



تنظیم ویژگی‌های ساختاری، الکترونیکی، مغناطیسی و نوری EuS از طریق Nd^{2+} آلایده: یک مطالعه جامع

کمال کیشور دوویدی^۱، آنوج کومار^۲، یو سی سریواستاوا^۳، امان کومار^۴، و شیامندرا سینگ پراتاپ^۵

^۱دپارتمان فیزیک، کالج علوم کرال ورما سوبهاری، دانشگاه سوامی ویکان و ساب هارتی، دانشگاه MEERUT هند ۲۵۰۰۰۴

^۲دپارتمان فیزیک دکتر شیوانند ناوتیال Govt P.G. کالج کارنپرایاگ اوتاراکنند، هند.

^۳گروه فیزیک، کالج دولتی ماهامایا، شرکوت، بیجنور، اوتار پرادش، هند.

^۴گروه فیزیک، موسسه علوم کاربردی آمیتی، دانشگاه آمیتی، نویدا-۲۰۱۳۰۱، هند

^۵گروه فیزیک، دولت سوامی ویکاناند P.G. کالج لوهاگات اوتاراکنند، هند

پست الکترونیکی: amankumar@gmail.com

(دریافت مقاله: ۱۴۰۳/۱۰/۲۴؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۳/۱۲/۲۹)

چکیده

این پژوهش برای بررسی ویژگی‌های الکترونیکی، مغناطیسی و نوری ترکیبات EuS و $Eu_{0.5}Nd_{0.5}S$ از محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT) در چارچوب نرم افزار WIEN2K استفاده می‌کند. در روش محاسباتی، پتانسیل تبدیلی-هم‌بستگی بک-جانسون اصلاح‌شده با تران-بلاها (TB-mBJ) ترکیب شده است تا دقت پیش‌بینی ساختار الکترونیکی افزایش یابد. پارامترهای ساختاری، از جمله ثابت‌های شبکه تعادل و حجم سلول واحد، با برازش داده‌های انرژی کل بر حسب حجم به معادله حالت بیرج-مورناگان (BME) به دست آمدند. ویژگی‌های ساختاری محاسبه‌شده تطابق بسیار قوی با داده‌های تجربی موجود نشان می‌دهند و قابلیت اطمینان رویکرد محاسباتی اتخاذ شده را تأیید می‌کند. ویژگی‌های الکترونیکی از طریق محاسبات ساختار نواری (BS) مورد بررسی قرار گرفت، که با تجزیه و تحلیل عمیق چگالی حالت‌های کل و جزئی (P-DOS و T-DOS) تکمیل شد. نتایج ساختار نواری ماهیت فلزی هر دو ترکیب EuS و $Eu_{0.5}Nd_{0.5}S$ را تأیید می‌کند، به گونه‌ای که وجود حالت‌های رسانش در تراز فرمی مشاهده می‌شود. ویژگی‌های نوری به صورت نظام‌مند و از طریق توابع کلیدی پاسخ وابسته به بسامد تجزیه و تحلیل شده‌اند که شامل بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک $\epsilon_1(\omega)$ و $\epsilon_2(\omega)$ ، طیف بازتابی $R(\omega)$ ، تابع اتلاف انرژی $L(\omega)$ ، ضریب شکست $n(\omega)$ و ضریب جذب $\alpha(\omega)$ هستند. این پارامترهای نوری سازوکارهای برهم‌کنش بین این مواد و تابش الکترومغناطیسی را واضح می‌کنند و بینش‌های مهمی را در مورد کاربردهای بالقوه آنها در فناوری‌های نوری و فوتونیک ارائه می‌دهند.

واژه‌های کلیدی: WIEN2K، ویژگی‌های نوری، کالکوزنیدها، GGA

مقاله کامل در بخش انگلیسی همین شماره مجله به چاپ رسیده است.