پژوهش های نوین فیزیک (نشریه علوم دانشگاه خوارزمی)

بررسی ویژگیهای ساختاری و اپتیکی ترکیب MgAl₂O4 با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی حمداله صالحی^{*}، زهره جاودانی؛ دانشگاه شهید چمران اهواز، دانشکده فیزیک

چکیدہ

در این مقاله ساختار الکترونی، خواص ساختاری از جمله ثابت شبکه، مدول حجمی، تراکمپذیری، چگالی و خواص اپتیکی اکسید اسپینل (MgAl₂O4) بررسی میشود. محاسبهها با استفاده از روش امواج تخت تقویتشدهٔ خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و با استفاده از نرمافزار WIEN2k صورت گرفته است. پارامترهای ساختاری و گاف نواری با تقریبهای مختلف برر سی شده است و نتایج پارامترهای ساختاری در تقریب GGA-WC صورت گرفته است. پارامترهای ساختاری و گاف نواری با تقریبهای مختلف برر سی در ادامه روش HBJ به همراه دو تقریب ذکر شده به کار گرفته شده است. گاف نواری در تقریب GGA-WC با نتایج تجربی سازگاری بهتری داشته لذا داشت بنابراین بررسی سیستم تحت فشار با استفاده از تقریب (MBJ+GGA(WC) استفاده از تقریب GGA-WC تطابق بهتری با تجربه ضریب شکست، ضریبخاموشی، تابع اتلافانرژی، بررسی شده است. تایج به دست آمده از ساختار نواری نشان میدهند که این ترکیب عایق است و گاف نواری ۷/۶۷ الکترونولت دارد. ضریب شکست ۱۸۵۵ محا سبه شد. نتایج محا سبه شده در توافق خوبی با نتایج نظری و تجربی دیگران است.

واژهگان كليدى: MgAl₂O4، گاف انرژى، خواص ساختارى، ھابارد، نظرية تابعى چگالى

مقدمه

فریتها ترکیبات سرامیکی از فلزات واسطه به همراه اکسیژن هستند. تعداد زیادی از این ترکیبات دارای خواص مغناطیسی هستند که در دوقطبیهای مغناطیسی، هستههای فریتی و تجهیزات گوناگون دیگر به کار میروند. فریتها اغلب ترکیبات عایقی هستند که دارای خواص فری مغناطیس میباشند به همین لحاظ مانند بسیاری از سرامیکها مغنا ترکیبات عایقی هستند که دارای خواص فری مغناطیس میباشند به همین لحاظ مانند بسیاری از سرامیکها مخت اعلب ترکیبات عایقی هستند که دارای خواص فری مغناطیس میباشند به همین لحاظ مانند بسیاری از سرامیکها مخت اما شکنندهاند. این دسته از موادبه دو دستهٔ فریتهای نرم وسخت تقسیم میشوند [۱]. ترکیب MgAl₂O4 جزء خانوادهٔ فریتهای نرم وسخت تقسیم میشوند [۱]. ترکیب MgAl₂O4 جزء خانوادهٔ فریتهای نرم به حساب میآید. این مواد به طور عمده دارای ساختار اسپینلی هستند [۲]. از این ترکیبات درساخت فوتوسلهای شیمیایی [۳]، لعابهای سرامیکی، ژنراتورها، موتورها و ترانسفورماتو رها استفاده میشود تا با گذشتن جریان، شار مغناطیسی زیادی تولید شود. درعملکرد مه این مواد میتوانند به سرعت تغییر کنند، بدون این که اصطکاک جریان، شار مغناطیسی زیادی تولید این مواد باریک و بلند است [۴]. در این مواد بای که اصطکاک زیادی در کار باشد. منحنی پسماند این مواد باریک و بلند است [۴]. در این مواد باید میتوانند به در ما ته در می زیادی تولید شود. در میلکرد ما این مواد میتوانند به سرعت تغییر کنند، بدون این که اصطکاک زیادی در کار باشد. منحنی پسماند این مواد باریک و بلند است [۴]. در این مواد باید مکان کوچک باشد. برای

