



محاسبه ویژگی‌های اپتیکی سدیم سولفید (Na_2S) در فازهای مختلف

حمدا... صالحی*، امل عبداللہی

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

تاریخ ثبت اولیه: ۱۴۰۱/۱۱/۱۵، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۴۰۲/۰۲/۲۴، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۴۰۲/۰۳/۱۲

چکیده

در این مقاله ویژگی‌های اپتیکی Na_2S (سدیم سولفید) در فازهای ساختاری مختلف مکعبی مرکز وجهی، اورتورومبیک و هگزاگونال 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 شده 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 موهمی تابع دی‌الکتریک که بیانگر بیشینه جذب و خاموشی است به ازای بازه انرژی (۶-۷/۵) الکترون‌ولت رخ می‌دهد و مقدار بیشینه سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک که نشانگر بیشینه بازتاب و شکست است در انرژی‌های نزدیک به ۵ الکترون‌ولت مشاهده می‌شود.

واژه‌های کلیدی: ضریب شکست، ضریب خاموشی، تابع اتلاف انرژی، نظریه تابعی چگالی، سدیم سولفید.

۱. مقدمه

مواد دوبعدی معمولاً شامل چندین لایه نازک بوده که با نیروی ضعیف واندوالس به هم نگه داشته شده اند. سدیم سولفید گزینه مناسبی برای منبع نیرو، سلول خورشیدی، و تجهیزات فضایی فرابنفش است. اخیراً این ترکیب به عنوان گزینه مناسبی برای منبع مولد نیرو در ابزارهای الکترونیکی مانند لپ‌تاپ، دوربین دیجیتال، سلول‌های سوختی و تولید مواد شیمیایی آلی است [۱]. این ترکیب با افزایش سرعت واکنش و افزایش اکسیداسیون سطح نیم‌رساناها نقش مهمی در بهبود کاتد نوری دارد. از دیگر کاربردهای این ترکیب می‌توان به تولید مواد شیمیایی آلی، رنگ‌ها، معدن، خمیر سلولزی (کاغذ)، لاستیک، صنعت چرم‌سازی، ابریشم

*عهده دار مکاتبات: حمدا... صالحی

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

پست الکترونیک: E-mail: salehi_h@scu.ac.ir

تلفن: ۰۹۱۶۶۱۸۲۲۳۹

۲. روش‌های محاسباتی

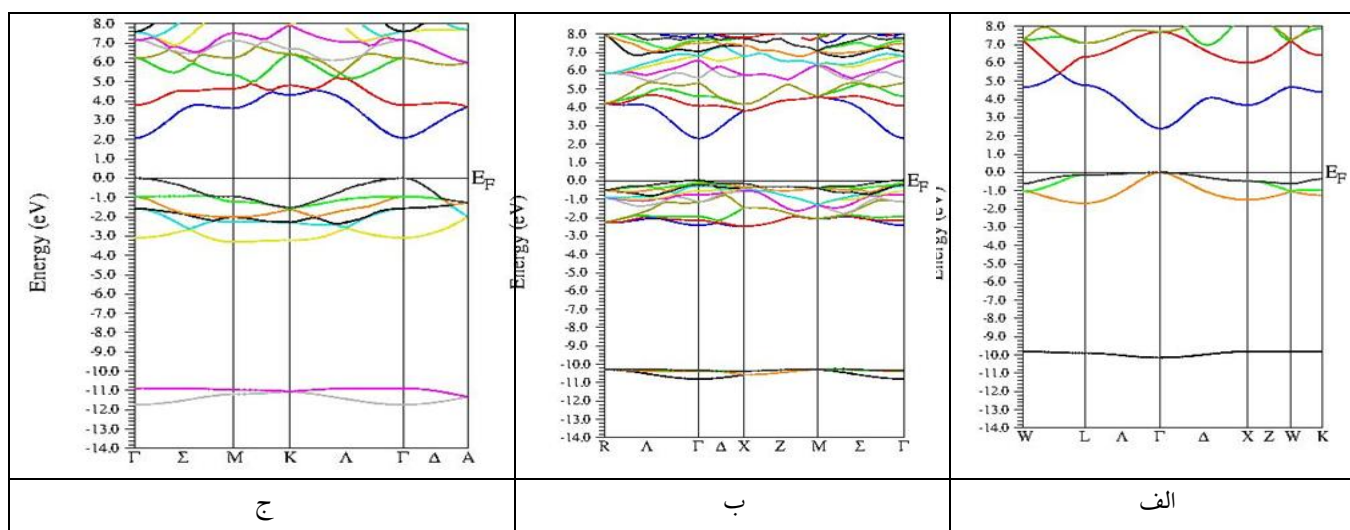
محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی با تقریب‌های مختلف و با استفاده از کد محاسباتی Wien2k انجام گرفته است. با توجه به شعاع کره اتمی و طول پیوندها، شعاع مافین-تین برای اتم‌های تشکیل‌دهنده $R_{MT}(Na)=2/1au$ و $R_{MT}(S)=2/2au$ معین شده است. تقریب‌های متفاوتی برای انرژی تبادل همبستگی بررسی شدند ولی چون ویژگی‌های الکترونی به دست آمده از تقریب چگالی موضعی^۱ (LDA) با نتایج تجربی همخوانی بهتری داشت در ادامه محاسبات از تقریب LDA بهره گرفتیم. پارامترهای Rk_{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} ریدبرگ برای فاز ساختاری اول $7/5$ و 12 و برای فاز ساختاری دوم و سوم 5 و 12 انتخاب شد. هم چنین تعداد نقاط k در منطقه اول بریلوین برای فاز اول 800 و برای فاز دوم و سوم 700 برگزیده شده است. تعداد امواج تخت تولید شده برای 1^{-1} $G_{max}=12bohr$ در فاز اول، 3381 و در فاز دوم و سوم به ترتیب 6267 و 1053 است. هم چنین برای جداسازی حالت‌های ظرفیت از حالت‌های مغزه؛ انرژی 6 - ریدبرگ انتخاب شد.

