فصلنامه‌ی علمی

علم و مهندسی سرامیک

دوره‌ی ۱۱، شماره‌ی ۱، بهار ۱۴۰۱

بررسی ابتدا به ساکن اثر خنثی‌کردن سطح بر ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی سطح (۰۰۱) پادپروسکایت $SbNSr_3$

نوع مقاله: علمی پژوهشی

حمد ا... صالحی*، نرگس‌السادات موسوی‌نژاد؛ پیمان امیری

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

* salehi_h@scu.ac.ir

اطلاعات مقاله:

دریافت: ۷ آبان ۱۳۹۹

پذیرش: ۸ آذر ۱۴۰۰

صفحه ۲۲ تا صفحه ۳۶

در دسترس در نشانی:
www.ijcse.ir

زبان نشریه: فارسی

شاپا چاپی: ۲۳۵۲-۲۳۲۲

شاپا الکترونیکی:
۲۷۸۳-۳۰۰۳

چکیده:

در این مقاله ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی ترکیب $SbNSr_3$ در حالت سطح در راستای [۰۰۱] بلور و اثر خنثی کردن سطح بر ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی آن برای دو پایانهٔ SbSr و NSr_2 مورد بحث و بررسی قرار گرفت. محاسبات بر پایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی و روش شبه پتانسیل با امواج تخت انجام شد. جهت محاسبات پتانسیل تبادلی همبستگی از تابعی هیبریدی HSE استفاده شد. محاسبات سطح با در نظرگرفتن ابرسلول‌های تتراگونال، شرایط مرزی دوره‌ای، میزان خلأ کافی و کمینه نیروهای وارد بر اتم‌ها انجام گرفت. نتایج محاسبات الکترونی نشان داد در سطح خنثی نشده برخلاف ماهیت نیم‌رسانایی حالت انبوهۀ ترکیب، حالت‌های الکترونی در مجاورت سطح فرمی مشاهده می‌شود. پیوندهای فعال سطح با جذب اتم‌های هیدروژن بر روی سطح، اشباع و حالت‌های الکترونی در نزدیکی سطح فرمی حذف شدند که به باز شدن گاف نواری در هر دو پایانه منجر شد. گاف نواری محاسبه شده برای پایانه‌های SbSr و NSr_2 به ترتیب ۰٫۸۰۸ و ۱٫۰۲۹ الکترون ولت به دست آمد. ویژگی‌های اپتیکی سطح $SbNSr_3$ در دو حالت خنثی نشده و خنثی شده مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد در هر دو پایانه، خنثی کردن سطح که باعث از بین رفتن حالت‌های الکترونی سطح می‌شود، به افزایش گاف اپتیکی منجر می‌شود. گاف اپتیکی محاسبه شده در هر دو حالت سطح خنثی نشده و خنثی شده برای نور فرودی عمود بر سطح (z) بزرگ‌تر از راستای موازی با سطح (x) به دست آمد. در توافق با نتایج الکترونی گاف اپتیکی پایانهٔ SbSr کم‌تر از پایانهٔ NSr_2 محاسبه شد. هم‌چنین مشاهده شد با خنثی کردن سطح ثابت دی‌الکتریک استاتیک در هر دو پایانه کاهش می‌یابد و در راستای z کم‌تر از راستای x است.

کلیدواژه:

نظریهٔ تابعی چگالی، $SbNSr_3$، ساختار سطح، خنثی‌کردن سطح، ویژگی‌های الکترونی، ویژگی‌های اپتیکی.

کد DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4

۱- مقدمه

مواد پادپروسکایت ترکیبات غیرآلی هستند که ساختاری مشابه پروسکایت‌ها دارند با این تفاوت که موقعیت آنیون و کاتیون آن‌ها تغییر کرده است [۱]. در واقع پادپروسکایت‌ها گروهی از ترکیبات هم‌شکل با فرمول عمومی ABX_3 هستند که در حالت ایده‌آل دارای شکل مکعبی می‌باشند. در این ترکیبات A، آنیون بزرگ‌تر، به صورت دوازده‌تایی و B، آنیون

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4]

کوچک‌تر، به صورت شش‌تایی در همسایگی با کاتیون‌های X قرار دارند. هر یک از اتم‌های X به وسیلهٔ دو آنیون در موقعیت B و چهار آنیون در موقعیت A احاطه شده‌اند. ترکیبات پادپروسکایت به واسطهٔ خواص متنوع و منحصر به فردشان مورد توجه می‌باشند. این ترکیبات دارای طیف وسیعی از گاف نواری هستند که با توجه به ترکیب شیمیایی‌شان، خواص متنوع فیزیکی از نیم‌رسانایی تا مغناطیسی و ابررسانایی را دارا هستند [۲–۵]. این مزیت به کاربرد آن‌ها در حوزهٔ وسیعی از فناوری منجر شده است [۸–۶]. در این بین نیتریدهای سه‌تایی با پایهٔ استرانسیوم (SbNSr3 و BiNSr3) به صورت نظری، خواص ترموالکتریکی قابل توجهی از خود نشان دادند که می‌توان آن‌ها را به عنوان گزینه‌ای برای مولدهای ترموالکتریکی در نظر گرفت [۹]. هم‌چنین بررسی ویژگی‌های اپتیکی این ترکیبات نشان داد می‌توانند به عنوان محافظ در برابر اشعهٔ فرابنفش مفید باشند [۱۰]. ترکیب $SbNSr_3$ با گروه فضایی pm3m (221)، برای اولین بار توسط گبلر[۱] و همکاران در سال ۲۰۰۴ سنتز و برخی از ویژگی‌های فیزیکی آن از قبیل پارامتر شبکه و گاف اپتیکی اندازه‌گیری و به ترتیب برابر با ۵٫۱۷ آنگستروم و ۱٫۱۵ الکترون ولت گزارش شد. هم‌چنین با اندازه‌گیری مقاومت الکتریکی و پذیرفتاری مغناطیسی نشان دادند که ترکیب مورد نظر یک نیم‌رسانای دیامغناطیس می‌باشد [۱۱]. ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، اپتیکی و ترموالکتریکی این ترکیب در حالت انبوهه به صورت نظری مورد بررسی قرار گرفته است [۱۴–۱۲، ۱۰–۹]. نانوسطوح با خصوصیات فیزیکی فراوان کاربردهای گسترده‌تری نسبت به حالت انبوهه دارند، اما به دلیل پیچیدگی و سختی در محاسبات توجه کمی به آن شده است. به ویژه در مطالعهٔ نظری سطوح نیم‌رساناها وجود پیوندهای آویزان فعال سطح می‌تواند منجر به حالت‌های الکترونی در مجاورت سطح فرمی شود که ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی سطح و در نتیجه کاربردهای مختلف آن را تحت تأثیر قرار می‌دهد [۱۶–۱۵]. در حقیقت به واسطهٔ وجود پیوندهای آویزان (پیوندهای نیمه‌پر) در سطح، حالت‌های الکترونی در محدودهٔ گاف نواری مشاهده می‌شود که به ماهیت فلزی سطح منجر می‌شود. به عبارت دیگر این پیوندهای آویزان می توانند انرژی گاف نواری ماده را تحت تأثیر قرار داده و بر خصوصیات آن به عنوان یک نیم‌رسانا تأثیر بگذارند.

