

ORIGINAL ARTICLE

Investigation of the Structural and Optical Properties of Ag_2SiS_3 Chalcogenide Semiconductor Compounds

Maryam Azizi¹, Hamdollah Salehi^{2*}

1 Ph.D. Student, Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.

2 Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.

Correspondence

Hamdollah Salehi

Email: salehi_h@scu.ac.ir

How to cite

Azizi, M. Salehi, H. (2024). Investigation of the Structural and Optical Properties of Ag_2SiS_3 Chalcogenide Semiconductor Compounds, Optoelectronic, 6(3), 17-28.

ABSTRACT

In this study, the structural and optical properties such as refractive index, extinction coefficient, absorption coefficient, reflection coefficient, and optical conductivity of the monoclinic crystalline structure compound Ag_2SiS_3 are investigated using theoretical calculations. The LDA approximation with the pseudo-potential method, and from the density of states diagram, the value of the band gap are 1.2 eV, 1.4 eV, and 2.37 eV, in the LDA and LDA+U and HSE approximations, respectively, were obtained with norm conserving pseudo-potential. Also, the calculated bulk modulus value were 81 GPa in LDA, 79.4 GPa in LDA+U, and 76.5 GPa in HSE approximation. Finally, the optical properties such as refractive index, extinction coefficient, absorption coefficient, reflection coefficient and optical conductivity were examined. From the examination of the optical properties, the optical gap value obtained from the absorption coefficient is in good agreement with the band gap value, which is Optical coefficients are different in different directions due to the anisotropy of the structure. The value of the optical gap that read from the absorption coefficient diagram in the approximation of LDA, LDA+U and HSE were 1.27 eV, 1.4 eV and 2.37 eV, respectively. Based on the optical investigations, this compound is useful in solar cells and optoelectronic materials.

KEYWORDS

DFT, Chalcogenide, Density of States, Bulk Modul, Optical Properties.

فصلنامه علمی
اپتوالکترونیک

«مقاله پژوهشی»

بررسی خواص ساختاری و نوری ترکیب نیم رسانای کلکوژنیدی Ag_2SiS_3 مریم عزیزی¹، حمدالله صالحی^{2*}

چکیده

در این کار با استفاده از محاسبات نظری به بررسی خواص ساختاری و نوری مانند ضریب شکست، ضریب خاموشی، ضریب جذب، ضریب بازتاب و رسانندگی نوری ترکیب کلکوژنیدی Ag_2SiS_3 که دارای ساختار کریستالی مونوکلینیک است، پرداخته می‌شود. در این کار از نظریه تابعی چگالی در تقریب LDA با روش شبه پتانسیل استفاده شده است که از نمودار چگالی حالت‌ها مقدار گاف نواری را $1/2 \text{ eV}$ و $1/4 \text{ eV}$ به ترتیب در تقریب LDA+U، LDA و HSE با شبه پتانسیل بار پایسته به دست آمد. همچنین مقدار مدول حجمی نیز به ترتیب 81 GPa در LDA و $79/4 \text{ GPa}$ در LDA+U و $76/5 \text{ GPa}$ در HSE به دست آمده است. در نهایت به بررسی خواص نوری مانند ضریب شکست، ضریب خاموشی، ضریب جذب، ضریب بازتاب و رسانندگی نوری پرداخته شد که از بررسی خواص نوری مقدار گاف نواری که از ضریب جذب به دست می‌آید با مقدار گاف نواری انطباق خوبی دارد که مقدار ضرایب نوری در راستاهای مختلف به دلیل ناهمسان گرد بودن ساختار، متفاوت است. مقدار گاف نواری که از نمودار ضریب جذب خوانده شد در تقریب LDA+U، LDA و HSE به ترتیب $1/27 \text{ eV}$ ، $1/4 \text{ eV}$ و $2/37 \text{ eV}$ به دست آمده از بررسی‌های نوری مشخص گردید این ترکیب دارای قابلیت خوبی برای کاربرد در سلول خورشیدی و مواد اپتوالکترونیک است.

واژه‌های کلیدی

DFT، چگالی حالت‌ها، مدول حجمی، کلکوژنید، خواص نوری.

1 دانشجوی دکتری، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.
2. استاد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.

نویسنده مسئول:

حمدالله صالحی

رایانامه: salehi_h@scu.ac.ir

استناد به این مقاله:

مریم عزیزی، حمدالله صالحی (1403). بررسی خواص ساختاری و نوری ترکیب نیم رسانای کلکوژنیدی Ag_2SiS_3 . فصلنامه علمی اپتوالکترونیک، 6(3)، 28-17.<https://jphys.journals.pnu.ac.ir>

مقدمه

تحرك پذیری بالا، جالب توجه است و دارای رسانندگی یونی که موجب کاربرد آن در الکترولیت جامد می شود، است. با توجه به کاربردهای مواد کلکوژنیدی که گفته شد، در این پژوهش به بررسی خواص ساختاری و نوری ترکیب کلکوژنیدی Ag_2SiS_3 با استفاده از نظریه تابعی چگالی پرداخته می شود. خواص نوری مانند ضریب جذب، ضریب بازتاب و رسانندگی نوری برای نخستین بار در این مطالعه بررسی شده است.

روش کار

از نظریه تابعی چگالی DFT در بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو برای انجام محاسبات خودسازگار استفاده شده است [20]. از روش امواج تخت (پهבודیافته) با بسط توابع موج الکترون ظرفیت برای حل معادلات کوهن - شم خودسازگار، استفاده و از تقریب چگالی موضعی (LDA) و شبه پتانسیل بار پایسته به منظور در نظر گرفتن تابعی تبدلی - همبستگی (XC) استفاده شد. ویژگی های مواد به خصوصیات الکترونی آن وابسته است به این صورت که تفاوت ناچیز در ساختار الکترونی مواد منجر به تغییرات بزرگ در این ویژگی ها می گردد، به این منظور در این مطالعه برای بررسی خواص ساختاری و نوری ترکیب Ag_2SiS_3 از تقریب LDA، LDA+U و تابع هیبریدی HSE استفاده می شود. یک شبکه متراکم از نقاط K که به طور یکنواخت در منطقه بریلون توزیع شده باشد، برای محاسبه تابع دی الکتریک، ثابت های نوری و چگالی حالت ها، مورد نیاز است. مسیر پرتقارن (Z-Γ-Y-A-B-D-E-C) در اولین منطقه بریلون، برای ادغام منطقه بریلون بالک با استفاده از مش بندی مונخوست - پک پس از بهینه سازی تعداد نقاط، $6 \times 6 \times 6$ نقطه K برای انجام محاسبات ساختار نواری انتخاب شده است. انرژی قطع Ry 55 برای بسط تابع موج تخت پس از انجام تست های همگرایی کافی انتخاب شد که در شکل (1) نمودار بهینه شده انرژی قطع و kpoint آورده شده است. برای دستیابی به حداقل انرژی در ترکیب Ag_2SiS_3 که انرژی حالت پایه است، به واهلش کردن موقعیت های اتمی دقیق تا نیروهای کمتر از 1 mRy/Bohr پرداخته شد.

