sn}_{0.9375}\text{Co}_{0.0625}\text{O}_2$

نمودار چگالی حالت‌های جزئی محاسبه شده برای هریک از اتم‌های نمونه اکسید قلع آلائیده با ۶/۲۵٪ کبالت در شکل (۳) نشان داده شده است. مقایسه چگالی حالت‌های محاسبه شده نشان می‌دهد بیش‌ترین سهم در نوارهای ظرفیتی نزدیک به تراز فرمی به ترتیب مربوط به اوربیتال‌های  $\text{Co}-3d$  و  $\text{O}-2p$  اختصاص دارد. هم‌چنین بیش‌ترین سهم در نوارهای رسانشی نزدیک به لبه نوار به ترتیب مربوط به اوربیتال‌های  $\text{Co}-3d$  و  $\text{O}-2p$  و  $\text{Sn}-5s$  است. با توجه به موقعیت اتم‌های نشان داده شده در ساختار بلوری (شکل ۱) می‌توانیم بگوییم که چگالی حالت‌های جزئی اوربیتال  $d$ - $\text{Co}$  مربوط به اتم کبالتی است که در جایگاه ۱ قرار می‌گیرد. هم‌چنین چگالی حالت‌های جزئی اوربیتال  $p$ - $\text{O}$  مربوط به اتم اکسیژن در نزدیک‌ترین همسایه به اتم  $\text{Co}$  (جایگاه ۷) است، از این رو هیبریداسیون حالت‌های  $\text{Co}-3d$  (شکل ۳-د) نسبت به هیبریداسیون حالت‌های  $\text{O}-2p$  و  $\text{Sn}-5s$  (شکل ۳-ج) قوی‌تر است. هیبریداسیون حالت‌های  $\text{O}-2p$  و  $\text{Co}-3d$  در نواحی بیشینه نوار ظرفیت به روش شکافتگی تبدیلی وابسته به حالت‌های ناخالصی واقع در گاف نواری  $\text{SnCoO}$  انجام می‌شود [۶]، [۲۱]. این بررسی نشان می‌دهد چگالی حالت‌های جزئی محاسبه شده برای  $\text{Sn}$ ، مربوط به اتم‌های  $\text{Sn}$  واقع در جایگاه (۰، ۰، ۰) در مجاورت اتم‌های  $\text{Co}$  (در جایگاه ۱) و  $\text{O}$  (در جایگاه ۷) است. ساختار نواری محاسبه شده برای نمونه  $\text{Sn}_{0.9375}\text{Co}_{0.0625}\text{O}_2$  برای حالت‌های اسپین بالا و پایین در شکل (۴) نشان داده شده است. نمودارهای مربوط نشان می‌دهند برای حالت‌های اسپین بالا بیشینه نوار ظرفیت در نقطه  $\Gamma$  قرار ندارد. در ناحیه تراز فرمی در نمودار چگالی حالت‌های اسپین پایین حالت‌های انرژی مربوط به اوربیتال‌های  $\text{Co}-3d$  مشاهده می‌شود.



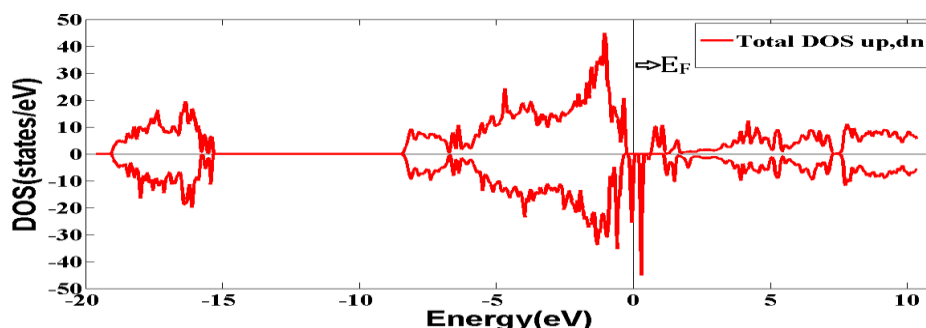
شکل ۳: نمودار مربوط به چگالی حالت‌های جزئی عناصر نمونه  $\text{Sn}_{0.9375}\text{Co}_{0.0625}\text{O}_2$ . الف)  $\text{Sn s up,dn}$ ،  $\text{Co s up,dn}$ ، ب)  $\text{Sn s up,dn}$ ،  $\text{Co p up,dn}$ ، ج)  $\text{Co p up,dn}$ ،  $\text{O p up,dn}$ ، د)  $\text{Co d up,dn}$ ،  $\text{O p up,dn}$ ، ه)  $\text{Sn p up,dn}$ ،  $\text{Sn s up,dn}$  و  $\text{O s up,dn}$ .



