

بررسی ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی سدیم سولفید (Na_2S) در فاز ساختاری اورتورومبیک

حمداله صالحی*، امل عبداللهی، پیمان امیری، زهره جاودانی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

دریافت: ۱۳۹۴/۱۰/۲۹ ویرایش نهایی: ۱۳۹۵/۰۴/۱۹ پذیرش: ۱۳۹۵/۰۷/۱۴

چکیده

در این مقاله ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی Na_2S (سدیم سولفید) در فاز ساختاری اورتورومبیک مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی و روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل و با استفاده از کد محاسباتی Wien2k انجام شده‌اند. نتایج ساختار نواری نشان می‌دهد که سدیم سولفید در فاز ساختاری اورتورومبیک دارای یک گاف نواری مستقیم در نقطه Γ به اندازه ۲٫۴۰۵ الکترون‌ولت می‌باشد، که بیشترین سهم در نوار ظرفیت مربوط به اتم گوگرد و در نوار رسانش مربوط به اتم سدیم است. ویژگی‌های اپتیکی به دست آمده شامل تابع دی‌الکتریک، ضریب شکست، ضریب خاموشی، ضریب جذب و طیف اتلاف هستند. با توجه به نتایج به دست آمده مقدار بیشینه سهم موهومی تابع دی‌الکتریک که بیانگر بیشینه جذب و خاموشی است به ازای انرژی ۵٫۵ الکترون‌ولت رخ می‌دهد و مقدار بیشینه سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک که نشانگر بیشینه بازتاب و شکست است در انرژی‌های نزدیک به ۵٫۴ الکترون‌ولت مشاهده می‌شود. نتایج به دست آمده با دیگر داده‌های موجود سازگاری خوبی دارند.

کلیدواژگان: گاف نواری، ضریب خاموشی، تابع اتلاف انرژی، نظریه تابعی چگالی، سدیم سولفید

مقدمه

فضایی ($Fm-3m$) $a = 6,5265$ (آنگستروم، فاز دوم اورتورومبیک با گروه فضایی $pnma$) $a = 6,607$ ، $b = 4,120$ ، $c = 8,204$ آنگستروم و در فاز سوم ساختار شش وجهی با گروه فضایی $p6_3/mmc$ برابر با $a = 4,376$ و $c = 5,856$ آنگستروم هستند [۳].

روش انجام محاسبات

محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی با تقریب‌های مختلف و با استفاده از کد محاسباتی Wien2k انجام گرفته است [۴]. با توجه به شعاع کره اتمی و طول پیوندها، شعاع مافین-تین برای اتم‌های تشکیل دهنده $R_{MT}(S) = 2,2 \text{ au}$ و

این ترکیب گزینه مناسبی برای منبع مولد نیرو در ابزارهای الکترونیکی مانند لپ‌تاپ، دوربین دیجیتال، سلول‌های سوختی و تولید مواد شیمیایی آلی است [۱]. نتایج اولیه داده‌های Na_2S در ساختار مکعبی مرکز وجهی توسط گوستاو لینبرگ و همکاران با استفاده از اندازه‌گیری میدان الکترومغناطیسی (EMF)^۱ در سال ۲۰۰۷ گزارش شدند [۲]. این ترکیب با تغییر فشار، دو گذار فاز یکی در فشار ۷ GPa از ساختار CaF_2 به PbCl_2 و گذار فاز دیگری در ۱۶ GPa از PbCl_2 به Ni_2In خواهد داشت. سدیم سولفید نیم‌رسانایی باگاف مستقیم است. ثابت‌های شبکه در فاز اول (fcc) با گروه

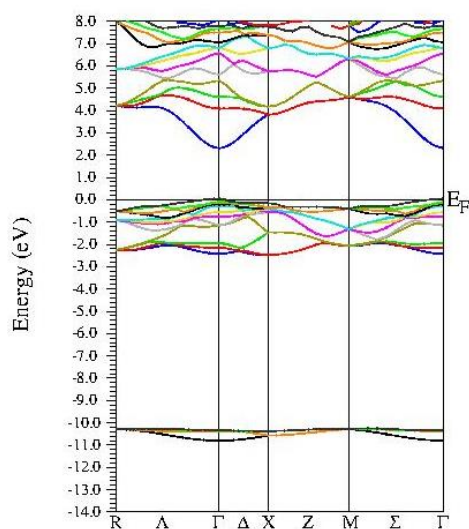
* نویسنده مسئول: salehi_h@scu.ac.ir

¹ Electromagnetic Field

فاز ساختاری اورتورومبیک با تقریب‌های مختلف در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱. گاف نواری محاسبه شده با تقریب‌های مختلف در فاز ساختاری اورتورومبیک.