نرم بودن یک ماده فرومغناطیسی باید مرزهای حوزهها بتوانند به آسانی حرکت کنند. مواد نرم ساختمان یکنواختی دارند، عاری از ناخالصی هستند و به خاطر همجهتی خوب دانههای بلور و ناهمسانگردی کم، کشش محلی بسیار کمی دارد. بهطور کلی یک ماده مغناطیسی نرم دارای نیروی وادارندهٔ کوچک، چگالی شار اشباع Bc زیاد و تراوایی µ بزرگ است و باکیفیت بدی آهنربا میشود. اکسیدهای اسپینلی جزء طیف مهمی از ترکیبات سرامیکی با ویژگیهای الکتریکی، مکانیکی، اپتیکی و مغناطیسی قابلتوجه هستند. گاف نواری مشاهده شده در این ساختارها کاربردهای اپتیکی و فوتوالکترونیکی فراوانی دارد [۵]. در ترکیبات سرامیکی به دلیل ویژگیهای مطلوب در نقاط ذوب بالا (۱۲۵۰ درجه)، مقاومت بالا و مقاومت در برابر صدمات شیمیایی مورد توجه خاص قرار گرفتهاند [۶]. اکسید دی آلومینیوم منیزیم بهصورت یک نمونه از خانواده AB₂O4 که ساختار اسپینلی دارد در نظر گرفته میشود. برای محاسبهٔ خواص متنوع اسپینل MgAl₂O4 از روشهای مختلف اصول اولیه استفاده شده است [۷]. در این پژوهش به کمک محاسبات اصول اسپینل MgAl₂O4 از روشهای مختلف اصول اولیه استفاده شده است [۷]. در این پژوهش به کمک محاسبات اصول اولیه TPT به بررسی ساختار نواری و برخی ویژگیهای اسپینل MgAl₂O4 می میردازیم.

در این مقاله محاسبه با با ستفاده از روش FP-APW در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و نرمافزار WIEN2k انجام شده است. ارای شده است [۸-۹]. انرژی ۶- ریدبرگ برای جداسازی حالتهای ظرفیت از حالات مغزه مبنا قرارداده شده است. برای محاسبهٔ پارامترهای ساختاری و گاف نواری تقریبهای LSDA.LDA.GGA-WC .PBEsol .PBE و LSDA.LDA.GGA-WC .PBEsol .PBE و معاد کری مورداستفاده قرار گرفت [۱۰] و علیرغم این که نتایج پارامترهای ساختاری در تقریب GGA-WC .PBEsol .PBE با نتایج تجربی سازگاری مورداستفاده قرار گرفت [۱۰] و علیرغم این که نتایج پارامترهای ساختاری در تقریب GGA-WC .PBEsol .PBE با نتایج تجربی سازگاری بهتری داشت اما مقادیر به دست آمده برای گاف نواری در همهٔ تقریبها به میزان چشمگیری از مقدار واقعی کمتر بود. از این میان روش ADA بالاترین میزان گاف را محاسبه نمود لذا در ادامه روش MBJ به همراه این دو تقریب استفاده شد. برای سه کمیت تعداد نقاط و MIX یه و ۸۸ محاسبه نمود لذا در ادامه روش MBJ به همراه این دو تقریب استفاده شد. برای سه کمیت تعداد نقاط و MIX و ۸۸ محاسبه نمود لذا در ادامه روش MBJ به همراه این دو تقریب استفاده شد. برای سه کمیت تعداد نقاط و ۸۸ میزان گاف را محاسبه نمود لذا در ادامه روش الم به همراه این دو تقریب استفاده شد. برای سه کمیت تعداد نقاط و ۸۸ میزان گاف را محاسبه نمود لذا در ادامه روش الم به همراه این دو تقریب استفاده به ازای آن یک شبکه MBa به مورت ۲۱×۱۲ ایجاد شده است. با تعیین مبنای همگرایی (۷۰) (۰۰۰/۰ برای انرژی، (ع) ۱۰۰/۰۰ برای بار و (۱۳۵/۵) برای نیروی محاسبات خود سازگار انجام گرفت. خواص اپتیکی، محاسبات انرژی، (ع) ۱۰۰/۰۰ برای بار و سازگار انجام گرفت. خواص اپتیکی، محاسبات مربوط به تابع دی الکتریک، تابع اتلاف انرژی، هدایت اپتیکی، ضریب شکست و ضریب خاموشی، ضریب جذب و بازتاب را شامل می شود در تجزیه و تحلیل داده های به به دستآمدهاز خواص اپتیکیاز تبدیلات کرامرز کرونیک استفاده شده است. را شامل می شود در تجزیه و تحلیل داده های به دست آمدهاز خواص اپتیکیاز تبدیلات کرامرز کرونیک استفاده شده است.