ترکیبات شیمیایی که از ترکیب حداقل یک آنیون کلکوژن (عناصر گروه 16 جدول تناوبی) و حداقل یک عنصر الکتروشیمیایی دیگر تشکیل شده باشند کلکوژنید¹ نامیده می شوند [1]. کلکوژنیدها دارای کاربردهای وسیعی از جمله حسگرهای شیمیایی، حسگرهای یونی، آشکارسازهای نوری و رایانه هستند [2]. همچنین به دلیل دارا بودن عملکرد عالی برای کاربردهای فوتوکاتالیستی، فوتولومینسانس، مغناطیسی، اپتیک غیرخطی، عایق های توپولوژیکی و واکنش نوری بسیار مورد توجه قرار گرفته اند [3, 4]. تعداد زیادی از کلکوژنیدها جزء مواد نیم رسانا هستند که دارای ساختار کریستالی و تعداد اتم متفاوت هستند که با توجه به ساختار بلوری خود خواص متفاوتی دارند [5-9]. تغییر دما، وجود ناخالصی و تحریک نوری می تواند باعث تغییر در رسانایی در مواد نیم رسانا شود که این تنوع در خصوصیات الکتریکی باعث انتخاب این مواد برای بررسی در دستگاه های الکترونیکی می شود. ابتدا در ترانزیستورها و دیودها از نیم رساناهای بر پایه ژرمانیوم به طور گسترده استفاده می شد، اکنون در ترانزیستورها، یکسوکننده ها و مدارهای مجتمع از سیلیکون استفاده می شود. گاف نواری انرژی مهم ترین وجه تمایز میان نیم رساناها، فلزات و عایق ها بوده که این پارامتر تعیین کننده میزان طول موج نوری است که توسط نیم رسانا جذب یا ساطع می شود.

در این پژوهش به بررسی ترکیب کلکوژنیدی Ag_2SiS_3 با فرمول شیمیایی کلی $VI=S, Se, Te, IV=Si, Ge, Sn$ و $I=Cu, Ag$ و $I_2=IV-VI_3$ به منظور بررسی خواص ساختاری و نوری پرداخته می شود [10]. تاکنون ترکیبات کلکوژنیدی سه تایی فراوانی شناخته شده اند که با توجه به ساختار کریستالی و گاف نواری که دارند، دارای خاصیت فلزی، نیم رسانایی و عایق هستند. کلکوژنیدهای سه تایی دارای کاربردهای فراوانی مانند استفاده به عنوان الکتروود در باتری های لیتیومی، ماده امیدوارکننده برای کاربرد در سلول خورشیدی (به دلیل دوستدار محیط زیست بودن، کم هزینه و غیر سمی بودن)، موجرهای فیلم نازک، دیودهای ساطع نور، فوتوکاتالیستی، الکترولیت جامد و فوتو ولتاییک هستند [4, 11-18]. مطالعات انجام شده روی ترکیب Ag_2SiS_3 نشان می دهد که این ترکیب دارای پتانسیل برای کاربرد در فوتوکاتالیستی، فوتوولتاییک و سلول خورشیدی هستند [19]. همچنین ترکیب Ag_2SiS_3 به دلیل داشتن اتم نقره و

می‌شود [21]:

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2}\omega(\sqrt{\varepsilon_1(\omega)^2 + \varepsilon_2(\omega)^2} - \varepsilon_1(\omega))^{\frac{1}{2}} \quad (4)$$

تابع دی‌الکتریک با دیگر پارامترهای نوری مهم مرتبط می‌شود و رسانش نوری $\sigma(\omega)$ از طریق رابطه 5 بیان می‌شود [21]:

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_0 + \frac{I\sigma(\omega)}{\omega} \quad (5)$$

ضریب شکست $N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$ خواص انتشار موج الکترومغناطیسی را در ماده با $n(\omega)$ ضریب شکست و ضریب خاموشی $k(\omega)$ که به بیانی به $\varepsilon_1(\omega)$ و $\varepsilon_2(\omega)$ بستگی دارد، توصیف می‌کند [21]:

$$n(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\varepsilon_1(\omega)^2 + \varepsilon_2(\omega)^2} + \varepsilon_1(\omega)) \quad (6)$$

$$k(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{\varepsilon_1(\omega)^2 + \varepsilon_2(\omega)^2} - \varepsilon_1(\omega)) \quad (7)$$

ضریب شکست $n(\omega)$ شفافیت یک محیط را مشخص می‌کند، یعنی سرعت حرکت نور در یک محیط معین، درحالی‌که ضریب خاموشی $k(\omega)$ درجه میرایی موج نور ورودی را بیان می‌کند.

بحث و نتایج

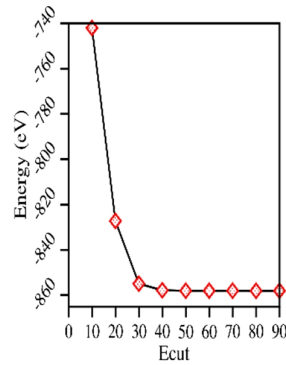
الف: ویژگی ساختاری

سلول واحد ترکیب Ag_2SiS_3 در شکل (2) که دارای 24 اتم است نشان داده شده است، این ترکیب دارای ساختار کریستالی مونوکلینیک با گروه فضایی P_{21}/C است دارای ثابت شبکه $a = \text{\AA}68/6$ ، $b = \text{\AA}66/6$ ، $c = \text{\AA}17/13$ و $\beta = 118/66^\circ$ ، ابتدا به بهینه‌سازی پارامترهای شبکه پرداخته شد که در جدول (1) مقادیر بهینه شده برای این ترکیب آورده شده است که در توافق خوبی با مقالات دیگر و تأیید کننده صحت بهینه‌سازی است [10، 22]. پارامتر مهمی که باید در محاسبات استفاده شود ثابت‌های شبکه هستند که برای محاسبه ثابت شبکه، انرژی حالت پایه بلور را محاسبه و در حوالی حجم تعادلی وردش می‌دهند. برازش نقاط به‌دست آمده از طریق معادله حالت مورناگون، تغییرات انرژی را برحسب حجم نتیجه می‌دهد [23، 24].

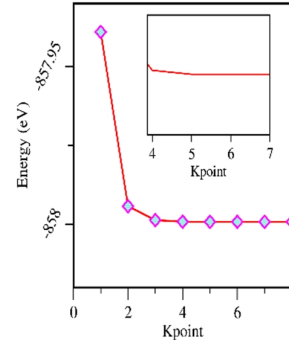
$$E(V) = E_0 + \frac{BV_0}{B'} \left[\frac{V}{V_0} + \frac{(V/V_0)^{1-B'} - B'}{B' - 1} \right] \quad (8)$$

در این مطالعه B ، $B\Phi$ ، V_0 و E_0 به‌ترتیب مدول حجمی و مشتق مدول حجمی، حجم تعادلی و انرژی حالت پایه در فشار و دمای صفر است. شکل (3) نمودار تغییرات انرژی برحسب حجم را برای این ترکیب نشان می‌دهد که مقدار حجم بهینه شده در جدول (1) آورده شد. به‌دنبال محاسبه ثابت شبکه، مدول حجمی و مشتق آن، تراکم‌پذیری در فشار صفر

الف



ب



شکل 1. منحنی مقادیر بهینه شده، الف) kpoint

برحسب انرژی و ب) انرژی قطع برحسب انرژی

خواص نوری در میان خصوصیات فیزیکی مواد، مرتبط با برهمکنش نور با الکترون‌های ظرفیت ماده است. پارامترهایی مانند تابع دی‌الکتریک $\varepsilon(\omega)$ ، ضریب شکست $N(\omega)$ ، ضریب بازتاب $R(\omega)$ ، رسانندگی نوری $\sigma(\omega)$ و ضریب جذب $\alpha(\omega)$ در مورد رفتار محیط مبتنی بر ترکیب، بر پایه انرژی فوتون‌های فرودی اطلاعاتی ارائه می‌دهد. تابع دی‌الکتریک به صورت $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ نشان داده می‌شود، به‌عنوان بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک، اطلاعاتی در مورد انرژی ذخیره شده در محیط ماده را فراهم می‌کند و قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک $\varepsilon_2(\omega)$ ، تحرکات بین حالت‌های اشغال شده و اشغال نشده را توصیف می‌کند [21]:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (1)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_1(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (2)$$