فاز ساختاری	گاف نواری محاسبه شده (eV)			
	LDA	GGA	WCGGA	PBE-solGGA
اورتورومبیک	۲٫۴۹۳	۲٫۲۹۸	۲٫۲۱۶	۲٫۲۷۱



شکل ۱. ساختار نواری ترکیب سدیم سولفید در فاز ساختاری اورتورومبیک.

داده‌های تجربی و نظری دیگری برای مقایسه با نتایج به دست آمده وجود ندارد، که بتوان با آن مقایسه نمود.

چگالی حالت‌ها

سطح زیر منحنی چگالی حالت‌ها در هر گستره انرژی معرف تعداد حالت‌های مجاز حضور الکترون در آن گستره انرژی می‌باشد. این تابع در فرآیندهای الکترونی به ویژه در پدیده‌های تبادلی بسیار مهم است. با استفاده از آن برای الکترون‌های یک بلور علاوه بر محاسبه مقدار گاف نواری می‌توان سهم مربوط به اوربیتال هریک از اتم‌های شرکت‌کننده در ترکیب را به درستی تعیین نمود. شکل‌های ۲ و ۳ شکل چگالی

تقریب‌های $R_{MT}(Na)=2/1au$ معین شده است. تقریب‌های متفاوتی برای انرژی تبادلی-همبستگی بررسی شدند ولی چون خواص الکترونی به دست آمده از تقریب چگالی موضعی (LDA) با نتایج تجربی هم‌خوانی بهتری داشت در ادامه محاسبات از تقریب LDA بهره گرفتیم.

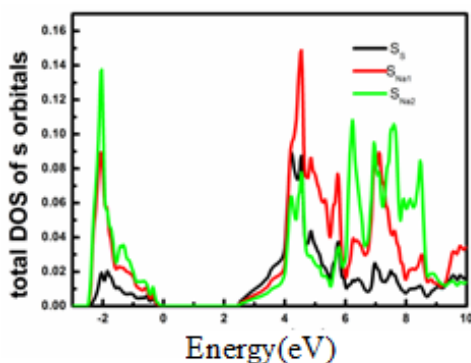
پارامترهای $R_{MTk_{max}}$ (حاصل ضرب شعاع کره مافین-تین در عدد قطع بردار موج) و G_{max} (بزرگترین بردار در بسط فوریه چگالی بار) با همگرایی 10^{-4} اریدبرگ ۱۲ به ترتیب ۵ و ۱۲ انتخاب شدند. همچنین تعداد نقاط k در منطقه اول بریلوئن ۷۰۰۰ انتخاب شده‌اند. تعداد امواج تخت تولید شده برای $G_{max}=12$ ، 1053 است. همچنین برای جداسازی حالت‌های ظرفیت از حالت‌های مغزه، انرژی -6 اریدبرگ را انتخاب نمودیم. علاوه بر این ثابت‌های شبکه با استفاده از شکل حجم برحسب انرژی (معادله مورناگون)، حجم بهینه و پارامترهای ساختاری مربوط به همه تقریب‌ها محاسبه و در این محاسبات از مقادیر بهینه شده استفاده شده است.

ساختار نواری

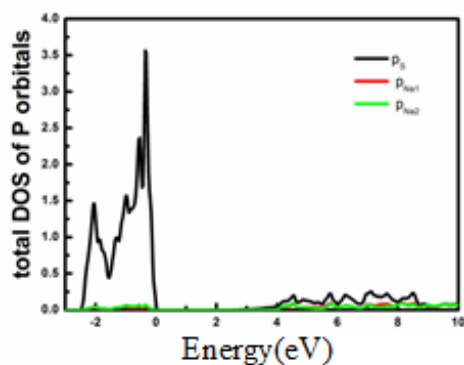
از ساختار نواری می‌توان اطلاعاتی در مورد ماهیت بلور از لحاظ رسانا یا نارسانا بودن، اندازه گاف انرژی در صورت وجود و نوع آن را به دست آورد. گاف نواری یکی از سودمندترین جنبه‌های ساختار نواری است و به مقدار زیادی روی ویژگی‌های اپتیکی و الکتریکی تأثیر می‌گذارد. شکل ۱ ساختار نواری ترکیب Na_2S را در فاز ساختاری اورتورومبیک نمایش می‌دهد. در این شکل تراز فرمی با خط مشکی مشخص شده و بر انرژی صفر منطبق می‌باشد. این شکل یک گاف نواری مستقیم را در نقطه Γ نشان می‌دهد. مقدار گاف نواری محاسبه شده برای ترکیب سدیم سولفید در