الف: ویژگیهای ساختاری و الکترونی

در محاسبه ابه روش نظریهٔ تابعی چگالی علی رغم اینکه اطلاعات ورودی ممکن است بر نتایج تجربی یا نظری استوار باشند، اما با مقایسهٔ انرژی مربوط به حجم های مختلف سلول واحد، می توان پایدار ترین حالت (کم ترین انرژی) را شناسایی و به دنبال آن به پارامتر های ساختاری بهینه دست یافت. یکی از مهم ترین پارامتر های ساختاری، ثابت شبکه است که به عنوان تأیید نظری مجدداً محاسبه می شود. تغییرات انرژی بر حسب حجم از طریق معادلهٔ مورناگون [۱۱] به شکل زیر به دست می آید:

بررسی ویژگیهای ساختاری و اپتیکی ترکیب MgAl2O4....

$$E(V) = E_0 + \frac{BV_0}{B'} \left[\frac{V}{V_0} + \frac{\left(\frac{V}{V_0}\right)^{1-B'} - B'}{B' - 1} \right]$$
(1)

که در این رابطه Vo حجم سلول اولیه، Eo انرژی حالت پایه در دما و فشار صفر، B مدول حجمی و 'B مشتق آن است. در این پژوهش تغییرات انرژی سیستم به ازای حجمها مختلف برای همهٔ تقریبهای ذکر شده محاسبه شده است و نتایج پارامترهای ساختاری در جدول (۱) درج شده است و به عنوان نمونه در شکل (۱) نمودار تغییرات حجم برحسب انرژی برای تقریب GGA-WC نشان داده شده است.

			_		-			
	GGA- PBEsol	GGA-PBE	LSDA	LDA	Engle- Vosko	GGA- WC	[12.Theo]	[13.Exp]
a(a.u)	10/298	10/419	10/147	10/144	18/1•4	10/292	10/174	۱۵/۲۷۵
در صد خطا نسبت به مقدار تجربی	۰/۱۵	۰/۹۵	۰/ ۸ ۶	٠/٨۵	۵/۴	•/١۵	• 88	-
B(Gap)	१९४/९९४	19./187	7 • 9/477	212/222	147/209	۱۹γ/λλλ	77.	198
در صد خطا نسبت به مقدار تجربی	٠/٩	٣	۶/۶	٨/١	۲۷	•/٩	17.	-
Β'	3/077	٣/۴٨٩	37/818	۴/۰۲۷	٣/۶۴٨	٣/۵۴٩	۲/۹۵	۴/۷
در صد خطا نسبت به مقدار تجربی	٢۴	۲۵/۷	۲۳/۲	۱۴/۳	۲١/٧	24/8	۳۷	-
$\kappa(\text{Gap})^{-1}$	•/••&•	•/••۵۲	•/••۴٨	•/••۴٧	•/••٧•	•/••&•	•/••۴	۰/۰۰۵
در صد خطا نسبت به مقدار تجربی	٠	۴	۴	۶	٤٠	•	۲.	-
V(au) ³	894/978	918/878	888/114	888/148	1.44/102	አ ۹۴/አ۲۳	XVT/FTV	۸۹۰/۹۵۳
در صد خطا نسبت به مقدار تجربی	•/44	۲/۸۷	۲/۵۶	۲/۵۵	۱۷/۱۹	•/۴۴	١/٩	

جدول ۱: پارامترهای ساختاری محاسبه شده و مقایسه با نتایج تجربی

همان طور که در جدول (۱) مشاهده می کنید نتایج تقریب GGA-WC تطابق خوبی با تجربه دارند.



شکل ۱: نمودار حجم بر حسب انرژی با استفاده از تقریب GGA-WC

پژوهشهای نوین فیزیک (نشریه علوم دانشگاه خوارزمی)

حال به بررسی سایر پارامترهایی که از نمودار تغییرات انرژی برحسب حجم به دست می آید می پردازیم. زمانی که نیروی ثابتی به سیستم وارد می شود. مدول حجمی تمایل جسم برای تغییر شکل در همه جهات را نشان می دهد به عبارت دیگر مدول حجمی معیاری برای سنجش تراکم پذیری در یک سیستم است و با آن نسبت عکس دارد. اگر فشار در واحد حجم جسم به اندازهٔ dp افزایش یابد حجم موردنظر به اندازهٔ dv– کاهش خواهد یافت. از نسبت این دو عبارت ضریب کشسانی حجمی حاصل می شود که به صورت رابطهٔ (۲) تعریف می شود:

$$B = -V\frac{dp}{dv} \tag{(1)}$$

به همین جهت مقادیر بزرگ مدول حجمی برای ترکیب MgAl₂O4 بیانگر تراکم پذیری کم و سختی زیاد ترکیب است. در ادامه؛ گاف نواری را به ازای همهٔ تقریب ها محاسب و نتایج مربوط به آن همراه با دیگر داده های موجود در جدول (۲) آورده ایم.

