

## بررسی ابتدا به ساکن ویژگی های فیزیکی دو تک بلور RTP و KTP

مرضیه قوهستانی، علی عرب و حسین صادقی

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

(دریافت مقاله: ۱۳۹۵/۰۷/۲۴؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۵/۰۹/۱۴)

### چکیده

در کار حاضر برخی خواص فیزیکی دو تک بلور RTP و KTP مورد بررسی قرار گرفته است. اثر جانمایی روبیدیم بر خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی KTP بررسی شده است. محاسبات با استفاده از امواج تخت بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی انجام گرفته است. خواص ساختاری با استفاده از تابعی های تبدیلی - همبستگی متفاوت WC، PBE، LDA و PBEsol محاسبه شده است. همچنین برای محاسبه مقدار انرژی گاف تقریب PBEsol و جهت محاسبه دقیق تر، تقریب mBJ به کار گرفته شده است. پدیده شبه وارونی دو بلور بررسی و مقادیر آن برای هر دو بلور با استفاده از نرم افزار محاسبه شده است. اثر جانمایی روبیدیم بر شبه تقارن RTP و همچنین ارتباط این کمیت با خواص اپتیکی غیرخطی مورد بحث قرار گرفته است. ضرایب اپتیکی از جمله ضریب شکست، مقادیر دوشکستی و ضرایب جذب با استفاده از تابع دی الکتریک محاسبه گردیده، درباره وجود ناهمسانگردی در هر دو بلور بحث و نتایج مقایسه شده اند.

واژه های کلیدی: نظریه تابعی چگالی، پتاسیم تیتانیل فسفات، روبیدیم تیتانیل فسفات، خواص ساختاری، شبه وارونگی، تابع دی الکتریک

### ۱. مقدمه

یاخته واحد بلوری شده است (شکل ۱). هر یاخته واحد شامل دو گروه مولکولی غیر معادل، یعنی دو تیتانیم، دو پتاسیم، دو فسفر و ده اکسیژن غیر معادل با موقعیت های شبکه ای متفاوت می باشد. یون های تیتانیم از شکل طبیعی هشت وجهی خارج شده و توسط چهار گروه فسفات و دو یون اکسیژن محاصره شده اند. این بلور دارای استعداد جانمایی است و برای بهبود برخی خواص می توان به جای اتم های 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 می توان اتم روبیدیم را به صورت جزئی و کلی

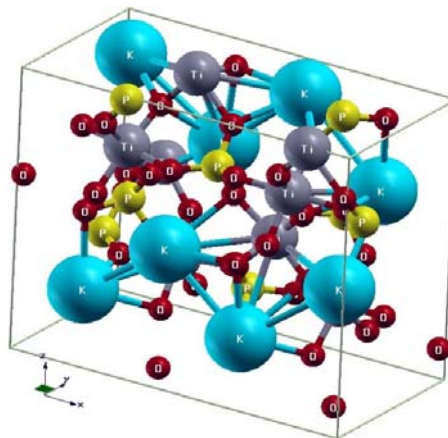
تک بلور فسفات پتاسیم تیتانیل (KTP) ویژگی های قابل توجهی از جمله ضرایب اپتیک غیرخطی بزرگ، آستانه تخریب اپتیکی بالا، افتاع شرایط تطبیق فازی نوع ۱ و نوع ۲، پایداری شیمیایی و گرمایی بالا، ضرایب انبساط گرمایی پایین و غیره از خود نشان می دهند [۱]. خواص اپتیک غیرخطی این تک بلور باعث کاربردهای زیادی از جمله دوبرابر سازی بسامد، تولید هماهنگ دوم از لیزرهای Nd:YAG با طول موج ۱۰۶۴ nm، تقویت نوسانگر پارامتری، ادوات موجبر اپتیکی شده است. این تک بلور در ساختار اورتورمیک با گروه فضایی  $pna2_1$  با ۶۴ اتم در

### ۳. خواص ساختاری

به منظور محاسبه ویژگی‌های ساختاری، نمودار انرژی بر حسب 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 WC، PBE، LDA و PBESol در جدول ۱ 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 به دست آمده است. از طرف دیگر، تقریب PBE مقادیری به دست می‌دهد که اندکی بزرگ‌تر از نتایج تجربی و نظری دیگر هستند. در حالی که تقریب‌های WC و PBESol 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  $Rb^+$  نسبت به  $K^+$  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 جانمایی Rb باعث انبساط در صفحه افقی و انقباض در راستای محور عمود می‌شود.