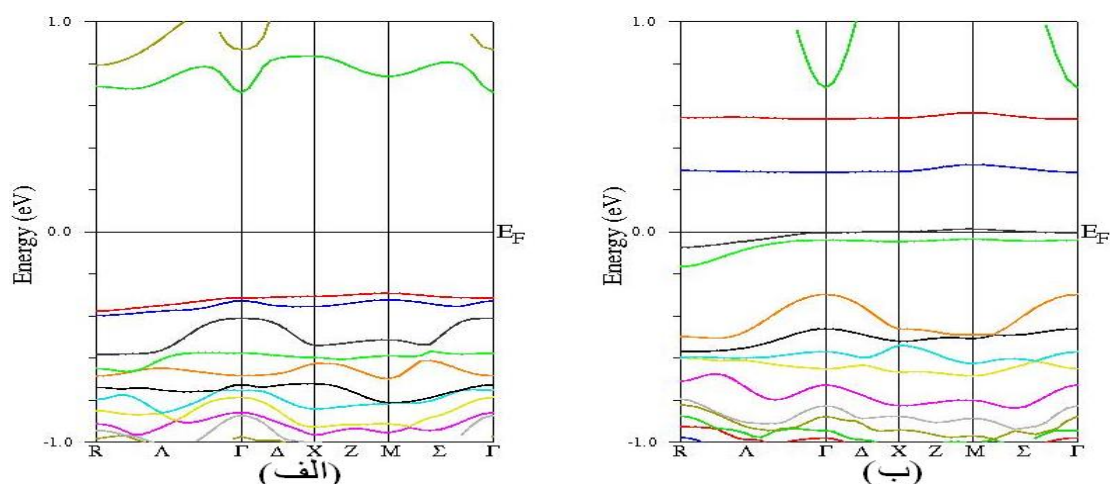
شکل ۴: نمودار ساختار نواری نمونه  $\text{Sn}_{0.9375}\text{Co}_{0.0625}\text{O}_2$ . الف) حالت‌های اسپین بالا (ب) حالت‌های اسپین پایین.

نمودار چگالی حالت‌های کلی محاسبه شده برای فاز فرومغناطیس نمونه  $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_2$  در شکل (۵) نشان داده شده است. چگالی حالت‌ها نزدیک به تراز فرمی (لبه نوار ظرفیت)، به‌طور عمده متشکل از حالت‌های مربوط به اوربیتال‌های  $\text{Co-3d}$  و  $\text{O-2p}$  است. با توجه به حضور چگالی حالت‌های اسپین پایین در تراز فرمی، این ترکیب نیز خاصیت نیم‌فلزی دارد. نمودار ساختار نواری نمونه  $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_2$  برای حالت‌های اسپین بالا و پایین در شکل (۶) نشان داده شده است. بررسی نمودار مربوط به حالت‌های اسپین بالا نشان می‌دهد بیشینه نوار ظرفیت در نقطه  $\Gamma$

قرار ندارد. چنان‌که در شکل (۶-ب) مشاهده می‌شود نوار انرژی مربوط به حالت‌های Co-3d در تراز فرمی است و منشأ رفتار نیم‌فلزی این ترکیب به حالت‌های اسپین پایین وابسته است.



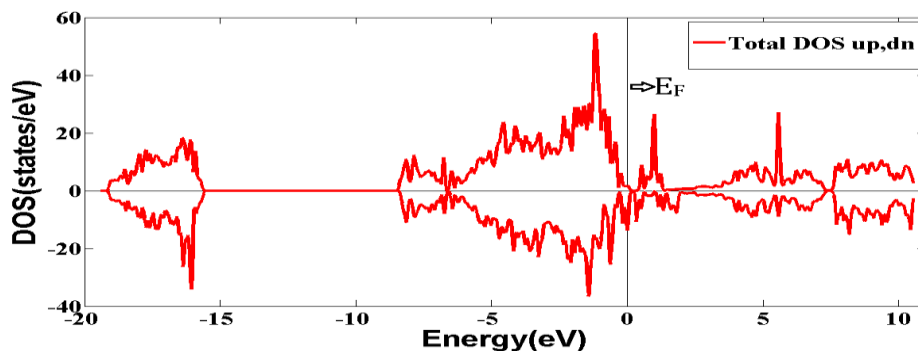
شکل ۵: نمودار چگالی حالت‌های کلی نمونه  $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_2$  در فاز فرومغناطیس.