در بررسی‌های نظری محاسبهٔ گاف نواری دقیق برای کاربرد مؤثر آن‌ها از جمله در کاربردهای اپتیکی از اهمیت بسیاری برخوردار است. از این رو، خنثی کردن پیوندهای آویزان سطح در تحقیقات نظری نانوساختارهای نیم‌رسانا بسیار مهم است. در عمل این پیوندهای آویزان فعال از طریق جذب اتم‌های مختلف محیط و یا بازسازی سطح اشباع می‌شوند [۱۷]. تاکنون نتایج محاسبات ویژگی‌های سطح پادپروسکایت‌های مختلفی ارائه شده است [۲۰–۱۸] اما ویژگی‌های ترکیب $SbNSr_3$ در حالت سطح مورد بررسی قرار نگرفته است. در این پژوهش به مطالعهٔ ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی سطح پادپروسکایت SbNSr3 در راستای [۰۰۱] بلور پرداخته می‌شود. هم‌چنین اثر خنثی‌کردن پیوندهای آویزان بر ویژگی‌های سطح از طریق جذب اتم‌های هیدروژن بر

[۱] gäbler

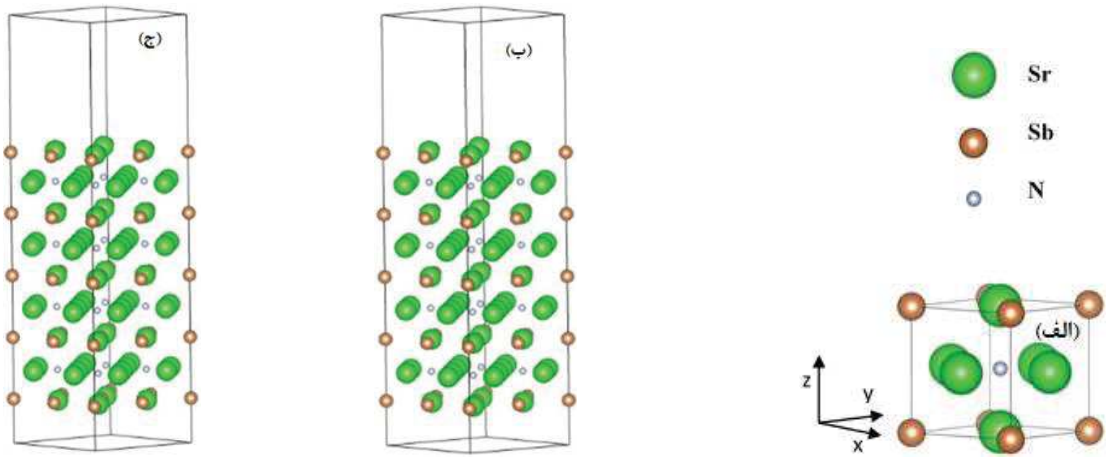
[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4]

روی آن نیز بررسی می‌شود. لازم به توضیح است که بخشی از نتایج الکترونی این پژوهش در مقاله‌ای در مجلهٔ physics and chemistry of solids توسط نویسندگان این مقاله به چاپ رسیده است [۲۱] که به دلیل وابستگی ویژگی‌های اپتیکی به خصوصیات الکترونی مواد در این مقاله آورده شده است.

۲- فعالیت‌های تجربی

برای بررسی ویژگی‌های سطح $SbNSr_3$ در راستای (۰۰۱) بلور از مدل ابریاخته استفاده شد. بدین صورت که با در نظر گرفتن یک بُره با ضخامت مناسب و خلأ به اندازهٔ کافی بزرگ در امتداد جهت عمود بر سامانه مورد نظر، ابریاخته ساخته می‌شود. در واقع برای شبیه‌سازی سطح آزاد یک بلور، تناوب بلور درراستای عمود بر سطح مورد نظر شکسته می‌شود. از این رو جهت شبیه‌سازی سطح (۰۰۱) $SbNSr_3$، تقارن انتقالی در امتدادمحور z شکسته شده و به منظور جلوگیری از برهم‌کنش بین اتم‌های بره‌های سطحی مجاور، ضخامتی از خلأ در این راستا (راستای Z) در نظر گرفته شد. ساختار سطح $SbNSr_3$ متشکل از لایه‌های متناوب SbSr و NSr_2 در امتداد [۰۰۱] است. دو نوع برهٔ سطح $SbNSr_3$ در تقارن P4/mmm مورد بررسی قرار گرفت که با نام پایانهٔ SbSr و پایانهٔ NSr_2 مشخص شده‌اند. برهٔ سطح با پایانهٔ SbSr در هر دو طرف به لایه‌ای شامل اتم‌های Sb و Sr خاتمه می‌یابد و پایانهٔ NSr_2، برهٔ سطح خاتمه یافته به لایه‌ای با اتم‌های N و Sr می‌باشد. محاسبات ما نشان داد برای بررسی آثار سطح، بره‌ای با ضخامت ۹ لایهٔ اتمی مناسب است. برهٔ شامل ۹ لایهٔ اتمی تقارن آینه‌ای نسبت به مرکز بره را حفظ می‌کند [۲۳-۲۲]. برای جلوگیری از برهم‌کنش بین اتم‌های بره‌های متوالی، از خلأ به ضخامت ۱۵ آنگستروم استفاده شد که محاسبات نشان داد فاصله خلأ ۱۵ آنگستروم برای بررسی سطح $SbNSr_3$ مناسب است. در شکل ۱ ساختار انبوههٔ $SbNSr_3$ و بره‌ها با پایانه‌های SbSr و NSr_2 نشان داده شده‌اند.



شکل ۱- (الف) حالت انبوههٔ ترکیب پادپروسکایت $SbNSr_3$ با ساختار مکعبی و با گروه فضایی pm3m (۲۲۱) و (ب) ساختار سطح ترکیب $SbNSr_3$ با پایانه SbSr و ج) NSr_2

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4]

محاسبات بر اساس اصول اولیه و با استفاده از بستهٔ محاسباتی کوانتوم اسپرسو که بر پایهٔ روش شبه پتانسیل با امواج تخت می‌باشد، انجام گرفته است [۲۵-۲۴]. در این محاسبات از شبه پتانسیل‌های نوع بار پایسته [۲۶] استفاده می‌شود. الکترون‌های ظرفیت برای اتم‌های Sb، N و Sr به صورت Sb: $5s^2\ 5p^3$، N: $2s^2\ 2p^3$ و Sr: $4s^2\ 4p^6\ 5s^2$ در نظرگرفته شدند. برای دقت بیش‌تر در محاسبات سطح ابتدا ترکیب $SbNSr^3$ به لحاظ ساختاری و الکترونی در حالت انبوهه بررسی شد. در محاسبات انبوهه، تقریب‌های متداول چگالی موضعی LDA [۲۷] و شیب تعمیم یافته GGA [۲۸] به علاوه تابعی هیبریدی HSE [۳۱-۲۹] به کار برده شدند. پارامتر شبکهٔ محاسبه شده توسط تقریب‌های LDA، GGA و تابعی هیبریدی HSE به ترتیب ۴٫۹۷۹، ۵٫۱۳۱ و ۵٫۱۸۴ آنگستروم محاسبه شد. هم‌چنین گاف نواری به دست آمده از محاسبات تقریب‌های LDA، GGA و تابعی HSE به ترتیب ۰٫۱۶۳، ۰٫۳۲۰ و ۱٫۱۷ الکترون ولت می‌باشد. بنابراین با توجه به این که مقادیر تجربی پارامتر شبکه و گاف نواری برابر با ۵٫۱۷ Å و ۱٫۱۵ eV گزارش شدند [۱۱] و نتایج حاصل از تابعی هیبریدی HSE نسبت به دیگر تقریب‌ها بهترین توافق را با مقادیر تجربی داشتند، در بررسی ویژگی‌های سطح کلیهٔ محاسبات با تابعی HSE انجام شد. انرژی قطع بهینهٔ تابع موج نیز ۷۰ Ry محاسبه شد. نقاط بهینه K بر پایهٔ مدل مونخورست- پک [۳۲] و با توجه به این که در سطح شبیه‌سازی شده خلأ در راستای محور z اعمال می‌شود به صورت شبکهٔ ۱ × ۶ × ۶ انتخاب شد. محاسبات واهلش ساختار بره‌های سطحی با ثابت در نظر گرفتن پارامتر شبکه در صفحهٔ xy انجام می‌شود در حالی که اتم‌ها مجاز به جابه‌جایی در تمام جهت‌ها هستند. موقعیت‌های اتمی بهینه با کمینه‌کردن نیروهای بین تمام یون‌ها تا کم‌تر از ۳ mRy/a.u به دست آمدند. از آن‌جا که وجود پیوندهای آویزان در سطح باعث ایجاد حالت‌های الکترونی سطحی پیرامون سطح فرمی می‌شود، برای حذف این حالت‌های الکترونی از فرآیند خنثی‌کردن سطح توسط اتم‌های هیدروژن استفاده شد.