^۱Local density approximation

چگالی حالت‌های جزئی اتم‌های تشکیل‌دهنده ترکیب در شکل‌های ۴ و ۵ رسم شده است.



شکل ۴. چگالی حالت‌های اوربیتال s ترکیب سدیم سولفید.



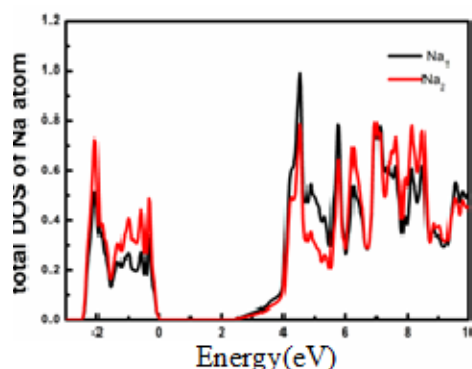
شکل ۵. چگالی حالت‌های اوربیتال p ترکیب سدیم سولفید.

همان‌گونه که از شکل ۴ مشاهده می‌کنید سهم اوربیتال s اتم سدیم در نوار رسانش، از اتم گوگرد بیشتر است و با توجه به شکل ۵ بیشینه سهم اوربیتال p در نوار ظرفیت متعلق به اتم گوگرد است.

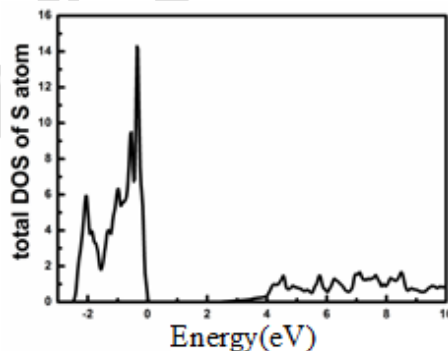
چگالی ابرالکترونی

چگالی ابرالکترونی نحوه توزیع بار در اطراف اتم‌ها را نشان می‌دهد. احتمال یافتن در هر ناحیه معین متناسب با چگالی ابرالکترونی در آن ناحیه می‌باشد. این احتمال در ناحیه‌ای که چگالی ابرالکترونی تراکم بیشتری داشته باشد، بیشتر خواهد بود. لازم به توضیح است که برای بررسی در یک ترکیب، بایستی صفحات به‌گونه‌ای انتخاب شوند که پیوند اتم‌ها در هر ساختار

حالت‌های الکترونی کل اتم‌های سدیم و گوگرد را نشان می‌دهند. همان‌طور که مشاهده می‌شود چگالی حالت‌ها در تراز فرمی صفر است، می‌توان گفت که این ترکیب نیم‌رسانا است.



شکل ۲. چگالی حالت‌های کل اتم سدیم.



شکل ۳. چگالی حالت‌های کل اتم گوگرد.

شکل ۳ نشان می‌دهد که سهم اتم‌های گوگرد در بازه ۴- تا صفر الکترون‌ولت در شکل چگالی حالت‌های الکترونی بسیار بیشتر از اتم‌های سدیم می‌باشد، و در بازه ۲ تا ۱۰ الکترون‌ولت طبق شکل ۲، سهم اتم‌های سدیم از اتم گوگرد بیشتر است. همچنین شکل چگالی حالت‌های الکترونی مربوط به اتم‌های سدیم در این شکل سطح فرمی را در مقدار بیشتر از صفر قطع می‌کند که نشان‌دهنده شرکت این اتم‌ها در رسانش کل بلور می‌باشد. به‌طور کلی می‌توان گفت که اتم‌های سدیم در این بلور نقش مهمی در ویژگی‌های فیزیکی کل ترکیب ایفا می‌کند.

که در شکل‌های رسم‌شده از چگالی ابرالکترونی نیز قابل مشاهده است.

