محاسبه پارامترهای ساختاری دی‌اکسید قلع در فاز $CaCl_2$

حمدا.. صالحی* و ماهرخ آریادوست

دانشگاه شهید چمران اهواز، گروه فیزیک

تاریخ ثبت اولیه: ۱۳۸۸/۳/۲۱، **تاریخ دریافت نسخهٔ اصلاح‌شده:** ۱۳۸۸/۷/۲۱، **تاریخ پذیرش قطعی:** ۱۳۸۸/۸/۲۸

چکیده دراین مقاله خصوصیات الکترونی ترکیب ازجمله ساختار الکترونی، ثابت شبکه، مدول حجمی، تراکم‌پذیری خطی و بهینه‌سازی حجم سرامیک SnO_2 در فاز $CaCl_2$ بررسی شده است. همچنین بار مؤثر اتم‌های تشکیل‌دهنده آن و اثر فشار بر این ساختار مطالعه شده است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت شدهٔ خطی با پتانسیل کامل (FP – LAPW)،در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و با استفاده از نرم‌افزار Wien2k صورت گرفته است. نتایج به دست آمده با نتایج دیگران سازگاری دارد.

کلمات کلیدی ثابت شبکه، مدول حجمی، سرامیک SnO_2.

Calculation of the structure parameters of Tin dioxide in $CaCl_2$ phase

H. Salehi and M. Aryadoust

Department of Physics, Shahid Chamran University of Ahvaz

Abstract In this paper, we studied the compound structure properties such as lattice constant, bulk module, compressibility, volume optimization in $CaCl_2$ phase of SnO_2 ceramic. Calculations were made with using a Full Potential-Linearized Augmented Plane Wave (FP-LAPW) method, in the framework Density Functional Theory(DFT)with different approximations and by using WIEN2k package. The obtained results are in a good agreement with the other results.

Keywords Lattice Constant, Bulk Module , Sno_2 Ceramic.

*عهده‌دار مکاتبات

نشانی:.اهواز، دانشگاه شهیدچمران اهواز، گروه فیزیک

تلفن: ۰۶۱۱-۳۳۳۱۰۴۰، **پیام‌نگار:** salehi-h@scu.ac.ir

۱_ مقدمه

دی‌اکسید قلع، ترکیبی غیرآلی با فرمول SnO_2 می‌باشد. این ماده یک جامد دیامغناطیس است. جرم ملکولی این پودر سفید رنگ ۱۵۰/۷۰۸gr/mol و نقطه‌ی ذوب آن ۱۱۲۷°C می‌باشد [۱]. لایه نازک SnO_2 با توجه به کمبود اکسیژن، نیمه‌رسانای شفاف نوع n با انرژی باند ممنوعه بزرگ حدود ۳/۸–۴/۳eV است [۳،۲]. این در حالی است که با افزودن ناخالصی به SnO_2، تراز انرژی آن جابه‌جا می‌شود. مقاومت ویژهٔ آن حدود $\rho = 1.073\times10^{-4}\ \Omega m$ است. به دلیل خواص بنیادی و کاربردهای فراوان این ماده در الکترونیک و الکترواپتیک و سایر رشته‌ها، مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفته‌است و در سال‌های گذشته تحقیقات تجربی فراوانی بر روی آن انجام شده است.

این سرامیک خواص بسیار مهمی همچون ثابت دی‌الکتریک بزرگ، رسانش الکتریکی بالا همراه با انتقالات اپتیکی درناحیه‌ی مرئی دارد [۴–۷]. مقاومت ویژه پایین و انتقالات بالا سبب شده‌است از لایه‌های نازک SnO_2 در لایه‌های پنجره، بازگردانندهٔ گرما و سلول خورشیدی استفاده شود [۸،۷]. دی‌اکسید قلع در ترکیب با اکسیدوانادیوم نقش کاتالیزور را برای اکسیداسیون ترکیبات آروماتیک در سنتز اسیدهای کربوکسی و اسیدآنیدرید دارد. دی‌اکسید قلع در صنعت سرامیک‌سازی، خصوصاً در ظروف سفالی استفاده می شود. این ماده معمولاً در شیشهٔ مذاب حل نمی‌شود.