با توجه به جدول (۲) مشاهده می کنیم که نتایج به دست آمده تفاوت زیادی با گاف نواری واقعی؛ ۷/۸ الکترونولت؛ دارند اما از میان آنها تقریب LDA بیش ترین مقدار گاف را محاسبه کرده است لذا لازم است که تصحیحاتی را به تقریبهای به کار رفته اضافه کنیم. به دنبال همین هدف روش MBJ را به همراه تقریبهای GGA-WC و MBJ به کار بردیم که به طور چشمگیری موجب بهبود گاف نواری شد و گاف نواری تقریبهای MBJ-GGA(WC) و MBJ به کار بردیم که به طور چشمگیری موجب بهبود گاف نواری شد و گاف نواری تقریبهای MBJ-GGA(WC) و MBJ به کار بردیم که به طور چشمگیری موجب بهبود گاف نواری شد و گاف نواری تقریبهای MBJ-GGA(WC) و MBJ به کار بردیم که به اطور چشمگیری موجب بهبود آمد که حتی از پژوهشهایی که اخیراً برای محاسبهٔ گاف نواری ترکیب انجام گرفته است دقیق تر می باشد [۱۶]. با توجه به نزدیکی بیش تر تقریب (MC) MBJ+GGA با مقادیر تجربی گاف نواری، محاسبات را با این روش ادامه می دهیم.

جناول ۲۰ فاغ توری محصبه شناه و معاییه و تعاییم										
Exp. [15]	Theo. [14]	LDA	LSDA	GGA- PBE	GGA- PBEsol	GGA- WC	Engle- Vosko	MBJ- GGA(WC)	MBJ- LDA	
										گاف نواری
V/A	۷/۴	۵/۳۹	۵/۳۹	۵/۰۱	۵/۱۲	۵/۱۲	۳/٨۶	٧/۶٧	٧/٩٧	(برحسب
										الكترونولت)
										درصد خطا
-	۵/۱۲	۳۱	۳۱	ra/λ	34/41	34/41	۵۰	1/88	۲/۱۸	نسبت به
										مقدار تجربي

جدول ۲: گاف نواری محاسبه شده و مقایسه با نتایج تجرب

ب: بررسی سیستم در فشارهای مختلف

برای بررسـی سـیسـتم در فشـارهای مختلف با توجه به رابطهٔ ترمودینامیکیdE=-PdV لازم اسـت از معادلهٔ مورناگون مشتق گرفته و برابر با PdV– قرار دهیم و درنهایت نیز به رابطهٔ (۳) دست می یابیم:

$$V(P) = V_0 \left[\left(\frac{B'}{B_0} P \right) + 1 \right]^{-1/B'}$$
(7)

در این رابطه P فشار خارجی وارد بر سیستم است. فشار را از ۲۰- تا ۲۰ گیگا پا سکال تغییر دادیم و نمودار تغییرات حجم برحسب فشار را در شکلهای (۲) و (۳) رسم نمودهایم. برای این که تأثیر فشار بر گاف نواری و حجم مشهودتر باشد در بازههای بزرگتر نیز تغییرات را نمایش دادهایم.



شکل ۲: نمودار تغییرات حجم برحسب فشار. الف) در بازهٔ ۸۰۰ الی ۱۰۰۰ برای حجم ب) در بازهٔ ۰ تا ۱۰۰۰ برای حجم



شکل ۳: نمودار تغییرات گاف نواریبرحسب فشار. الف) در بازهٔ ۱۴/۸ الی۱۶ برای گاف نواری ب) در بازهٔ صفرتا ۱۶ برای گاف نواری

با توجه به شکل (۲) مشاهده می کنیم، همان طور که انتظار می رفت افزایش فشار باعث کاهش حجم می شود اما این کاهش محسوس نیست که این امر تأییدی بر تراکم پذیری کم و سختی زیاد تر کیب است. گاف نواری نیز با افزایش فشار کاهش می یابد اما این تغییرات بسیار ناچیز است. علاوه بر آن افزایش فشار در بازهٔ ذکر شده منجر به تغییر فاز ترکیب نمی شود که این امر به صورت تجربی نیز بررسی شده است [۱۷].