تراکم زیاد بین اتم‌ها نشان دهنده قوی بودن پیوند و تراکم کمتر بین دو اتم پیوند ضعیف‌تری را نشان می‌دهد، که می‌توان این‌گونه تفسیر کرد که پیوند گوگرد-گوگرد و سدیم-سدیم نسبت به پیوند سدیم-گوگرد، پیوندهای ضعیف‌تری هستند، که با واقعیت سازگاری خوبی دارد.

ویژگی‌های اپتیکی

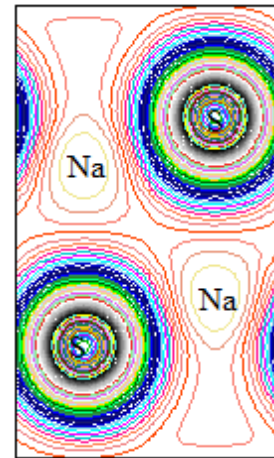
تابع دی‌الکتریک

تابع دی‌الکتریک مختلط $\varepsilon(\omega)$ توصیف‌گر خواص اپتیکی یک ترکیب است، که می‌توان آن را به صورت زیر نوشت [۵].

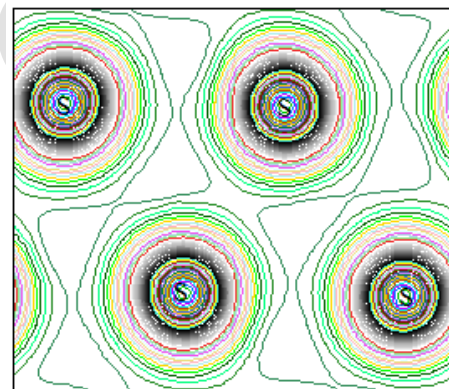
$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad ۱$$

تابع دی‌الکتریک گاز الکترون $\varepsilon(\omega, k)$ که در آن وابستگی بسامد و بردار موج قوی است، برای توصیف پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی به کار برده می‌شود و به ساختار نواری الکترونی بلور بستگی دارد. بررسی‌های تابع دی‌الکتریک، با استفاده از طیف نمایی اپتیکی در تعیین ساختار نواری کل بسیار سودمند است. این تابع، دارای دو سهم گذار بین نواری و درون‌نواری می‌باشد. از گذارهای بین نواری غیرمستقیم که سهم کوچکی در خواص نوری مواد دارند و دربرگیرنده پراکندگی‌های فونونی (جذب و گسیل) می‌باشد، صرف‌نظر می‌کنیم و سهم موهومی تابع دی‌الکتریک را با در نظر گرفتن همه گذارهای ممکن از حالت‌های اشغال‌شده به اشغال نشده در سهم درون‌نواری محاسبه می‌شود. حد $\varepsilon(\omega, 0)$ پلاسمون‌های حجمی و سطحی و در حد دیگر $\varepsilon(0, k)$ استتار الکتروستاتیکی برهم‌کنش‌های الکترون-الکترون، الکترون-شبکه و الکترون-ناخالصی در بلورها را توصیف می‌کند [۶].

به خوبی مشخص شده باشد. در شکل ۶ چگالی‌های ابرالکترونی ترکیب سدیم سولفید در صفحات (۰۱۰) و (۰۰۱) با استفاده از تقریب LDA آورده شده‌اند.



(الف)

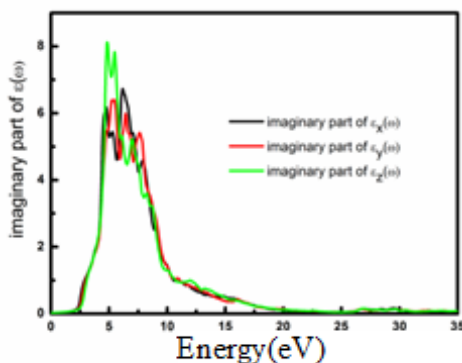


(ب)

شکل ۶. چگالی ابرالکترونی در صفحه (الف) (۰۱۰) و (ب) (۰۰۱).