۳. نتایج و بحث

۳-۱. ساختار نواری

زمانی که الکترون‌های آزاد را مورد بررسی قرار می‌دهیم، برای آن‌ها ترازهای انرژی تعریف می‌کنیم که احتمال حضور الکترون‌ها، البته با رعایت اصل تردپائولی، تنها در این ترازها مجاز است. حال زمانی که تعداد زیادی از الکترون‌ها در کنار هم قرار می‌گیرند، ترازهای انرژی الکترون‌ها روی هم می‌افتد با فاصله گرفتن ناچیز هر یک از ترازهای الکترونی از یکدیگر و ایجاد اختلاف جزئی در انرژی آن‌ها، یک نوار گسترده برای انرژی تشکیل می‌گردد. بنابراین در بلورها ترازهای انرژی به صورت ساختار نواری شکل می‌گیرند [۹]. 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 تاثیر می‌گذارد. شکل (۲) ساختار نواری ترکیب Na_2S را در فازهای ساختاری مختلف 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. وجود گاف تأییدی بر ویژگی نیمرسانایی ترکیب سدیم سولفید دارد در جدول (۱) گاف نواری محاسبه شده برای فازهای مختلف آورده شده و با نتایج تجربی مقایسه شده است.

¹ LDA (Local Density Approximation)



شکل ۲. ساختار نواری ترکیب سدیم سولفید در فاز ساختاری (الف) مکعبی مرکزوجهی؛ (ب) اورتورومبیک و (ج) هگزاگونال.

جدول ۱: گاف نواری (برحسب الکترون ولت) محاسبه شده از تقریب LDA

ترکیب	فاز ساختاری	کارحاضر	مقدار تجربی [۳]
سدیم سولفید	مکعبی مرکزوجهی	۲,۴۹۳	۲,۵
	اورتورومبیک	۲,۴۰۵	-
	هگزاگونال	۲,۰۸۲	-

۲-۳. تابع دی الکتریک

تابع دی الکتریک مختلط $\epsilon(\omega)$ توصیف کننده ویژگی اپتیکی یک ترکیب است، که می توان آن را به صورت زیر نوشت [۱۰].

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (1)$$

تابع دی الکتریک گاز الکترون $\epsilon(\omega, k)$ که در آن وابستگی بسامد و بردار موج قوی است، برای توصیف پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی به کار برده می شود و به ساختار نواری الکترونی بلور بستگی دارد. بررسی های تابع دی الکتریک؛ با استفاده از طیف نمایی اپتیکی در تعیین ساختار نواری کل بسیار سودمند است. این تابع، دارای دو سهم گذار بین نواری و درون نواری می باشد. از گذارهای بین نواری غیرمستقیم که سهم کوچکی در خواص نوری مواد دارند و دربرگیرنده پراکندگی های فونونی (جذب و گسیل) می باشد، صرف نظر می کنیم. سهم موهومی تابع دی الکتریک با در نظر گرفتن همه گذارهای ممکن از حالت های اشغال شده به اشغال نشده در سهم درون نواری محاسبه می شود. حد؛ $\epsilon(\omega, 0)$ پلاسمون های حجمی و سطحی و در حد دیگر $\epsilon(0, k)$ استتار

الکتروستاتیکی برهم کنش‌های الکترون-الکترون، الکترون-شبهه و الکترون-ناخالصی در بلورها را توصیف می‌کند [۹]. سهم موهومی تابع دی‌الکتریک $\epsilon_2(\omega)$ ، با رابطه زیر داده می‌شود [۱۰]:

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{e^2 \hbar^2}{\pi m^2 \omega^2} \sum_{v,c} [_{BZ} |M_{ck}(\omega)|^2 \delta[\omega_{ck}(k) - \omega] d^3k \quad (2)$$

انتگرال در محدوده منطقه اول بریلوین است و $\delta^{\frac{1}{2}}$ پتانسیل برداری است که، بیان‌کننده میدان الکتریکی است. عناصر گشتاور دو-قطبی، که درایه‌های ماتریس گذار مستقیم میان حالت‌های نوار ظرفیت $u_{vk}(r)$ به نوار رسانش $u_{ck}(r)$ هستند، به صورت زیر بیان می‌شوند [۱۰]:

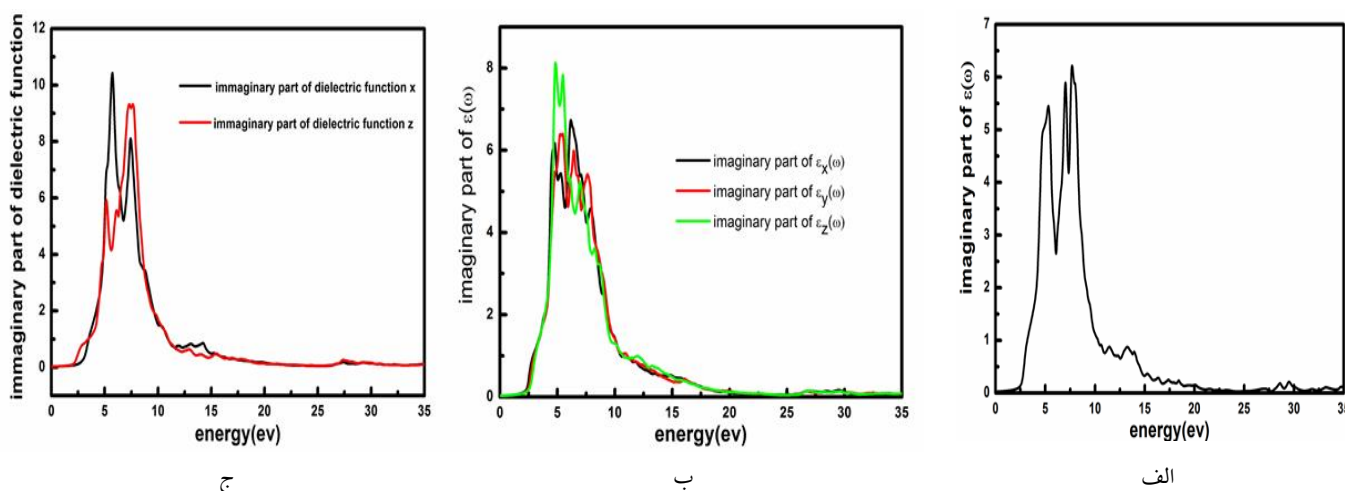
$$M_{ck}(k) = \langle u_{ck} | \delta \cdot \vec{\nabla} | u_{vk} \rangle \quad (3)$$

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 به دست آورد [۱۱].

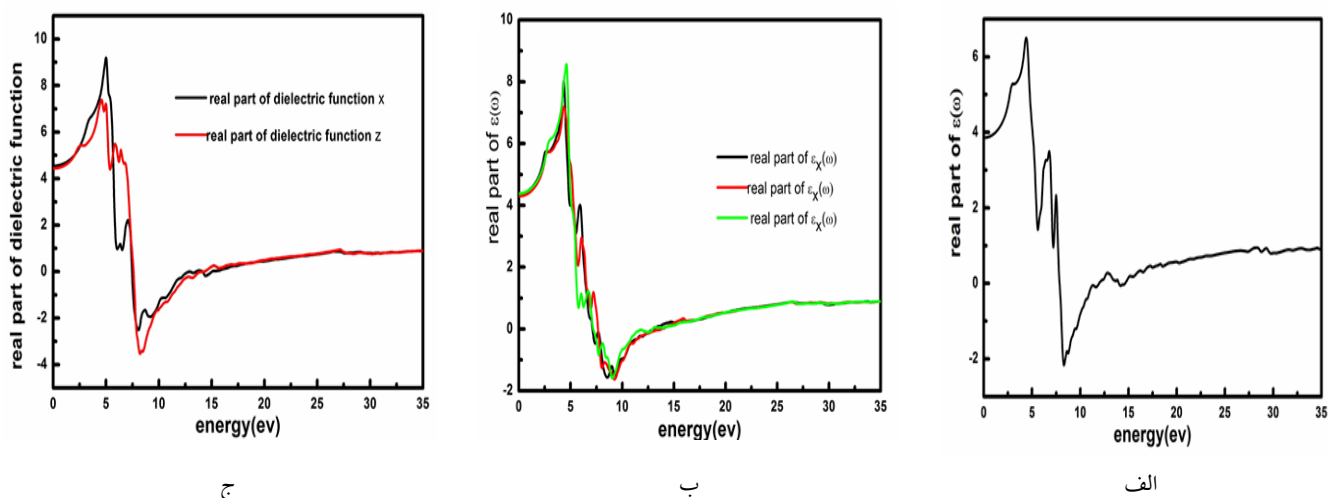
$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \epsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega \quad (4)$$

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 آن جاکه در فاز مکعبی مرکز وجهی و هگزاگونال مؤلفه‌های اصلی تانسور دی‌الکتریک به ترتیب در سه راستا، دو و دو راستا باهم برابر و به صورت $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz}$ و $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz}$ می‌باشند؛ بنابراین محاسبه یک مؤلفه برای فاز اول و دو مؤلفه برای فاز سوم از تابع دی‌الکتریک ضروری است، و برای فاز اورتورومبیک (فاز دوم) چون هیچ کدام از مؤلفه‌های تانسور باهم برابر نیستند یعنی $\epsilon_{xx} \neq \epsilon_{yy} \neq \epsilon_{zz}$ هر سه مؤلفه باید محاسبه شوند. همان گونه که از شکل (۳) مشاهده می‌کنیم، سهم موهومی برای هر سه فاز تقریباً تا قبل از انرژی ۲/۵ الکترون‌ولت دارای تغییرات آرام است که ناشی از جذب فوتون‌های کم‌انرژی است که منجر به گذارهای درون‌نواری می‌شود اما بعد از ۲/۵ الکترون‌ولت سهم موهومی به صورت ناگهانی افزایش می‌یابد که این امر بیانگر جذبی است که به دنبال آن گذارهای میان‌نواری رخ می‌دهد. E_0 انرژی لازم برای عبور از گاف اپتیکی را نشان می‌دهد که بیانگر گاف اپتیکی است و نقاط متناظر با قله‌های بعدی به ترتیب، انرژی موردنیاز برای گذارهای احتمالی بعدی را نشان می‌دهند. برای بررسی تابع دی‌الکتریک در راستاهای مختلف توجه به این امر ضروری است که در بازه انرژی صفر تا ۲/۵ الکترون‌ولت، در فاز ساختاری هگزاگونال $\epsilon_2(\omega)$ در راستای z دارای مقدار بزرگ تری نسبت به جهت y یا x است اما در بازه ۲/۵ تا ۵ الکترون‌ولت این امر برعکس می‌شود. دلیل این امر را می‌توان به این صورت شرح داد که با اعمال میدان، اختلاف انرژی جزئی میان برخی از ارییتال‌ها ایجاد می‌گردد به صورتی که زیرارییتال p_z شرایط مناسب برای اولین گذار را به دست می‌آورد با فرود فوتون‌هایی در حد