### ۴. خواص الکترونی

برای بررسی ویژگی‌های الکترونی و گاف انرژی ترکیبات مورد بررسی، ساختار نوارهای انرژی را محاسبه کردیم. نمودار مربوط به ساختار نوازی KTP و RTP با استفاده از تقریب PBESol در شکل ۲ نمایش داده شده است. هر دو بلور نیم‌رسانا هستند و بیشینه نوار ظرفیت و کمینه نوار رسانش در نقطه تقارنی  $\Gamma$  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 [۱۷]. مقادیر به دست آمده برای گاف انرژی در جدول ۲ با نتایج دیگران مقایسه شده است. با توجه به محدودیت شناخته شده تقریب‌های



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) ساختار بلوری تک‌بلور KTP.

جایگزین کرد. اتوجین و همکاران، با روش‌های محاسباتی و تجربی ارتباط بین ساختار بلوری، خواص الکترونی و خواص اپتیکی غیرخطی این بلور KTP و  $RTP(RTiOPO_4)$  را بررسی کردند [۲]. 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.

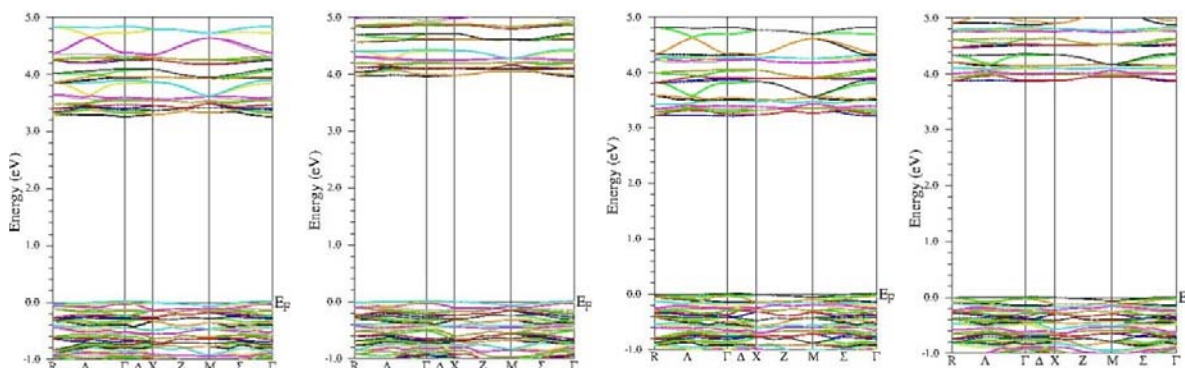
### ۲. روش انجام محاسبات

محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از امواج تخت بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل و به کمک بسته نرم‌افزاری Wien2k انجام شده است [۳]. شعاع کره‌های مافین-تین برای اتم‌های پتاسیم، روبیدیم، تیتانیم، فسفر و اکسیژن به ترتیب  $1/8$ ،  $1/9$ ،  $1/63$ ،  $1/32$  و  $1/43$  (بر حسب بوهر) در نظر گرفته شده‌اند. برای محاسبه خواص ساختاری جهت تعیین بهترین تقریب تبدیلی-همبستگی در معادله کوهن-شم از تقریب‌های LDA [۴]، PBE [۵]، WC [۶] و PBESol [۷] و همچنین در محاسبه ساختار نوازی جهت بهبود گاف از تقریب mBJ [۸ و ۹] و در سایر محاسبات از تقریب PBESol استفاده گردیده است. همچنین برای تعیین شبه تقارن چگالی الکترونی از نرم‌افزار PseudoSymmetry استفاده شده است [۱۰].

جدول ۱. ضرایب ساختاری محاسبه شده مربوط به RTP و KTP با استفاده از تقریب‌های مختلف.