با توجه به میزان توزیع بار در اطراف اتم‌ها و الکترونگاتیوی آنها می‌توان نوع پیوند بین آنها را مشخص کرد. الکترونگاتیوی اتم‌های سدیم و گوگرد در مقیاس پائولینگ به ترتیب در حدود ۰٫۸ و ۲٫۶ می‌باشد و اختلاف الکترونگاتیوی آنها مقداری در حدود ۱٫۷ است. لذا پیوند بین آنها از نوع یونی است و از آنجا که الکترونگاتیوی گوگرد از سدیم بیشتر است، الکترون‌های بیشتری را در پیوند به خود جذب می‌کند،

همان‌گونه که از شکل ۷ مشاهده می‌کنیم، سهم موهومی تا قبل از انرژی ۲٫۵ الکترون‌ولت دارای تغییرات آرام است که ناشی از جذب فوتون‌های کم انرژی است که منجر به گذارهای درون‌نواری می‌شود اما بعد از ۲٫۵ الکترون‌ولت سهم موهومی به‌صورت ناگهانی افزایش می‌یابد که این امر بیانگر جذبی است که به‌دنبال آن گذارهای میان‌نواری رخ می‌دهد. E_c انرژی لازم برای عبور از گاف اپتیکی را نشان می‌دهد که بیانگر گاف اپتیکی است و نقاط متناظر با قله‌های بعدی به‌ترتیب، انرژی موردنیاز برای گذارهای احتمالی بعدی را نشان می‌دهند. گاف اپتیکی این سیستم با استفاده از تقریب چگالی موضعی در فاز ساختاری اورتورومبیک ۲٫۴ الکترون‌ولت است که با مقدار گاف نواری ترکیب در این فاز ساختاری هم‌خوانی خوبی دارد.



شکل ۷. سهم موهومی تابع دی‌الکتریک فار ساختاری اورتورومبیک.

ضریب شکست و خاموشی

ضریب خاموشی برای یک ماده ویژه، معیاری از میزان جذب پرتو الکترومغناطیس توسط آن ماده است. اگر پرتو الکترومغناطیس از درون ماده به‌آسانی عبور کند، ماده ضریب خاموشی پایینی دارد. برعکس اگر پرتو به‌سختی درون ماده نفوذ کند، دارای ضریب خاموشی بالا است. بیشینه‌های موضعی ضریب خاموشی $k(\omega)$ متناظر با صفرهای سهم حقیقی تابع

سهم موهومی تابع دی‌الکتریک $\epsilon_2(\omega)$ ، با رابطه زیر داده می‌شود [۵]:

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum_i |i| \langle i | M | j \rangle^2 f_i (1 - f_i) \times \delta(E_f - E_i - \omega) d^3k \quad 2$$

که در آن M ماتریس دو قطبی، i و j به ترتیب حالت‌های اولیه و نهایی، f_i تابع توزیع فرمی برای حالت i ام و E_i انرژی الکترون در حالت i ام است. انتگرال در محدوده منطقه اول بریلوئن است.

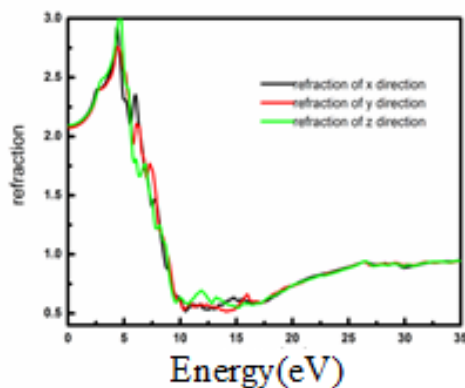
عناصر گشتاور دو قطبی، که درایه‌های ماتریس گذار مستقیم میان حالت‌های نواری ظرفیت $u_{vk}(\mathbf{r})$ به نواری رسانش $u_{ck}(\mathbf{r})$ هستند، به‌صورت زیر بیان می‌شوند [۵]:

$$M_{cv}(k) = \langle u_{ck} | \vec{\delta} \cdot \vec{\nabla} | u_{vk} \rangle \quad 3$$

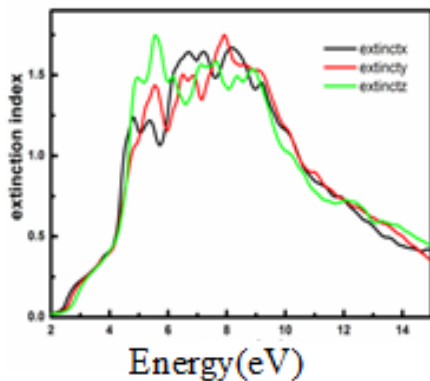
که در آن $\vec{\delta}$ پتانسیل برداری است که، بیان‌کننده میدان الکتریکی است. انرژی متناظر با گذار برابر $\hbar\omega_{cv}(k) = E_{ck} - E_{vk}$ است. سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک وابسته به بسامد را می‌توان از سهم موهومی با استفاده از رابطه کرامرز-کرونیگ به‌دست آورد [۷].