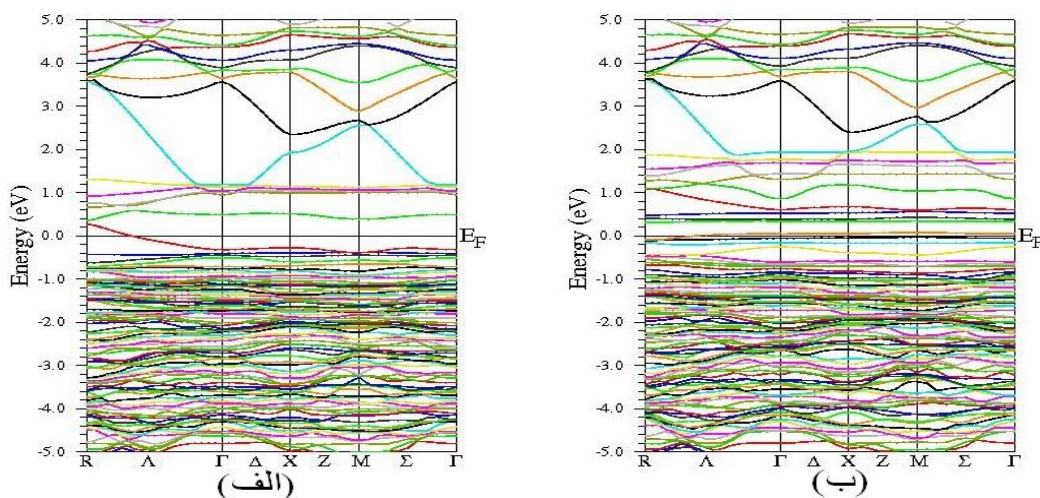
شکل ۶: نمودار ساختار نواری نمونه  $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_2$  برای حالت‌های الف) اسپین بالا و ب) اسپین پایین.

نمودار چگالی حالت‌های کلی محاسبه شده برای فاز فرومغناطیس نمونه  $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_2$  در شکل (۷) نشان داده شده است. حضور چگالی حالت‌ها در تراز فرمی برای حالت‌های اسپین بالا و پایین، می‌تواند منجر به بروز خاصیت فلزی در این نمونه شود. چگالی حالت‌ها در نزدیکی تراز فرمی عمدتاً متشکل از حالت‌های Co-3d و O-2p 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-3d که از تراز فرمی عبور می‌کند منجر به خاصیت فلزی این نمونه می‌شوند.



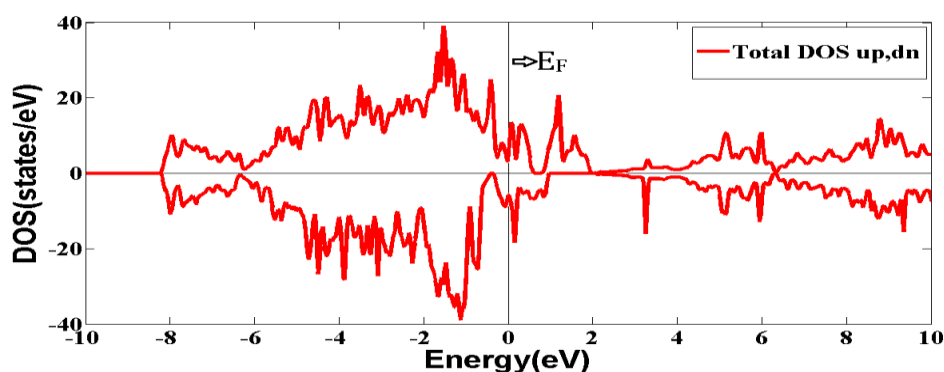
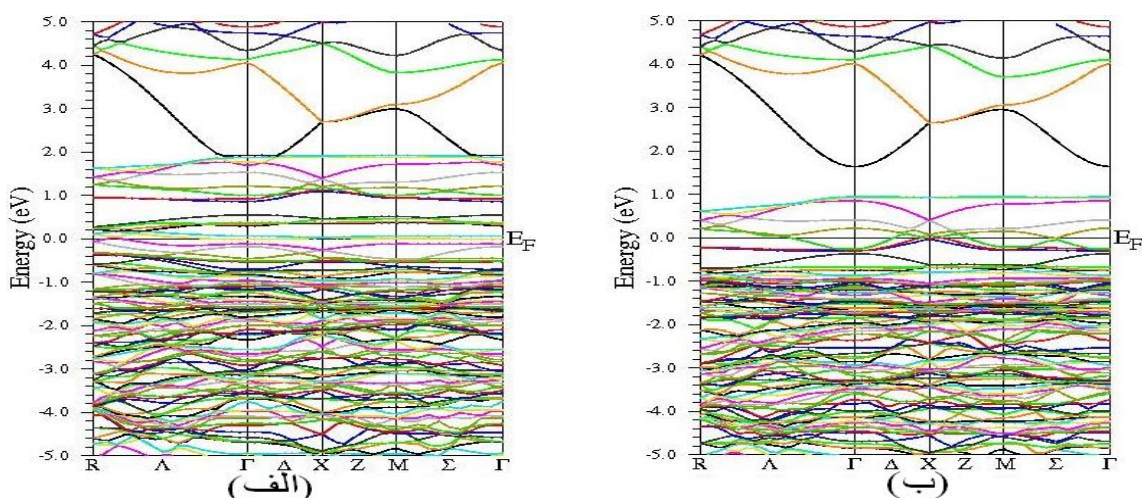


شکل ۷: نمودار چگالی حالت‌های کلی نمونه  $\text{Sn}_{0.8125}\text{Co}_{0.1875}\text{O}_2$  در فاز فرومغناطیس.