ج: خواص اپتيكى

تابع دیالکتریک برای تو صیف پا سخ ماده به میدان الکترومغناطیسی به کاربرده می شود. سهم حقیقی و موهومی تابع دیالکتریک با توجه به ساختار مکعبی با استفاده از روابط (۵) و (۶) در راستای (x) تحت تبدیلات کرامرز-کرونیگ، پژوهشهای نوین فیزیک (نشریه علوم دانشگاه خوارزمی)

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2(\omega) \tag{(1)}$$

$$\varepsilon_{1}(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_{0}^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_{2}(\omega') d\omega'}{\omega'^{2} - \omega^{2}}$$
(٥)

و سهم موهومی داده می شود با [۱۹]:

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum \int \langle i|M|j \rangle^2 f_i (1-f_i) \times \delta(E_f - E_i - \omega) d^3k$$
(٦)

ضریب شکست پارامتر فیزیکی مهمی است که وابسته به اثر متقابل میکرو سکوپیکی اتمی میباشد و ضریب خاموشی برای یک ماده نیز سنجشی از میزان جذب پرتوی الکترومغناطیسی تو سط آن ماده است. اگر ضریب خاموشی در یک بلور پایین باشــد موج الکترومغناطیس به آسـانی از آن عبور میکند. یکی دیگر از پارامترهای مهم اپتیکی ضـریب بازتاب R است که انرژی انعکاس یافته از قسمت فصل مشترک جامد را توصیف میکند. مقدار ضریب شکست، ضریب خاموشی و بازتاب به ترتیب داده می شود با [۱۸]:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon(\omega)| + Re\varepsilon(\omega)}{2}}$$
(V)

$$k(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon(\omega)| - Re\varepsilon(\omega)}{2}} \tag{(A)}$$

$$R(\omega) = \left| \frac{(\varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega))^{\frac{1}{2}} - 1}{(\varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega))^{\frac{1}{2}} + 1} \right|^2$$
(9)

تابع دیالکتریک: با توجه به شکل (۴ الف) مشاهده می شود مقدار ثابت دیالکتریک ۴/۰۹ بهدست آمده است. شکل (۴ ب) سهم موهومی تابع دیالکتریک یا به عبارت دیگر تابع جذب اسـپینل MgAl₂O4 را نشـان میدهد. در سـهم موهومی تابع دیالکتریک چندین قله وجود دارد. این قلهها بیانگر گذارهای اپتیکی مجاز بین نوارهای اشــــــدهٔ ظرفیت و حالتهای خالی نوار رسانشاند.

در شکل (۴ب) نشان داده شده است که سهم موهومی تا قبل از انرژی ۷/۷ الکترون ولت دارای تغییراتی آرام است که نا شی از جذب فوتونهای کم انرژی است که منجر به گذارهای دروننواری می شوند اما بعد از انرژی ۷/۷ الکترون ولت سهم موهومی به صورت ناگهانی افزایش مییابد که این امر بیانگر جذبی است که به دنبال آن گذارهای میاننواری رخ میدهد.



شکل ۴ الف: سهم حقیقی؛ ب: سهم موهومی تابع دیالکتریکMgAl2O4ج) سهم حقیقی د) سهم موهومی تابع دیالکتریک در فشارهای مختلف با تقریب MBJ

چهار نقطهٔ اصلی موجود در نمودار سهم موهومی در شکل (٤) با نامهای E₂ ،E₁ ،E₀ و E₃ نشان داده شده است. نقطهٔ (P/V۴(eV) انرژی لازم برای عبور از گاف را نشان میدهد که بیان گر گاف اپتیکی بلور است و سه نقطهٔ (۷۷/eV/ E₁=۱۰ , E₂=۱۱/۷٤(eV) و E₂=۱۲/۷۷(eV نیز به ترتیب انرژی مورد نیاز برای گذارهای احتمالی بعدی را نشان میدهد. جذر سهم حقیقی تابع دی الکتریک در انرژی صفر، ضریب شکست استاتیک را میدهد.

$$n_0(\omega) = \sqrt{\varepsilon_1(0)} = \sqrt{2.40} = 1.55$$
 (17)

با اعمال فشار بر سیستم، تابع دیالکتریک دستخوش تغییراتی می شود که به منظور برر سی اثر اعمال فشار در شکل (۴) مقادیر تابع دیالکتریک برای فشار صفر تا ۲۰ گیگا پاسکال نمایش داده شده است. افزایش فشار منجر به جابهجایی تابع به سمت انرژیهای بیشتر می شود. البته بعد از افت و خیزهای متعدد سهم حقیقی و موهومی تابع به ازای انرژیهای بزرگتر از ۴۵ الکترونولت برای همهٔ فشارها همگرا می شود، که این امر بیانگر عدم وابستگی تابع دی الکتریک به فشار اعمال شده در انرژیهای بیشتر از ۴۵ الکترونولت فوتونهای فرودی است. ضریب شکست استاتیک نیز با افزایش فشار کاهش می یابد.