SnO_2 در حسگرهای گازی قابل احتراق به‌کار می رود، که در این حالت، سطح حسگر تا دمای ثابت کمتر از ۱۰۰°C گرم شده و درحضور گاز قابل احتراق، مقاومت الکتریکی افت می‌کند [۶]. دی‌اکسید قلع در دمای ۲۵°C وفشار ۱۰۰kPa دارای ساختار روتیل تتراگونال با گروه فضایی $P4_2/mnm, \#136$ است. اما به تازگی با استفاده از طیف‌سنجی پراکندگی رامان در ساختار $CaCl_2$ مشاهده شده است [۹]. بررسی پراش اشعه X در فشارهای بالا نشان می‌دهد; ساختار روتیل می‌تواند به سه فاز ساختاری دیگر تبدیل شود. با افزایش فشار تاحدود ۱۱/۸GPa تحت شرایط هیدرواستاتیکی از فازتتراگونال با بیشترین تعادل به اورتورومبیک فاز نوع $CaCl_2$ منتقل شده و در فشار ۱۲GPa تحت شرایط هیدرواستاتیکی به فاز نوع $\alpha-PbO_2$ تبدیل می‌شود.هردو فاز $CaCl_2$ و $\alpha-PbO_2$ در فشار ۲۱GPa به یک فاز مکعبی فلورایت باگروه فضایی $Pa\overline{3}$ منتقل می‌شوند [۱۰]. به هرحال لایه‌های SnO_2 رسوب‌گیری شده تعداد چشمگیری جای خالی اکسیژن دارند که سبب رسانش الکترون‌ها می‌شود.

۲_ نحوهٔ انجام آزمایش

محاسبات با استفاده از روش $FP-LAPW$ درچارچوب نظریهٔ تابعی چگالی (DFT) با تقریب‌های مختلفی انجام شده است [۱۱–۱۳]. پارامترها به صورت $R_{MT}(Sn) =$ ۲/۱au و $R_{MT}(O) =$ ۱/۷ au درنظر گرفته شده است. شعاع کرهٔ مافین- تین با توجه به شعاع کرهٔ اتمی وطول پیوندها انتخاب شده است همچنین حداکثر بار در داخل کرهٔ مافین–تین در بررسی شعاع مافین- تین مدنظر قرار گرفته است. برای جداسازی حالت‌های ظرفیت از حالت‌های مغزه، انرژی ۶- ریدبرگ به صورت مبنا قرار داده شده است، که باتوجه به این جداسازی حالت‌های ظرفیت، مغزه و شبه مغزه در این ترکیب در جدول(۱) آمده است.

در اجرای برنامه، همگرایی انرژی مدنظر قرار گرفته است که با۱۰ چرخه و با اختلاف انرژی ۰/۰۰۰۱ریدبرگ، همگرایی ایجاد شده است. برای رسیدن به این همگرایی۳۰۳۰ موج تخت تولید شده است که به ازای آن

جدول ۱. تفکیک الکترون های مغزه، شبه مغزه و ظرفیت.

اتم	آرایش الکترونی مغزه	آرایش الکترونی شبه مغزه	آرایش الکترونی ظرفیت
Sn	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}$	$4s^2, 4p^6, 4d^{10}$	$5s^2, 5p^2$
O	$1s^2$	$2s^2$	$2p^4$

یک شبکهٔ (k-mesh) ۴۰×۴۰×۴۰ ایجاد شده است. پارامتر همگرایی RK_{max} برابر با ۷ انتخاب شده است. این پارامتر، تعداد پایه‌ها را در محاسبات کنترل می‌کند. ثابت‌های شبکه که به صورت تجربی اندازه‌گیری شده اند، برابر با a=۴/۶۵۳۳ A°، b=۴/۶۳۱۳ A° و c=۳/۱۵۵ A° می باشند که در محاسبات از آن استفاده شده است [۷_۹]. در این مقاله، برای محاسبهٔ پتانسیل تبادلی هم‌بستگی از تقریب‌های LDA و GGA استفاده شده است.

