

بررسی ابتدا به ساکن ویژگی‌های فیزیکی دو تک‌بلور KTP و RTP

مرضیه قوهستانی، علی عرب، حسین صادقی

دانشکده فیزیک، مرکز تحقیقات نانو، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، اصفهان

مرضیه قوهستانی - دانشجوی دکتری دانشگاه صنعتی مالک اشتر اصفهان - - دانشاهین شهر-شگاه صنعتی مالک اشتر اصفهان

دکتر علی عرب استادیار دانشگاه صنعتی مالک اشتر اصفهان - - دانشاهین شهر-شگاه صنعتی مالک اشتر اصفهان

دکتر حسین صادقی - استادیار دانشگاه صنعتی مالک اشتر اصفهان - - دانشاهین شهر-شگاه صنعتی مالک اشتر اصفهان

Marzieh Ghoohestani , Ali Arab, Hossein.Sadeghi

Department of Physics, Nano research Center, Malek-Ashtar University of Technology, Isfahan, Iran

Marzieh Ghoohestani - PhD student Malek-Ashtar University of Technology - Shahinshar-Malek-Ashtar University of Technology - mghoohestani18@gmail.com

Dr Ali Arab - Assistant Professor Malek-Ashtar University of Technology - Shahinshar- Malek-Ashtar University of Technology - aa.arab@yahoo.com

Dr Hossein Sadeghi - Assistant Professor Malek-Ashtar University of Technology - Shahinshar-Malek-Ashtar University of Technology - hsadeghi@mut-es.ac.ir

Abstract

In this work, some physical properties of KTP and RTP single-crystals have been investigated by performing accurate total energy calculations in the framework of density functional theory, using the full-potential linearized augmented plane wave method. Effects of Rb substitution on structural, electronic and optical properties are discussed for KTP single crystal. The structural properties have been calculated using different exchange correlation including LDA, PBE, WC and PBEsol. In addition, PBEsol approximation with more accurate mBJ is employed to calculate values of energy gap. The Pseudo inversion values of both crystals have been calculated by using Pseudo Symmetry software. The Rb substitution effects on pseudosymmetry of KTP and its relation between second-order susceptibility of crystals and the Pseudoinversion values are discussed. Optical constants such as refractive index, birefringence values and absorption coefficients are calculated using the dielectric function. The anisotropy in the linear optical properties of KTP and RTP crystals have been demonstrated.

Keywords: DFT, KTP, RTP, Structural properties Pseudoinversion, Dielectric function, Anisotropy, Birefringence

چکیده

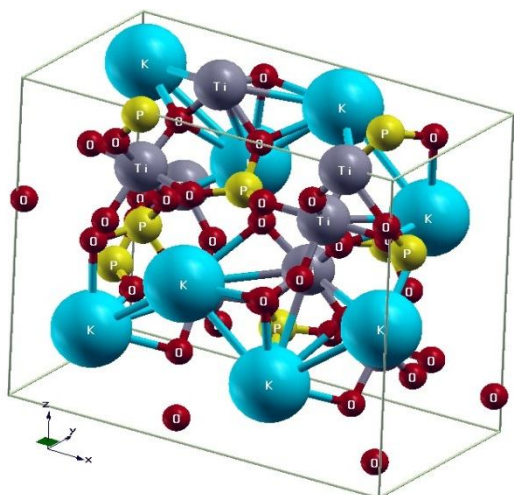
در کار حاضر برخی خواص فیزیکی دو تک‌بلور KTP و RTP مورد بررسی قرار گرفته است. اثر جانمایی روبیدیم بر خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی KTP بررسی شده است. محاسبات با استفاده از امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی انجام گرفته است. خواص ساختاری با استفاده از تابعی‌های تبدیلی - همبستگی متفاوت LDA, PBE, WC و PBEsol محاسبه گردیده است. همچنین برای محاسبه مقدار انرژی گاف تقریب PBEsol و جهت محاسبه دقیق‌تر، تقریب mBJ به کار گرفته شده است. پدیده‌ی شبه وارونی دو بلور بررسی گردیده و مقادیر آن برای هر دو بلور با استفاده از نرم افزار PseudoSymmetry محاسبه شده است. اثر جانمایی روبیدیم بر شبه تقارن KTP و همچنین ارتباط این کمیت با خواص اپتیکی غیرخطی مورد بحث قرار گرفته است. ضرائب اپتیکی از جمله ضریب شکست، مقادیر دوشکستی و ضرائب جذب با استفاده از تابع دی‌الکتریک محاسبه گردیده، درباره وجود ناهمسانگردی در هر دو بلور بحث و نتایج مقایسه شده‌اند.