پارامتر مهم دیگری که بخشی از انرژی منعکس شده در سطح یک محیط را توصیف می‌کند ضریب بازتاب $R(\omega)$ است. فرمول فرنل برای برخورد نرمال، با در نظر گرفتن جهت سطح کریستال موازی با محور نوری با استفاده از رابطه 3 تعریف می‌شود [21]:

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon(\omega)} + 1} \right|^2 \quad (3)$$

از سوی دیگر ضریب جذب تعیین‌کننده این موضوع است که نور دارای یک طول موج خاص، تا چه اندازه می‌تواند قبل از جذب به درون ماده نفوذ کند. ضریب جذب با رابطه 4 بیان

جدول 1. مقادیر بهینه سازی شده پارامترهای شبکه و مدول حجمی و

مقادیر محاسبه شده	مشتق آن در ترکیب Ag_2SiS_3			کار دیگران [19, 10]
	LDA	LDA+U	HSE	
a(Å)	6/58	6/55	6/54	6/67
درصد خطا	1/41	1/79	1/96	—
b(Å)	6/53	6/55	6/41	6/66
درصد خطا	1/96	1/61	3/36	—
c(Å)	13/26	13/18	13/22	13/17
درصد خطا	0/665	0/02	0/32	—
a=g	90	90	90	90
b	118/68	118/10	118/68	118/66
درصد خطا	0/02	0/47	0/02	—
V (Å ³)	498/91	501/59	506/67	513/37
درصد خطا	2/82	2/29	1/3	—
B(GPa)	81/0	79/5	76/5	—
B ₀	4/7	4/69	4/73	—

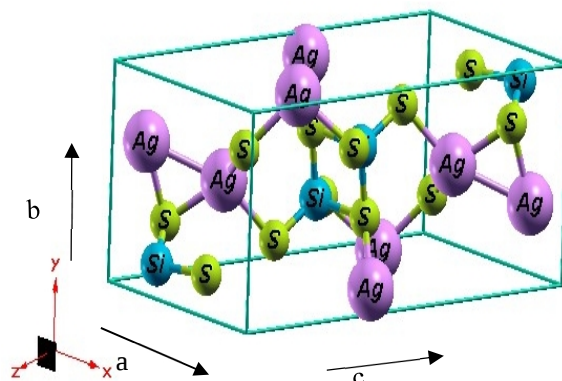
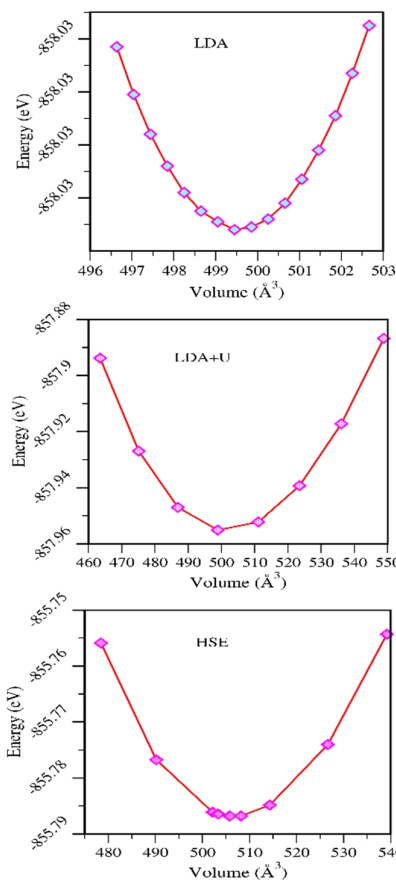
برای بررسی عمیق ساختار نواری الکترونی با استفاده از شبه پتانسیل بار پایسته در تقریب LDA، LDA+U و تابع هیبریدی HSE، چگالی حالت های کلی¹ (TDOS) و چگالی حالت های جزئی² (PDOS) محاسبه می شود. شکل (4) چگالی حالت های کلی ترکیب Ag_2SiS_3 را در محدوده انرژی 6 eV - 10 نشان می دهد. همان طور که در شکل 4 مشخص گردیده مقدار گاف نواری در چگالی حالت کلی با کار دیگران کاملاً مطابقت دارد [19, 10].

برای دریافت بینش بیشتر در مورد خواص الکترونی مواد، چگالی حالت های جزئی، در محدوده انرژی 6 eV - 10 - رسم شده که در شکل (4) نشان داده شده است. در تمام مجموعه محاسبات سطح فرمی، روی نقطه صفر تنظیم شده اند. با چگالی حالت های جزئی، سهم اتمی در چگالی حالت ها و وجود هیبریداسیون بین اوربیتال ها به راحتی قابل درک است. از شکل (4- ب) می توان دید که چگالی حالت های جزئی به سه طیف نوار انرژی (7 eV - 8 eV، -0/3 eV - 6 eV و 5 eV - 1) تقسیم می شوند که نوارهای انرژی در محدوده 0/3 eV - 10 - نوار ظرفیت را تشکیل می دهند که مربوط به هیبریداسیون قوی بین اوربیتال های d اتم Ag و p اتم S است، از این رو ماهیت ترکیب Ag_2SiS_3 به دلیل هیبریداسیون قوی بین نوارهای ظرفیت و نوارهای رسانش کووالانسی بوده و نوارهای انرژی در محدوده 5 eV - 1 نوار رسانش را تشکیل می دهند. نوارهای

به دست می آید، که در جدول (1) آورده شد از این جدول مشاهده می شود که مدول حجمی از طریق رابطه 9:

$$B = -V \frac{dP}{dV} \quad (3)$$

به مقدار ثابت شبکه وابستگی دارد، هرچه مقدار ثابت شبکه بزرگ تر باشد مدول حجمی کمتر و هر چه مدول حجمی بزرگ تر باشد، مقدار طول پیوند اتم ها کوچک تر و بالعکس هر چه مقدار مدول حجمی بیشتر باشد بلور سخت تر بوده و دارای تراکم پذیری کمتری است و انتظار می رود اتم ها در فاصله کمتری از هم قرار داشته باشند.