B'	B	c(Å)	b(Å)	a(Å)	V(Å <sup>3</sup> )		
۴٫۸	۱۶۵	۱۰٫۵۰	۶٫۳۷	۱۲٫۶۵	۸۴۶٫۱	LDA	
۴٫۴	۱۴۲	۱۰٫۶۷	۶٫۴۹	۱۲٫۹۰	۸۹۳٫۱	PBE	
۴٫۵	۱۵۳	۱۰٫۵۸	۶٫۴۳	۱۲٫۷۹	۸۷۰٫۶	WC	
۴٫۱	۱۵۲	۱۰٫۵۸	۶٫۴۱	۱۲٫۸۱	۸۶۸٫۵	PBEsol	
—	—	۱۰٫۶۱	۶٫۴۰	۱۲٫۸۱ ۱۲٫۵۹	—	THE <sup>(الف)</sup>	KTP
—	—	۱۰٫۵۸ <sup>(الف)</sup> ۱۰٫۶۱ <sup>(الف)</sup> ۱۰٫۵۹ <sup>(الف)</sup>	۶٫۴۱ <sup>(الف)</sup> ۶٫۴۰ <sup>(الف)</sup>	۱۲٫۸۲ <sup>(الف)</sup> ۱۲٫۸۱ <sup>(الف)</sup>	۸۶۸٫۶ <sup>(الف)</sup> ۸۶۸٫۲ <sup>(ب)</sup> ۸۶۹٫۹ <sup>(ت)</sup>	EXP	
۵٫۲	۱۶۴	۱۰٫۴۶	۶٫۴۶	۱۲٫۷۹	۸۶۴٫۲	LDA	
۴٫۷	۱۴۱	۱۰٫۶۵	۶٫۵۹	۱۳٫۰۲	۹۱۳٫۶	PBE	
۴٫۶	۱۵۰	۱۰٫۵۵	۶٫۵۳	۱۲٫۹۲	۸۸۹٫۹	WC	
۴٫۳	۱۵۰	۱۰٫۵۴	۶٫۵۱	۱۲٫۹۶	۸۸۹٫۴	PBEsol	
—	—	۱۰٫۵۷	۶٫۴۹	۱۲٫۹۳	—	THE <sup>(ج)</sup>	RTP
—	—	۱۰٫۵۶ <sup>(ج،ت)</sup>	۶٫۴۶ <sup>d,f</sup>	۱۲٫۹۵ <sup>(ب)</sup> ۱۲٫۹۷ <sup>d</sup>	۸۸۹٫۶ <sup>(ب)</sup> ۸۹۰٫۱ <sup>(ج)</sup> ۸۹۰٫۳ <sup>(ب)</sup>	EXP	

(الف) مرجع [۱۱]، (ب) مرجع [۱۲]، (پ) مرجع [۱۳]، (ت) مرجع [۱۴]، (ث) مرجع [۱۵] و (ج) مرجع [۱۶].



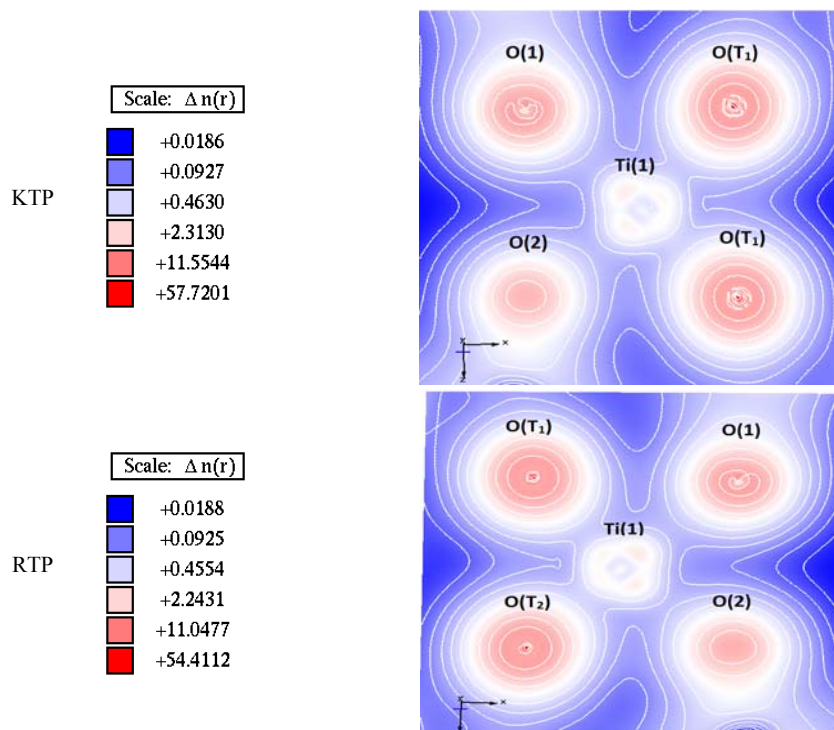
شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) مقایسه نمودار ساختار نواری KTP (بالا) و RTP (پایین) با استفاده از تقریب‌های PBEsol (چپ) و mBJ (راست).