	گاف اپتیکی (eV)	ثابت دىالكتريك	ضريب شكست			
	[19] <i>۶</i> /۲۷	[11] ۶/•Y	[11]1/Y۵	نظرى		
	٧/٧۴	۲/۴۰	1/۵۵	کار حاضر		
	[Y•] Y/A	[11] ٢/٨٩	١/٧١۶	تجربى		

جدول ۳: ضریب شکست استاتیک، ثابت دیالکتریک در مقایسه با نتایج دیگران

در سهم موهومی نیز شاهد افزایش گاف اپتیکی و تغییر مکان قلههای چهارگانه به سمت انرژیهای بیش تر هستیم که این امر بیانگر نیاز به فوتونهایی با انرژی بالاتر برای انجام گذارهای احتمالی در سیستمهای تحت فشار است. در جدول (۳) ضریب شکست استاتیک و ثابت دیالکتریک و گاف اپتیکی در فشار صفر گیگاپاسکال در مقایسه با نتایج نظری و تجربی آورده شده است.

ضریب شکست و ضریب خاموشی: مقدار ضریب شکست، ضریب خاموشی با استفاده از رابطهٔ (۷) محاسبه شده است. در شکلهای (۵–الف) و (۵–ب) ضریب شکست و ضریب خاموشی اسپینل MgAl₂O4 رسم شده است و در شکلهای (۵–ج) و (۵–د) به بررسی ضریب شکست و ضریب خاموشی در فشارهای مختلف پرداخته شده است. با نگاهی گذرا به نمودارهای بالا میتوان به تشابه آنها با نتایج حاصل از تابع دیالکتریک پی برد. به این صورت که ضریب شکست رفتاری مشابه با سهم حقیقی و ضریب خاموشی رفتاری مانند سهم موهومی تابع دیالکتریک از خود نشان میدهند؛ که البته این امر با توجه به روابطی که این کمیات از آن پیروی میکنند، دور از انتظار نبود. میزان ضریب شکست بلور تا محدودهٔ انرژی گاف نواری مقادیر ناچیزی را به خود اختصاص میدهد اما با افزایش انرژی فوتونهای فرودی به بیش از ۷/۷ الکترونولت مقدار ضریب شکست نیز شروع به افزایش میکند تا در انرژی ۲۰/۴۲ الکترونولت سرعت نور در بلور با سرعت نور در خلاً برابری میکند.



(د)

(ج)

شکل ۵: الف) ضریب شکست؛ ب)ضریب خاموشی ترکیب MgAl2O4 باتقریب (MBJ-GGA(WC در فشار صفر و ج) ضریب شکست؛ د) ضریب خاموشی در فشار صفر الی ۲۰ گیگا پاسکال.

با توجه به نتیجه به ستآمده از برر سی ضریب شکست در فشارهای مختلف مشاهده می شود که در یک انرژی خاص از فوتون فرودی، ضریب در بلور با افزایش فشار کاهش مییابد. علاوه بر آن با افزایش فشار، انرژی که به ازای آن سرعت نور در بلور با سرعت آن در خلأ برابری میکند نیز افزایش مییابد. در برر سی ضریب خامو شی در فشارهای مختلف نیز مشاهده شد که با افزایش فشار، در انرژیهای کم تر از گاف نواری، میزان ضریب خاموشی کاهش مییابد و عبور آسان تری را برای موج الکترومغناطیس پیشبینی میکند.

بازتاب:کمینهٔ نمودار بازتابندگی بیانگر بیشترین مقدار جذب است. بر همین اساس با توجه به بخش (ب) از شکل (۵) تأثیر گذارترین کمینه های نمودار بازتابندگی در انرژی های ۱۳/۸۴، ۱۹/۰۳، ۲۲/۸۷ و ۲۸/۰۴ الکترون ولت رخ می دهد که در این انرژی ها بیش ترین جذب را خواهیم داشت و تقریباً به ازای فوتون هایی با انرژی بیش تر از ۴۰ الکترون ولت، که در شکل نشان داده نشده اند، بازتابندگی به صفر میل می کند.