انرژی گاف یعنی فوتون‌هایی با انرژی ۲ الکترون‌ولت یا بیشتر اولین گذار الکترون صورت می‌گیرد و اربیتال‌های p_z خالی می‌شود حال نوبت به الکترون‌های موجود در p_x و p_y است که این امر باعث می‌شود سهم موهومی در بازه‌ای محدود در راستای z افزایش یابد. البته این تفسیر تنها در بازه ۲ تا ۴ الکترون‌ولت اعتبار دارد زیرا با افزایش انرژی فوتون‌های فرودی گذارها از مجموعه‌ای از اتم‌ها و اربیتال‌های مختلف انجام می‌گیرد که به سادگی قابل تفکیک نمی‌باشد. نکته ذکر شده باعث افزایش گاف اپتیکی می‌شود که گاف اپتیکی به دست آمده در راستای x و y نسبت به راستای z افزایش می‌یابد. گاف اپتیکی این سامانه با استفاده از تقریب LDA در فاز ساختاری اول، دوم و سوم برابر ۲، ۲٫۴، ۲٫۶ الکترون‌ولت است که با مقدار گاف نواری ترکیب در هر سه فاز همخوانی خوبی دارد. در شکل (۴) سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک برای هر سه فاز ساختاری رسم شده است.



شکل ۳. سهم موهومی تابع دی‌الکتریک سدیم سولفید در فاز ساختاری (الف) مکعبی مرکز وجهی؛ (ب) اورتورومبیک و (ج) هگزاگونال.



شکل ۴. سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک سدیم سولفید در فاز ساختاری (الف) مکعبی مرکز وجهی؛ (ب) اورتورومبیک و (ج) هگزاگونال.

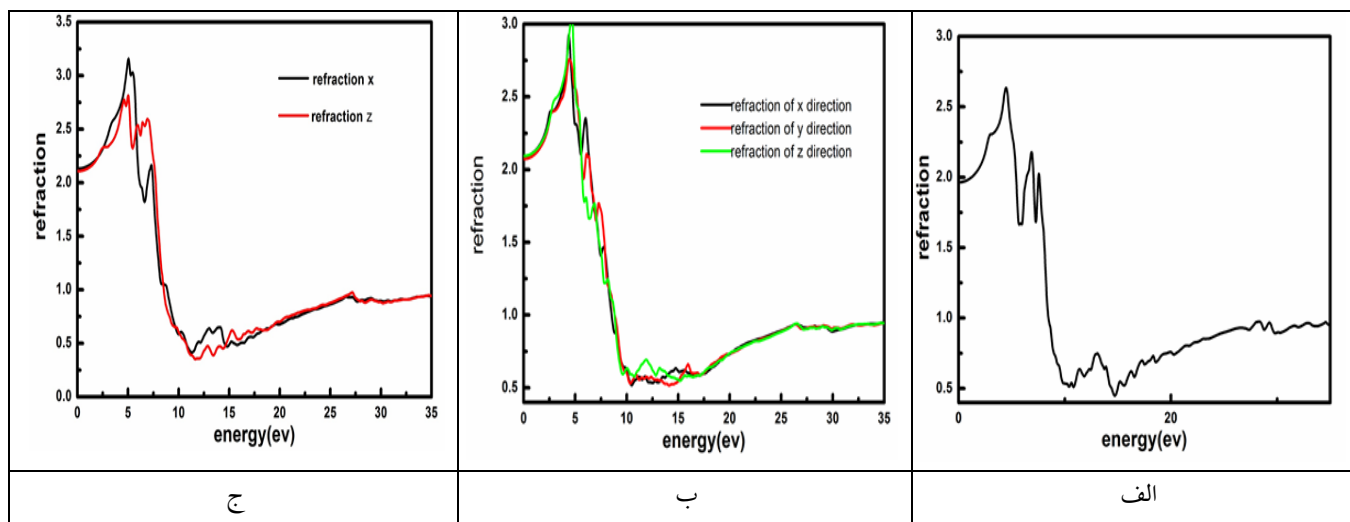
۳-۳. ضریب شکست و خاموشی

ضریب خاموشی برای یک ماده‌ی ویژه، معیاری از میزان جذب پرتوالکترومغناطیس توسط آن ماده است. اگر پرتو الکترومغناطیس از درون ماده به آسانی عبور کند، ماده ضریب خاموشی پایینی دارد. برعکس اگر پرتو به سختی درون ماده نفوذ کند، دارای ضریب خاموشی بالا است. بیشینه‌های موضعی ضریب خاموشی $k(\omega)$ متناظر با صفرهای سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک است. ضریب شکست $n(\omega)$ به برهم کنش‌های اتمی میکروسکوپی مربوط می‌شود [۱۰].