۳- نتایج و بحث

۳-۱- واهلش ساختار سطح

در محاسبات واهلش ساختار، با بهینه‌سازی موقعیت‌های اتمی نیروی وارد بر اتم‌ها کمینه شده و پس از اتمام فرآیند واهلش، سامانه به کم‌ترین انرژی خود می‌رسد که در این هنگام می‌توان ویژگی‌های مورد نظر سامانه را استخراج کرد. بنابراین در شبیه‌سازی ساختار سطح در راستای [۰۰۱]، ابتدا برهٔ ساخته شده واهلش داده شد. در این محاسبات بهینه‌سازی مختصات اتمی از طریق کمینه‌سازی نیروی کل تا ۳ mRy/a.u انجام شد. بعد از انجام فرایند واهلش مشاهده شد اتم‌ها در راستای z جابه‌جا شدند که این جابه‌جایی در مورد اتم‌های سطحی قابل توجه و جابه‌جایی اتم‌های لایه‌های درونی سطح ناچیز بود. نتایج حاصل از واهلش سطح برای هر دو نوع پایانهٔ SbSr و NSr_2 در جدول ۱ آورده شده است. جابه‌جایی اتم‌های i امین لایه از سطح با Δz_i نمایش داده شده است که با رابطه زیر قابل محاسبه می‌باشد [۳۳]:

$$\Delta z_i = \frac{z_i - z_{i,bulk}}{a} \times 100\% \qquad (۱)$$

در رابطهٔ فوق z_i و $z_{i,bulk}$ بیانگر مختصهٔ z اتم مورد نظر در i امین لایه از برهٔ سطح به ترتیب بعد و قبل از واهلش هستند.

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4]

پارامتر شبکهٔ بهینهٔ انبوهه با a نمایش داده شده است. مقادیر محاسبه شدهٔ جابه‌جایی‌های اتمی ۴ لایه بالایی سطح در جدول ۱ ارائه شده است. به دلیل از بین رفتن تقارن بلور و وجود پیوندهای آویزان سطح، موقعیت اتم‌های Sb، N و Sr نسبت به جایگاه‌شان در یک بلور کامل تغییر می‌کند. در حقیقت بعد از برش بلور، اتم‌های لایه سطحی برخی از پیوندهای خود را از دست داده و سامانه از حالت تعادلی خود خارج و ناپایدار می‌شود. اتم‌های لایهٔ سطحی برای رسیدن به پایدارترین حالت، جابه‌جا شده و هم‌چنین بر موقعیت اتم‌های نزدیک به لایهٔ سطحی نیز تأثیر می‌گذارند. بنابراین بیش‌ترین جابه‌جایی اتم‌ها مربوط به اتم‌های لایهٔ سطحی و نزدیک سطح می‌باشد و با نزدیک شدن به لایهٔ مرکزی جابه‌جایی اتم‌ها کاهش و در لایه مرکزی به صفر می‌رسد. علامت‌های مثبت و منفی در جدول ۱ نشان‌دهندهٔ جابه‌جایی اتم‌ها به سمت خارج و داخل برهٔ سطح می‌باشند.

مشاهده می‌شود که در هر دو پایانه کاتیون‌ها و آنیون‌های لایهٔ سطحی به ترتیب به سمت خارج و درون برهٔ سطح جابه جا شده‌اند. اگرچه با توجه به قطبش‌پذیری بیش‌تر آنیون‌ها انتظار داریم رفتاری عکس مشاهده شود [۳۴] اما قطبش‌پذیری یون‌ها در جامدات متفاوت از قطبش‌پذیری یون‌ها در حالت گازی است و به ماهیت محیط بلور بستگی دارد. بنابراین قانون مربوط به جهت جابه‌جایی اتم‌های سطح بر اساس قطبش‌پذیری یونی می‌تواند برای سامانه‌هایی که قطبش‌پذیری آنیونی و کاتیونی مشابهی را نشان می‌دهند، پیچیده باشد [۳۵] علاوه بر این تاکنون استثنائات دیگری نیز در مورد جهت جابه‌جایی اتم‌های سطحی گزارش شده است [۳۶-۳۷، ۳۴]. به عنوان مثال مشابه با نتایج محاسبات ما، بلال[۱] و همکاران در بررسی سطح پادپروسکایت Sr_3SnO مشاهده کردند در نتیجهٔ واهلش سطح، کاتیون‌ها و آنیون‌های سطحی به ترتیب به سمت داخل و خارج از سطح جابه‌جا می‌شوند [۳۶]. همان‌گونه از جدول ۱ مشاهده می‌شود در هر دو پایانه بیش‌ترین جابه‌جایی مربوط به اتم‌های لایهٔ سطحی است. در لایهٔ سطحی پایانهٔ SbSr جابه‌جایی اتم Sb نسبت به اتم Sr و در پایانهٔ NSr_2 جابه‌جایی اتم N نسبت به اتم‌های Sr بیش‌تر است.

جدول ۱- جابه‌جایی، Δz اتم‌های ۴ لایهٔ بیرونی از برهٔ سطحی با دو پایانهٔ SbSr و NSr_2

پایانه	iاُمین لایه	اتم	Δz %
SbSr-	۱	Sb	-۳٫۴۴
		Sr	۱٫۷۶
	۲	N	۱٫۷۷
		Sr	۰٫۵۶
	۳	Sb	-۰٫۹۷
		Sr	۰٫۰۹
	۴	N	۰٫۲۰
		Sr	۰٫۰۵
NSr_2-	۱	N	-۲٫۰۷
		Sr	۰٫۶۶
	۲	Sb	۱٫۰۷
		Sr	۰٫۰۹
	۳	N	-۰٫۳۵
		Sr	۰٫۰۰
	۴	Sb	۰٫۰۵
		Sr	۰٫۰۱

[۱] Bilal

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4]

جابه‌جایی‌های اتمی ناشی از واهلش ساختاری باعث تغییر در فاصله بین لایه‌های سطح می‌شوند. تغییرات فاصلهٔ بین لایه‌ها Δd_{ij} (i و j شماره لایه‌های مورد نظر را نشان می‌دهند)، مطابق با روش گوتوفسکی[1] [۳۶]، محاسبه و در جدول ۲ ارائه شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود برای هر دو پایانهٔ SbSr و NSr_2 مقدار Δd_{12} به دست آمده، منفی است که نشان‌دهندهٔ این است فاصلهٔ بین لایهٔ اول (لایه سطحی) و لایه دوم نسبت به انبوهه کاهش یافته است. فاصله بین لایه‌های دوم و سوم Δd_{23} و لایه‌های سوم و چهارم Δd_{34} در مقایسه با انبوههٔ $SbNSr_3$ به ترتیب افزایش و کاهش می‌یابد. همان‌گونه که انتظار می‌رود تغییرات فاصله بین لایه‌های سطح نسبت به انبوهه به صورت تناوبی کاهش و افزایش یافته است. هم‌چنین مشاهده می‌شود با نفوذ به مرکز سطح، اندازهٔ تغییر فاصلهٔ بین لایه‌ها کوچک‌تر می‌شود.

جدول ۲- تغییرات نسبی فاصلهٔ بین لایه‌های سطوح با دو پایانهٔ SbSr و NSr_2

پایانه	Δd_{12} %	Δd_{23} %	Δd_{34} %
SbSr-	-٤/٠٠٧	+١/٥٣٩	-١/١٢٤
NSr_2-	-٤/٠٢٧	+١/٥٠٨	-٠/٤٠٩

۳-۲- اثر خنثی کردن سطح بر ویژگی‌های الکترونی سطح ترکیب $SbNSr_3$

برای بررسی ویژگی‌های الکترونی پادپروسکایت $SbNSr_3$ در حالت سطح، چگالی حالت‌های الکترونی کل برای هر دو پایانهٔ SbSr و NSr_2 محاسبه و در شکل ۲ ارائه شده است. محاسبات نشان داد که برخلاف ماهیت نیم‌رسانایی حالت انبوههٔ ترکیب، در حالت سطح به واسطهٔ وجود پیوندهای آویزان اتم‌های سطحی، در ناحیهٔ گاف نواری حالت‌های الکترونی مشاهده می‌شوند. از آن‌جا که وجود این حالت‌های الکترونی بر ویژگی‌های الکترونی، اپتیکی و بنابراین کاربردهای مواد تأثیر می‌گذارد شایسته است روش‌هایی برای از بین بردن حالت‌های سطح مورد بررسی قرار گیرد. یکی از روش‌های حذف حالت‌های سطحی، خنثی کردن سطح از طریق جذب اتم‌های هیدروژن بر روی سطح می‌باشد که در این پژوهش از این روش استفاده شده است. لازم به ذکر است در این مقاله نتایج محاسبات سطح قبل و بعد از خنثی کردن سطح با اتم‌های هیدروژن به ترتیب با عنوان حالت خنثی نشده و خنثی شده مشخص شده است. چگالی حالت‌های الکترونی کل سطح بعد از خنثی شدن توسط اتم‌های هیدروژن (سطح خنثی شده) برای هر دو پایانهٔ SbSr و NSr_2 محاسبه و در شکل ۳ نشان داده شده است.