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \epsilon_2(\omega')}{\omega^2 - \omega'^2} d\omega \quad 4$$

که در آن P بر مقدار انتگرال کوشی دلالت می‌کند، به این معنی که باید مقدار اصلی انتگرال در نقاط $\omega \neq \omega'$ محاسبه شود. دانستن هر دو سهم موهومی و حقیقی تابع دی‌الکتریک وابسته به بسامد برای توابع اپتیکی مانند ضریب شکست و ضریب خاموشی ضروری است. از آنجا که در فاز اورتورومبیک هیچ کدام از مؤلفه‌های تانسور باهم برابر نیستند یعنی $\epsilon_{xx} \neq \epsilon_{yy} \neq \epsilon_{zz}$ هر سه مؤلفه باید محاسبه شوند.



شکل ۹. ضریب شکست فاز ساختاری اورتورومبیک.



شکل ۱۰. ضریب خاموشی فاز ساختاری اورتورومبیک.

جذر سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر منجر به ضریب شکست استاتیک می‌شود.

$$n_o(\omega) = \sqrt{\epsilon_1(0)} \quad ۷$$

در جدول ۲ نتایج محاسبه ضریب شکست استاتیک، با استفاده از سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک ارائه شده است. نتایج تجربی برای مقایسه با داده‌های به دست آمده برای فاز ساختاری اورتورومبیک وجود ندارد، که بتوان با آن مقایسه نمود.

جدول ۲. ضریب شکست استاتیک در فاز ساختاری اورتورومبیک

ϵ_{xx}	۴٫۳۵	ϵ_{yy}	۴٫۳	ϵ_{zz}	
ρ_{ox}	۲٫۰۸۵	ρ_{oy}	۲٫۰۷۳	ρ_{oz}	۲٫۰۹۷

ضریب بازتاب و جذب

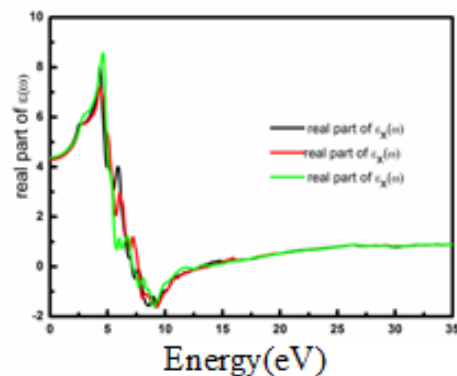
یکی از پارامترهای مهم اپتیکی ضریب انعکاس R است که انرژی انعکاس یافته از قسمت فصل مشترک

دی‌الکتریک است. ضریب شکست $n(\omega)$ به برهم‌کنش‌های اتمی میکروسکوپی مربوط می‌شود [۶].

$$n_{ij}(\omega) = \sqrt{\frac{|\epsilon_{ij}(\omega)| + \text{Re} \epsilon_{ij}(\omega)}{2}} \quad ۵$$

$$k_{ij}(\omega) = \sqrt{\frac{|\epsilon_{ij}(\omega)| - \text{Re} \epsilon_{ij}(\omega)}{2}} \quad ۶$$

در شکل ۸ سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک، در شکل ۹ منحنی ضریب شکست و در شکل ۱۰ منحنی ضریب خاموشی رسم شده است. با نگاهی به این شکل‌ها می‌توان به تشابه 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 باتوجه به روابطی که این کمیات از آنها پیروی می‌کنند، دور از انتظار نبود.



شکل ۸. سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک فاز ساختاری اورتورومبیک.