$$n_{ij}(\omega) = \sqrt{\frac{\epsilon_{ij}(\omega) + \text{Re}\epsilon_{ij}(\omega)}{2}} \quad (5)$$

$$k_{ij}(\omega) = \sqrt{\frac{\epsilon_{ij}(\omega) - \text{Re}\epsilon_{ij}(\omega)}{2}} \quad (6)$$

در نمودارهای (۵)، منحنی‌های ضریب شکست و در نمودار (۶)، منحنی ضریب خاموشی سدیم سولفید برای هر سه فاز ساختاری رسم شده است. با نگاهی به نمودارهای بالا 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. با کاهش ضریب شکست برای هر سه فاز، مقدار ضریب خاموشی افزایش پیدا کرده است.



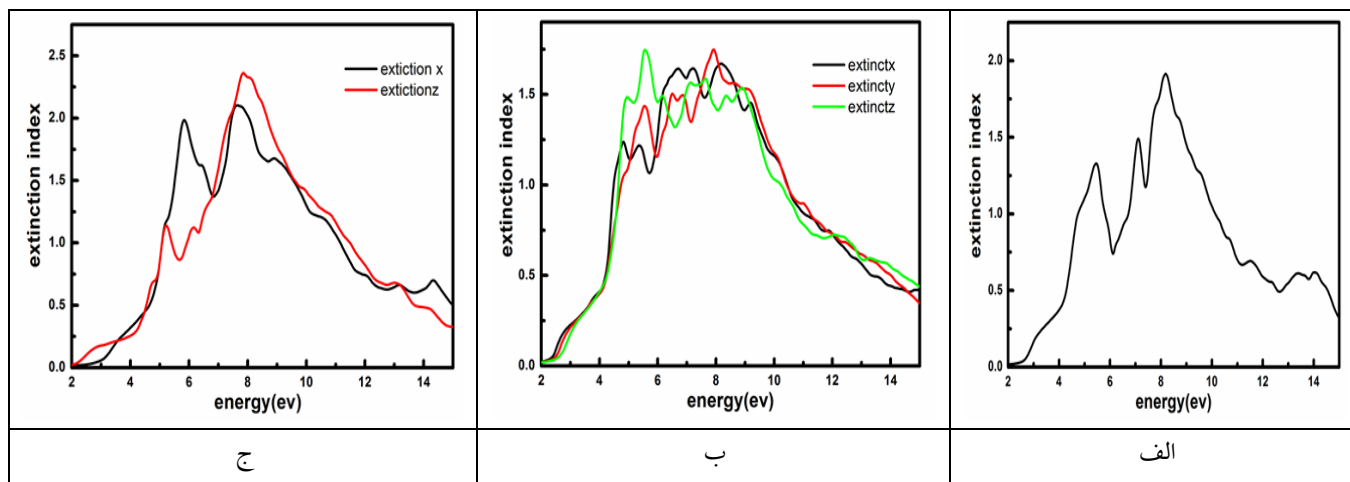
شکل ۵. ضریب شکست سدیم سولفید در فاز ساختاری (الف) مکعبی مرکز وجهی؛ (ب) اورتورومبیک و (ج) هگزاگونال.

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

$$n_0(\omega) = \sqrt{\epsilon_1(0)} \quad (7)$$

در جدول (۲) نتایج محاسبه ضریب شکست استاتیکی، با استفاده از سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک ارائه شده است. نتایج تجربی برای مقایسه با داده‌های به دست آمده برای فاز ساختاری اورتورومبیک و هگزاگونال، وجود ندارد؛ ولی داده‌های فاز ساختاری فاز اول با

داده‌های تجربی همخوانی دارد. با مشاهده نتایج حاصل از جدول (۲) می‌توان فهمید با کاهش گاف نواری و اپتیکی از مقدار ضریب شکست استاتیکی نیز کاسته می‌شود.



شکل ۶. ضریب خاموشی سدیم سولفید در فاز ساختاری (الف) مکعبی مرکز وجهی؛ (ب) اورتورومبیک و (ج) هگزاگونال.

جدول ۲. ضریب شکست استاتیک در فازهای مختلف.