جدول ۲. گاف نواری محاسبه شده مربوط به RTP و KTP با استفاده از تقریب‌های PBEsol و mBJ در واحد الکترون-ولت.

	PBEsol	mBJ	سایر نتایج نظری	سایر نتایج تجربی
KTP	۳٫۲۹	۳٫۹۹	۳٫۱ <sup>(الف)</sup> ، ۳٫۰۱ <sup>(ب)</sup> ، ۴٫۹ <sup>(پ)</sup>	۳٫۲ <sup>(الف)</sup> ، ۳٫۶ <sup>(ت)</sup> ، ۳٫۵ <sup>(ت)</sup> ، ۳٫۵۵ <sup>(ت)</sup> ، ۳٫۸ <sup>(ج)</sup> ، ۳٫۶۵-۳٫۸
RTP	۳٫۲۳	۳٫۸۸	—	۳٫۸ <sup>(ج)</sup> (لایه نازک)

(الف) مرجع [۱۱]، (ب) مرجع [۱۵]، (پ) مرجع [۱۸]، (ت) مرجع [۱۹]، [۲۰]، (ت) مرجع [۲۱] و [۲۲]، (ث) مرجع [۲۳]، (ج) مرجع

[۱۷]، (چ) مرجع [۲۴] و (ح) مرجع [۲۲].



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) توزیع ابر الکترونی  $\text{TiO}_6$  تحریف شده مربوط به RTP و KTP.

هشت وجهی  $\text{TiO}_6$  را در هر دو بلور نشان می‌دهد که تفاوت طول پیوندها مشهود است. این تفاوت در طول پیوندها و به دنبال آن زاویه بین پیوندها، منشاء ایجاد اعوجاج ساختاری در گروه‌های  $\text{TiO}_6$  است. زاویه‌های بین پیوندهای  $\text{Ti(1)-O(Ti)-Ti(2)}$  همان طور که در جدول ۳ درج شده‌اند با جانمایی روبیدیم افزایش یافته است. با افزایش زاویه، قطبش‌پذیری پیوند کوتاه  $\text{Ti=O}$  بیشتر شده و در نتیجه افزایش شدت تولید هماهنگ دوم را به همراه خواهد داشت. می‌توان گفت جانمایی روبیدیم باعث اعوجاج شبکه و در نتیجه افزایش شدت تولید هماهنگ دوم نسبت به KTP خواهد شد [۱].

### ۵. 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 پدیده شبه تقارن،

جدول ۳. زاویه‌های پیوندهای  $\text{Ti(2)-O(Ti)-Ti(1)}$

	$\text{Ti(2)-O(Ti)-Ti(1)}$	$\text{Ti(1)-O(Ti)-Ti(2)}$
KTP	۱۳۷٫۰۳	۱۳۶٫۲۴ ۱۳۵٫۵۲ <sup>(الف)</sup>
RTP	۱۳۸٫۹۸	۱۳۷٫۸۴

(الف) مرجع [۱]

LDA/GGA در تعیین صحیح گاف انرژی، از تقریب mBJ برای محاسبه دقیق تر گاف انرژی بلورهای مورد بررسی استفاده کردیم. همان طور که در جدول ۲ دیده می‌شود، مقادیر گاف انرژی به دست آمده با این تابعی، همخوانی بهتری با داده‌های تجربی دارند.

ساختار بلورهای RTP و KTP از زنجیره‌هایی متشکل از هشت وجهی‌های معوج  $\text{TiO}_6$  که توسط چهاروجهی‌های  $\text{PO}_4$  از هم جدا شده‌اند، تشکیل شده است. گروه‌های  $\text{TiO}_6$  شامل یک پیوند غیرعادی کوتاه  $\text{Ti=O}$  و یک پیوند غیرعادی بلند  $\text{Ti-O}$  می‌باشد. شکل ۳ توزیع ابر الکترونی در مقطع

همان طور که از نتایج جدول ۴ مشخص است، جانشانی روبیدیم باعث کاهش مقدار  $\eta_{\max}$  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 KTP 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 ۴ می‌توان ادعا کرد که شدت تولید هماهنگ دوم با جانشانی روبیدیم افزایش خواهد یافت.