**شکل 2.** ساختار سلول واحد ترکیب Ag_2SiS_3 **شکل 3.** منحنی انرژی کل بر حسب حجم سلول واحد

1 Total Density of States
2 Partial Density of States

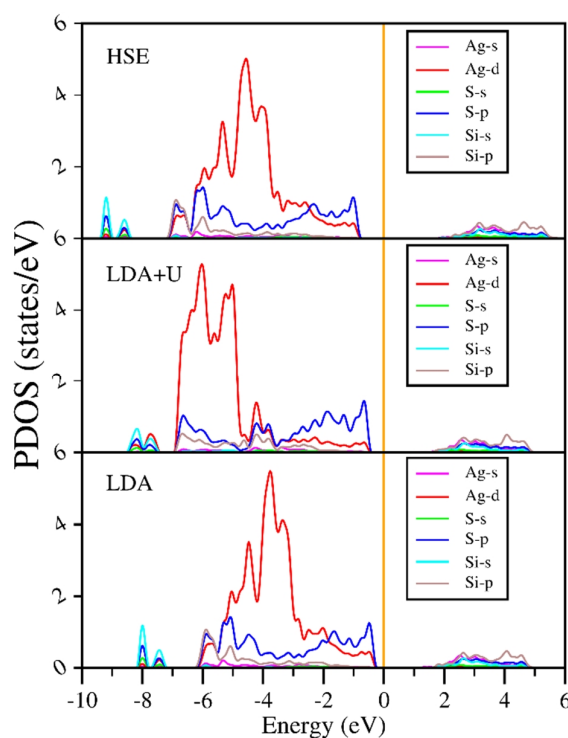
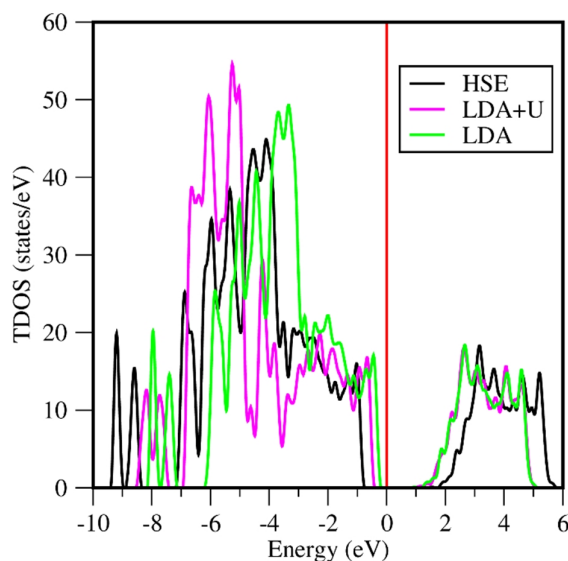
و اوربیتال s اتم S هستند. همچنین سهم اوربیتالی در تشکیل نوارهای ظرفیت مربوط به اوربیتالهای d اتم Ag، p اتم Si و p اتم S در انرژیهای پایین است و نوار بالای سطح فرمی مربوط به اوربیتالهای s اتم Ag، p اتم S و p اتم Si است که تشکیل نوار رسانش را در بازه انرژی 5 - 1 eV نشان می‌دهند. از شکل (4) در چگالی حالت‌های جزئی می‌توان برداشت کرد که پایین‌ترین انرژی در نوار رسانش مربوط به اوربیتال p اتم Si و بالاترین انرژی در نوار ظرفیت مربوط به اوربیتالهای d اتم Ag و p اتم S است که اختلاف انرژی این اوربیتال‌ها عامل اصلی تشکیل گاف نواری هستند. در مجموع انرژیهای پایین تشکیل نوار ظرفیت و انرژیهای بالای سطح فرمی تشکیل نوار رسانش را می‌دهند.

ب: خواص نوری

در قرن حاضر، فناوری با سرعت بالایی در حال پیشرفت است که این پیشرفت‌ها مبتنی بر توسعه و استفاده از مواد کاربردی جدید است. مواد کاربردی به دسته‌ای از مواد با خواص الکتریکی، مغناطیسی، نوری، حرارتی، شیمیایی و بیولوژیکی اشاره دارد. با توسعه انرژی خورشیدی، لیزر، ارتباطات و سایر فناوری‌ها، مواد کاربردی با خواص فوتوالکتریک توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده‌اند، چنین موادی با عملکردهای نوری و الکتریکی معین به‌عنوان مواد کاربردی در اپتوالکترونیک شناخته می‌شوند [25]. در حال حاضر، انرژی خورشیدی راه‌حلی برای حل مشکلات انرژی است که می‌توان آن را به انرژی الکتریکی، انرژی شیمیایی، انرژی زیستی و غیره تبدیل کرد، بنابراین مواد کاربردی فوتوالکتریک در سلول‌های خورشیدی و فوتوکاتالیست‌ها با خواص فوتوالکتریک به کار می‌روند از سوی دیگر، در زمینه‌های دیگر مانند آشکارسازهای اپتوالکترونیک، حسگرهای نوری و غیره، نیاز مبرمی به مواد کاربردی فوتوالکتریک با پاسخ فوتوالکتریک خوب وجود دارد [26].

برای کاربردهای اپتوالکترونیک، خواص نوری مواد به درک برهمکنش‌های الکترونی فوتون‌ها با فونون‌های درون ماده به‌صورت میکروسکوپی کمک می‌کند، فوتون‌ها را هنگامی می‌توان به‌خوبی مطالعه کرد که با میدان الکتریکی که مسئول انتقال الکترون از حالت‌های انرژی اشغال شده به حالت‌های انرژی غیراشغالی هستند، برهمکنش کنند. در جامدات، پاسخ الکترون‌ها توسط تابع دی‌الکتریک $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ بررسی می‌شود [21] که در آن $\epsilon_2(\omega)$ بخش موهومی و $\epsilon_1(\omega)$ بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک هستند. بخش حقیقی ثابت دی‌الکتریک مسئول قطبش و جذب نور در داخل ماده تحت

انرژی زیر سطح فرمی از 0/0 eV - 10، عمدتاً توسط اوربیتالهای s اتم Si، d اتم Ag و اوربیتالهای p و s اتم S ایجاد می‌شوند، بلندترین قله تیز در انرژی 3/36 eV - در LDA، 5/225 eV - در LDA+U و 4/16 eV - در تابع هیبریدی HSE در نوار ظرفیت مشاهده می‌شود که صرفاً به دلیل وجود اوربیتال d اتم Ag تشکیل شده است. در انرژیهای بالاتر (7 - 9/2 eV) در انتهای نمودار چگالی حالت‌های جزئی قله‌های تیز مربوط به اوربیتال s اتم Si، اوربیتال p اتم S

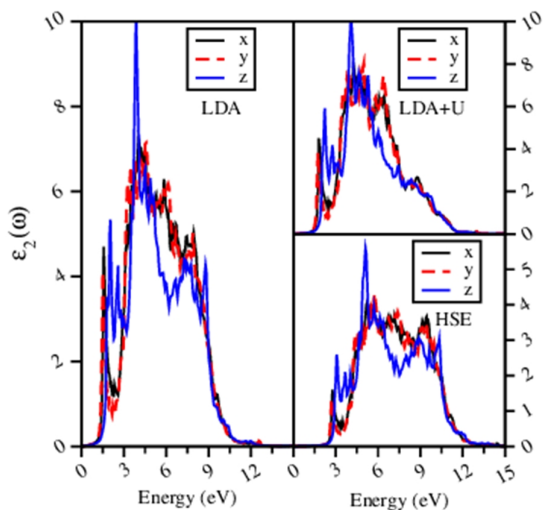


شکل 4. نمودار الف) چگالی حالت‌های کلی، ب) چگالی حالت‌های جزئی ترکیب Ag_2SiS_3 .

این لبه جذب آستانه انتقال الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش است که مربوط به نقطه Γ و E است؛ که متناسب با گاف نواری بوده و به آن گاف نوری گفته می‌شود [10, 19]. چنین انتقال‌های الکترونی از اوربیتال d اتم Ag و اوربیتال p اتم S در نوار ظرفیت به اوربیتال s اتم Ag و اوربیتال‌های p, s اتم Si در نوار رسانش است. در محدوده انرژی فوتولتاییک یعنی $0/0 - 4$ eV همان‌طور که از شکل (5) مشاهده می‌شود که در راستای x قله‌ها نسبت به راستای y بلندتر و همچنین قله‌ها در راستای z از راستای y بلندتر هستند. در شکل (5) لبه جذب معرف گاف نوری بوده که به دلیل ساختار مونوکلینیکی ترکیب مقدار این گاف در راستاهای مختلف متفاوت است؛ که ناشی از متفاوت بودن ثابت‌های شبکه است، قله‌ها نشان‌دهنده گذارهای نوری‌اند که مقدار انرژی در اولین قله میزان انرژی لازم برای عبور از گاف نوری و مقدار انرژی در قله‌های بعدی، انرژی لازم برای گذارهای احتمالی بعدی است. از شکل (5) کاملاً مشخص می‌شود که هر چقدر گاف نواری بزرگ‌تر باشد برای گذار نیاز به انرژی بیشتری داریم، همچنین از شکل (5) مشاهده می‌شود که دامنه بخش موهمومی تابع دی‌الکتریک در HSE کوتاه‌تر از LDA و LDA+U است؛ که به دلیل اختلاف گاف نواری است.