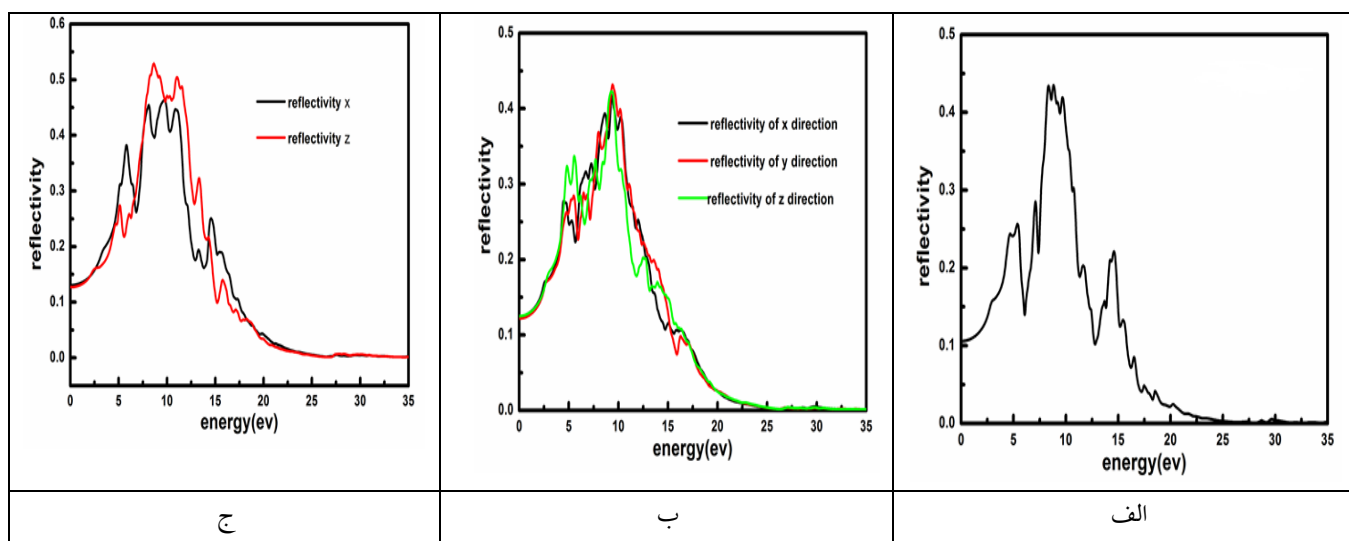
فاز ساختاری	کار حاضر				مقدار تجربی [۱۰]
	ϵ_{xx}	ϵ_{yy}	n_{ox}	n_{oy}	
مکعبی مرکز وجهی	ϵ_{xx}	۴٫۹ V	n_{ox}	۲٫۲۱۳	۲٫۳۲۳
اورتورومبیک	ϵ_{xx}	۴٫۳۵ eV	n_{ox}	۲٫۰۸۵	—
	ϵ_{yy}	۴٫۳ eV	n_{oy}	۲٫۰۷۳	—
	ϵ_{zz}	۴٫۴ eV	n_{oz}	۲٫۰۹۷	—
هگزاگونال	ϵ_{xx}	۴٫۲ eV	n_{ox}	۲٫۲۱	—
	ϵ_{zz}	۴٫۳ eV	n_{oz}	۲٫۲۸	—

۳-۴. ضریب بازتاب و جذب

یکی از پارامترهای مهم اپتیکی ضریب انعکاس R است که انرژی انعکاس یافته از قسمت فصل مشترک جامد را توصیف می‌کند و با رابطه زیر که بخشی از آن ضریب شکست است محاسبه می‌گردد [۴].

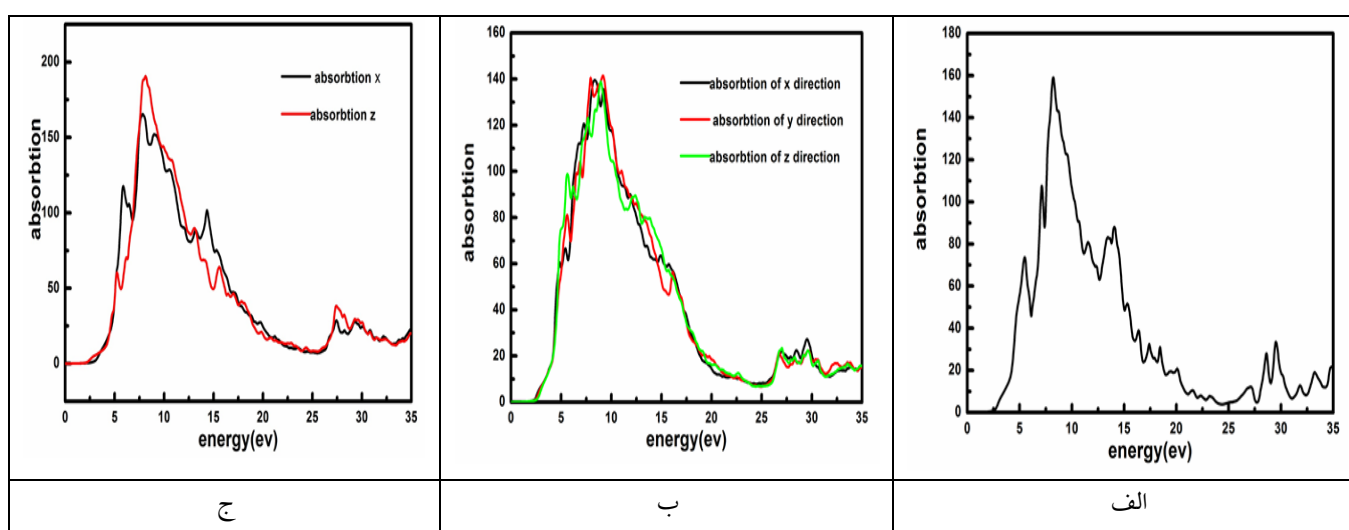
$$R(\omega) = \left(\frac{\sqrt{\epsilon} - 1}{\sqrt{\epsilon} + 1} \right)^2 \quad (۸)$$

ضریب انعکاس وابسته به فوتون فرودی است. در شکل‌های (۷) و (۸) ضریب بازتاب و ضریب جذب برای هر سه فاز نشان داده شده است.