واژه‌های کلیدی:

نظریه تابعی چگالی، پتاسیم تیتانیل فسفات، روبیدیم تیتانیل فسفات، خواص ساختاری، شبه وارونگی، تابع دی الکتریک، ناهمسانگردی، دوشکستی

1. مقدمه

تک‌بلور فسفات پتاسیم تیتانیل (KTP) ویژگی‌های قابل توجهی از جمله ضرائب اپتیک غیرخطی بزرگ، آستانه تخریب اپتیکی بالا، اقتاع شرایط تطبیق فازی نوع 1 و نوع 2، پایداری شیمیایی و گرمایی بالا، ضرائب انبساط گرمایی پایین و غیره از خود نشان می‌دهند. [1] خواص اپتیک غیرخطی این تک‌بلور باعث کاربردهای زیادی از جمله دو برابر سازی فرکانس، تولید هماهنگ دوم از لیزرهای Nd:YAG با طول‌موج 1064 nm، تقویت نوسانگر پارامتری، ادوات موجبر اپتیکی شده است. این تک‌بلور در ساختار اُترُمبیک با گروه فضایی $pna2_1$ با 64 اتم در یاخته واحد بلوری شده است (شکل 1). هر یاخته واحد شامل دو گروه مولکولی غیر معادل، یعنی دو تیتانیم، دو پتاسیم، دو فسفر و ده اکسیژن غیر معادل با موقعیت‌های شبکه‌ای متفاوت می‌باشد. یون‌های تیتانیم از شکل طبیعی هشت‌وجهی خارج شده و توسط چهار گروه فسفات و دو یون اکسیژن محاصره شده‌اند. این بلور دارای استعداد جانمایی می‌باشد و برای بهبود برخی خواص می‌توان بجای اتم‌های پتاسیم، تیتانیم و فسفر عناصر دیگری را به صورت کلی یا جزئی جایگزین کرد. به عنوان مثال برای بهبود خواص اپتیکی غیرخطی، به جای اتم پتاسیم اتم روبیدیم به صورت جزئی و کلی می‌تواند جایگزین شود. آتوچین و همکاران، با روش‌های محاسباتی و تجربی ارتباط بین ساختار بلوری، خواص الکترونی و خواص اپتیکی غیرخطی این بلور KTP و RTP (RTiOPO4) را بررسی کردند. [2] با وجود پژوهش‌های متعدد بر روی این دو بلور هنوز برخی خواص آن نیاز به بررسی بیشتر دارد. در این کار مقایسه‌ای جامع‌تر بین برخی خواص RTP و KTP صورت گرفته است.



شکل 1: ساختار بلوری تک بلور KTP

2. روش انجام محاسبات

محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از امواج تخت بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل و به کمک بسته نرم افزاری wien2k انجام شده است [3]. شعاع کره‌های مافین-تین برای اتم‌های پتاسیم، روییدیم، تیتانیوم، فسفر و اکسیژن به ترتیب 1,8، 1,9، 1,63، 1,32 و 1,43 (برحسب بوهر) در نظر گرفته شده‌اند. برای محاسبه خواص ساختاری جهت تعیین بهترین تقریب تبدالی-همبستگی در معادله کوهن-شم از تقریب‌های LDA [4]، PBE [5]، WC [6] و PBEsol [7] و همچنین در محاسبه ساختار نواری جهت بهبود گاف از تقریب mBJ [8, 9] و در سایر محاسبات از تقریب PBEsol استفاده گردیده است. همچنین برای تعیین شبه‌تقارن چگالی الکترونی از نرم‌افزار PseudoSymmetry استفاده شده است [10].

3. خواص ساختاری

به منظور محاسبه ویژگی‌های ساختاری، نمودار انرژی برحسب حجم، بر اساس معادله حالت مورناگون برازش داده می‌شود و ثابت‌های شبکه و مدول حجمی و مشتق مدول حجمی به دست می‌آید. نتایج با استفاده از تقریب‌های LDA، PBE، WC و PBEsol در جدول 1 آورده شده است. مشاهده می‌کنیم که در تقریب LDA نتایج به دست آمده برای حجم و ثابت‌های شبکه تعادلی هر دو بلور کمتر از مقادیر تجربی و همچنین کمتر از سایر تقریب‌ها بدست آمده است. از طرف دیگر، تقریب PBE مقادیری بدست می‌دهد که اندکی بزرگ‌تر از نتایج تجربی و نظری دیگر هستند. در حالی که تقریب‌های PBEsol و WC توافق بیشتری با نتایج تجربی دارند. نتایج نشان می‌دهد که حجم تعادلی RTP بزرگ‌تر از KTP می‌باشد و این را می‌توان به بزرگ‌تر بودن شعاع اتمی R_{b+} نسبت به R_{K+} نسبت داد. اما ثابت‌های شبکه رفتار یکسانی نشان نمی‌دهند. ثابت‌های شبکه a و b در RTP بزرگ‌تر و ثابت شبکه c کوچک‌تر از KTP می‌باشد. در واقع می‌توان این‌گونه بیان کرد که جانشانی R_b باعث انقباض در صفحه افقی و انقباض در راستای محور عمود می‌شود.

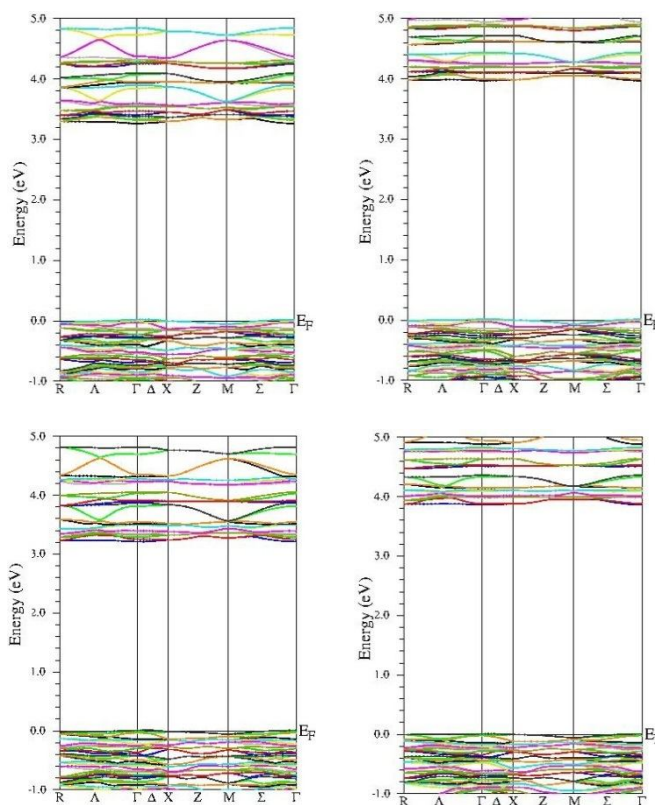
جدول 1- پارامترهای ساختاری محاسبه شده مربوط به RTP و KTP با استفاده از تقریب‌های مختلف