جدول 2. مقادیر گاف نوری بخش موهمومی تابع

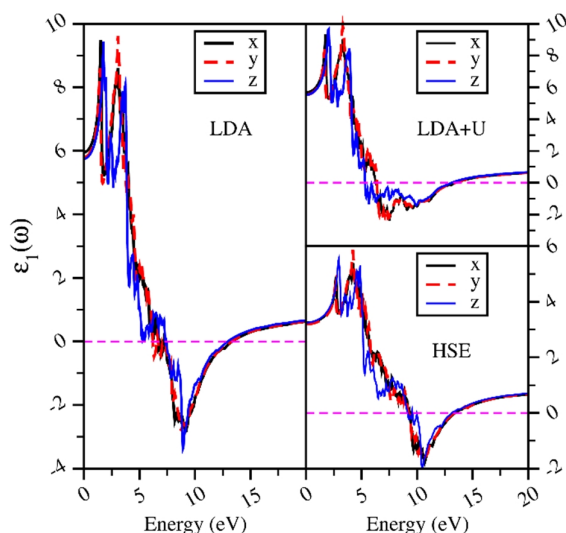
دی‌الکتریک ترکیب Ag_2SiS_3				
$\epsilon_2(\omega)$	گاف نوری	راستا		
		x	y	z
LDA	Energy(eV)	1/2	1/2	1/4
LDA+U	Energy(eV)	1/4	1/3	1/7
HSE	Energy(eV)	2/3	2/3	2/4

شکل 5. بخش موهمومی تابع دی‌الکتریک ترکیب Ag_2SiS_3

تأثیر میدان الکتریکی خارجی است. جذب فوتون در نهایت منجر به انتقال بین نواری و همچنین انتقال درون نواری در داخل ماده می‌شود که می‌تواند به‌طور گسترده به‌عنوان انتقال نواری مستقیم و غیرمستقیم طبقه‌بندی شود. همچنین، در انتقال‌های بین نواری غیرمستقیم، فونون‌ها برای حفظ انتقال انرژی منتشر می‌شوند، اما چنین فونون‌هایی به سختی بر بخش موهمومی ثابت دی‌الکتریک تأثیر می‌گذارند و از این رو می‌توان سهم آن‌ها را به‌راحتی نادیده گرفت. با کمک عناصر ماتریس تکانه بین توابع موج اشغال شده و اشغال نشده هنگامی که در منطقه کامل بریلونن ادغام می‌شوند، می‌توان سهم مستقیم بین نواری را با بخش موهمومی تابع دی‌الکتریک $\epsilon_2(\omega)$ محاسبه کرد [21].

برای اطمینان از مناسب بودن ترکیب Ag_2SiS_3 برای کاربردهای سلول خورشیدی خواص نوری آن مطالعه شده است به‌منظور محاسبه خواص نوری، برهمکنش امواج الکترومغناطیسی با حالت‌های بار داخل ماده تجزیه و تحلیل شد؛ که از تقریب LDA+U، LDA و تابع هیبریدی HSE استفاده شد، چنین فعل و انفعالاتی در داخل ماده منجر به انتقال الکترونی بین نواری و درون نواری، بین نوار انرژی پر و نوار انرژی خالی می‌شود. با توجه به ساختار بلوری مونوکلینیک (گروه نقطه‌ای P_{21}/c) که پارامترهای شبکه در آن متفاوت است، سه جزء تانسوری xx ، yy و zz برای تکمیل شرح خواص نوری نیاز می‌باشد. در دمای صفر مطلق انتقال درون نواری ممکن نیست از این رو سهم آن در خواص نوری نادیده گرفته می‌شود. بخش موهمومی تابع دی‌الکتریک $\epsilon_2(\omega)$ به عناصر ماتریس تکانه وابستگی دارد و از طریق فرمول لینهارد محاسبه می‌شود [21] و همچنین بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک $\epsilon_1(\omega)$ را می‌توان با استفاده از رابطه کرامرز-کرونیك محاسبه کرد [21]. با استفاده از مقادیر محاسبه شده از بخش‌های حقیقی و موهمومی تابع دی‌الکتریک دیگر توابع نوری وابسته به فرکانس (انرژی) مانند ضریب جذب $\alpha(\omega)$ ، ضریب شکست $n(\omega)$ ، ضریب خاموشی $k(\omega)$ ، رسانندگی نوری $\sigma(\omega)$ و بازتاب نوری $R(\omega)$ را می‌توان با توجه به روابط داده شده محاسبه کرد [21].

قسمت موهمومی تابع دی‌الکتریک به معنی انرژی گم شده یا جذب انرژی فوتون در محیط است مقادیر محاسبه شده $\epsilon_2(\omega)$ براساس انرژی فوتون برای ترکیب Ag_2SiS_3 در شکل (5) آورده شده است از شکل (5) مشاهده می‌شود که لبه جذب در تقریب LDA حدود $1/2$ eV و لبه جذب در LDA+U حدود $1/4$ eV و در تابع هیبریدی HSE تقریباً $2/3$ eV است.



شکل 6. بخش حقیقی تابع دی الکتریک ترکیب Ag_2SiS_3

ضریب شکست $N(\omega)$ یک کمیت فیزیکی است که خواص نوری ماده را با دقت بیشتری توضیح می‌دهد، همان‌طور که مشاهده می‌شود روند نمودار $n(\omega)$ مانند نمودار $\epsilon_1(\omega)$ است، مقدار ضریب شکست در انرژی صفر را ضریب شکست استاتیکی می‌گویند که برابر با جذر ثابت دی الکتریک است. در جدول (4) مقادیر ضریب شکست استاتیکی در راستاهای x, y و z آورده شد. با افزایش انرژی تا حدود گاف نواری، ضریب شکست نیز افزایش می‌یابد که نشان‌دهنده سرعت موج کمتر در این ترکیب نسبت به خلأ است. حداکثر مقدار ضریب شکست در راستاهای x, y و z در تقریب‌های LDA، LDA+U و HSE در شکل (7) نشان‌دهنده عبور حداقلی امواج الکترومغناطیسی در این نواحی است. با افزایش انرژی، ضریب شکست کاهش می‌یابد که نشان می‌دهد هر چه مقدار ضریب شکست کمتر و انرژی فرودی بیشتر باشد، عبور امواج از ماده بیشتر است. همان‌گونه که در شکل (7) مشاهده می‌شود در محدوده انرژی $11/42 - 13/46 \text{ eV}$ ضریب شکست نزدیک به صفر است که بیانگر بیشینه بازتاب است، همان‌طور که از شکل نمودار ضریب شکست و بخش حقیقی تابع دی الکتریک مشخص است قله‌ها در $n(\omega)$ و $\epsilon_1(\omega)$ با یکدیگر مطابقت و در یک انرژی این قله‌ها وجود دارند.