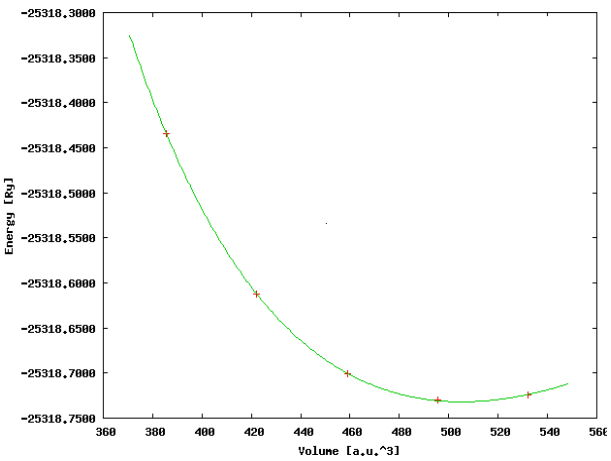
۳_ نتایج و بحث

۳_۱_ ساختار الکترونی

یکی ازپارامترهای مهم در این محاسبات، ثابت شبکه است، این ثابت به صورت تجربی اندازه‌گیری شده و در دسترس می‌باشد. با وجود این برای تأیید نظری مسئله مجدداً محاسبه می‌شود. برای این منظور انرژی حالت پایهٔ دی‌اکسیدقلع به‌ازای حجم‌های مختلف، اطراف حجم تعادلی محاسبه و با تغییرات جزئی در اطراف حجم تعادلی وردش داده می‌شود. تغییرات انرژی بر حسب حجم از طریق معادلهٔ حالت مورناگون داده می‌شود که در این معادله انرژی کل به صورت تابعی ازحجم به صورت رابطه ۱ بیان می‌شود [۱۴]:

$$E(V) = E_0 + \frac{B_0 V_0}{B'}\left[\frac{V}{V_0} + \frac{\left(\frac{V}{V_0}\right)^{1-B'}}{B'-1} - B'\right] \qquad \text{رابطه(۱)}$$

که در رابطه فوق V_0 حجم سلول اولیه، E_0 انرژی حالت پایه دردماوفشار صفر، B_0 مدول حجمی و B' مشتق آن است. با استفاده از این معادله، کمینه انرژی برای ساختار SnO_2 در تقریب‌های مختلف به دست آورده شده است. که یکی از نتایج در شکل (۱) رسم شده است.



شکل ۱. نمودار انرژی بر حسب حجم ساختار SnO_2 با استفاده از تقریب $GGA\,96$

در ادامهٔ این محاسبات کمیت‌های دیگری از قبیل ثابت شبکه، مدول حجمی، مشتق مدول حجمی نسبت به فشار و تراکم‌پذیری محاسبه و مقایسه شده‌اند. در جدول(۲) نتایج به دست آمده با داده‌های تجربی مقایسه شده‌اند.

ازجدول (۲) مشاهده می‌شود که پارامترهای محاسبه شده با این روش سازگاری نسبتاً خوبی با نتایج تجربی دیگران دارد. از طرف دیگر با توجه به اینکه تراکم پذیری به صورت عکس مدول حجمی تعریف می‌شود بنابراین مدول حجمی نمایانگر سختی بلور است، یعنی هرچه مدول حجمی بیشتر باشد سختی بلور بیشتر است. در این مقاله، تراکم‌پذیری با استفاده از تقریب‌های مختلف برای SnO_2 به دست آمده‌است. این جدول بیانگر آن است که این ترکیب مدول حجمی نسبتاً فراوانی دارد. البته در این فاز مقدار تجربی مدول حجمی وجود ندارد که بتوان با آن مقایسه کرد.

۳ـ۲ـ بررسی تأثیر فشار بر روی ساختار SnO_2

برای بررسی اثرتغییرات فشار روی ساختار SnO_2، وابستگی حجم به فشار از معادلهٔ حالت مورناگون به‌دست آمده و سپس با مشتق گرفتن از معادلهٔ فوق و استفاده از رابطهٔ ترمودینامیکی $dE=-PdV$، وابستگی حجم به فشار تعیین می‌شود. این معادله به صورت زیر است:

$$V(P) = V_0[(\frac{B'}{B_0})P+1]^{-\frac{1}{B'}} \qquad \text{رابطه(۲)}$$

در این رابطه V_0، B_0 و B' را با توجه به جدول (۲) در رابطهٔ (۲) قرار داده شده و نمودار وابستگی حجم به فشار را برای