شکل ۶: بازتابندگی ترکیب MgAl₂O4با تقریب (MBJ-GGA(WC در فشار صفر

طیف اتلاف انرژی الکترون (EELs): طیف اتلاف انرژی پلاسمونی متناظر شده با نوسان دستهجمعی الکترونهای ظرفیت و انرژی آنها که وابسته به چگالی الکترونهای ظرفیت است. طیف اتلاف انرژی محاسبه شده برای این ترکیب در شکل (۶) آورده شده است. از روی نمودار ELOSS می توان فرکانس تشدید پلاسمونی را به دست آورد. قلهٔ اصلی در نمودار افت انرژی، قلهٔ پلاسمونی است به طوری که ماده در فرکانس های بالاتر از فرکانس پلاسما به صورت شفاف رفتار می کند. ممکن است در یک بلاسمونی است به پیدان و داشته با می توان در تعیی می نوان و می نوان و می می توان فرکانس تشدید پلاسمونی را به دست آورد. قلهٔ اصلی در ممودار افت انرژی، قلهٔ پلاسمونی است به طوری که ماده در فرکانس های بالاتر از فرکانس پلاسما به صورت شفاف رفتار می کند. ممکن است در یک بلور چندین قله وجود داشته باشد. در انرژی هایی که تابع اتلاف بیشینه است، شدت انتقال بین نواری کمینه است [۲۰].



(ب) شکل ۶: الف) طیف اتلاف انرژی الکترون ترکیب MgAl2O4 با تقریب (MBJ-GGA (WC) در فشار صفر و ب)طیف اتلاف انرژی الکترون در فشار صفر الی ۲۰ گیگاپاسکال.

 $\omega_{\rm p}$ قلهٔ تیز مربوط به پلاسـمون جمعی با انرژی $\hbar\omega_p$ در حدود ۵۴/۵۴ الکترونولت اتفاق میافتد. بسـامد پلاسـما $\omega_{\rm p}$ عبارت است از بسامد آستانهٔ بین انتشار درون ماده و انعکاس قوی از سطح نمونه. در این انرژی (بسامد)، قسمت حقیقی تابع دیالکتریک به سمت صفر میرود. در انرژیهای بیشتر از این انرژی ذرات آزاد سهم بیشتری در جذب و رسانش دارند. این طیف شامل یک سری قلههای کوچکتر بین صفر و ۷/۷ الکترونولت است که مرتبط با گذارهای بین نواری هستند. با اعمال فشار به بلور از صفر تا ۱۵ گیگاپا سکال، قلهٔ اصلی در انرژیهای کمتر ظاهر می شود اما در فشار ۲۰

بررسی ویژگیهای ساختاری و اپتیکی ترکیب MgAl2O4....

گیگا پاسکال مجدداً انرژی قله اصلی افزایش مییابد. که این امر میتواند از تغییر مختصر در ساختار بلور تحت فشار ۲۰ گیگاپاسکال نشأت گرفته باشد.

نتيجهگيرى

محاسبات با استفاده از روش FP-LAPW در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و با تقریبهای مختلف صورت گرفته است. نتایج پارامترهای ساختاری در تقریب GGA-WC و نتایج گاف نواری در تقریب LDA با نتایج تجربی سازگاری بهتری داشت. لذا در ادامه روش MBJ به همراه دو تقریب ذکر شده به کار گرفته شده است و گاف نواری به ترتیب ۷/۶۷ و ۸/۹۸ الکترونولت به دست آمد که نتیجهٔ تقریب (MBJ-GGA(WC سازگاری بهتری با تجربه داشت. با توجه به مقدار مدول حجمی درمی یابیم که ترکیب از تراکم پذیری کم و سـختی زیادی برخورداراسـت. با توجه به نتایج به مقدار مدول حجمی درمی یابیم که ترکیب از تراکم پذیری کم و سـختی زیادی برخورداراسـت. با توجه به نتایج که این امر نیز به تأییدی بر سختی ترکیب از تراکم پذیری کم و سـختی زیادی برخورداراسـت. با توجه به نتایج که این امر نیز به تأییدی بر سختی ترکیب است به عبارتی با استفاده از نتایج به دست آمده از مدول حجمی و اعمال فشار به نتایج مشابهی دست یافتیم. همچنین خواص اپتیکی آن نیز محا سبه و ضریب شکست آن ۱۵/۱ و انرژی قلهٔ پلاسمونی آن ۵۴/۰ الکترونولت به دست آمد. با بررسی گاف نواری و خواص اپتیکی ترکیب MgAl2O4 در فشار صفر تا ۲۰ گیگاپاسکال مشاهده می شود که گاف نواری و ضریب شکست با فیش مییابد و قلهٔ پلاسمونی نیز در انرژیهای کم تر رخ می دهد. در کل نتایج به دستآمده سازگاری خوبی با دیگر دادههای موجود دارد.