با جذب اتم‌های هیدروژن بر روی سطح در هر دو پایانه حالت‌های سطح از بین رفته و گاف نواری باز می‌شود. گاف نواری پایانه‌های SbSr و NSr_2 به ترتیب ۰/۸۰۸ و ۱/۰۲۹ الکترون‌ولت محاسبه شد که همان‌طور مشاهده می‌شود گاف نواری سطح با پایانهٔ SbSr کم‌تر از پایانهٔ NSr_2 می‌باشد. چگالی حالت‌های الکترونی جزئی اتم‌های پنج لایهٔ بالایی سطح در حالت خنثی شده و خنثی نشدهٔ هر دو نوع پایانه در شکل‌های ۴ و ۵ آورده شده است. از شکل ۴ الف مشاهده می‌شود قبل از خنثی‌سازی سطح با پایانهٔ SbSr، بیش‌ترین سهم حالت‌های الکترونی در محدودهٔ

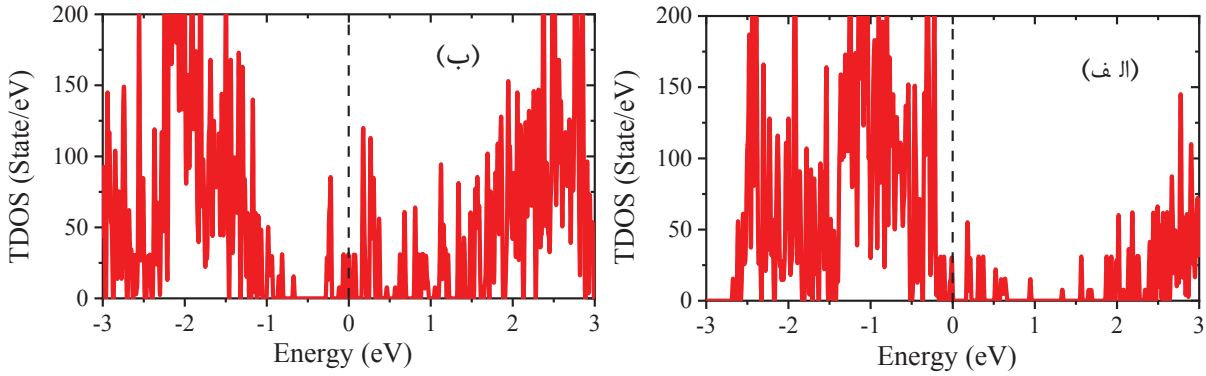
[1] Gutowski

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-04]

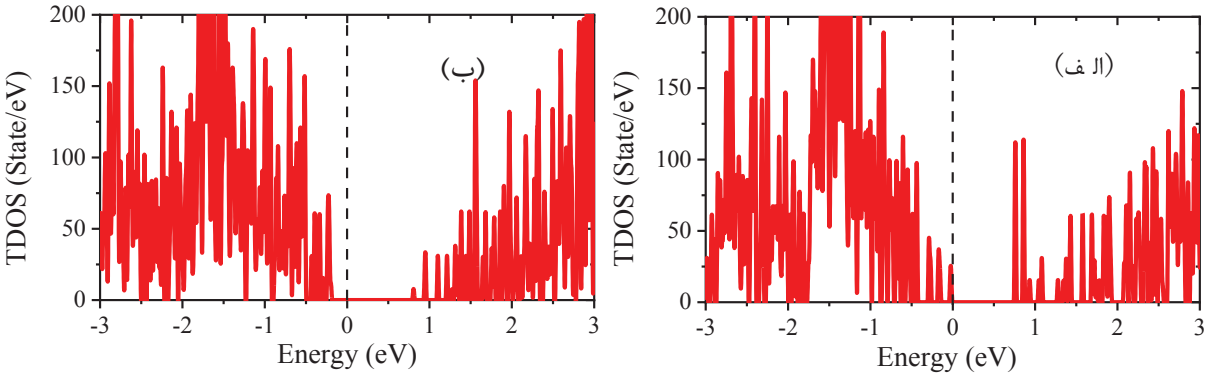
[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4]

گاف نواری مربوط به اربیتال p اتم‌های Sb و N به ترتیب در لایه‌های سطحی و زیر سطحی می‌باشد. با نفوذ به عمق سطح این آثار کم می‌شود تا جایی که اتم‌های موجود در لایهٔ مرکزی هیچ سهمی در حالات الکترونی محدودهٔ گاف نواری نشان نمی‌دهند. هم چنین اتم‌های Sr موجود در لایهٔ سطحی سهم ناچیزی در حالت‌های الکترونی سطحی دارند که مربوط به اربیتال 5s این اتم می‌باشد. شکل ۴ ب چگالی حالت‌های الکترونی ناشی از اتم‌های پنج لایهٔ بالایی سطح را بعد از خنثی‌سازی با اتم‌های هیدروژن نمایش می‌دهد.

مشاهده می‌شود با خنثی‌سازی سطح حالت‌های سطحی از بین رفته و گاف نواری به باز می‌شود. چگالی حالت‌های الکترونی جزئی ۵ لایهٔ بالایی سطح با پایانهٔ NSr2 قبل و بعد از خنثی‌سازی به ترتیب در شکل ۵ الف و ۵ ب ارائه شده است. مشاهده می‌شود که در این نوع پایانه نیز حالت‌های سطحی ایجاد شده در محدودهٔ گاف نواری ناشی از اربیتال p اتم‌های N و Sb لایه‌های سطحی و زیر سطحی و نیز اربیتال s اتم‌های Sr لایهٔ سطحی می‌باشند. سهم اتم‌های N و Sb لایه‌های سطحی و زیر سطحی در حالت‌های الکترونی سطحی کم‌تر از پایانهٔ SbSr است در حالی که اتم‌های Sr سطحی سهم بیشتری نسبت به پایانهٔ SbSr در حالت‌های سطحی نشان دادند



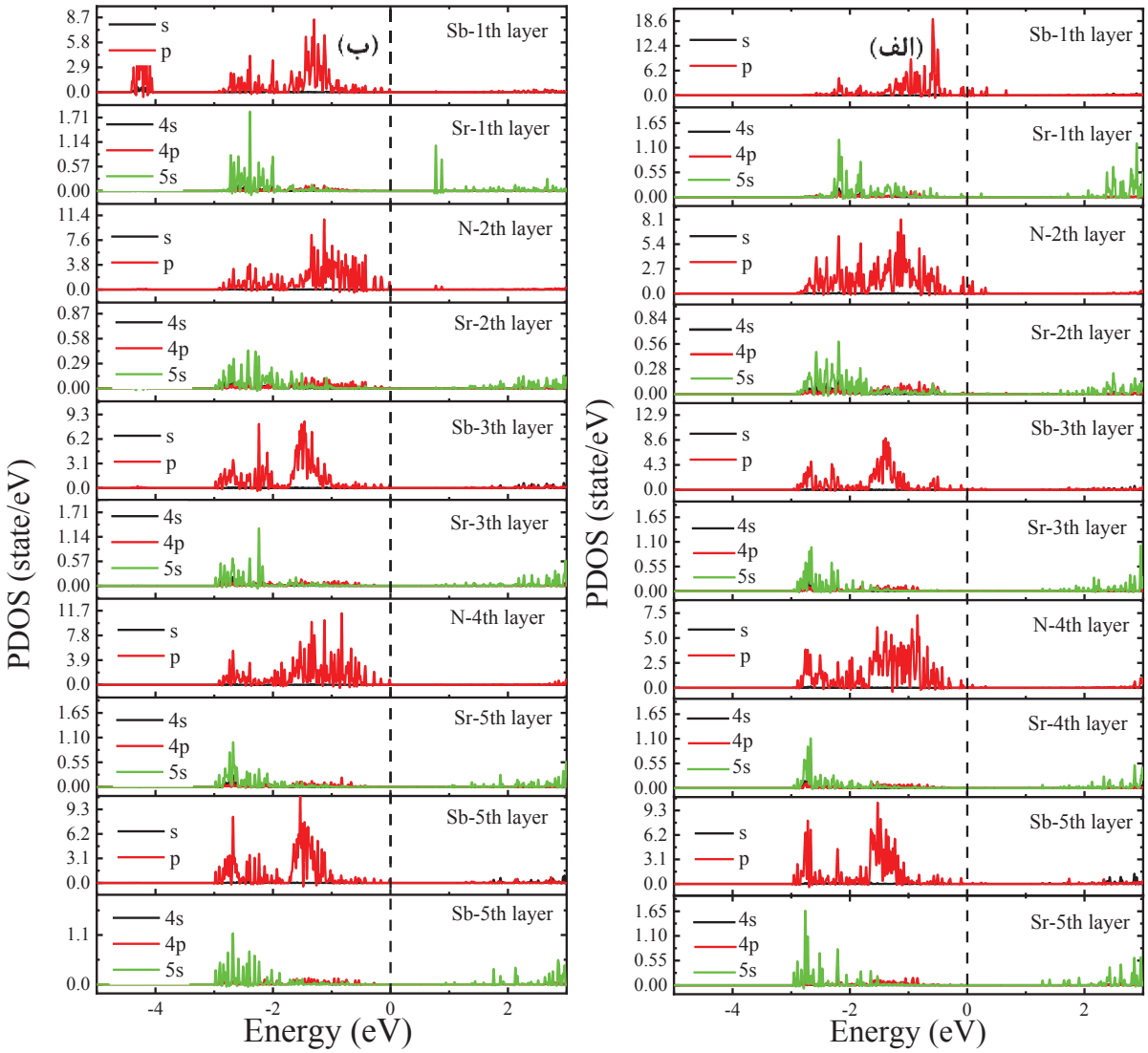
شکل ۲- چگالی حالت‌های کل الکترونی سطح با پایانه‌های(الف) SbSr و (ب) NSr_2