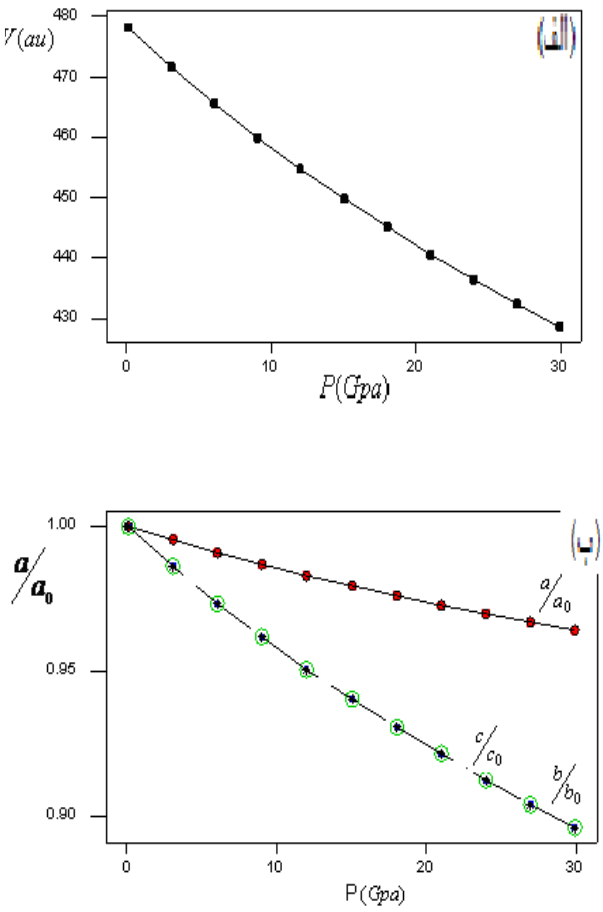
جدول ۲: پارامترهای ساختاری محاسبه شده در کار حاضر و مقایسه‌ی آن با نتایج دیگران

کمیات محاسبه شده	FP-LAPW GGA96	FP-LAPW GGA91	FP-LAPW LDA	نتایج تجربی[۱۵]	نتایج نظری[۱۰]
$a(A^0)$	۴/۸۰۲۱	۴/۸۱۷۶	۴/۷۱۷۱	۴/۶۵۳۳	۴/۸۵۵
درصد اختلاف	۳/۱۹	۳/۵۳	۱/۳۷	–	۴/۳
$b(A^0)$	۴/۷۸۲۹	۴/۷۹۳۵	۴/۶۹۳۵	۴/۶۳۱۳	۴/۷۳۷
درصد اختلاف	۳/۲۱	۳/۵۰	۱/۳۴	–	۲/۲۴
$c(A^0)$	۳/۲۵۵۸	۳/۲۶۶۳	۳/۱۹۸۲	۳/۱۵۵۰	۳/۲۵۸
درصد اختلاف	۳/۱۹	۳/۵۲	۱/۳۶	–	۳/۲۶
b/a	۰/۹۹۶	۰/۹۹۵	۰/۹۹۵	۰/۹۹۵	۰/۹۷۶
c/a	۰/۶۷۸	۰/۶۷۸	۰/۶۷۸	۰/۶۷۸	۰/۶۷۱
B(Gpa)	۱۸۳/۸۱۵۰	۱۸۱/۲۷۰۴	۲۱۵/۸۴۹۰	–	۲۰۵
B'	۴/۴۲۹۵	۴/۳۴۰۲	۴/۵۴۰۴	–	–
K $(Gpa)^{-1}$	$\times10^{-3}$ ۵/۴۴۰۳	$\times10^{-3}$ ۵/۵۱۲۷	$\times10^{-3}$ ۴/۶۳۲۹		$\times10^{-3}$ ۴/۸۱۸۰

ترکیب SnO_2 در بازه‌ی Gpa ۳۰-۱ رسم می‌شود. شکل(۲) این تغییرات را نشان می دهد.

از این نمودار مشخص است که با افزایش فشار حجم سلول واحد کاهش می‌یابد. تغییرات کم حجم در بازهٔ مورد بررسی نشان دهندهٔ تراکم پذیری کم این ترکیب و در نتیجه سختی زیاد آن است.