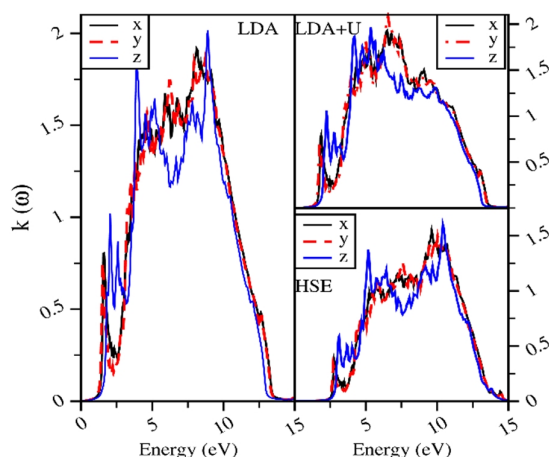
جدول 4. مقادیر ضریب شکست استاتیکی

	$n(\omega)$ راستا	ضریب شکست استاتیکی		
		x	y	z
LDA	Energy(eV)	0/0	0/0	0/0
	دامنه	2/44	2/41	2/4
LDA+U	Energy(eV)	0/0	0/0	0/0
	دامنه	2/39	2/35	2/35
HSE	Energy(eV)	0/0	0/0	0/0
	دامنه	1/79	1/79	1/80

بخش حقیقی تابع دی الکتریک $\epsilon_1(\omega)$ ، درجه‌ایی که ماده می‌تواند قطبی شود را به صورت کمی نشان می‌دهد. در محاسبات $\epsilon_1(\omega)$ مهم‌ترین پارامتر محدوده فرکانس صفر $\epsilon_1(0)$ است که به‌عنوان ثابت دی الکتریک استاتیک شناخته می‌شود که در درجه اول به گاف نواری ماده بستگی دارد، هر چه گاف نواری بزرگ‌تر باشد ثابت دی الکتریک استاتیک کوچک‌تر است. ثابت دی الکتریک استاتیک یکی از مهم‌ترین کمیت‌ها در بررسی طیف سهم حقیقی تابع دی الکتریک است که توصیف‌کننده برهمکنش‌های الکترون-شبهه، الکترون-ناخالصی، الکترون-الکترون و استار الکتروستاتیکی در بلور است. مقدار محاسبه شده ثابت دی الکتریک استاتیک توسط معادله Penn's شرح داده شده‌اند. مقدار ثابت دی الکتریک استاتیک در راستاهای x, y و z برای تقریب LDA، LDA+U و HSE در جدول (3) آورده شده است. از ثابت دی الکتریک استاتیک متوجه می‌شویم که هرچه گاف نواری کمتر باشد مقدار $\epsilon_1(0)$ بیشتر می‌شود که از مقادیر آن در جدول (3) نیز کاملاً مشخص می‌شود [33]. پس از قله دوم به تدریج تا مقادیر منفی کاهش می‌یابد که در شکل مقادیر منفی $\epsilon_1(\omega)$ کاملاً مشخص است که این مقادیر منفی در LDA در بازه انرژی $6/73 - 13/32 \text{ eV}$ و $6/31 - 13/64 \text{ eV}$ در LDA+U است مقادیر منفی و نزدیک به صفر برای تابع هیبرید HSE در انرژی‌های بالاتر یعنی $9/2 - 13/4 \text{ eV}$ رخ می‌دهد و از شکل (6) مشخص است ارتفاع قله‌ها در HSE کوچک‌تر از LDA و در انرژی‌های بالاتر این قله‌ها وجود دارند. مقادیر منفی $\epsilon_1(\omega)$ نشان می‌دهد که عبور امواج الکترومغناطیس در این بازه از انرژی منتشر نمی‌شوند و کاملاً منعکس می‌شود $\epsilon_1 < 0$ نشان می‌دهد که ماده رفتار فلزی دارد [21]. عمده فرایندها در این بخش که به‌عنوان نواحی غیرمجاز شناخته می‌شوند مربوط به جذب و اتلاف هستند و بلور شفافیت خود را از دست می‌دهد. چنین رفتاری از مواد را می‌توان در این محدوده انرژی برای اهداف محافظت از تشعشعات استفاده کرد.

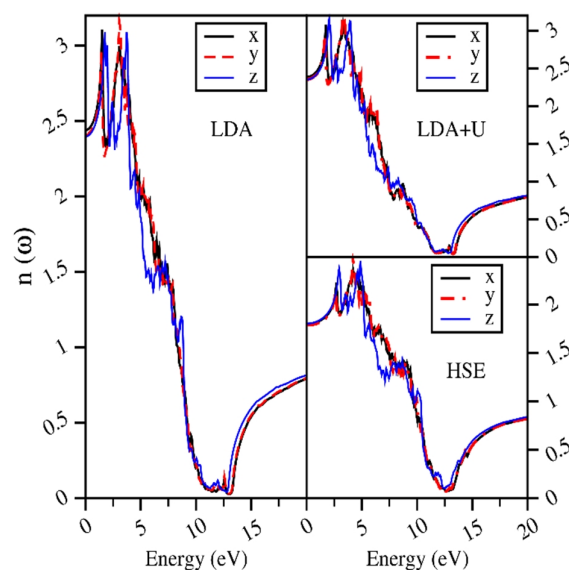
جدول 3. مقادیر ثابت استاتیک بخش حقیقی تابع دی الکتریک

	$\epsilon_1(\omega)$ راستا	ثابت استاتیک ($\epsilon_1(0)$)		
		x	y	z
LDA	Energy(eV)	0/0	0/0	0/0
	دامنه	5/95	5/76	5/74
LDA+U	Energy(eV)	0/0	0/0	0/0
	دامنه	5/69	5/54	5/53
HSE	Energy(eV)	0/0	0/0	0/0
	دامنه	3/23	3/19	3/25



شکل 8. نمودار ضریب خاموشی $k(\omega)$ ترکیب Ag_2SiS_3

برای مواد با کاربردهای اپتوالکترونیک تجزیه و تحلیل عملکرد تابع جذب آن‌ها بسیار ضروری است، ضریب جذب هر ماده یک پارامتر نوری است که کاهش شدت نور را در واحد فاصله توصیف می‌کند، ضریب جذب را می‌توان به صورت اتلاف نور در طی عبور از ماده توصیف کرد. شکل (9) ضریب جذب را در فاصله انرژی 0/0 - 15 eV نشان می‌دهد، جذب در این محدوده انرژی برجسته و پس از آن صفر می‌شود. در شکل به‌طور واضح قابل مشاهده است که جذب از انرژی گاف نواری مربوط به آن شروع می‌شود، علاوه بر این برون‌یابی خط نمودار ضریب جذب روی محورهای گاف نواری ماده را در همه راستاها می‌دهد. از نمودار مشاهده می‌شود که قله‌ها در این ساختار در همه راستاها در یک محدوده طیفی رخ می‌دهند. رفتار منحنی ضریب جذب نسبت به انرژی فرودی مانند بخش موهمومی تابع دی‌الکتریک و ضریب خاموشی است، در نمودار بخش موهمومی شاهد قله‌های نشان‌دهنده گذارهای بین نور رسانش و ظرفیت هستیم که باعث جذب فوتون می‌شوند؛ بنابراین در نمودار ضریب جذب نیز باید شاهد وجود چنین قله‌هایی باشیم و مکان این قله‌ها باید با بخش موهمومی تابع دی‌الکتریک مطابقت داشته باشد. اگر انرژی کمتر از انرژی گاف نواری باشد جذب رخ نمی‌دهد زمانی که انرژی فوتون‌های فرودی از انرژی گاف بیشتر شود جذب فوتون‌ها صورت گرفته و به دلیل وجود گذارهای بین نواری دارای پاشندگی است. بیشترین جذب در بلندترین قله رخ می‌دهد که بلور در این انرژی هیچ‌گونه شفافیتی ندارد. این ترکیب دارای ضریب جذب بالایی است و می‌توان از آن در سلول‌های خورشیدی استفاده کرد.