		$V(\text{\AA}^3)$	$a(\text{\AA})$	$b(\text{\AA})$	$c(\text{\AA})$	B	B'
KTP	LDA	846,1	12,65	6,37	10,50	165	4,8
	PBE	893,1	12,90	6,49	10,67	142	4,4
	WC	870,6	12,79	6,43	10,58	153	4,5
	PBEsol	868,5	12,81	6,41	10,58	152	4,1
	THE ^a	—	12,81	6,40	10,61	—	—
	EXP	868,6 ^b	12,82 ^a	6,41 ^a	10,58 ^a	—	—
		868,2 ^c	12,81 ^a	6,40 ^a	10,61 ^a		
		869,9 ^d	12,59		10,59 ^a		
RTP	LDA	864,2	12,79	6,46	10,46	164	5,2
	PBE	913,6	13,02	6,59	10,65	141	4,7
	WC	889,9	12,92	6,53	10,55	150	4,6
	PBEsol	889,4	12,96	6,51	10,54	150	4,3
	THE ^e		12,93	6,49	10,57	—	—
	EXP	889,6 ^b	12,95 ^b	6,49 ^{d,f}	10,56 ^{d,f}	—	—
		890,1 ^f	12,97 ^d				
		890,3 ^c					

^aReference[11], ^bReference[12], ^cReference[13], ^dReference[14], ^eReference[15], ^fReference[16]

4. خواص الکترونی

برای بررسی ویژگی‌های الکترونی و گاف انرژی ترکیبات مورد بررسی، ساختار نوارهای انرژی را محاسبه کردیم. نمودار مربوط به ساختار نوری RTP و KTP با استفاده از تقریب PBEsol در شکل 2 نمایش داده شده است. هر دو بلور نیم‌رسانا هستند و بیشینه نوار ظرفیت و کمینه نوار رسانش در نقطه تقارنی Γ واقع شده‌اند و در نتیجه نیم‌رسانای با گاف انرژی مستقیم محسوب می‌شوند. اندازه گاف انرژی RTP نسبت به KTP کاهش یافته است که این می‌تواند منجر به افزایش در ضرایب اپتیکی غیرخطی شود [17]. مقادیر بدست آمده برای گاف انرژی در جدول 2 با نتایج دیگران مقایسه شده است. با توجه به محدودیت شناخته شده تقریب‌های LDA/GGA در تعیین صحیح گاف انرژی، از تقریب mBJ برای محاسبه دقیق‌تر گاف انرژی بلورهای مورد بررسی استفاده کردیم. همان‌طور که در جدول 2 دیده می‌شود، مقادیر گاف انرژی بدست آمده با این تابعی، هم‌خوانی بهتری با داده‌های تجربی دارند.



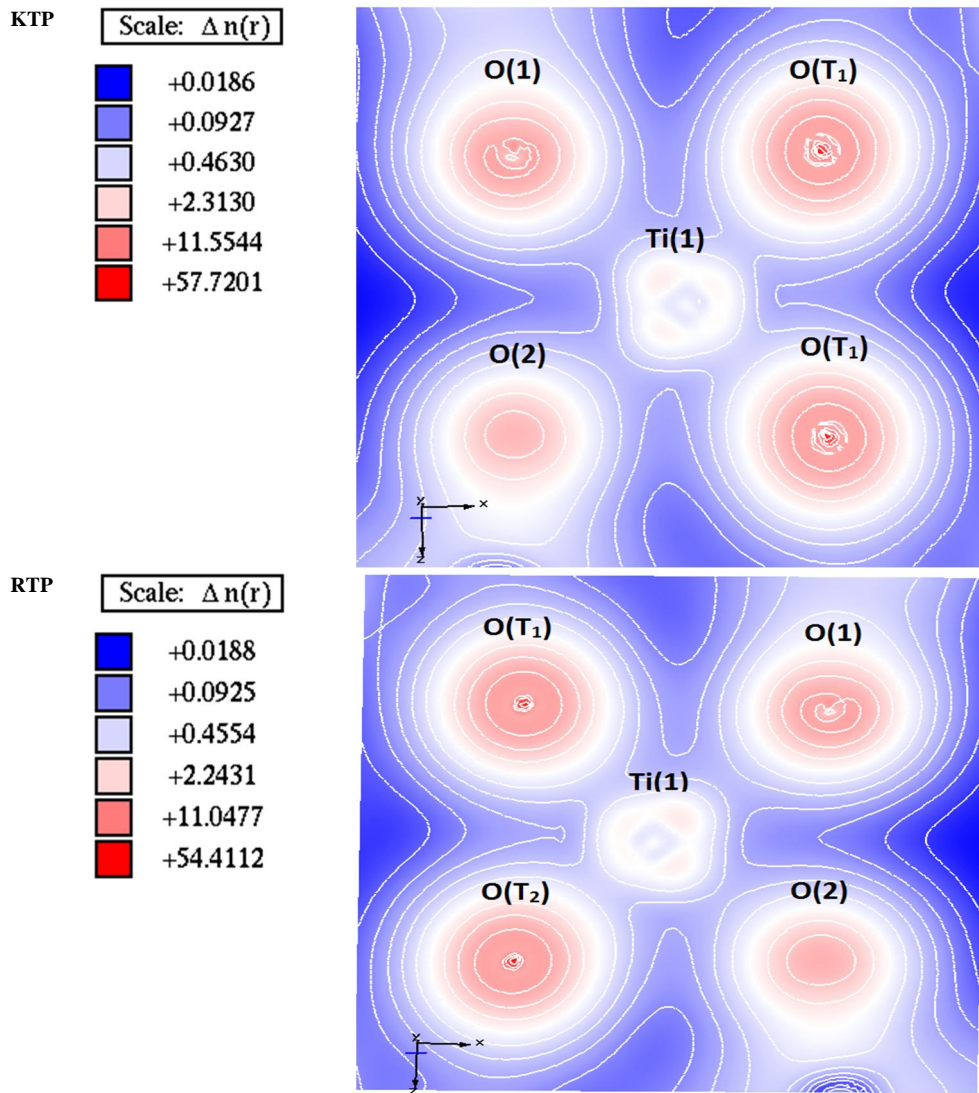
شکل 2- مقایسه‌ی نمودار ساختار نواری KTP (بالا) و RTP (پایین) با استفاده از تقریب‌های PBEsol (چپ) و mBJ (راست)