شکل ۳- چگالی حالت‌های کل الکترونی سطح خنثی‌شده توسط اتم‌های هیدروژن با پایانه‌های (الف) SbSr و (ب) NSr_2

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4]



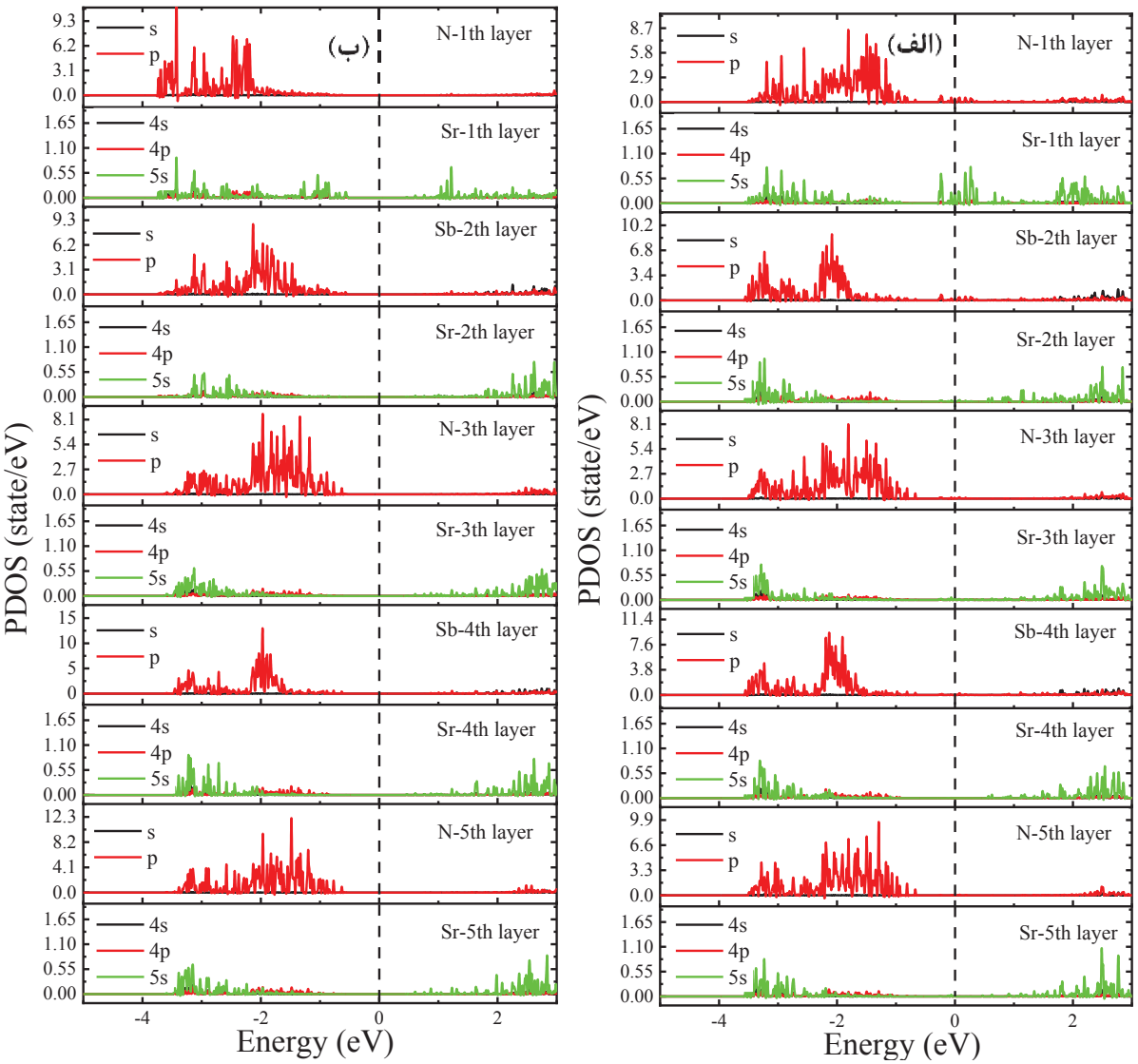
شکل ۴- چگالی حالت‌های جزئی الکترونی ۵ لایهٔ بالایی سطح (الف) خنثی نشده و (ب) خنثی شده توسط اتم‌های هیدروژن با پایانهٔ SbSr

با جذب اتم‌های هیدروژن بر روی سطح با پایانهٔ NSr_2، مشاهده می‌شود که حالت‌های سطحی ایجاد شده ناشی از اتم‌های لایه‌های سطحی و زیر سطحی از بین رفته و سطح خنثی شده دارای گاف نواری است. همان گونه که گفته شد گاف نواری سطح با پایانهٔ SbSr کم‌تر از پایانهٔ NSr_2 به دست آمد.

تاکنون هیچ پژوهشی بر روی ویژگی‌های سطح پادپروسکایت $SbNSr_3$ انجام نشده است. به طور مشابه نتایج محاسبات یانگ و همکاران بر روی سطح ترکیب پادپروسکایت $KMgF_3$ نشان داد گاف نواری سطح با پایانهٔ KF کم‌تر از پایانهٔ MgF_2 است [۳۸].

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4]



شکل ۵- چگالی حالت‌های جزئی الکترونی ۵ لایهٔ بالایی سطح (الف) خنثی نشده و (ب) خنثی شده توسط اتم‌های هیدروژن با پایانهٔ NSr_2

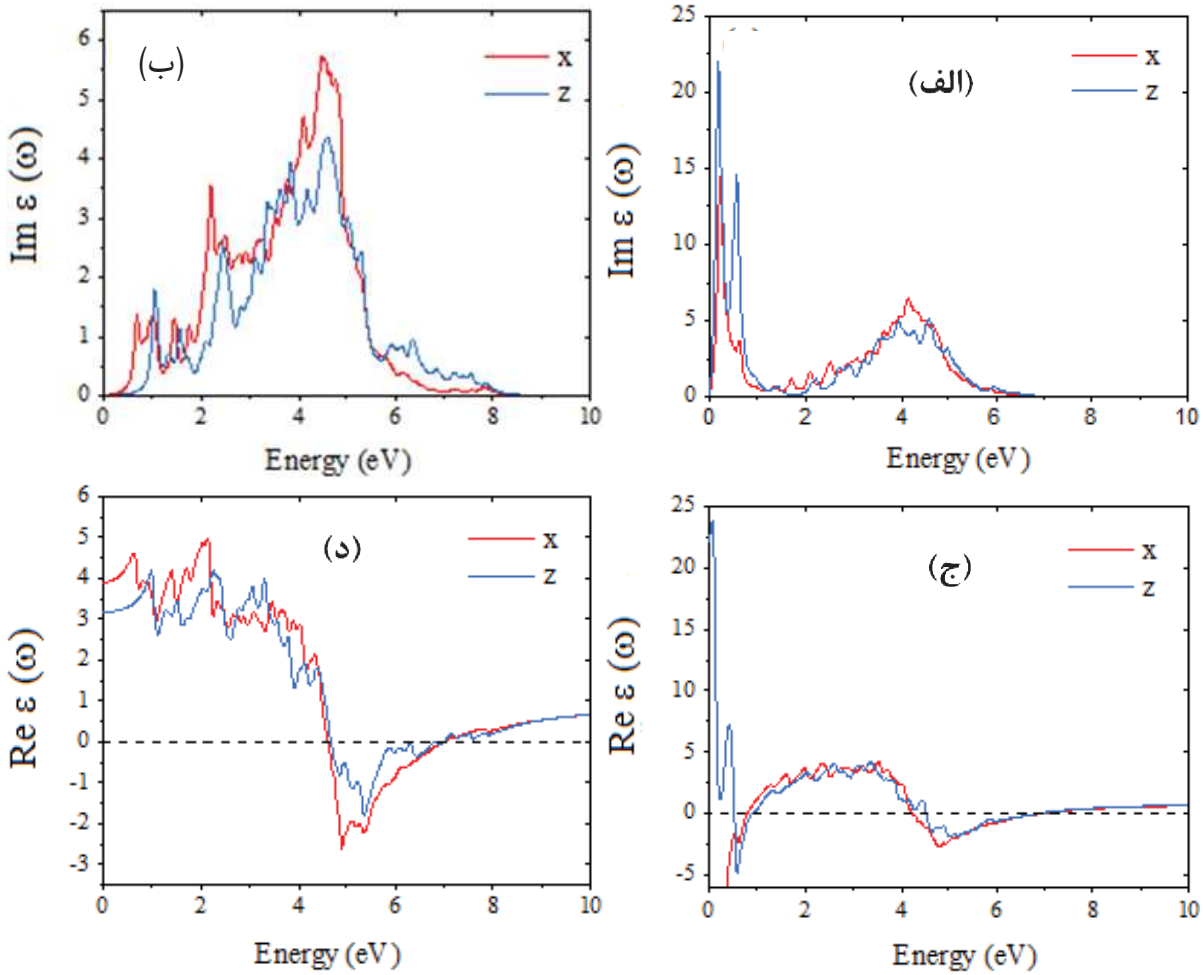
۳-۳- اثر خنثی‌کردن سطح بر ویژگی‌های اپتیکی سطح ترکیب $SbNSr_3$