ضریب اتلاف

ضریب اتلاف یکی از کمیت‌های مهم برای بررسی ویژگی‌های میکروسکوپی و ماکروسکوپی جامدات می‌باشد. این تابع متناسب با احتمال اتلاف انرژی E در واحد طول برای الکترون در حال عبور از محیط است. شاخص قله در شکل ضریب اتلاف به‌عنوان قله پلاسمونی شناخته می‌شود که بیانگر برانگیختگی‌های حجمی چگالی بار الکترون‌های در حال عبور است. در یک بلور امکان حضور چند قله پلاسمونی وجود دارد، مقدار بیشینه آن متناظر با پلاسمون حجمی است و بسامد منطبق با آن بسامد پلاسمای نامیده می‌شود. وجود قله‌های پلاسمونی در این نقاط، چندان دور از انتظار نیست، زیرا در این نقاط سهم‌های موهومی و حقیقی تابع دی‌الکتریک بسیار کوچک هستند، بنابراین در این انرژی‌ها منحنی‌های مربوط به تابع اتلاف انرژی الکترون با قله‌هایی مواجه خواهند شد. رابطه بین تابع دی‌الکتریک و تابع اتلاف انرژی به‌صورت زیر است [۶].

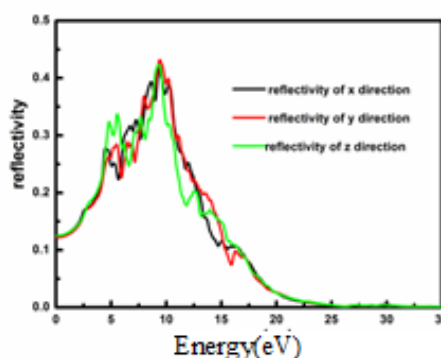
$$EELS(\omega) = \text{Im}[-1/\varepsilon(\omega)] = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} \quad 9$$

این رابطه بیانگر این است که تابع اتلاف انرژی با سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نسبت عکس دارد، به این معنا که در بازه‌هایی که تابع اتلاف دارای قله می‌باشد، سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مقادیر بسیار کوچکی دارند.

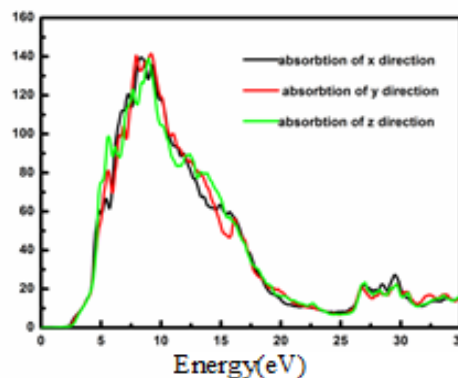
جامد را توصیف می‌کند و با رابطه زیر که بخشی از آن ضریب شکست است محاسبه می‌گردد [۹و۸].

$$R(\omega) = \left| \frac{(\varepsilon_1(\omega) - i\varepsilon_2(\omega))^{1/2} - 1}{(\varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega))^{1/2} + 1} \right| \quad 8$$

ضریب انعکاس وابسته به فوتون فرودی است. در شکل‌های ۱۱ و ۱۲ ضریب بازتاب و ضریب جذب نشان داده شده‌اند.



شکل ۱۱. نمایش ضریب بازتاب فاز ساختاری اورتورومبیک.



شکل ۱۲. نمایش ضریب جذب فاز ساختاری اورتورومبیک.

در فاز ساختاری اورتورومبیک ترکیب در هر سه راستا ناهمسانگرد است به‌همین دلیل ضریب بازتابندگی در هر سه راستا نمایش داده شده است و ضریب بازتاب در راستای Z بیشتر از راستای Y و X است. کمینه میزان بازتابندگی بیانگر جذب است، پس عکس موارد ذکر شده برای ضریب بازتاب، برای ضریب جذب صادق است.

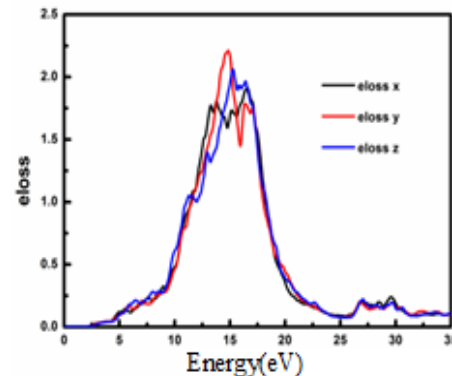
ساختاری اورتورومبیک بلور ناهمسانگرد است به‌ازای راستایی که ثابت شبکه کوچکتر است مقدار جذب بیشتر و مقدار شکست کمتر به‌دست آمد.

سپاس‌گزاری

از زحمات آقای محمد معدلی بسیار سپاس‌گزاریم.