شکل ۸: نمودار ساختار نواری نمونه  $\text{Sn}_{0.8125}\text{Co}_{0.1875}\text{O}_2$  برای (الف) حالت‌های اسپین بالا (ب) حالت‌های اسپین پایین.

نمودار چگالی حالت‌های کلی محاسبه شده برای فاز فرومغناطیس نمونه  $\text{Sn}_{0.75}\text{Co}_{0.25}\text{O}_2$  در شکل (۹) نشان داده شده است. برای این نمونه فاز فرومغناطیس به‌عنوان حالت پایه ساختار تعیین و تفاوت انرژی بین حالت‌های فرومغناطیس و پادفرومغناطیس برابر با  $198/56 \text{ meV}$  - به دست آمد. چنان‌که در شکل (۹) دیده می‌شود حضور چگالی حالت‌ها در تراز فرمی منجر به خاصیت فلزی این ترکیب می‌شود. مقایسه نمودارهای چگالی حالت‌های کلی برای ساختارهای آرایش یافته با درصد های ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪، ۱۸/۷۵٪ و ۲۵٪ کبالت، نشان می‌دهد که افزایش غلظت ناخالصی Co و هم‌چنین افزایش میزان هیبریداسیون اوربیتال‌های  $\text{Co-3d}$  و  $\text{O-2p}$  در نوار ظرفیت و نوار رسانش سبب افزایش چگالی حالت‌ها در مجاورت لبه نوار ظرفیت و لبه 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  $\text{Co-3d}$  در تراز فرمی منجر به خاصیت فلزی در این ترکیب می‌شود.

شکل ۹: نمودار چگالی حالت‌های کلی فاز فرومغناطیس نمونه  $\text{Sn}_{0.75}\text{Co}_{0.25}\text{O}_2$ .شکل ۱۰: نمودارهای ساختار نواری نمونه  $\text{Sn}_{0.75}\text{Co}_{0.25}\text{O}_2$ . (الف) حالت‌های اسپین بالا (ب) حالت‌های اسپین پایین.

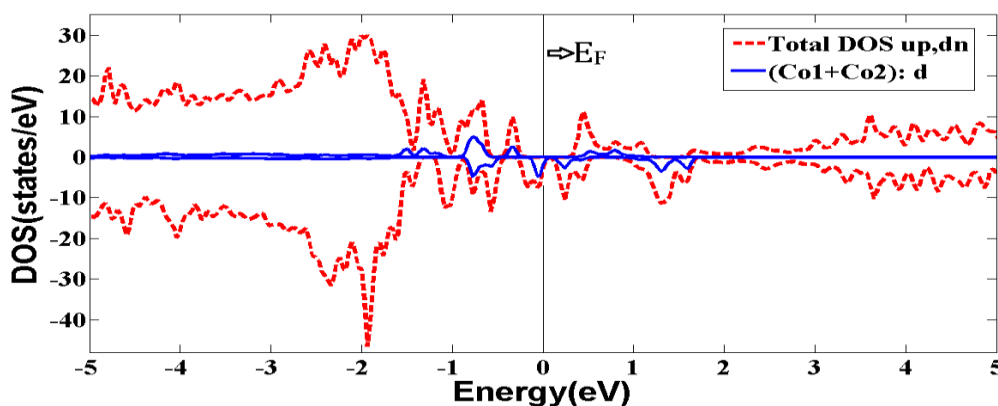
### ۳- محاسبه ساختار الکترونی نمونه $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_{0.9375}$ در حضور تهی‌جاها اکسیژن

در این کار ساختار الکترونی نمونه اکسید قلع آلاینده با  $12/5\%$  کبالت در فاز فرومغناطیس با حضور تهی‌جای اکسیژن نیز بررسی شد. با توجه به شکل ۱ موقعیت آرایش اتم‌های کبالت در ساختار نمونه  $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_{0.9375}$  مشابه موقعیت آرایش این اتم‌ها در ساختار نمونه  $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_2$ ، در نظر گرفته شد (جایگاه‌های ۱، ۵). موقعیت تهی‌جای اکسیژن نیز در جایگاه ۸ انتخاب شد. بررسی‌ها نشان می‌دهند که تهی‌جاها 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  $\text{Sn}^{4+}$  و  $\text{Co}^{2+}$  با برداشتن یک اکسیژن در شبکه هشت وجهی اطراف یون کبالت، برطرف شود [۲۱]. نتایج حاصل از محاسبه گشتاور مغناطیسی کل، گشتاور مغناطیسی یون‌های Co و انرژی کل در فاز فرومغناطیس نمونه  $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_{0.9375}$  در جدول (۳) گزارش شده است. مقایسه نتایج حاصل از آرایش  $12/5\%$  کبالت در دو سیستم  $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_2$  و  $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_{0.9375}$

(جدول‌های ۳ و ۲) 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.