۳-۳- تراکم پذیری بلور SnO_2



شکل۲: تغییرات، الف) حجم ب) $\frac{a}{a_0}$ ، برحسب فشار برای سرامیک SnO_2

تراکم پذیری عکس مدول حجمی تعریف می شود و مدول حجمی بیانگر سختی بلور است، هرچه مدول حجمی بیشتر باشد سختی بلور نیز بیشتر است. تراکم‌پذیری حجمی از رابطهٔ زیر به دست می‌آید:

$$K_V = -\frac{1}{V_0}\frac{dV}{dP}$$ رابطه(۳)

در این رابطه، V_0 حجم تعادلی در فشار صفر می‌باشد و مقدار آن از جدول (۲) در رابطه قرار می‌گیرد. با توجه به شیب منحنی شکل (۲)، $\frac{dV}{dP}$ محاسبه شده و در رابطهٔ(۳) قرار داده می‌شود و از آنجا تراکم‌پذیری حجمی محاسبه می‌شود. تراکم‌پذیری که درواقع عکس مدول حجمی است با سختی بلور رابطهٔ عکس دارد و هرچه تراکم‌پذیری بلور کمتر باشد، سختی بلور و قابلیت چکش خواری این ترکیب بیشتر است. با توجه به مقدارتراکم‌پذیری حجمی و همچنین زیادبودن مقدار مدول حجمی، می‌توان نتیجه گرفت که سرامیک SnO_2 یک جسم سخت است و به راحتی تغییر شکل نمی‌دهد و برای ایجاد تغییر شکل در بلور آن انرژی زیادی لازم است. همچنین می‌توان تراکم‌پذیری خطی را در راستای محورهای a و c از رابطهٔ زیر به دست آورد:

$$K_r = -\frac{V_0}{B_0}\frac{d\ln(r)}{dV}$$ رابطه(۴)

در این رابطه، r نمایانگر پارامترهای شبکه‌ی a، b و c می باشد. برای به‌دست‌آوردن تراکم‌پذیری خطی در راستاهای a، b و c ابتدا نمودارهای lna، lnb و lnc را برحسب حجم تعادلی رسم کرده و سپس تغییرات شیب محاسبه می شود. با توجه به مقادیر داده شده V_0 و B_0 در جدول (۲) مقدار تراکم پذیری خطی در راستای محورهای a و c به‌صورت زیر به

جدول ۳ :تراکم پذیری حجمی و تراکم پذیری خطی برای بلور SnO_2 در فاز $CaCl_2$

تراکم پذیری	FP-LAPW GGA96	FP-LAPW GGA91	FP-LAPW LDA	نتایج نظری[۱۰]
$K_V \times 10^{-3}\ (Gpa)^{-1}$	۵/۴۴۰۳	۵/۵۱۲۷	۴/۶۳۲۹	۴/۸۱۸۰
$K_a \times 10^{-3}\ (Gpa)^{-1}$	۱/۹۳۲۲	۱/۹۴۰۷	۱/۶۳۲۰	–
$K_b \times 10^{-3}\ (Gpa)^{-1}$	۵/۷۹۶۳	۵/۸۲۲۲	۴/۸۹۵۸	–
$K_c \times 10^{-3}\ (Gpa)^{-1}$	۵/۷۹۶۳	۵/۸۲۲۲	۴/۸۹۵۸	–

دست می‌آید که در جدول(۳) آمده است.