مرجع‌ها

- [1] R.D. Eithiraj, G. Jaiganesh, G. Kalpana, M. Rajagopalan, First principle study of electronic structure and ground state properties of alkali metal sulfides Li_2S , Na_2S , K_2S and Rb_2S , *physica status solidi* **224** (2007) 1337-1346.
- [2] G. Lindberg, A. Larsson, M. Reberg, R. Bostrom, R. Backman, A. Nordin, Determination of thermodynamic properties of Na_2S using solid state EMF measurement, *The Journal of Chemical Thermodynamics* **39** (2007) 44-48.
- [3] A. Vegas, A. Grzenchnik, K. Sysen, I. Loa, M. Hanfland, M. Jansen, Reversible phase transition in Na_2S under pressure a comparison with cation array in Na_2SO_4 , *Acta Crystallographica Section B* **57** (2001) 151-156.
- [4] P Blaha, Improved and updated Unix version of the original copyrighted WIEN-code, *Computer Physics Communications* **59** (1990) 339.
- [5] H. Khachai, D. Rached, B. Soudini, FP-LAPW+LO calculation of electronic and optical properties of alkali metal sulfides under pressure, *journal of physics condensed matter* **21** (2009) 095404.
- [6] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley & Sons, Inc, New York, (1996).
- [7] S.W. Koch, *Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors*, World Scientific Publishing Company Incorporated, (1994).
- [8] A.M. Fox, M. Fox, *Optical properties of solids*, Oxford university press New York, (2001).
- [9] K. Wakamura, Roles of phonon amplitude and low-energy optical phonons on superionic conduction, *Physical Review B* **56** (1997) 11593.



شکل ۱۳. تابع اتلاف انرژی فاز ساختاری اورتورومبیک.

در شکل ۱۳ تابع اتلاف برای هر این فاز ساختاری نشان داده شده است. با توجه به این شکل، انرژی پلاسماون حجمی مورد نظر برابر $14/8$ الکترون‌ولت است. بنابر اطلاعات موجود تاکنون داده تجربی وجود نداشته که بتوان نتیجه به‌دست آمده را با آن مقایسه کرد، اما نتایج به‌دست آمده با مفاهیم اولیه سازگاری دارد، چرا که در این انرژی سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک بسیار ناچیز هستند.

نتیجه‌گیری

در این مقاله ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی سدیم سولفید Na_2S ، با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. شکل ساختار نواری بیانگر وجود یک گاف نواری مستقیم در ترکیب می‌باشند. گاف اپتیکی به‌دست آمده از سهم موهومی تابع دی‌الکتریک با نتایج به‌دست آمده از منحنی ساختار نواری مطابقت دارد. با توجه به شکل‌های سهم موهومی تابع دی‌الکتریک مشاهده می‌شود در بازه $0/5$ الکترون‌ولت، منحنی دارای قله است که معادل مقدار بیشینه در منحنی‌های جذب و ضریب خاموشی است و بزرگترین قله شکل سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک که بیانگر بیشترین بازتاب و شکست است در انرژی‌های نزدیک به $4/5$ الکترون‌ولت مشاهده می‌شود. در فاز

Calculation of electronic and optical properties of Na₂S in the orthorhombic phase

Hamdollah Salehi*, Emel Abdoulahi, Peyman Amiri, Zohreh Javdani

Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University, of Ahvaz, Ahvaz, Iran

Received: 19.01.2016 Final revised: 09.07.2016 Accepted: 05.10.2016

Abstract

In this paper, the electronic and optical properties of Na₂S in the orthorhombic structural phase have been investigated. Calculations were performed by using wien2k package which is based on density functional theory and FP-LAPW method. The results of band structure show that band gap is about 2.405eV. The orbitals of S and N atoms have the most contribution in valence and conduction band, respectively. The optical properties such as the dielectric function, refractive index, extinction coefficient, absorption coefficient and Energy Loss function have been calculated. The maximum of imaginary part of the dielectric function occurs in 5.5 eV and this point shows the maximum of absorption and extinctions. On the other hand, the maximum of the real part of dielectric function occurs in 5.4 eV and this point shows the maximum of reflectance and energy refractive. The results are in good agreement with other available data.

Key Words: Band gap, Extinction index, Energy loss function, Density functional theory, Na₂S

* Corresponding Author: salehi_h@scu.ac.ir