شکل ۷. ضریب بازتاب سدیم سولفید در فاز ساختاری (الف) مکعبی مرکزوجهی؛ (ب) اورتورومبیک و (ج) هگزاگونال.

در فاز مکعبی مرکز وجهی، چون بلور همسانگرد است بازتابندگی در هر سه راستا برابر است به همین دلیل تنها بازتابندگی در یک راستا رسم شده است. در فاز هگزاگونال علیرغم ناهمسانگردی بلور، در دو راستای x و y همسانگردی وجود دارد پس لزومی به ترسیم بازتابندگی راستای y نیست و رسم بازتابندگی دو راستای x و z کافی است و ضریب بازتاب راستای y بیشتر از راستای x و z است. در ساختار اورتورومبیک، ترکیب در هر سه راستا ناهمسانگرد است به همین دلیل ضریب بازتابندگی در هر سه راستا نمایش داده شده است و ضریب بازتاب در راستای z بیشتر از راستای y است، و ضریب بازتاب راستای x در این فاز ساختاری کمترین مقدار را دارد. کمیته میزان بازتابندگی بیانگر جذب است، لذا معکوس تمامی موارد ذکر شده برای ضریب بازتاب، برای ضریب جذب صادق است.



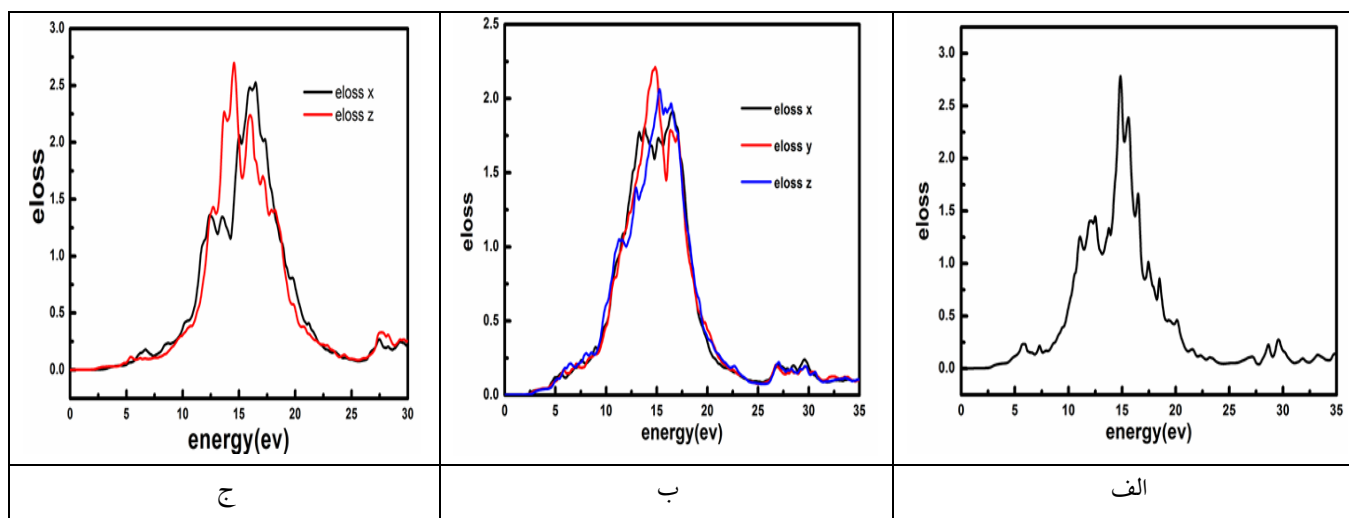
شکل ۸. ضریب جذب سدیم سولفید در فاز ساختاری (الف) مکعبی مرکزوجهی؛ (ب) اورتورومبیک و (ج) هگزاگونال.

۳-۴. 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 نمودار 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 سهم 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 [۱۰].

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

این رابطه بیان می‌کند 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.



شکل ۹. تابع اتلاف انرژی سدیم سولفید در فاز ساختاری (الف) مکعبی مرکزوجهی؛ (ب) اورتورومبیک و (ج) هگزاگونال.

در شکل (۹) تابع اتلاف برای هر سه فاز نشان داده شده است. با توجه به این نمودار؛ انرژی پلاسمون حجمی برای سه فاز موردنظر به ترتیب برابر ۱۵ و ۱۴/۹، ۱۴/۸ الکترون‌ولت است. بنابر اطلاعات موجود تاکنون داده تجربی وجود نداشته که بتوان نتیجه به‌دست‌آمده را با آن مقایسه کرد؛ اما نتایج به‌دست‌آمده با مفاهیم اولیه فیزیکی سازگاری دارد، چرا که در این انرژی سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک بسیار ناچیز هستند.