با توجه به نتایج به‌دست‌آمده می‌بینیم تراکم‌پذیری خطی در راستای محور c و b حدود سه برابر تراکم پذیری خطی در راستای محور a است. این نتایج نشان‌دهندهٔ آن است که بلور SnO_2 ناهمسانگرد است و این ناهمسانگردی می‌تواند ناشی از تفاوت طول پیوندها در این ترکیب باشد. ازآنجایی که طول پیوند O-O در صفحات بلور کوتاه‌تر از طول پیوند Sn-O بین لایه ها است. بنابراین تراکم پذیری درون لایهٔ اکسیژن در راستای محور a کمتر از تراکم‌پذیری درراستای محور b و C بین لایه‌های اکسیژن و قلع است و این به دلیل آن است که اتم‌های اکسیژن با هم پیوند یونی برقرار می‌کنند درحالی که پیوند بین اتم‌های اکسیژن و قلع یونی ضعیف است و می‌تواند سبب تغییر شکل بیش تر در هنگام اعمال فشار در راستای محورهای b وC شود. بنابراین باتوجه به اینکه تراکم‌پذیری نمادی از سختی بلور است، می‌توان گفت برای تغییر شکل در صفحات بلور در راستای محور a نسبت به محورb و C انرژی بیشتری نیاز است.جداول (۴)و(۵) اطلاعات مربوط به تجزیهٔ بار اتم‌های مختلف را در این ترکیب با استفاده از تقریب‌های مختلف نشان می‌دهند.

وجود ماکزیمم بار الکتریکی در داخل کره‌های مافین–تین برای اتم‌های SnO_2 تشکیل دهندهٔ دلیل دیگری بر انتخاب بهینهٔ شعاع کرهٔ مافین–تین است. از جمله پارامترهایی که در مطالعهٔ خواص ساختاری ترکیب مورد توجه می‌باشد، بار مؤثر اتم‌های تشکیل‌دهندهٔ آن می‌باشد. میزان این بار و میزان انحراف آن از بار اسمی اتم‌ها، دلیلی بر وجود پیوندهای یونی در ترکیب مورد نظر می باشد. در جدول (۶) بار مؤثر محاسبه شده برای اتم‌های تشکیل دهندهٔ SnO_2 در تقریب‌های مختلف آورده شده و با بار اسمی مقایسه شده است.

با توجه به نتایج به‌دست‌آمده درجدول (۶)، د این ترکیب به‌طور متوسط برای هر اتم قلع، ۰/۴۹۱۳ الکترون و برای هراتم اکسیژن، ۱/۶۵۲۳ الکترون وجود دارد. بنابراین فرمول یونی برای این ترکیب در فاز کلریدسدیم به صورت $Sn^{0.4930}O^{1.65}$ می‌باشد. همان‌طور که می‌دانیم انحراف این فرمول از فرمول اسمی SnO_2 نشان دهندهٔ وجودپیوند یونی بین اتم‌های تشکیل دهندهٔ این ترکیب است که با نتایج به دست آمده توسط دیگران سازگاری خوبی دارد.

۳-۴- چگالی ابرالکترونی

چگالی ابرالکترونی در واقع نحوهٔ توزیع بار در اطراف اتم‌ها را نشان می‌دهد. با توجه به میزان توزیع بار در اطراف اتم‌ها می‌توان نوع پیوند بین آن‌ها را تشخیص داد. تراکم زیاد

جدول ۴: تجزیه‌ی بار اتم Sn در تقریب‌های مختلف برای ترکیب SnO_2

نوع تقریب	FP-LAPW GGA96	FP-LAPW GGA91	FP-LAPW LDA	FP-LAPW LSDA
بار اسمی	۵۰	۵۰	۵۰	۵۰
بار داخل کره‌ی مافین-تین	۴۶/۷۹۵۴۱	۴۶/۷۹۸۴۶۱	۴۶/۸۵۴۰۲	۴۶/۸۵۴۱۲
بار مغزه Sn	۳۵/۹۶۹۷۸	۳۵/۹۷۵۸۹۸	۳۶/۴۲۸۳۸۷	۳۵/۳۲۸۴۸۹
بار ظرفیت Sn	۱۰/۸۲۵۶۳	۱۰/۸۲۵۶۳	۱۰/۴۲۵۶۳۳	۱۰/۵۲۵۶۳۱
باربیرون کره‌ی مافین-تین	۳/۲۰۵۱۳	۳/۲۰۲۰۷۹	۳/۱۴۶۵۲	۳/۱۴۵۹۵
مجموع بارهای داخل و خارج کره‌ی مافین-تین	۵۰/۰۰۰۵۴	۵۰/۰۰۰۵۴	۵۰/۰۰۰۵۴	۵۰/۰۰۰۰۷