ویژگی‌های اپتیکی مواد با تابع دی‌الکتریک $\varepsilon(\omega)= \varepsilon_1(\omega)+i\varepsilon_2(\omega)$ توصیف می‌شوند که دارای دو بخش حقیقی $\varepsilon_1(\omega)$ و موهومی $\varepsilon_2(\omega)$ است [۳۹]. این تابع دارای دو سهم گذارهای درون نواری و بین نواری است که سهم درون نواری برای فلزات، نیم‌فلزات و نیم‌رساناهای با گاف نواری کوچک به کار می‌رود. گذارهای بین نواری به دو نوع گذارهای مستقیم و غیرمستقیم تقسیم می‌شوند. برای محاسبهٔ خواص اپتیکی از گذارهای بین نواری غیرمستقیم که سهم کوچکی در ویژگی‌های نوری مواد دارند و در برگیرنده پراکندگی‌های فونونی (جذب وگسیل) می‌باشند، صرف نظر می‌کنیم [۴۰]. در ساختار سطح، تقارن مکعبی ترکیب از بین رفته و همان‌گونه که در شکل ۱ قابل مشاهده

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-04]
[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4]

است تقارن تتراگونال پیدا می‌کند. در این تقارن ویژگی‌های اپتیکی در راستای x و y یکسان و در راستای z متفاوت خواهند بود. بنابراین ویژگی‌های اپتیکی را برای نور فرودی قطبیده عمود بر سطح (z) و موازی با سطح (x) بررسی می‌کنیم. دو بخش حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک سطح در دو حالت خنثی نشده و خنثی شده برای پایانه‌های SbSr و NSr_2 به ترتیب در شکل‌های ۶ و ۷ آورده شده است.

شکل ۶ الف بخش موهومی تابع دی‌الکتریک سطح خنثی نشده با پایانهٔ SbSr را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود در انرژی‌های پایین تابع دی‌الکتریک با شیب تندی افزایش می‌یابد که در مورد راستای z شیب و اندازهٔ قله بزرگ‌تر است. در محدودهٔ ۱ تا ۵ الکترون ولت اندازهٔ قله‌ها برای راستای x نور فرودی بزرگ‌تر می‌باشد. بعد از آن و در انرژی‌های بالاتر بخش موهومی تابع دی‌الکتریک هر دو راستا تقریباً برابر می‌شود. مشاهده می‌شود سطح خنثی نشده رفتاری مانند ترکیبات فلزی نشان داده و در هر دو راستا فاقد گاف اپتیکی است.



شکل ۶- (الف) بخش موهومی تابع دی‌الکتریک سطح خنثی‌نشده، (ب) خنثی‌شده , (ج) بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک سطح خنثی نشده، و (د) خنثی شده با پایانهٔ SbSr

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4]

در شکل ۶ ب مشاهده می‌شود که با خنثی شدن پایانهٔ SbSr سطح، گاف اپتیکی راستای x و z به ترتیب برابر با ۰/۶۴۶و ۰/۷۳۶ الکترون ولت محاسبه شدند. تغییرات بخش موهومی تابع دی‌الکتریک نسبت به سطح خنثی نشده برای هر دو راستا در انرژی‌های کم آرام و اولین قله به سمت انرژی‌های بیش‌تر جابه‌جا می‌شود. هم‌چنین اندازهٔ اولین قله در هر دو راستا نسبت به سطح خنثی نشده کاهش می‌یابد. همان‌گونه که در شکل ۶ ج نشان داده شده است، قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک سطح خنثی نشده برای هر دو راستای نور فرودی در دو محدودهٔ انرژی دارای مقادیر منفی است که در این نواحی موج الکترومغناطیس منتشر نمی‌شود و عمدهٔ فرایندها مربوط به جذب و بازتاب است. مشاهده می‌شود پهنای این نواحی برای راستای x بیش‌تر می‌باشد. طیف قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک سطح خنثی شده در یک بازهٔ انرژی دارای مقادیر منفی است که برای هر دو راستا یکسان است.

هنگامی که قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک منفی می‌شود ماده رفتار فلزی از خود نشان می‌دهد و در مقابل نور فرودی کدر خواهد بود که با از بین رفتن حالت‌های سطحی به واسطهٔ جذب اتم هیدروژن بر روی سطح و پیدایش ماهیت نیم‌رسانایی در سطح خنثی شده، این بازهٔ انرژی کاهش می‌یابد. ثابت دی‌الکتریک استاتیک بعد از خنثی سازی سطح با پایانهٔ SbSr برای راستاهای x و z به ترتیب ۳/۹۰ و ۳/۱۶ محاسبه شد.