#### ۶. خواص اپتیکی

ویژگی‌های اپتیکی یک ماده را با تابع دی‌الکتریک  $\varepsilon(\omega)$  می‌توان توصیف نمود، زیرا با تعیین آن، سایر پارامترهای اپتیکی از جمله ضریب شکست، ضریب جذب و ... نیز به دست می‌آید. این تابع در واقع پاسخ اپتیکی بلور به میدان الکترومغناطیسی با بسامد  $\omega$  است که با معادله زیر بیان می‌شود:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (3)$$

که در آن  $\varepsilon_1(\omega)$  بخش حقیقی و  $\varepsilon_2(\omega)$  بخش موهومی تابع دی‌الکتریک می‌باشد. برای ترکیبات با تقارن اورتورومبیک، تانسور دی‌الکتریک دارای سه مؤلفه غیرصفر  $\varepsilon^{xx}(\omega)$ ،  $\varepsilon^{yy}(\omega)$  و  $\varepsilon^{zz}(\omega)$  می‌باشد. نمودار بخش موهومی تابع دی‌الکتریک مربوط به هر دو بلور در شکل ۴ نشان داده شده است.

نمودارها وجود ناهمسانگردی بین سه مؤلفه را نشان می‌دهد. وجود این ناهمسانگردی‌ها در پاسخ‌های اپتیکی خطی شرایط تطبیق فازی را برای تولید هماهنگ دوم و نوسانگر پارامتری اپتیکی فراهم می‌کند. در انرژی‌های حدود ۶-۳٫۵ eV

جدول ۴. مقادیر شبه وارونی مربوط به RTP و KTP برای دو عملگر متفاوت و مقادیر بیشینه آنها.

	{0.5, 0.5, X}	{0, 0, X}	$\eta_{\max}$
KTP	0.5814	0.3189	0.5824
			(الف) 0.363
RTP	0.3875	0.3493	0.3875
			(الف) 0.350

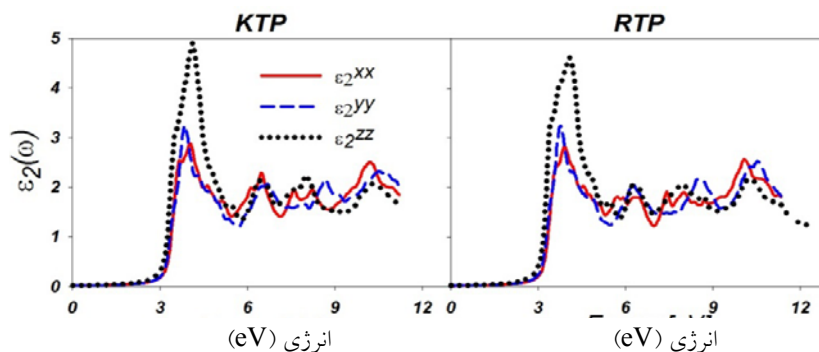
(الف) مرجع [۲۵]

بهرتر توصیف شود. شبه تقارن یک خاصیت هندسی ساختار اتمی بلور است. شبه تقارن Fedorov بلورها، پدیده تغییر ناپذیری 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 است.

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

$$\eta_g[\rho(r)] = \left[ \frac{\int_V \rho(r)\rho(\mathcal{G}'r)dV}{\int_V \rho^2(r)dV} \right], \quad (1)$$

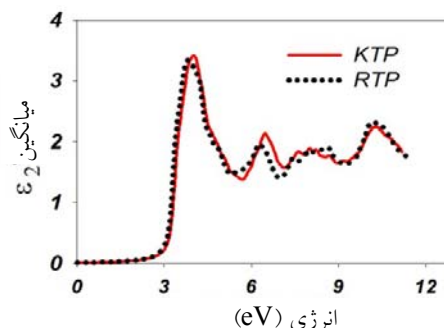
انتگرال بر روی حجم یاخته واحد گرفته می‌شود. پارامتر  $\eta_g$  توصیف کننده کسری از چگالی الکترونی است که پس از اعمال عملگر تقارنی  $\mathcal{G}$  بدون تغییر می‌ماند. اگر عملگر تقارنی  $\mathcal{G}$  جزء عملگرهای تقارنی بلور مورد بررسی نباشد، درجه شبه تقارن  $\eta_g$  کمتر از یک به دست می‌آید. در غیر این صورت،  $\eta_g$  به بیشینه مقدار واحدش یعنی یک می‌رسد [۲۵]. در این بخش از کار از نرم‌افزار 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  $\{0.5, 0.5, X\}$ ،  $\{0, 0, X\}$  و بیشینه محاسبه شده  $\eta_{\max}$  مربوط به RTP و KTP در جدول ۳ درج شده است.