شکل 7. نمودار ضریب شکست $n(\omega)$ ترکیب Ag_2SiS_3

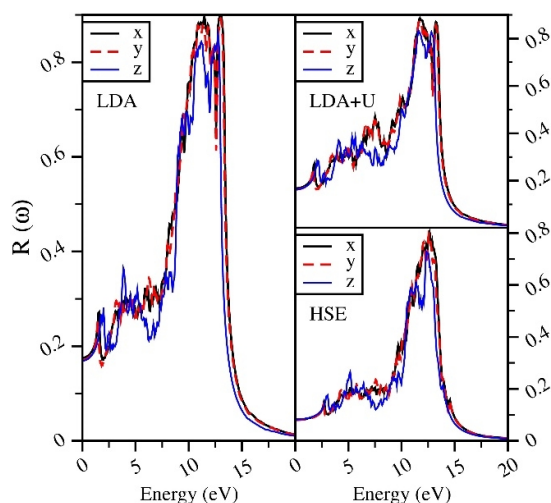
شکل (8) مقادیر محاسبه شده ضریب خاموشی $k(\omega)$ را نشان می‌دهد که برحسب انرژی فوتون رسم شده، که با قسمت موهمومی $\epsilon_2(\omega)$ ثابت دی‌الکتریک همخوانی دارد. ضریب خاموشی کارایی یک ماده را در جذب انرژی فوتون فرودی در طول موج معین توصیف می‌کند. از نمودار شکل (8) مشخص است که تغییر در شیب نمودار $k(\omega)$ با گاف نواری ماده مطابقت دارد. این تغییر پرتیب نموداری را می‌توان به جذب فوتون در ماده‌ای نسبت داد که انرژی بیشتری نسبت به انرژی نوار مربوطه دارد. علاوه بر این مشاهده می‌شود که حداکثر مقدار ضریب خاموشی برای هر ساختار، در همان مقدار انرژی رخ می‌دهد که با مقادیر صفر بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک منطبق است. از شکل (8) مشخص می‌شود که قله‌های سهم موهمومی تابع دی‌الکتریک با قله‌های ضریب خاموشی مطابقت دارد. ضریب خاموشی با افزایش انرژی تا مقدار انرژی بیشینه افزایش می‌یابد که در این محدوده انرژی در بعضی نقاط قله‌هایی نیز وجود دارد و پس از آن با افزایش انرژی مقدار آن کاهش می‌یابد که نشان‌دهنده نفوذ راحت‌تر امواج در ماده است، تغییرات ضریب شکست و ضریب خاموشی به ترتیب همانند سهم حقیقی و موهمومی تابع دی‌الکتریک هستند.

جدول 5. مقادیر گاف نوری ضریب خاموشی ترکیب Ag_2SiS_3

	$k(\omega)$	گاف نوری		
		x	y	z
LDA	Energy(eV)	1/42	1/20	1/26
LDA+U	Energy(eV)	1/48	1/43	1/7
HSE	Energy(eV)	2/44	2/39	2/62

جدول 7. مقادیر $R(0)$ ضریب بازتاب در ترکیب g_2SiS_3

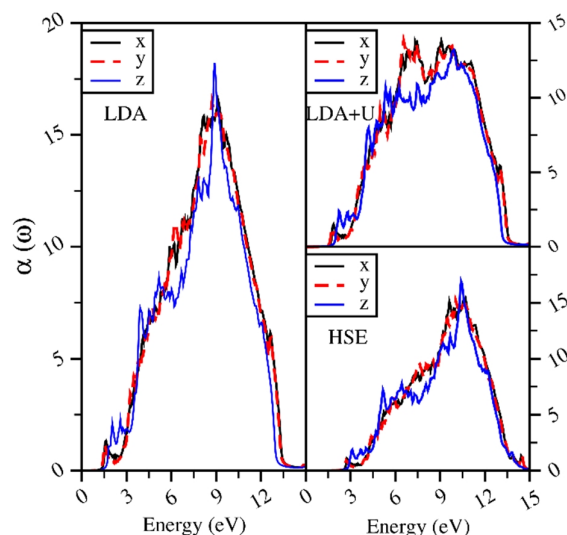
	$R(\omega)$ راستا	$R(0)$		
		x	y	z
LDA	Energy(eV)	0/0	0/0	0/0
	دامنه	0/18	0/17	0/17
LDA+U	Energy(eV)	0/0	0/0	0/0
	دامنه	0/17	0/16	0/16
HSE	Energy(eV)	0/0	0/0	0/0
	دامنه	0/08	0/08	0/082

**شکل 10.** نمودار ضریب بازتاب $R(\omega)$ ترکیب Ag_2SiS_3 .

بخش حقیقی رسانندگی نوری $\sigma(\omega)$ ، توانایی یک محیط را برای شروع رسانندگی، همزمان با عبور امواج الکترومغناطیس از ماده نشان می‌دهد. در شکل (11) مقادیر بخش حقیقی رسانندگی نوری برای ترکیب آورده شده است. قسمت ابتدایی نمودار رسانندگی شبیه به نمودار جذب است. از نمودار مشخص است که رسانندگی با افزایش انرژی تا ناحیه نزدیک فرابنفش افزایش و پس از آن کاهش می‌یابد. مشاهده می‌شود که قله‌های رسانندگی نوری با قله‌های مربوط به ضریب خاموشی مطابقت دارد و از شکل (11) مشاهده می‌شود که هر چه گاف نواری بزرگ‌تر باشد میزان رسانندگی کمتر است. مقدار رسانندگی در HSE کمتر از LDA و LDA+U است زیرا مقدار گاف نواری بزرگ‌تر و الکترون‌های کمتری از نوار ظرفیت به نوار رسانش انتقال می‌یابند و همچنین نیاز به انرژی فرودی بیشتری برای این انتقال‌های الکترونی است.

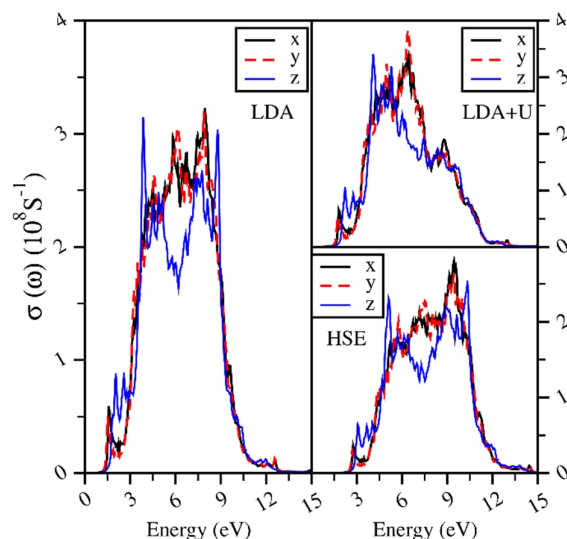
جدول 6. مقادیر گاف نوری ضریب جذب ترکیب Ag_2SiS_3

	$\alpha(\omega)$ راستا	گاف نوری		
		x	y	z
LDA	Energy(eV)	1/27	1/27	1/5
LDA+U	Energy(eV)	1/4	1/32	1/44
HSE	Energy(eV)	2/47	2/46	2/58

**شکل 9.** نمودار ضریب جذب $\alpha(\omega)$ ترکیب Ag_2SiS_3

ضریب بازتاب، دامنه یا شدت موج بازتابیده نسبت به موج فرودی را مشخص می‌کند، از بازتاب ماده در پوشش ضد انعکاس و برای اهداف محافظتی استفاده می‌کنند. نمودار بازتاب نوری برای ترکیب در شکل (10) آورده شده است، از شکل (10) می‌توان استنباط کرد که طیف بازتاب برای ساختار Ag_2SiS_3 در ناحیه مادون قرمز و ناحیه مرئی بسیار کم است؛ که در این محدوده انرژی، گذارهای بین نواری صورت می‌گیرد که مقدار جذب بالا و بازتاب پایین‌تر از نواحی دیگر است و با افزایش انرژی، بازتاب افزایش یافته و در ناحیه uv به اوج می‌رسد که در این نواحی جذب و انتشار اندک است و در نهایت با افزایش بیشتر انرژی، بازتاب کاهش می‌یابد تا به مقدار صفر در انرژی‌های بالا برسد. مقدار بازتاب $R(\omega)$ در فرکانس صفر که مربوط به انرژی صفر است یعنی $R(0)$ در جدول (7) آورده شده است، از آنجایی که بازتاب در کل طیف به یکپارچگی نرسیده است می‌توان از اندازه‌گیری‌ها نتیجه گرفت که ترکیب مطالعه‌شده در اینجا نیم‌رسانا است، همان گونه که از شکل (10) که قیاسی بین LDA، LDA+U و HSE است مشاهده می‌شود هر چه گاف نواری یک ترکیب بزرگ‌تر باشد میزان ضریب بازتاب آن کوچک‌تر است؛ که ضریب بازتاب مربوط به محاسبات HSE کوچک‌تر است.