جدول 2- گاف نواری محاسبه شده مربوط به RTP و KTP با استفاده از تقریب‌های PBEsol و mBJ در واحد الکترون-ولت

	PBEsol	mBJ	Other theoretical result	Other experimental result
KTP	3,29	3,99	3,1 ^a , 3,01 ^b , 4,9 ^c	3,2 ^a , 3,6 ^d , 3,5 ^e , 3,55 ^f , 3,8 ^g , 3-3,65 ^h
RTP	3,23	3,88	—	3,8 ⁱ . (for thin film)

^a Reference[11], ^b Reference[15], ^c Reference[18], ^d Reference[19, 20], ^e Reference[21, 22], ^fReference,[23] ^gReference[17], ^hReference[24], ⁱReference[22]

ساختار بلورهای RTP و KTP از زنجیره‌هایی متشکل از هشت وجهی‌های معوج TiO_6 که توسط چهاروجهی‌های PO_4 از هم جدا شده‌اند، تشکیل شده است. گروه‌های TiO_6 شامل یک پیوند غیرعادی کوتاه $Ti=O$ و یک پیوند غیرعادی بلند $Ti-O$ می‌باشد. شکل 3 توزیع ابر الکترونی در مقطع هشت وجهی TiO_6 را در هر دو بلور نشان می‌دهد که تفاوت طول پیوندها مشهود است. این تفاوت در طول پیوندها و متعاقباً زاویه بین پیوندها، منشاء ایجاد اعوجاج ساختاری در گروه‌های TiO_6 است. زاویه‌های بین پیوندهای $Ti(1)-O(Ti)-Ti(2)$ همان‌طور که در جدول 3 درج شده‌اند با جانمایی رویدیم افزایش یافته است. با افزایش زاویه، قطبش‌پذیری پیوند کوتاه $Ti=O$ بیشتر شده و در نتیجه افزایش شدت تولید هماهنگ دوم را به همراه خواهد داشت. می‌توان گفت جانمایی رویدیم باعث اعوجاج شبکه و در نتیجه افزایش شدت تولید هماهنگ دوم نسبت به KTP خواهد شد. [1]



شکل 3- توزیع ابر الکترونی TiO_6 تحریف شده مربوط به KTP و RTP

جدول 3- زاویه‌های پیوندهای Ti(2)-O(Ti)-Ti(1)

	Ti(2)-O(Ti)-Ti(1)	Ti(1)-O(Ti)-Ti(2)
KTP	137,03	136,24 135,52 ^a
RTP	138,98	137,84

^a Reference [1]

5. خواص شبه تقارنی

یکی از ویژگی‌های اساسی یک بلور تقارن آن است و مطالعه ارتباط بین خواص تقارنی بلور و ویژگی‌های فیزیکی آن از مباحث مهم در حوزه فیزیک ماده چگال می‌باشد. خواص تقارنی بلورها، می‌تواند با در نظر گرفتن پدیده‌ی شبه تقارن، بهتر توصیف شود. شبه تقارن یک خاصیت هندسی ساختار اتمی بلور است. شبه تقارن Fedorov بلورها، پدیده‌ی تغییرناپذیری از بخش قابل توجهی از ساختار اتمی بلور (بخش چگالی الکترونی یا زیرمجموعه‌ای از هسته‌های اتمی) با لحاظ کردن برخی گروه‌های عملگری تقارنی سازگار با شبکه می‌باشد.