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک RTP و KTP.

میدان الکتریکی در امتداد محور  $c$  و  $n_e(\omega)$  ضریب شکست غیرعادی (ضریب شکست مربوط به میدان الکتریکی عمود بر محور  $c$ ) می باشد.

دوشکستی در نواحی طیف غیرجذب (زیر انرژی گاف) مهم هستند. مقادیر استاتیک دوشکستی (در انرژی صفر) و مقادیر دوشکستی در  $1064 \text{ nm}$  برای هر دو بلور مثبت است. (جدول ۳) مقادیر مربوط به RTP نسبت به KTP بزرگتر است.



شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) مقایسه نمودارهای میانگین بخش موهومی تابع دی الکتریک RTP و KTP.

اندازه دوشکستی مربوط به RTP در انرژی صفر و طول موج  $1064 \text{ nm}$  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 ۸ نمایش داده شده است. به وضوح پیداست که تا انرژی حدود  $6 \text{ eV}$  جذب در راستای  $z$  بیشتر است؛ و همچنین با افزایش انرژی، جذب هم بیشتر می شود و از طرفی در انرژی های بالاتر از حدود  $11 \text{ eV}$  افزایش سریع جذب مشاهده می شود.

کمیت مهم دیگر انرژی گاف اپتیکی است که توسط آن می توان نیم رساناها و عایق ها را مشخص کرد. می توان اندازه گاف اپتیکی را از نمودار  $(\alpha E)^2$  بر حسب انرژی که از رابطه تائوک [۲۶] پیروی می کند، پیدا نمود. این رابطه به شکل زیر است:

$$\alpha E = B(E - E_g)^p. \quad (5)$$

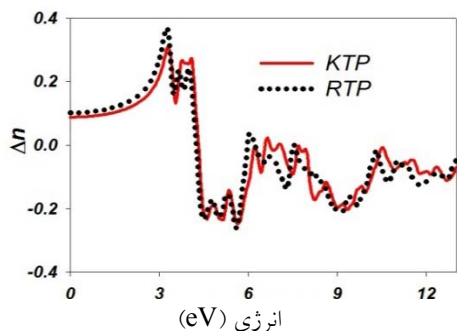
در این معادله  $\alpha$  ضریب جذب،  $E$  انرژی فوتون،  $B$  عامل

مؤلفه  $\epsilon^{zz}(\omega)$  و در انرژی های بالاتر از حدود  $10 \text{ eV}$  مؤلفه های  $\epsilon^{xx}(\omega)$  و  $\epsilon^{yy}(\omega)$  غالب هستند. برای مقایسه میانگین بخش موهومی تابع دی الکتریک هر دو ترکیب در شکل ۵ نمایش داده شده است.

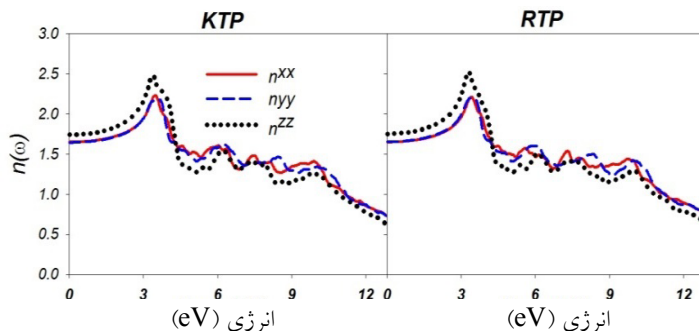
لبه جذب اپتیکی در انرژی های حدود  $3/5 \text{ eV}$  واقع شده است. اولین قله مربوط به گذار از بالای نوار ظرفیت که بیشتر سهم آن مربوط به اربیتال  $2p$  اتم اکسیژن است، به پایین نوار رسانش که غالباً ناشی از اربیتال  $3d$  اتم تیتانیوم است، می باشد. شکل ۶، ضریب شکست مربوط بلورها را در هر سه راستا نشان می دهد. در این نمودارها هم ناهمسانگردی بین مؤلفه ها مشاهده می شود. همچنین مقادیر  $n_{xx}(0)$ ،  $n_{yy}(0)$  و  $n_{zz}(0)$  در جدول ۳ آورده شده است شکل ۷ دوشکستی  $\Delta n$  را نمایش می دهد.