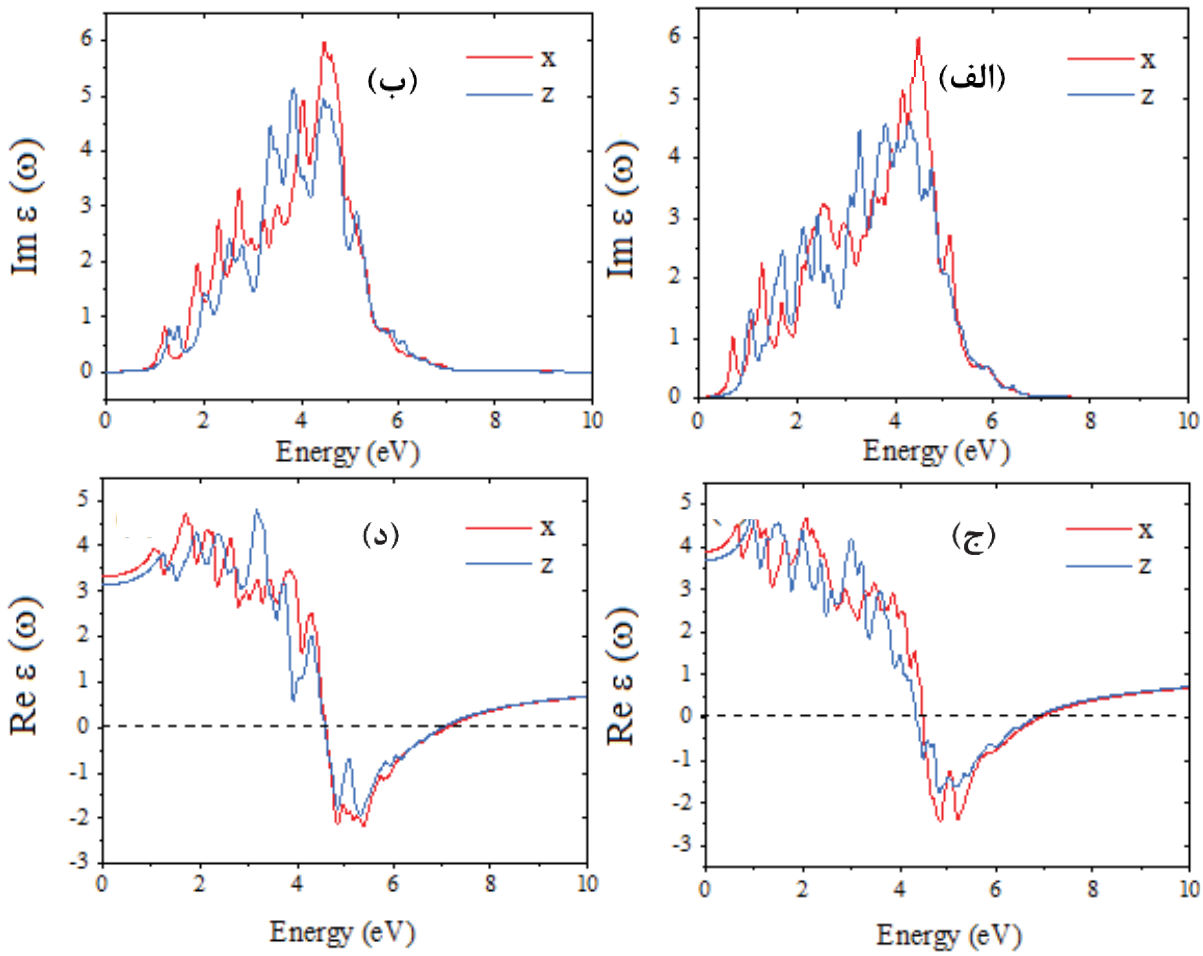
از شکل‌های ۷ الف و ۷ ب نیز مشاهده می‌شود که همان‌گونه انتظار می‌رود گاف اپتیکی با خنثی شدن سطح افزایش می‌یابد. گاف اپتیکی محاسبه شده قبل و بعد از خنثی کردن سطح به ترتیب به صورت ۰/۴۶۶ و ۰/۹۱۶ الکترون ولت در راستای x و ۰/۶۷۶ و ۱/۰۲۱ الکترون ولت در راستای z به دست آمد. مشاهده می‌شود در هر دو حالت گاف اپتیکی راستای z بزرگ‌تر از راستای x است. هم‌چنین مشاهده می‌شود در انرژی‌های بالا بخش موهومی تابع دی‌الکتریک قبل و بعد از خنثی‌سازی سطح رفتار تقریباً مشابهی دارد. شکل‌های ۷ ج و ۷ د بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک را نشان می‌دهند. همان گونه که از شکل پیداست ثابت دی‌الکتریک استاتیک سطح با پایانهٔ NSr_2 بعد از خنثی شدن سطح در هر دو راستا کاهش پیدا می‌کند. ثابت دی‌الکتریک استاتیک قبل و بعد از خنثی‌کردن سطح به ترتیب به صورت ۴/۳۳۸ و ۳/۷۰۳ در راستای x و ۳/۹۱۲ و ۳/۴۳۱ در راستای z است. در هر دو حالت پایانهٔ NSr_2 ثابت دی‌الکتریک استاتیک در راستای x بزرگ‌تر از راستای z می‌باشد. هم چنین مشاهده می‌شود پهنای بازهٔ انرژی که در آن بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک دارای مقادیر منفی است در راستای z بیش‌تر از راستای x است که با خنثی کردن سطح برای هر دو راستا برابر می‌شود.

۴- نتیجه‌گیری

محاسبات در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و با استفاده از روش شبه پتانسیل بر پایهٔ امواج تخت انجام شد. ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی سطح ترکیب $SbNSr_3$ در راستای [۰۰۱] بلور و اثر خنثی کردن سطح بر آن برای دو پایانهٔ SbSr و NSr_2 بررسی شد. با توجه به این که در بین تقریب‌های LDA، GGA و تابعی هیبریدی HSE، نتایج محاسبات ساختاری و الکترونی انبوههٔ ترکیب با استفاده از تابعی HSE توافق بسیار خوبی با نتایج تجربی داشت، پتانسیل تبادلی همبستگی در محاسبات سطح با استفاده از تابعی HSE تعیین شد.

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4]



شکل ۷- (الف) بخش موهومی تابع دی‌الکتریک سطح خنثی نشده، (ب) خنثی شده ،(ج) بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک سطح خنثی نشده، و (د) خنثی شده با پایانهٔ NSr_2

محاسبات سطح با در نظرگرفتن ابرسلول‌های تتراگونال، شرایط مرزی دوره‌ای، میزان خلأ کافی و کمینه نیروهای وارد بر اتم‌ها انجام گرفت. اگرچه حالت انبوهۀ ترکیب دارای ویژگی نیم‌رسانایی است اما نتایج محاسبات الکترونی نشان داد در سطح خنثی نشده به دلیل وجود پیوندهای آویزان در لایۀ سطحی، حالت‌های الکترونی در نزدیکی سطح فرمی مشاهده می‌شود. پیوندهای فعال سطح با جذب اتم‌های هیدروژن بر روی سطح اشباع و حالت‌های الکترونی در نزدیکی سطح فرمی حذف شدند که به باز شدن گاف نواری در هر دو پایانه منجر شد.

گاف نواری محاسبه شده برای پایانه‌های SbSr و NSr_2 به ترتیب ۰٫۸۰۸ و ۱٫۰۲۹ الکترون ولت به دست آمد. بررسی ویژگی‌های اپتیکی سطح $SbNSr_3$ در دو حالت خنثی نشده و خنثی شده نشان داد ساختار سطح به واسطۀ تقارن تتراگونال برای نور فرودی قطبیده در راستای موازی (x) و عمود بر سطح (z) رفتاری ناهمسانگرد دارد. هم‌چنین نتایج نشان داد

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4]

گاف اپتیکی هر دو پایانه با خنثی کردن سطح افزایش می‌یابد که به دلیل از بین رفتن حالت‌های الکترونی سطح می‌باشد. گاف اپتیکی محاسبه شده در هر دو حالت سطح خنثی نشده و خنثی شده در راستای z بزرگ‌تر از راستای x به دست آمد. در توافق با نتایج الکترونی گاف اپتیکی پایانهٔ SbSr در هر دو راستا کم‌تر از پایانهٔ NSr_2 محاسبه شد. هم‌چنین محاسبات نشان داد با خنثی کردن سطح، ثابت دی‌الکتریک استاتیک در هر دو پایانه کاهش می‌یابد و در راستای z کم‌تر از راستای x است.

مراجع

[1] S. V. Krivovichev, "Minerals with antiperovskite structure: a review," Zeitschrift Fur Kristallographie 223, (2008) 109-113.

[2] D. Fruchart and E. F. Bertaut, "Magnetic studies of the metallic perovskite-type compounds of manganese", Journal of the physical society of Japan 44 (1978) 781.

[3] T. He, et al., "Superconductivity in the non-oxide perovskite $MgCNi_3$", Nature 411 (2001) 54.

[4] M. Moakafi, R. Khenata, A. Bouhemadou, F. Semari, A.H. Reshak, and M. Rabah, "Elastic, electronic and optical properties of cubic antiperovskites $SbNCa_3$ and $BiNCa_3$", Computational Materials Science 46 (2009) 1051.

[5] C. Okoye, "First-principles optical calculations of $AsNMg_3$ and $SbNMg_3$", Materials Science and Engineering: B 130 (2006) 101.

[6] V. Antonov and L. Bekenov, "Electronic structure and x-ray magnetic circular dichroism in the Mn_3CuN perovskite", Low Temperature Physics 40 (2014) 641.

[7] Y. Nakamura, K. Takenaka, A. Kishimoto, and H. Takagi, "Mechanical Properties of Metallic Perovskite $Mn_3Cu_{0.5}Ge_{0.5}N$: High-Stiffness Isotropic Negative Thermal Expansion Material", Journal of the American Ceramic Society 92 (2009) 2999.

[8] Y. Zhao and L.L. Daemen, "Superionic conductivity in lithium-rich anti-perovskites", Journal of the American Chemical Society 134 (2012) 15042.

[9] M. Bilal, M. Shafiq, B. Khan, H.R. Aliabad, S.J. Asadabadi, R. Ahmad, I. Ahmad, "Antiperovskite compounds $SbNSr_3$ and $BiNSr_3$: Potential candidates for thermoelectric renewable energy generators", Physics Letters A 379 (2015) 206.