شبه تقارن یک ساختار خاص می‌تواند با درجه‌ی تغییرناپذیری (درجه‌ی شبه تقارن) چگالی الکترونی کل آن $\rho(r)$ با در نظر گرفتن برخی عملگرهای تقارنی \hat{g} با معادله زیر توصیف شود:

$$\eta_g[\rho(r)] = \left[\frac{\int_V \rho(r)\rho(\hat{g}^{-1}r)dV}{\int_V \rho^2(r)dV} \right] \quad (1)$$

انتگرال بر روی حجم یاخته واحد گرفته می‌شود. پارامتر η_g توصیف کننده کسری از چگالی الکترونی است که پس از اعمال عملگر تقارنی \hat{g} بدون تغییر می‌ماند. اگر عملگر تقارنی g جزء عملگرهای تقارنی بلور مورد بررسی نباشد، درجه شبه تقارن η_g کمتر از یک بدست می‌آید. در غیر این صورت، η_g به بیشینه مقدار واحدش یعنی یک می‌رسد [25]. در این بخش از کار از نرم افزار PseudoSymmetry برای تعیین شبه تقارن چگالی الکترونی RTP و KTP استفاده شده است. تابعی چگالی الکترونی به عنوان تخمین کمی درجه تغییرناپذیری یک بلور استفاده می‌شود. مقادیر شبه تقارن مربوط به دو عملگر $\{0,5,0,5, X\}$ ، $\{0, X, 0, 0\}$ و بیشینه محاسبه شده η_{max} مربوط به RTP و KTP در جدول 3 درج شده است.

جدول 4- مقادیر شبه وارونی مربوط به RTP و KTP برای دو عملگر متفاوت و مقادیر بیشینه آنها

	{0.5, 0.5, x}	{0, 0, x}	η_{max}
KTP	۰,۵۸۱۴	۰,۳۱۸۹	۰,۵۸۲۴ ۰,۳۶۳ ^a
RTP	۰,۳۸۷۵	۰,۳۴۹۳	۰,۳۸۷۵ ۰,۳۵۰ ^a

^a Reference[25]

همان طور که از نتایج جدول 4 مشخص است، جانشانی روبیدیم باعث کاهش مقدار η_{max} شده است و این به معنای کمتر متقارن بودن RTP نسبت به KTP می‌باشد. پذیرفتاری مرتبه دوم بلور، که شدت تولید هماهنگ دوم را تعیین می‌کند، یک خاصیت حساس به تقارن بلور است. برای بلورهای متقارن مرکزی پاسخ مرتبه دوم باید صفر شود. می‌توان پیشنهاد داد که کاهش تقارن به برخی وابستگی‌های پاسخ اپتیکی مرتبه دوم به درجه تغییرناپذیری ساختار بلور با در نظر گرفتن وارونگی منجر خواهد شد. یک مدل پیشنهاد شده این است که طبق آن پذیرفتاری اپتیکی مرتبه دوم با تقارن ساختار نوع RTP مرتبط می‌شوند. شبه تقارن به صورت زیر می‌باشد:

$$\chi_{2\omega} \sim \sqrt{1-\eta} \quad (2)$$

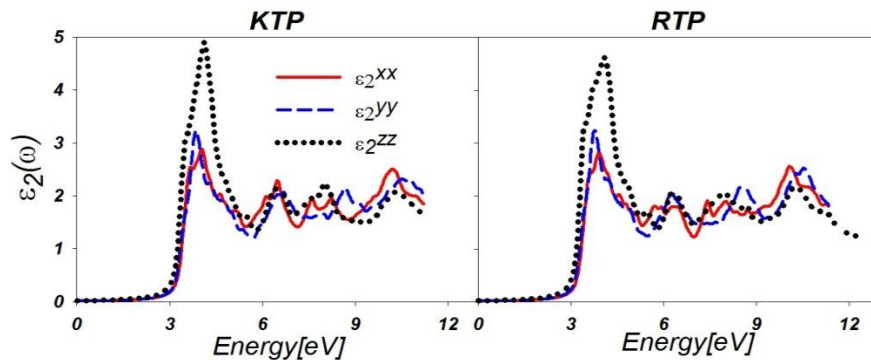
بر طبق این رابطه و با توجه به نتایج جدول 4 می توان ادعا کرد که شدت تولید هماهنگ دوم باجانشانی روبیدیم افزایش خواهد یافت.

6. خواص اپتیکی

ویژگی های اپتیکی یک ماده را با تابع دی الکتریک $\epsilon(\omega)$ می توان توصیف نمود، زیرا با تعیین آن، سایر پارامترهای اپتیکی از جمله ضریب شکست، ضریب جذب و ... نیز بدست می آید. این تابع در واقع پاسخ اپتیکی بلور به میدان الکترومغناطیسی با بسامد ω است که با معادله زیر بیان می شود:

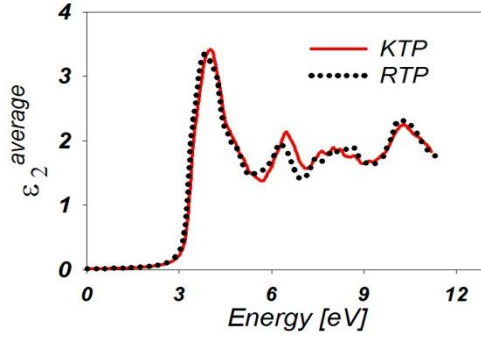
$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (3)$$

$\epsilon_1(\omega)$ بخش حقیقی و $\epsilon_2(\omega)$ بخش موهومی تابع دی الکتریک می باشد. برای ترکیبات با تقارن اورتورومبیک، تانسور دی الکتریک دارای سه مؤلفه ی غیر صفر $\epsilon^{xx}(\omega)$ ، $\epsilon^{yy}(\omega)$ و $\epsilon^{zz}(\omega)$ می باشد. نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک مربوط به هر دو بلور در شکل 4 نشان داده شده است.