$$\Delta n(\omega) = n_e(\omega) - n_o(\omega) \quad (4)$$

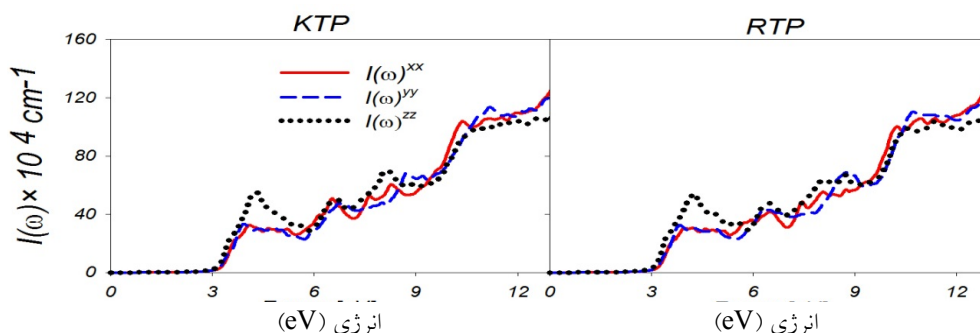
که  $n_o(\omega)$  ضریب شکست عادی (ضریب شکست مربوط به



شکل ۷. (رنگی در نسخه الکترونیکی) مقایسه نمودارهای دوشکستی RTP و KTP.



شکل ۸. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار ضریب شکست RTP و KTP.



شکل ۹. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار طیف جذب KTP و RTP.

جدول ۵. ضریب شکست و دوشکستی مربوط به RTP و KTP در انرژی صفر و  $\lambda=1064\text{nm}$ .

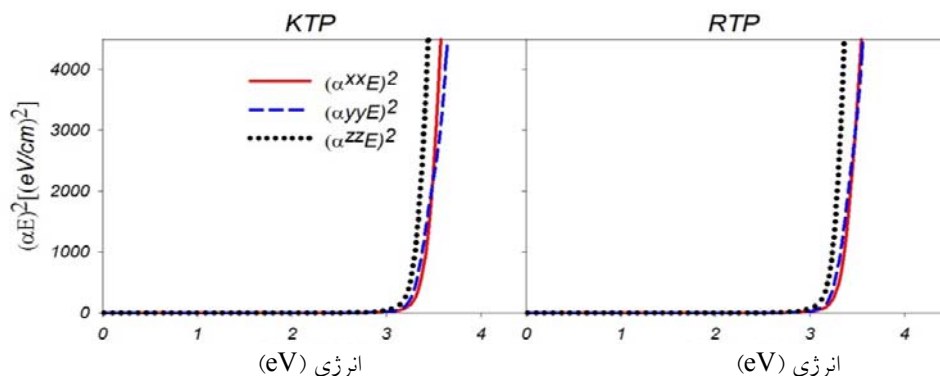
$\Delta n$	$n^{zz}$	$n^{yy}$	$n^{xx}$		
۰٫۰۸۹	۱٫۷۴	۱٫۶۴	۱٫۶۵	در صفر	KTP
۰٫۰۹۷	۱٫۷۷	۱٫۶۷	۱٫۶۸	$\lambda=1064\text{nm}$ در	
۰٫۰۷۴ <sup>(الف)</sup>	۱٫۸۲ <sup>(الف)</sup>	۱٫۷۵ <sup>(الف)</sup>	۱٫۷۵ <sup>(الف)</sup>		
۰٫۰۸۴ <sup>(الف)</sup>					
۰٫۱۰	۱٫۷۵	۱٫۶۵	۱٫۶۵	در صفر	RTP
۰٫۱۱	۱٫۷۹	۱٫۶۸	۱٫۶۸	$\lambda=1064\text{nm}$ در	

(الف) مرجع [۱۱]

مستقیم و مجاز هستند  $P=1/2$  در نظر گرفته می‌شود و انرژی گاف با استفاده از رابطه تائوک محاسبه و نمودار  $(aE)^2$  بر حسب انرژی در شکل ۹ 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.