جدول۵: تجزیه‌ی بار اتم O در تقریب‌های مختلف برای ترکیب SnO_2

نوع تقریب	FP-LAPW GGA96	FP-LAPW GGA91	FP-LAPW LDA	FP-LAPW LSDA
بار اسمی	۸	۸	۸	۸
بارداخل کره‌ی مافین-تین	۶/۶۵۹۲۶	۶/۸۶۵۴۵	۶/۶۴۵۴۰	۷/۰۵۵۵۵
بار مغزه O	۱/۴۰۲۳۰۳	۱/۶۱۴۷۴۳	۱/۵۳۴۶۳	۱/۷۴۷۳۲۸
بار ظرفیت O	۵/۲۵۶۹۵۷	۵/۲۵۰۷۰۷	۵/۱۱۰۷۷۰	۵/۳۰۸۲۲۲
باربیرون کره‌ی مافین-تین	۱/۳۴۴۰۷۶	۱/۱۳۴۸	۱/۳۵۴۶۲	۱/۴۵۰۹۱
مجموع بارهای داخل و خارج کره‌ی مافین-تین	۸/۰۰۰۰۲	۸/۰۰۰۰۲	۸/۰۰۰۰۲	۸/۵۰۶۴۶

جدول ۶: تجزیه‌ی بار مؤثر اتم‌های تشکیل دهنده‌ی SnO_2 در تقریب‌های مختلف.

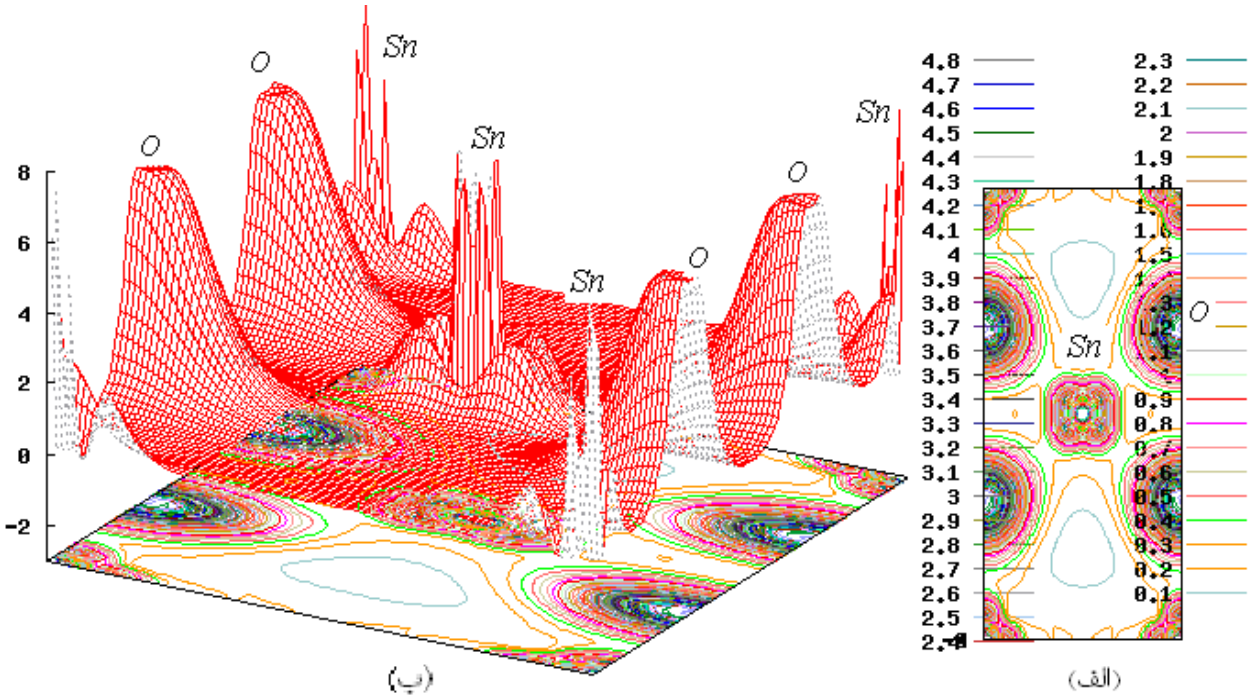
نوع تقریب	FP-LAPWGGA96	FP-LAPW GGA91	FP-LAPW LDA	FP-LAPWLSDA	بار اسمی
بار مؤثر اتم O	۱/۶۵۷۰	۱/۶۵۷۳	۱/۶۴۹۸	۱/۶۴۵۲	۲
بارمؤثر اتم Sn	۰/۴۸۷۶	۰/۴۸۹۵	۰/۴۹۹۹	۰/۴۸۸۰	۱