جدول ۳: مقادیر مربوط به گشتاور مغناطیسی کل، گشتاور مغناطیسی یون‌های Co و انرژی کل در فاز فرومغناطیس مربوط به نمونه  $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_{0.9375}$

آرایش	$M_{\text{tot}}(\mu\text{B})$	$M_{\text{Co1}}(\mu\text{B})$	$M_{\text{Co2}}(\mu\text{B})$	$E(\text{Ry})$
سیستم فرومغناطیس $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_{0.9375}$	۳/۹۳۸۱۴	۱/۴۸۲۷۸	۱/۴۲۱۱۹	-۱۸۳۱۵۸/۰۳۷۰۲۶



شکل ۱۱: نمودار چگالی حالت‌های کلی فاز فرومغناطیس نمونه  $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_{0.9375}$

### بررسی خواص اپتیکی

#### ۱- تابع دی‌الکتریک

در ادامه این کار خواص اپتیکی ساختار اکسید قلع (راستای [۱۰۰]) آلیپده 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-کرونینگ 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].  $\epsilon_1(\omega)$  و  $\epsilon_2(\omega)$  به ترتیب قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک هستند. بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک توصیف‌کننده میزان قطبش محیط و جریان حامل بار در حضور میدان خارجی است [۲۶]. بخش موهومی تابع دی‌الکتریک اختلال وابسته به زمان برای حالت‌های الکترونی در وضعیت پایه است و برای توصیف برهم‌کنش الکترون با فوتون یک شاخص مؤثر

است [۲۷]. به‌ازای  $\varepsilon_1(\omega) > 0$ ، ماده رفتار دی‌الکتریکی و به‌ازای  $\varepsilon_1(\omega) < 0$ ، ماده رفتار فلزی از خود نشان می‌دهد [۲۳].

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

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

نمودار قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک برحسب انرژی در شکل (۱۲-الف) نشان داده شده است. مقادیر ثابت دی‌الکتریک استاتیک ( $\varepsilon_1(\omega=0)$ )، برای نمونه خالص و نمونه‌های آلاییده با غلظت‌های ۰/۶۲۵٪، ۰/۱۲۵٪ و ۰/۲۵٪ به‌ترتیب ۳/۵، ۵/۴، ۱۱/۲۳ و ۸/۸۴ به‌دست آمد. مقایسه ثابت‌های دی‌الکتریک به‌دست آمده نشان می‌دهد که ثابت دی‌الکتریک استاتیک در نمونه‌های آلاییده از نمونه خالص بزرگ‌تر است. با افزایش غلظت آلایش تا ۰/۱۲۵٪، قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک افزایش و سپس با افزایش بیش‌تر آلایش تا ۰/۲۵٪، مجدداً کاهش می‌یابد. برای نمونه‌های آلاییده با ۰/۶۲۵٪، ۰/۱۲۵٪ و ۰/۲۵٪ کبالت تابع دی‌الکتریک مربوطه به‌ترتیب از انرژی‌های ۰/۱۰۲۴eV، ۰/۱۰۲۴eV 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 نمونه خالص در انرژی ۶/۹۷eV رخ می‌دهد، در نمونه‌های آلاییده با ۰/۶۲۵٪، ۰/۱۲۵٪ و ۰/۲۵٪ 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 ۰/۶۲۵٪، ۰/۱۲۵٪، نسبت به نمونه خالص شاهد هستیم. همچنین در انرژی‌های کم‌تر از ۶eV، یک جابه‌جایی قرمز در موقعیت قله‌های مربوط به نمونه آلاییده با غلظت ۰/۱۲۵٪ نسبت به نمونه آلاییده با غلظت ۰/۶۲۵٪ مشاهده می‌شود. مقایسه طیف‌های به‌دست آمده نشان می‌دهد که موقعیت قله‌های مربوط به آلایش ۰/۲۵٪ کبالت نسبت به موقعیت قله‌های مربوط به آلایش‌های ۰/۶۲۵٪ و ۰/۱۲۵٪ یک جابه‌جایی آبی نشان می‌دهد. 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 ۰/۲۵٪، 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 می‌یابد که این پدیده می‌تواند ناشی از افزایش گذارهای غیرمستقیم از نوار ظرفیت به نوار رسانش باشد [۲۸]. سایر قله‌های مربوط به نمونه‌های آلاییده با ۰/۶۲۵٪، ۰/۱۲۵٪ و ۰/۲۵٪ کبالت، که در بازه انرژی حدود ۲-۳eV 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