وابسته به احتمال گذار است که در محدوده بسامدهای اپتیکی می‌تواند 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 غیرمجاز  $P=3$ ، یا بیشتر برای ترکیب RTP و KTP که نیم‌رساناهای با گذار





شکل ۹. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار طیف  $(\alpha E)^2$  مربوط به RTP و KTP.

### ۷. نتیجه گیری

وارونگی و کاهش تقارن نیز افزایش شدت تولید همابنگ دوم را در پی خواهد داشت. وجود ناهمسانگردی مشاهده شده در ضرایب اپتیکی نشان از وجود قابلیت‌های اپتیکی غیرخطی در هر دو بلور دارد. مقدار دو شکستی RTP در طول موج  $1064 \text{ nm}$  نسبت به KTP بزرگتر است که این بزرگتر بودن ضرایب غیرخطی آن را مجدد یادآور می‌شود.

جانمایی رویدیم به جای پتاسیم، باعث افزایش حجم سلول واحد و انبساط شبکه در جهت محورهای  $x$  و  $y$  و انقباض آن در جهت محور  $z$  می‌شود. از طرفی این جانمایی کاهش در اندازه گاف را در پی دارد که این خود به افزایش در ضرایب اپتیکی غیرخطی منجر می‌شود. همچنین استفاده از تقریب mBJ اندازه گاف را به نتایج تجربی نزدیک کرده است. کاهش شبه

### مراجع

1. Z Kecong and W Ximin, *Chinese Science Bulletin* **46** (2001) 2028.
2. V Atuchin, V Kesler, G Meng, and Z Lin, *Journal of Physics: Condensed Matter* **24** (2012) 405503.
3. P Blaha, K Schwarz, P Sorantin, and S Trickey, *Computer Physics Communications* **59** (1990) 399.
4. J P Perdew and Y Wang, *Physical Review B* **45** (1992) 13244.
5. J P Perdew, K Burke, and M Ernzerhof, *Physical Review Letters* **77** (1996) 3865.
6. Z Wu and R E Cohen, *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, *Physical Review Letters* **100** (2008) 136406.
8. F Tran and P Blaha, *Physical Review Letters* **102** (2009) 226401.
9. D Koller, F Tran, and P Blaha, *Physical Review B* **83** (2011) 195134.
10. N V Somov and E V Chuprunov, *Crystallography Reports* **59** (2014) 137.
11. A H Reshak, I Kityk, and S Auluck, *The Journal of Physical Chemistry B* **114** (2010) 16705.
12. F C Zumsteg, J D Bierlein, and T E Gier, *Journal of Applied Physics* **47** (1976) 4980.
13. S T Norberg, J Gustafsson, and B E Mellander, *Acta Crystallographica Section B: Structural Science* **59** (2003) 588.
14. N K Hansen, J Protas, and G Marnier, *Acta Crystallographica Section B: Structural Science* **47** (1991) 660.
15. J Lowther, P Manyum, and P Suebka, *Physica Status Solidi (b)* **242** (2005) 1392.
16. P Thomas, S Mayo, and B Watts, *Acta Crystallographica Section B: Structural Science* **48** (1992) 401.
17. R DeSalvo, A A Said, D J Hagan, E W V Stryland, and M Sheik-Bahae, *IEEE Journal of Quantum Electronics* **32** (1996) 1324.
18. W Ching and Y N Xu, *Physical Review B* **44** (1991) 5332.
19. H Li, C Kam, Y Lam, and W Ji, *Optical Materials* **15** (2001) 237.
20. G Mann and H Weber, *Laser Physics-Lawrence* **9** (1999) 426.
21. A Zukauskas, V Pasiskevicius, and C Canalias, *Optics Express* **21** (2013) 1395.
22. N Golego and M Cocivera, *Thin Solid Films* **322** (1998) 14.
23. L Kang, D M Ramo, Z Lin, P D Bristowe, J Qin, and



25. A P Gazhulina and M O Marychev, *Crystal Structure Theory and Applications* **2** (2013) 106.
26. J Tauc, R Grigorovici, and A Vancu, *Physica Status Solidi (b)* **15** (1966) 627.
- C Chen, *Journal of Materials Chemistry C* **1** (2013) 7363.
24. A Dudelzak, P P Proulx, V Denks, V Mürk, and V Nagirnyi, *Journal of Applied Physics* **8**, 7 (2000) 2110.