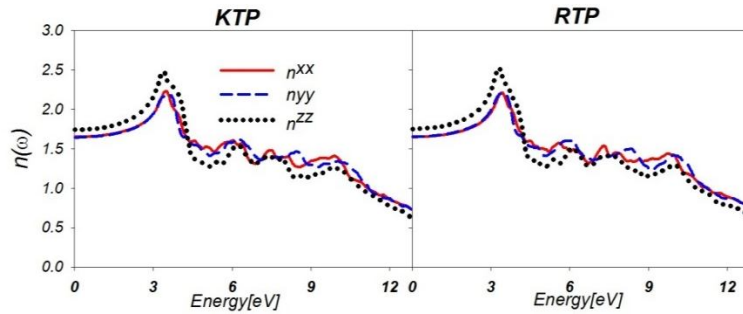
شکل 4- نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک RTP و KTP

نمودارها وجود ناهمسانگردی بین سه مؤلفه را نشان می دهد. وجود این ناهمسانگردی ها در پاسخ های اپتیکی خطی شرایط تطبیق فازی را برای تولید هماهنگ دوم و نوسانگر پارامتری اپتیکی فراهم می کند. در انرژی های حدود 3.5-6 eV مؤلفه ی $\epsilon^{zz}(\omega)$ و در انرژی های بالاتر از حدود 10 eV مؤلفه های $\epsilon^{xx}(\omega)$ و $\epsilon^{yy}(\omega)$ غالب هستند. برای مقایسه میانگین بخش موهومی تابع دی الکتریک هر دو ترکیب در شکل 5 نمایش داده شده است.



شکل 5- مقایسه‌ی نمودارهای میانگین بخش موهومی تابع دی‌الکتریک RTP و KTP

لبه‌ی جذب اپتیکی در انرژی‌های حدود 3.5 eV واقع شده است. اولین قله مربوط به گذار از بالای نوار ظرفیت که بیشتر سهم آن مربوط به اربیتال 2p اتم اکسیژن است، به پایین نوار رسانش که غالباً ناشی از اربیتال 3d اتم تیتانیوم است، می‌باشد. شکل 6، ضریب شکست مربوط بلورها را در هر سه راستا نشان می‌دهد. در این نمودارها هم ناهمسانگردی بین مؤلفه‌ها مشاهده می‌شود. همچنین مقادیر $n_{zz}(0)$ و $n_{yy}(0)$ ، $n_{xx}(0)$ در جدول 3 آورده شده است

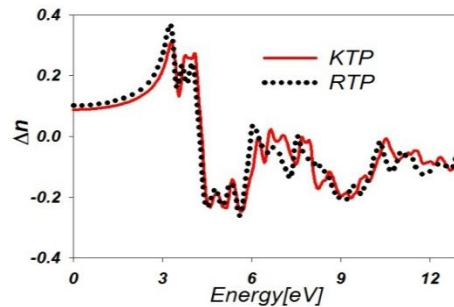


شکل 6- نمودار ضریب شکست RTP و KTP

شکل 7 دوشکستی Δn را نمایش می‌دهد.

$$\Delta n(\omega) = n_e(\omega) - n_o(\omega)$$

که $n_o(\omega)$ ضریب شکست عادی (ضریب شکست مربوط به میدان الکتریکی در امتداد محور c) و $n_e(\omega)$ ضریب شکست غیرعادی (ضریب شکست مربوط به میدان الکتریکی عمود بر محور c) می‌باشد.



شکل 7- مقایسه‌ی نمودارهای دوشکستی RTP و KTP

دوشکستی در نواحی طیف غیر جذبی (زیر انرژی گاف) مهم هستند. مقادیر استاتیک دو شکستی (در انرژی صفر) و مقادیر دوشکستی در 1064 nm برای هر دو بلور مثبت است. (جدول 3) مقادیر مربوط به RTP نسبت به KTP بزرگ‌تر است.

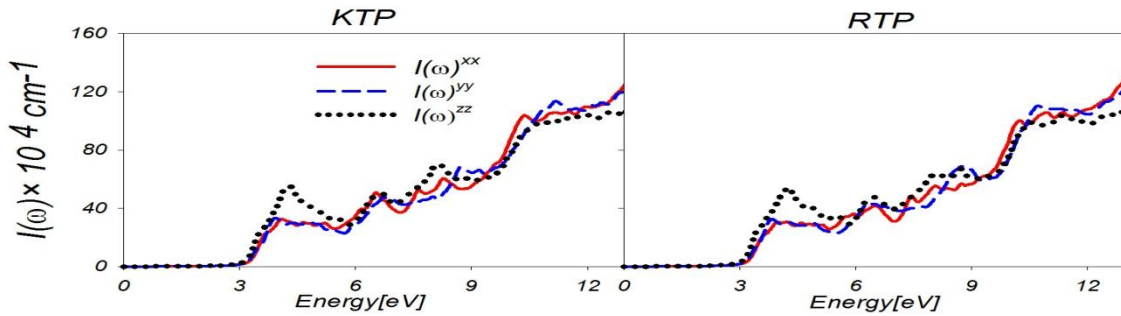
جدول 5- ضریب شکست و دو شکستی مربوط به KTP و RTP در انرژی صفر و $\lambda=1064\text{nm}$

		n^{xx}	n^{yy}	n^{zz}	Δn
KTP	at zero	1,65	1,64	1,74	0,089
	at $\lambda=1064\text{nm}$	1,68	1,67	1,77	0,097
		1,75 ^a	1,75 ^a	1,82 ^a	0,074 ^a
				0,084 ^a	
RTP	at zero	1,65	1,65	1,75	0,10
	at $\lambda=1064\text{nm}$	1,68	1,68	1,79	0,11

^a Reference[11]

اندازه دو شکستی مربوط به RTP در انرژی صفر و طول موج 1064 nm از مقادیر مربوط به KTP بزرگتر است و این می تواند به بزرگتر بودن ضرایب اپتیکی غیرخطی به ویژه RTP نسبت به KTP منجر شود.