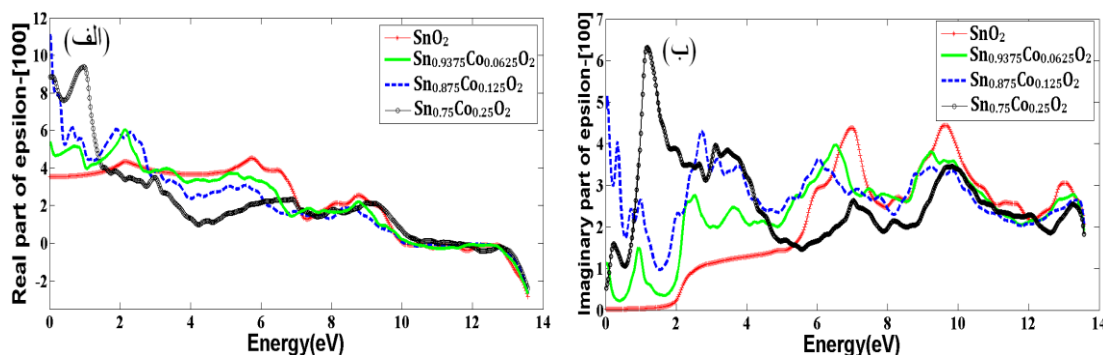
انرژی‌های خیلی کم مشاهده می‌شود که اولین قله ابتدا در نمونه آلیپده شامل ۱۲/۵٪ و سپس به ترتیب در نمونه‌های آلیپده شامل ۲۵٪ و ۶/۲۵٪ کبالت ظاهر می‌شود و برای نمونه خالص قله‌ای مشاهده نمی‌شود. برای نمونه‌های آلیپده اولین قله‌ها را می‌توان مربوط به گذار از حالت‌های Co-3d به حالت‌های Sn-5s دانست. این در حالی‌ست که در نمونه خالص اولین گذار از حالت‌های O-2p - به Sn-5s رخ می‌دهد. لبه جذب اپتیکی به دلیل کاهش گاف نواری در نمونه‌های آلیپده (تا ۱۲/۵٪) نسبت به نمونه خالص به سمت انرژی‌های کوچک‌تر (جابه‌جایی قرمز) جابه‌جا می‌شود. کوچک‌تر شدن لبه جذب اپتیکی در نمونه‌های آلیپده نسبت به نمونه خالص را می‌توان به اولین گذار مرتبط دانست، چنان‌چه در نمودارهای چگالی حالت‌ها و ساختار نواری نواری مربوط به نمونه‌های آلیپده نیز مشاهده نمودیم که تراز فرمی به طور عمده متشکل از حالت‌های Co-3d 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 رابطه (۳) به دست می‌آید [۲۷]:

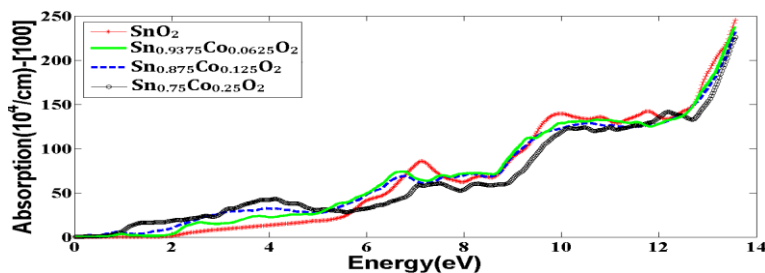
$$I(\omega) = \sqrt{2}(\omega/c) \left[ \sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{0.5} \quad (3)$$

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 آلیش میزان جذب افزایش می‌یابد و سپس افزایش غلظت آلیش سبب کاهش در جذب امواج الکترومغناطیسی می‌شود. موقعیت قله متناظر با انرژی ۷/۱۴eV مشاهده شده در نمونه خالص یک جابه‌جایی قرمز در نمونه‌های آلیپده با غلظت‌های ۶/۲۵٪ و ۱۲/۵٪ و یک جابه‌جایی آبی در نمونه آلیپده با غلظت ۲۵٪ را نشان می‌دهد. میزان جذب به ازای انرژی ۰/۲۰۴eV، برای نمونه خالص و نمونه‌های آلیپده با غلظت‌های ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ به ترتیب برابر با  $1.29 \text{ cm}^{-1}$ ،  $1.893/3 \text{ cm}^{-1}$ ،  $1.0819/7 \text{ cm}^{-1}$  و  $5615 \text{ cm}^{-1}$  است. به همین دلیل لبه جذب اپتیکی در نمونه‌های آلیپده نسبت به نمونه خالص به سمت انرژی‌های کم‌تر کشیده می‌شود.



شکل ۱۲: نمودار تابع دی‌الکتریک بر حسب انرژی برای نمونه  $\text{Sn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_2$  در راستای  $[100]$ ، (الف) بخش حقیقی

تابع دی‌الکتریک. (ب) بخش موهومی تابع دی‌الکتریک



شکل ۱۳: نمودار ضریب درآشامی بر حسب انرژی برای نمونه  $\text{Sn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_2$  در راستای [۱۰۰].