۴. نتیجه گیری

در این مقاله ویژگی‌های اپتیکی سدیم سولفید، با استفاده از روش خودسازگار در چارچوب نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. نمودارهای ساختار نواری بیانگر وجود یک گاف نواری مستقیم در ترکیب Na_2S به ازای فازهای ساختاری مختلف می‌باشند. گاف‌های اپتیکی به دست آمده از سهم موهومی تابع دی‌الکتریک با نتایج به دست آمده از منحنی‌های ساختار نواری مطابقت دارد. باتوجه به نمودارهای سهم موهومی تابع دی‌الکتریک مشاهده می‌شود در بازه ۷/۵ تا ۷ الکترون‌ولت، منحنی دارای بیشینه است که معادل مقدار بیشینه در منحنی‌های جذب و ضریب خاموشی است و بزرگ‌ترین قله نمودار سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک که بیانگر بیشترین بازتاب و شکست است در انرژی‌های نزدیک به ۵ الکترون‌ولت مشاهده می‌شود. در فاز ساختاری اورتورومبیک و هگزاگونال که بلور ناهمسانگرد است به ازای راستایی که ثابت شبکه کوچکتر است مقدار جذب بیشتر و مقدار شکست کمتر به دست آمد. همان گونه که مشاهده می‌شود با کاهش گاف نواری ترکیب مقدار گاف اپتیکی، ضریب شکست و بازتابندگی نیز کاهش می‌یابد ولی میزان جذب و ضریب خاموشی افزایش پیدا می‌کند. نتایج به دست آمده با دیگر داده‌های موجود سازگاری خوبی دارد.

۵. مراجع

- [1] Eithiraj.R.D, G. Jaiganesh.G, G. Kalpana.G, and Rajagopalan.M,(2007), *First principle study of electronic structure and ground state properties of alkali metal sulfides Li_2S , Na_2S , K_2S and Rb_2S* , Phy. Stat. sol 4, 1337-1346.
- [2] Alay-e-Abbas.s.,Sabri.N.,Saeed.Y., and Shaukat.A(2011).First principle study of structure and electronic properties of alkali metal chalcogenides: $\text{M}_2\text{CH}[\text{M}:\text{Li,Na,K,Rb};\text{CH}:\text{O,S,Se,Te}]$.International Journal of Modern Physics,B25,3911-3925.
- [3] Lindberg.G, Larsson.A, Reberg.M. Bostrom.R, Backman.R,and, Nordin.A,(2007), "Determination of thermodynamic properties of Na_2S using solid state EMF measurement", J.Chem. Thermodynamic 39, 44-48.
- [4] Kalarasse.F., Bennecer.B.(2011), *Elastic properties and lattice dynamics of alkali chalcogenide compounds Na_2S , Na_2Se and Na_2Te* , Computational Materials Science, 50, 1806-1810.
- [5] Xinxin.Y,Wei.C ,and Haohuan.Li,(2022),Thermal Transport properties of $\text{Na}_2\text{X}(\text{X}=\text{O}$ and $\text{S})$ Monolayers.Coatings 12,1294.
- [6] Bo-Hee H., HaiBo X., Su-Jin .P, Sung-Eun .C, Sahn.N. Youn-Woo .H, Jong-Hoo .P, Tae-Ho S.,and Jeong-Su. K.(2016),Structural and optical properties of solvothermally synthesized ZnS nano-materials using $\text{Na}_2\text{S} \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ and $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ precursors ,Ceramics International 42 , 11700-11708 .
- [7] Buhner.W and Bill.H,(1980) , Lattice dynamics of Na_2S ,Journal of Physics C: Solid State Physics 13,5495.
- [8] Vegas.A,Grzenchnik.A, Syszen.K, Loa.I, Hanfland.M and Jansen.M,(2001), "Reversible phase transition in Na_2S under pressure a comparison with cation array in Na_2SO_4 ",Acta Cryst, B 57, 151-156.
۹. سی، کیتل؛ آشنایی با فیزیک حالت جامد؛ (۱۳۸۶)، ترجمه ا، پور قاضی؛ م، صفا؛ ج، عمیقان؛ مرکز نشر دانشگاهی؛ چاپ هفتم .
- [10] Khachai.H,Rached.D,and, Soudini.B,(2009), FP-LAPW+LO calculation of electronic and optical properties of alkali metal sulfides under pressure, J. Phy. Condense Matter 21, 095404.
- [11] Montaner.A, Galtier.M, Benoit.C, and Bill.H,(1979), Optical constant of Sodium Sulphide, Phy. Stat. sol, 52, 597-604.

Calculation of optical properties of Na₂S in different phases

Hamdollah Salehi*¹, Amal Abdollahi

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

Submitted: 04 February 2023, Revised: 14 May 2023, Accepted: 02 June 2023

Abstract

In this paper, the optical properties of Na₂S in various fcc, orthorhombic and hexagonal structural phases have been investigated. Calculations have been performed by using wien2k package which is based on density functional theory and FP-LAPW method. The LDA band structure calculation indicate that Na₂S is a direct band gap semiconductor in each three studied phases. The optical band gaps obtained from imaginary part of dielectric function are in good agreement with structural band gaps. According to our results the maximum peak of the imaginary part of dielectric function, occurred at the energy range which coincide to the maximum peak of absorption and extinction curves on that range. Similar behavior is observed for real part of dielectric function in comparison to refraction and reflections diagrams.

Keywords: *refraction index, extinction index, loss, density functional theory, Na₂S*

*Corresponding author : Hamdollah Salehi

Address: Department of Physics, Faculty of Science, ShahidChamran University, of Ahvaz, Ahvaz, Iran

Tel: 09166182239

E-mail: salehi_h@scu.ac.ir