در ادامه طیف جذب اپتیکی مربوط به هر دو بلور در شکل 8 نمایش داده شده است. به وضوح پیداست که تا انرژی حدود 6 eV جذب در راستای z بیشتر است؛ و هم چنین با افزایش انرژی، جذب هم بیشتر می شود و از طرفی در انرژی های بالاتر از حدود 6 eV افزایش سریع جذب مشاهده می شود.



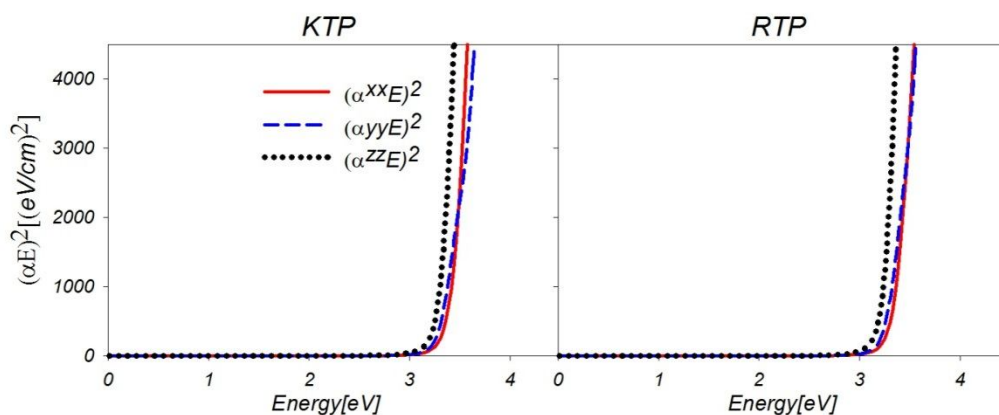
شکل 8- نمودار طیف جذب KTP و RTP

کمیت مهم دیگر انرژی گاف اپتیکی می باشد که توسط آن می توان نیم رساناها و عایقها را مشخص کرد. می توان اندازه ی گاف اپتیکی را از نمودار $(\alpha E)^2$ برحسب انرژی که از رابطه ی تائوک [26] پیروی می کند، پیدا نمود. این رابطه به شکل زیر است:

$$\alpha E = B(E - E_g)^p \quad (3)$$

در این معادله α ضریب جذب، E انرژی فوتون، B فاکتور وابسته به احتمال گذار است که در محدوده ی بسامدهای اپتیکی می تواند ثابت در نظر گرفته شود. ضریب p به توزیع چگالی حالتها بستگی دارد و دارای مقادیر گسسته است. برای گذار مستقیم و مجاز $P=1/2$ ، گذار مستقیم و ممنوع $P=3/2$ ، غیرمستقیم و مجاز $P=2$ ، و گذار غیر مجاز $P=3$ ، یا بیشتر. برای ترکیب KTP و RTP که نیم رساناهای با گذار مستقیم و مجاز هستند $P=1/2$ در نظر گرفته می شود و انرژی گاف با استفاده از رابطه ی تائوک

محاسبه و نمودار $(\alpha E)^2$ برحسب انرژی در شکل 9 نمایش داده شده است. گاف در راستای ZZ از بقیه کوچکتر است و همچنین اندازه گاف مربوط به RTP نسبت به KTP تا حدودی کوچکتر است.



شکل 9- نمودار طیف $(\alpha E)^2$ مربوط به KTP و RTP

7. نتیجه گیری

جانشانی روبیدیم به جای پتاسیم، باعث افزایش حجم سلول واحد و انبساط شبکه در جهت محورهای X و Y و انقباض آن در جهت محور Z می شود. از طرفی این جانشانی کاهش در اندازه گاف را در پی دارد که این خود به افزایش در ضرائب اپتیکی غیرخطی منجر می شود. همچنین استفاده از تقریب mBJ اندازه گاف را به نتایج تجربی نزدیک کرده است. کاهش شبه وارونگی و کاهش تقارن نیز افزایش شدت تولید هماهنگ دوم را در پی خواهد داشت. وجود ناهمسانگردی مشاهده شده در ضرائب اپتیکی نشان از وجود قابلیت های اپتیکی غیرخطی در هر دو بلور دارد. مقدار دو شکستی RTP در طول موج 1064 nm نسبت به KTP بزرگتر است که این بزرگتر بودن ضرائب غیرخطی آن را مجدد یادآور می شود.