منابع

C. B. Carter, M. G. Norton, *Ceramic Materials: Science and Engineering*. Springer, 2007
 C. kitte, "Introduction to solid state physics," *seventh Edition*, 442-483 1996
 L. G. J. Haart, G. Blasee, "

4. M. Pardavi-Horvath, "Microwave applications of soft ferrites," *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 215, pp. 171-183, 2000.

 Ueda N, Omata T, Hikuma N, Ueda K, Mizoquchi H, Hashimoto T and Kawazoe H 1992 Appl. Phys. Lett. 61(1954)

6. C. Baudín, R. Martínez, and P. Pena," High-Temperature Mechanical Behavior of Stoichiometric Magnesium Spinel ", J. Am. Ceram. Soc. 78, (1995) 1857-1862

7. J.P. Perdew and Y. Wang " Accurate and simple analytic representation of the electrongas correlation energy" Phys. Rev. B **45** (1992)13 244.

8. O. K. Andersen, "Linear methods in band theory," Physical Review B 12 (8), 3060 1975

9. P. Blaha, K. Schwarz, "Wien2k," Vienna University of technology, 2006.

10. P.Perdew, K. Burke, Y. Wang, "Generalized gradient approximation for the exchange-correlation hole of a many-electron system," *Phy Rev B* **54**, 533-534 1996.

11. F. Murnaghan, "The compressibility of media under extreme pressures," *Proceedings of the national academy of sciences of the United States of America*, vol. 30, p. 244, 1944.

12. R. Khenata, M. Sahnoun, H. Baltache, M. Re´rat, A. H. Reshak, Y. Al-Douri, B. Bouhafs, Phys. Lett. A344 (2005)271–279. A. Rébola, D. D. Fong, J. A. Eastman, S. Öğüt, and P. Zapol, "First-principles study of compensation mechanisms in negatively charged LaGaO₃/MgAl ₂ O₄ interfaces," *Physical Review B*, vol. 87, p. 245117, 2013.

13. M.B. Kruger, J.H. Nguyen, W. Caldwell, R. Jeanloz, Phys.Rev. B 56 (1997) 1.

, Y. Zou, S. Gréaux, T. Irifune, B. Li, and Y. Higo, "Unusual Pressure Effect on the Shear Modulus in MgAl2O4 Spinel," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 117, pp. 24518-24526, 2013.

 I. Ahmad, B. Amin, M. Maqbool, S. Muhammad, G. Murtaza, S. Ali, N. A. Noor, "Optoelectronic Response of GeZn2O4through the Modified Becke—Johnson Potential," *Chinese Physics Letters*29 (9), 097102 2012

15. S.M. Hosseini, Phys. Stat. Sol. (b) 245 (2008) 2800-2807.

16. C. Ambrosch-Draxl, J. O. Sofo, "Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented planewave method," *Computer Physics Communications* **175** (1), pp.1-14,(2006).

17. H. Wang, Y. Zheng, M.-Q. Cai, H. Huang, H. L. W. Chan, "First-principles study on the electronic and optical properties of BiFeO3," *Solid State Communications* **149** (15-16), pp.641-644,(2009).

18. P. Ravindran, A. Delin, R. Ahuja, B. Johansson, S. Auluck, J. Wills, *et al.*, "Optical properties of monoclinic SnI_ {2} from relativistic first-principles theory," *Physical Review B*, vol. 56, p. 6851, 1997.
19. Y. NianXu, and W. Y.Ching, "Self-consistent band structures, charge distributions, and optical-absorption spectra in MgO, α-Al₂O₃, and MgAl₂O_{4"}, Phys. Rev. B43,(1991).

20. C. Ambrosch-Draxl, J.O. Sofo, Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented planewave method, Comput. Phys. Commun. 175 (2006) 1–14.