کوانتوم اسپرسو، از نمودار چگالی حالت‌ها مقدار گاف نواری را $1/2$ eV، $1/4$ eV و $2/37$ eV به ترتیب در تقریب LDA، LDA+U و HSE با شبه‌پتانسیل بار پایسته به‌دست آوردیم؛ که یک ترکیب نیم‌رسانا است و همچنین بررسی چگالی حالت‌های جزئی، میزان سهم هر اوربیتال را در نوار رسانش و نوار ظرفیت نشان داده که بخش عمده تأثیر در نوار ظرفیت مربوط به اوربیتال d اتم Ag بوده و مقدار مدول حجمی GPa 81، $79/5$ GPa و $76/5$ GPa به ترتیب در تقریب LDA، LDA+U و HSE به‌دست‌آمده است. از بررسی خواص نوری این ترکیب گاف نوری در هر 3 راستای x، y و z اندازه‌گیری شد، مقدار گاف نوری در راستای x که از نمودار ضریب جذب خوانده شد به ترتیب برای ترکیب Ag_2SiS_3 در تقریب LDA، LDA+U و HSE به ترتیب $1/27$ eV، $1/4$ eV و $2/37$ eV به‌دست‌آمده از بررسی‌های نوری مشخص گردید این ترکیب دارای قابلیت خوبی برای کاربرد در سلول خورشیدی و مواد اپتوالکترونیک است.



شکل 11. نمودار رسانندگی نوری $\sigma(\omega)$ ترکیب Ag_2SiS_3 .

نتیجه‌گیری

پس از انجام محاسبات ساختاری و نوری و بهینه‌سازی پارامترهای شبکه برای ترکیب Ag_2SiS_3 با استفاده از تقریب‌های LDA، LDA+U و HSE و بسته محاسباتی

منابع

- [1] Eggleton, B.J., B. Luther-Davies, and K. Richardson, "Chalcogenide photonics, Nature photonics", 5(3), 141-148, 2011.
- [2] Oh, S.J., et al., "Stoichiometric control of lead chalcogenide nanocrystal solids to enhance their electronic and optoelectronic device performance", ACS nano, 7(3), 2413-2421, 2013.
- [3] Han, J., et al., "Manipulate Electronic and Magnetic Properties of Two-Dimensional Manganese Chalcogenides via Hydrogenation", The Journal of Physical Chemistry C, 127(37), 18662-18668, 2023.
- [4] Ahluwalia, G.K., "Applications of chalcogenides: S, Se, and Te", Springer, 2016.
- [5] Mishra, P., et al., "Two-dimensional boron monochalcogenide monolayer for thermoelectric material", Sustainable Energy & Fuels, 4(5), 2363-2369, 2020.
- [6] Devika, R., P. Vengatesh, and T. Shyju, "Review on ternary chalcogenides: Potential photoabsorbers", Materials Today, Proceedings, 2023.
- [7] Cheng, K., et al., "Electronic structures and photovoltaic applications of vdW heterostructures based on Janus group-IV monochalcogenides: insights from first-principles calculations", Physical Chemistry Chemical Physics, 25(7), 5663-5672, 2023.
- [8] Yang, R., et al., "2D transition metal dichalcogenides for photocatalysis", Angewandte Chemie International Edition, 62(13), e202218016, 2023.
- [9] Ojo, O.P., et al., "Electronic and Thermal Properties of the Cation Substitution-Derived Quaternary Chalcogenide CuInSnSe_4 ", Inorganic Chemistry, 2023.
- [10] Rudys, M.Y., et al., "First-principles analysis of physical properties anisotropy for the Ag_2SiS_3 chalcogenide semiconductor", Journal of Alloys and Compounds, 826, 154232, 2020.
- [11] Ahluwalia, G.K., "Fundamentals of chalcogenides in crystalline, amorphous, and nanocrystalline forms. Applications of Chalcogenides: S, Se, and Te", 3-60, 2017.
- [12] Nakashima, M., et al., "Fabrication of (Cu, Ag) 2SnS_3 thin films by sulfurization for solar cells", Thin Solid Films, 642, 8-13, 2017.
- [13] Siebentritt, S. and S. Schorr, "Kesterites—a challenging material for solar cells", Progress in photovoltaics: Research and Applications, 20(5), 512-51, 2012.

- [14] Liu, M.L., et al., "Improved thermoelectric properties of Cu-doped quaternary chalcogenides of $\text{Cu}_2\text{CdSnSe}_4$ ", *Advanced Materials*, 21(37), 3808-3812, 2009.
- [15] Wu, C., et al., "Hexagonal Cu_2SnS_3 with metallic character: Another category of conducting sulfides", *Applied physics letters*, 91, 2007.
- [16] Ming, H., et al., "Boosting thermoelectric performance of Cu_2SnSe_3 via comprehensive band structure regulation and intensified phonon scattering by multidimensional defects", *ACS nano*, 15(6), 10532-1054, 2021.
- [17] Reddy, V.R.M., et al., "Review on Cu_2SnS_3 , Cu_3SnS_4 , and Cu_4SnS_4 thin films and their photovoltaic performance", *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 76, 39-74, 2019.
- [18] Ranjan, P., K. Balasubramanian, and T. Chakraborty, "DFT Investigation of Structural and Optoelectronic Properties of Glassy Chalcogenide CuXY_2 (X= Sb, Bi; Y= S, Se, Te) Molecules", *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2023.
- [19] Aruga, A. and Y. Okamoto, "Structure and photoacoustic spectra of Ag-doped Cu_2SiS_3 particles", *Japanese journal of applied physics*, 45(5S), 461, 2006.
- [20] Giannozzi, P., et al., "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials", *Journal of physics: Condensed matter*, 21(39), 395502, 2009.
- [21] Butt, M.K., et al., "A DFT study of structural, magnetic, elastic and optoelectronic properties of lanthanide based XAlO_3 (X= Nd, Gd) compounds", *Journal of Materials Research and Technology*, 9(6), 16488-16496, 2020.
- [22] Zhibankov, O., et al., "Crystal structure of the Ag_2SiS_3 compound", *Journal of alloys and compounds*, 509(12), 4372-4374, 2011.
- [23] Murnaghan, F.D., "The compressibility of media under extreme pressures", *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 30(9), 244-247, 1944.
- [24] Rahman, S., et al., "Structural, electronic, optical and mechanical properties of oxide-based perovskite ABO_3 (A= Cu, Nd and B= Sn, Sc): A DFT study", *Journal of Solid State Chemistry*, 317, 123650, 2023.
- [25] Deng, J. and Z.-Y. Zhao, "Electronic structure and optical properties of bismuth chalcogenides Bi_2Q_3 (Q= O, S, Se, Te) by first-principles calculations", *Computational Materials Science*, 142, 312-319, 2018.
- [26] Halder, S., et al., "Investigating the optical, photosensitivity and photocatalytic properties of double perovskites A_2LuTaO_6 (A= Ba, Sr): a combined experimental and density functional theory study", *Ceramics International*, 45(12), 15496-15504, 2019.