-4 مراجع

- [۱] Z. Kecong and W. Ximin, **Structure sensitive properties of KTP-type crystals**, *Chinese science bulletin* 46 (2001) 2028-2036.
- [۲] V. Atuchin, V. Kesler, G. Meng, and Z. Lin, **The electronic structure of RbTiOPO4 and the effects of the A-site cation substitution in KTiOPO4-family crystals**, *Journal of Physics: Condensed Matter* 24 (2012) 405503.
- [۳] P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, and S. Trickey, **Full-potential, linearized augmented plane wave programs for crystalline systems**, *Computer Physics Communications* 59 (1990) 399-415.
- [۴] J. P. Perdew and Y. Wang, **Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy**, *Physical Review B* 45 (1992) 13244.

- [5] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, **Generalized gradient approximation made simple**, *Physical review letters* 77 (1996) 3865.
- [6] Z. Wu and R. E. Cohen, **More accurate generalized gradient approximation for solids**, *Physical Review B* 73 (2006) 235116.
- [7] J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, O. A. Vydrov, G. E. Scuseria, L. A. Constantin, X. Zhou, and K. Burke, **Restoring the density-gradient expansion for exchange in solids and surfaces**, *Physical Review Letters* 100 (2008) 136406.
- [8] F. Tran and P. Blaha, **Accurate Band Gaps of Semiconductors and Insulators with a Semilocal Exchange-Correlation Potential**, *Physical Review Letters* 102 (2009)06/03/ 226401.
- [9] D. Koller, F. Tran, and P. Blaha, **Merits and limits of the modified Becke-Johnson exchange potential**, *Physical Review B* 83 (2011)05/31/ 195134.
- [10] N. V. Somov and E. V. Chuprunov, **Pseudosymmetry software for studying the pseudosymmetry of crystal atomic structures**, *Crystallography Reports* 59 (2014)2014// 137-139.
- [11] A. H. Reshak, I. Kityk, and S. Auluck, **Investigation of the linear and nonlinear optical susceptibilities of KTiOPO4 single crystals: Theory and experiment**, *The Journal of Physical Chemistry B* 114 (2010) 16705-16712.
- [12] F. C. Zumsteg, J. D. Bierlein, and T. E. Gier, **KxRb1-xTiOPO4: A new nonlinear optical material**, *Journal of Applied Physics*. 49 80-49 80 (1976) 47
- [13] S. T. Norberg, J. Gustafsson, and B.-E. Mellander, **Phase transitions in KTP isostructures: correlation between structure and Tc in germanium-doped RbTiOPO4**, *Acta Crystallographica Section B: Structural Science* 59 (2003) 588-595.
- [14] N. K. Hansen, J. Protas, and G. Marnier, **The electron-density distribution in KTiOPO4**, *Acta Crystallographica Section B: Structural Science* 47 (1991) 660-672.
- [15] J. Lowther, P. Manyum, and P. Suebka, **Electronic and structural properties of orthorhombic KTiOPO4 and related isomorphous materials**, *physica status solidi (b)* 242 (2005) 1392-1398.
- [16] P. Thomas, S. Mayo, and B. Watts, **Crystal structures of RbTiOAsO4, KTiO (P0. 58, As0. 42) O4, RbTiOPO4 and (Rb0. 465, K0. 535) TiOPO4, and analysis of pseudosymmetry in crystals of the KTiOPO4 family**, *Acta Crystallographica Section B: Structural Science* 48 (1992) 401-407.
- [17] R. DeSalvo, A. A. Said, D. J. Hagan, E. W. V. Stryland, and M. Sheik-Bahae, **Infrared to ultraviolet measurements of two-photon absorption and $n^{(2)}$ in wide bandgap solids**, *IEEE Journal of Quantum Electronics* 32 (1996) 1324-1333.
- [18] W. Ching and Y.-N. Xu, **Band structure and linear optical properties of KTiOPO 4**, *Physical Review B* 44 (1991) 5332.
- [19] H. Li, C. Kam, Y .Lam, and W. Ji, **Femtosecond Z-scan measurements of nonlinear refraction in nonlinear optical crystals**, *Optical Materials* 15 (2001) 237-242.
- [20] G. Mann and H. Weber, **Measurement of Nonlinear Absorption Coefficients of KTP Crystals in the Green Spectral Range**, *LASER PHYSICS-LAWRENCE-9* (1999) 426-429.
- [21] A. Zukauskas, V. Pasiskevicius, and C. Canalas, **Second-harmonic generation in periodically poled bulk Rb-doped KTiOPO 4 below 400 nm at high peak-intensities**, *Optics express* 21 (2013) 1395-1403.
- [22] N. Golego and M. Cocivera, **Polycrystalline RbTiOPO 4 and KTiOPO 4 bilayer thin films by spray pyrolysis**, *Thin Solid Films* 322 (1998) 14-20.
- [23] L. Kang, D. M. Ramo, Z. Lin, P. D. Bristowe, J. Qin, and C. Chen, **First principles selection and design of mid-IR nonlinear optical halide crystals**, *Journal of Materials Chemistry C* 1 (2013) 7363-7370.
- [24] A. Dudelzak, P.-P. Proulx, V. Denks, V. Mürk, and V. Nagirnyi, **Anisotropic fundamental absorption edge of KTiOPO4 crystals**, *Journal of Applied Physics* 8. 2113-2110 (2000) 7

- [20] A. P. Gazhulina and M. O. Marychev, **Pseudosymmetric Features and Nonlinear Optical Properties of Potassium Titanyl Phosphate Crystals**, (2013).
- [26] J. Tauc, R. Grigorovici, and A. Vancu, **Optical properties and electronic structure of amorphous germanium**, *physica status solidi (b)* 15 (1966) 627-637.