[10] M. Hichour, R. Khenata, D. Rached, M. Hachemaoui, A. Bouhemadou, A.H. Reshak, F. Semari, "FP-APW+ lo study of the elastic, electronic and optical properties for the cubic antiperovskite $ANSr_3$ (A= As, Sb and Bi) under pressure effect", Physica B: Condensed Matter 405 (2010) 1894.

[11] F. Gäbler, M. Kirchner, W. Schnelle, U. Schwarz, M. Schmitt, H. Rosner, R. Niewa, "(Sr_3N) E and (Ba_3N) E (E= Sb, Bi): synthesis, crystal structures, and physical properties", Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie 630 (2004) 2292.

[12] K. Haddadi, A. Bouhemadou, L. Louail, F. Rahal, and S. Maabed, "Prediction study of the structural, elastic and electronic properties of $ANSr_3$ (A= As, Sb and Bi)", Computational Materials Science 46 (2009) 881.

[13] H. Salehi, N. Mousavinezhad, P. Amiri, "Ab-initio calculation of the structural, electronic, optical and transport properties of $SbNSr_3$ ternary nitride compound", Computational Condensed Matter 21 (2019) e00395.

[14] I. Ullah, G. Murtaza, R. Khenata, A. Mahmood, M. Muzzamil, N. Amin, M. Saleh, "Structural and Optoelectronic Properties of X_3 ZN (X= Ca, Sr, Ba; Z= As, Sb, Bi) Anti-Perovskite Compounds", Journal of Electronic Materials 45 (2016) 3059.

[15] H. Deng, S. Li, J. Li, S. Wei, "Effect of hydrogen passivation on the electronic structure of ionic semiconductor nanostructures", Physical Review B 85, (2012) 195328.

[16] W. Wang, G. Lee, M. Huang, R. M. Wallace, K. Cho, "First-principles study of GaAs (001)-β 2 (2 × 4) surface oxidation and passivation with H, Cl, S, F, and GaO", Journal of Applied Physics 107, (2010) 103720.

[17] P. Amiri, S. J. Hashemifar, H. Akbarzadeh, "Density functional study of narrow cubic MnSe nanowires: Role of MnSe chains",

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4]

Physical Review B 83 (2011) 165424.

[18] M. Wu, B. Xu, W. Luo, B. Sun, J. Shi, C. Ouyang, "First-principles study on the structural, electronic, and Li-ion mobility properties of anti-perovskite superionic conductor Li_3OCl (100) surface", Applied Surface Science (2020).

[19] Wang, K. Li, N.G. Zhou, "Structural, electronic properties and stability of $AlCMn_3$(111) surfaces by first principles calculations", Applied Surface Science 289 (2014) 351– 357.

[20] D. Cherrad, "First-principles studies on (001) surface electronic bonding and magnetic properties of $ZnCMn_3$ and $ZnNMn_3$ intermetallic antiperovskites type compounds", Journal of Alloys and Compounds 586 (2014) 230–238.

[21] N. Mousavinezhad, H. Salehi, P. Amiri, "Investigation of the structural and electronic properties and surface passivation influence on electronic properties of (001) $SbNSr_3$ nano-surfaces: A hybrid DFT study", Journal of Physics and Chemistry of Solids 161 (2022) 110407.

[22] R.I. Eglitis, D. Vanderbilt, "Ab initio calculations of the atomic and electronic structure of $CaTiO_3$ (001) and (011) surfaces", Physical Review B 78 (2008) 155420.

[23] B. Luo, X. Wang, E. Tian, G. Li, L. Li, "Structural and electronic properties of cubic $KNbO_3$ (001) surfaces: a first-principles study", Applied Surface Science 351 (2015) 558–564.

[24] W. Kohn and L.J. Sham, "Self-consistent equations including exchange and correlation effects", Physical review 140 (1965) A1133.

[25] P. Giannozzi, et al., "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials", Journal of physics: Condensed matter 21 (2009) 395502.

[26] A.M. Rappe, K.M. Rabe, E. Kaxiras, and J. Joannopoulos, "Optimized pseudopotentials", Physical Review B 41 (1990) 1227.

[27] D.M. Ceperley and B. Alder, "Ground state of the electron gas by a stochastic method", Physical Review Letters 45 (1980) 566.

[28] J.P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Generalized gradient approximation made simple", Physical review letters 77 (1996) 3865.

[29] J. Heyd, G.E. Scuseria, "Assessment and validation of a screened Coulomb hybrid density functional", Journal of Chemical Physics 120 (2004) 7274.

[30] A. Arbuznikov, "Hybrid exchange correlation functionals and potentials: Concept elaboration", Journal of Structural Chemistry 48 (2007) S1.

[31] J. Heyd, G.E. Scuseria, and M. Ernzerhof, "Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential", The Journal of chemical physics 118 (2003) 8207.

[32] H.J. Monkhorst and J.D. Pack, "Special points for Brillouin-zone integrations", Physical review B 13 (1976) 5188.

[33] F. Wang, K. Li, and N. Zhou, "Structural, electronic properties and stability of $AlCMn_3$ (1 1 1) surfaces by first-principles calculations", Applied Surface Science 289 (2014) 351.

[34] F. W. de Wette, W. Kress, and U. Schröder., "Relaxation of the rocksalt (001) surface: Alkali halides, MgO, and PbS", Physical Review B 32, (1985) 414.

[35] D. R. Alfonso, J. A. Snyder, J. E. Jaffe, A. C. Hess, M. Gutowski, "Opposite rumpling of the MgO and CaO (100) surfaces: A density-functional theory study", Physical Review B 62, (2000) 8318.

[36] M. Bilal, S. M. Alay-e-Abbas, A. Laref, M. Noor, N. Amin, "First-principles investigations of structural, energetic and electronic properties of (001) surfaces of cubic inverse-perovskite Sr_3SnO", Journal of Physics and Chemistry of Solids 136 (2020) 109191.

[37] R.I. Eglitis, D. Vanderbilt, "Ab initio calculations of $BaTiO_3$ and $PbTiO_3$ (001) and (011) surface structures", Physical Review B 76 (2007) 155439.

[38] K. Yang, Y. He, C. Liang, X. Sun, H. Zhong, L. Yao, J. Zhong, "Thickness effect on the structural, electronic and energetic properties of the cubic $KMgF_3$ (0 0 1) surfaces: A first-principles study", Applied Surface Science, 506 (2020) 2-6.

[39] Mark Fox, "Optical properties of solids", Oxford University Press (2001).

[40] L. Li, S. Lu, J. Pan, Z. Qin, Y. Wang, Y. Wang, G. Cao, S. Du, H. Gao, "Buckled germanene formation on Pt(111)", Advanced Materials. 26 (2014) 4820-4824.

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4]

Iranian Journal of
Ceramic Science & Engineering
Vol. 11, No. 1, 2022

Ab Initio Study of the Surface Passivation Influence on Electronic and Optical Properties of (001) $Sbnsr_3$ Anti-Perovskite Surface

H. Salehi, N.Mousavinezhad, P. Amiri

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

*** salehi_h@scu.ac.ir**

Abstract: In this research, the electronic and optical properties of the (001) surface of $SbNSr_3$ with SbSr and NSr_2 terminations and surface passivation impact on electronic properties were investigated. The calculations were done within density functional theory and using pseudo-potential method. HSE hybrid functional was used for exchange correlation potential. The surface calculations were performed taking into account tetragonal supercell, periodic boundary conditions, sufficient vacuum and minimum force on atoms. Results of the electronic calculations show that despite the semiconducting nature of the $SbNSr_3$ bulk, the electron states were observed near the Fermi level. The active surface bonding was saturated through adsorbing hydrogen atoms on the surface. Due to this, the electron states were removed and opened the band gap in both terminations. The calculated band gap of the SbSr and NSr_2 terminations were calculated 0.808 and 1.029 eV, respectively. The optical properties of the $SbNSr_3$ surface were investigated without and with the surface passivation. The results showed that in both terminations, the surface passivation which causes the elimination of surface electron states, leads to an increase in the optical gap. The calculated optical gap in both bare and passivated surfaces for the polarized incident light in the direction perpendicular to the surface was obtained greater than in the direction parallel to the surface. The optical gap of the SbSr termination was calculated to be less than that of the NSr_2 termination in agreement with the results of the electronic calculations. It was also observed that the static dielectric constant at both terminations decreases with surface passivation and the static dielectric constant in the z-direction is less than in the x- direction.

Keywords: DFT, $SbNSr_3$, Surface structure, Surface passivation, Electronic properties, Optical properties.

[Downloaded from ijcse.ir on 2026-11-04]

[DOR: 20.1001.1.23222352.1400.10.0.11.4]