الکترون بین دو اتم نشان‌دهندهٔ قوی بودن پیوندی بین آن‌ها است وتراکم کمتر الکترون بین دو اتم پیوند ضعیف‌تری را بین آنها نشان می دهد. نمودار چگالی ابرالکترونی نشان دهندهٔ تراکم الکترون‌ها در مکان‌های مختلف می‌باشد و از روی آن می‌توان فهمید که درچه نقاطی تراکم الکترون بیش‌تر و در چه نقاطی کم‌تراست. چگالی ابرالکترونی برای ترکیب SnO_2 در صفحهٔ (۱۱۰) برای تمام تقریب‌ها محاسبه شده است، که فقط یکی از آنها در شکل (۳) نشان داده شده است.

چگالی ابرالکترونی نشان داده شده بیانگر وجود یک پیوند یونی بین اتم‌های تشکیل دهندهٔ این ترکیب است که وجود فرمول یونی و انحراف از فرمول اسمی این موضوع را تأئید می‌کند.

۴_ نتیجه گیری

محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت‌شده خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی انجام شده است. از تحقیقات انجام شده می‌توان نتیجه گرفت ترکیب SnO_2، ماده‌ای سخت است. تراکم‌پذیری در راستای محورهای مختلف بیانگر این است که ترکیب SnO_2 ناهمسانگرد است (در راستای محور a کمتر از راستای محورهای دیگر است) و این می‌تواند ناشی از تفاوت طول پیوندها و نوع پیوندها در این ترکیب باشد. پارامترهای ساختاری به‌دست‌آمده دراین تحقیق سازگاری نسبتاً خوبی با داده‌های به‌دست‌آمده دیگران دارد. همچنین انحراف فرمول یونی این ترکیب از فرمول اسمی آن بیانگر وجود پیوندهای



شکل۳: چگالی ابرالکترونی SnO_2 درصفحه‌ی (۱۱۰) با تقریب $GGA\,96$ در فاز $CaCl_2$ الف:در دو بعد ، ب: در سه بعد

یونی در بین اتم‌های آن است، که چگالی ابر الکترونـی هـم آن را تأیید می‌کند.

مراجع

1. http://en.Wikipedi.org/Wiki/Tindioxide(2008)
2. K. L. Chopra. et al.. Thin Solid Films 102, 1 (1983).
3. T. J. Coutts, et al., MRS. Bull. 25, 58 (2000).
4. C.Sevik and C. Bulutay, phy. Rev. B 74, 193201 (2006).
5. F.Sherwood Taylor Heineman ab Inorganic & Theoretical Chemistry, 6th Edition (1942).
6. E. Elangovan and K. Ramamurthi, Cryst. Res. Technol. 38, 779 (2003).
7. D. Dobler,S. Oswald,G. Behr, J. Werner, and K.Wetzig, Cryst.Res. Technol38, 956 (2003).
8. G. Frank, et al., Sol. Energ. Matt. 8, 387 (1983).
9. . H. Hellwing, A. F.Goncharov,E. Gregoryanz,H. K. Mao and R.J. Hemley, Phys.Rev. B 67,174110 (2003).
10. F.Haj Hassan, A. Alaeddine, M. Zoaeter and I.Rachidi, Interaction Journal of modern physics B, (2005).
11. P.Blaha, K.Schwarz WIEN2k, Vienna university of technology, Austria (2006).
12. J. P. Perdew, J. A. Chavary and etal, Phys. Rev. B48, 6671-6687 (1922).
13. H. Salehi, India Journal of physics, Vol 80, No.12, 1167-1246 (2006).
14. E. K. Evangelou,C. Wiemer, and M. Fanciulli, M. Sethu and W. Cranton,J. Appl. Phys., 94(1), 318-325,(2003).
15. J. Haines and J. M. Leger, Phys. Rev. B 55, 11144 (1997).