### ۳- ضریب شکست و ضریب خاموشی

چگونگی انتشار امواج الکترومغناطیسی در یک محیط به ضریب شکست  $n$  و ضریب خاموشی  $k$  بستگی دارد [۲۹].

ضریب شکست  $n(\omega)$ ، میزان انتشار امواج و ضریب خاموشی  $k$ ، پاشندگی امواج را نشان می‌دهند [۳۰].

ضریب شکست حقیقی  $n$  و ضریب خاموشی (یا شاخص میرایی)  $k$ ، با استفاده از رابطه (۴) داده می‌شود [۳۱]:

$$n = \sqrt{\frac{1}{2}(\epsilon_1 + \sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2})}, k = \sqrt{\frac{1}{2}(-\epsilon_1 + \sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2})} \quad (4)$$

نمودارهای ضریب شکست و ضریب خاموشی نمونه‌های خالص و آلییده در شکل‌های (۱۴-الف و ب) نشان داده شده است. مقادیر ضریب شکست استاتیک برای نمونه‌های آلییده با غلظت‌های ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ کبالت، به ترتیب برابر با ۲/۳۳، ۳/۱۳ و ۲/۹۷ به دست آمد. چنان‌که در این شکل دیده می‌شود، در محدوده انرژی ۰-۳/۶۸ eV برای نمونه خالص و نمونه‌های آلییده با غلظت‌های ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ با افزایش درصد آلایش، ضریب شکست ماده افزایش و در محدوده 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  $\epsilon_2(\omega)$  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 محدوده انرژی ۰/۹۳-۵/۲۶ eV افزایش و سپس از محدوده انرژی ۵/۲۲ eV 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 رابطه (۵) داده

می‌شود [۲۹]:

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



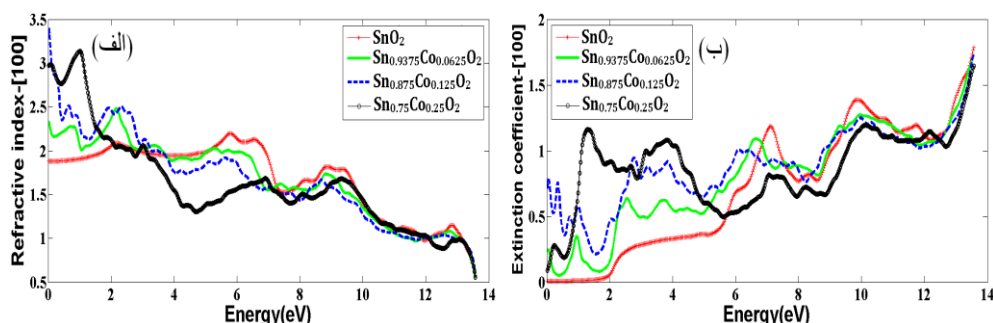
نمودار طیف بازتابندگی برحسب انرژی برای نمونه‌های خالص و آلیپده با کبالت در شکل (۱۵-الف)، نشان داده شده است. چنان‌که در این شکل دیده می‌شود، با افزایش آلیش، بازتابندگی در محدوده انرژی  $۴/۵۸-۰/۳۶\text{eV}$  افزایش می‌یابد. با مقایسه طیف‌های مربوطه مشاهده می‌شود که با افزایش غلظت آلیش تا ۲۵٪ میزان جذب و بازتابندگی در ناحیه مرئی افزایش می‌یابد. هم‌چنین در محدوده انرژی  $۱۳/۶-۱۲/۲۰\text{eV}$  بازتابندگی نمونه‌ها افزایش می‌یابد. میزان بازتابندگی نمونه‌های خالص و آلیپده با غلظت‌های  $۰/۶۲۵$ ٪،  $۰/۱۲۵$ ٪ و  $۰/۲۵$ ٪، در انرژی  $۱۳/۵۶\text{eV}$  به ترتیب در حدود  $۰/۶۰$ ٪،  $۰/۵۹$ ٪،  $۰/۵۶$ ٪ و  $۰/۵۶$ ٪ هستند.

## ۵- رسانندگی اپتیکی

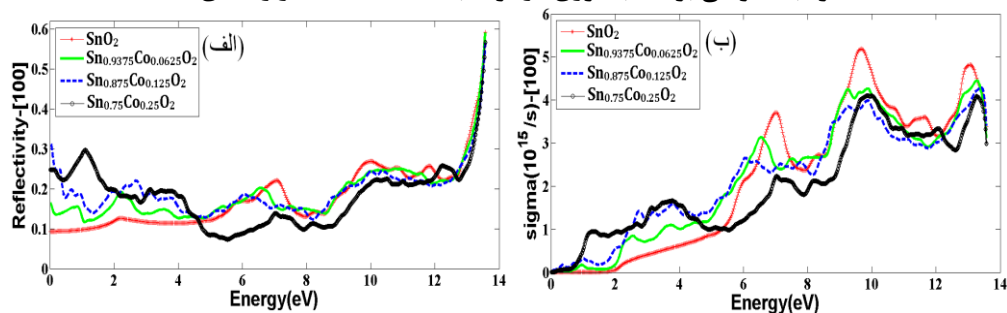
رسانندگی اپتیکی ماده با رابطه (۶) داده می‌شود [۳۱]:

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

نمودار رسانندگی اپتیکی برحسب انرژی برای نمونه‌های خالص و آلیپده اکسید قلع در شکل (۱۵-ب) نشان داده شده است. بررسی این طیف نشان‌گر حضور سه قله اصلی در انرژی‌های بالاتر از  $۶\text{eV}$  برای هر یک از نمونه‌ها است. قله متناظر با انرژی  $۷\text{eV}$  در نمونه خالص، متناظر با انرژی  $۶/۵۴\text{eV}$  در نمونه آلیپده با غلظت  $۰/۶۲۵$ ٪، با انرژی  $۶/۰۵\text{eV}$  در نمونه آلیپده با غلظت  $۰/۱۲۵$ ٪ و با انرژی  $۷/۰۳\text{eV}$  در نمونه آلیپده با غلظت  $۰/۲۵$ ٪ می‌باشد. چنان‌که در شکل (۱۵-ب) دیده می‌شود بیش‌ترین جریان رسانی برای نمونه‌های خالص و آلیپده با غلظت‌های  $۰/۶۲۵$ ٪،  $۰/۱۲۵$ ٪ و  $۰/۲۵$ ٪ به ترتیب در انرژی‌های  $۹/۶۷\text{eV}$ ،  $۹/۲۳\text{eV}$ ،  $۹/۲۳\text{eV}$  و  $۹/۸۳\text{eV}$  رخ می‌دهد.



شکل ۱۴: الف) نمودار ضریب شکست برحسب انرژی در ترکیب  $\text{Sn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_2$  در راستای [۱۰۰]. ب) نمودار ضریب خاموشی برحسب انرژی در ترکیب  $\text{Sn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_2$  در راستای [۱۰۰].



شکل ۱۵: الف) نمودار بازتابندگی برحسب انرژی در ترکیب  $\text{Sn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_2$  در راستای [۱۰۰]. ب) نمودار رسانندگی اپتیکی برحسب انرژی در ترکیب  $\text{Sn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_2$  در راستای [۱۰۰].

## نتیجه‌گیری

در این کار ساختار الکترونی و خواص مغناطیسی و اپتیکی نمونه‌های خالص  $\text{SnO}_2$  و آلیاژ  $\text{Sn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_2$  (با  $x=0/25$  و  $0/1875$ ،  $0/125$ ،  $0/0625$ ) با استفاده از نظریه تابعی چگالی بررسی شدند. اثر تهی‌جای اکسیژن روی خواص ساختاری و مغناطیسی نمونه‌ها نیز بررسی شد. با بررسی خواص مغناطیسی نمونه‌های آلیاژ مشخص شد که افزایش غلظت آلاینش سبب افزایش چگالی ترازهای انرژی مربوط به اوربیتال‌های  $3d$  یون کبالت در نزدیکی تراز فرمی می‌شود. بررسی فاز پایدار مغناطیسی نمونه‌های آلیاژ نشان داد که در آلاینش‌های  $0/125$  و  $0/25$  فاز پایدار شبکه فرومغناطیس است. حضور تهی‌جای اکسیژن در نمونه فرومغناطیسی  $\text{Sn}_{0.875}\text{Co}_{0.125}\text{O}_{0.9375}$  نزدیک به یون کبالت منجر به افزایش گشتاور مغناطیسی یون‌های کبالت می‌شود. بررسی خواص اپتیکی نمونه خالص و نمونه‌های آلیاژ با  $0/6/25$ ،  $0/12/5$  و  $0/25$  کبالت نشان داد که با افزایش غلظت آلاینش تا  $0/12/5$ ، گاف نواری اپتیکی کاهش و سپس با افزایش بیش‌تر آن تا  $0/25$ ، گاف نواری اپتیکی افزایش می‌یابد. با افزایش آلاینش تا  $0/12/5$ ، شدت مربوط به اولین قله‌ها در طیف تابع دی‌الکتریک نمونه‌ها، هم‌چنین ضرایب درآشامی و خاموشی افزایش و شدت مربوط به قله‌های ظاهر شده در محدوده انرژی‌های بالاتر از  $6\text{eV}$  کاهش می‌یابند. با توجه به طیف‌های بازتابندگی و ضریب درآشامی مشخص شد که با افزایش غلظت آلاینش تا  $0/25$  میزان عبور فوتون در ناحیه 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.



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، ایزدی فرد 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 Grechnev, "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، ترجمه 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.

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 B*407 (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 Technology", 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.