

بررسی فاز توپولوژی و ویژگی‌های مغناطیسی آلیاژهای $\text{ScPdSb}_x\text{As}_{1-x}$ ($x=0,0.25,0.5,0.75,1$) با استفاده از نظریه تابعی چگالی

محدثه کریمی^۱، امین الله واعظ^۲

^۱ کارشناس ارشد فیزیک، دانشگاه اصفهان

^۲ عضو هیئت علمی گروه فیزیک، دانشگاه اصفهان

چکیده

هدف پژوهش بررسی فاز توپولوژی و ویژگی‌های مغناطیسی آلیاژهای $\text{ScPdSb}_x\text{As}_{1-x}$ ($x=0,0.25,0.5,0.75,1$) با استفاده از نظریه تابعی چگالی می‌باشد. آلیاژهای هویسلر را برای مطالعات تجربی به روش‌های مختلف تولید می‌کنند. به طور کلی عناصر این ترکیب‌ها را که البته باید خلوص بالایی داشته باشند در کوره تحت بازپخت قرار می‌دهند و سپس به‌طور ناگهانی سرد می‌کنند. این عملیات حرارتی برای ترکیب‌های مختلف این آلیاژها و ساختار ماده مورد نظر در دماهای مختلف و یا با چندین بار افزایش دما صورت می‌گیرد. البته کار حاضر محاسباتی است و یک کار تجربی نمی‌باشد. در این کار از کدهای محاسباتی براساس نظریه تابعی چگالی استفاده شده است، که در آن برای الکترون‌های ظرفیت در نزدیک هسته از شبه پتانسیل به جای پتانسیل واقعی دستگاه استفاده می‌شود. این کار در کاهش حجم محاسبات تاثیر زیادی دارد و دقت ویژگی‌های فیزیکی حاصل با استفاده از آن (البته به غیر از ویژگی‌های مربوط به ناحیه نزدیک هسته‌ها) خوب است. سپس فازهای ممکن را برای این ترکیب‌ها را شناسایی کرده و فایل‌های ساختاری آن‌ها را می‌سازیم. پس از آن، با توجه با حل معادله‌ی شرودینگر و تعیین ویژه مقادیر و ویژه توابع به روش خودسازگار، خواص فیزیکی در این ترکیب‌ها را یافته و به تجزیه و تحلیل نتایج خواهیم پرداخت. در آخر ویژگی‌های ساختاری آلیاژهای $\text{ScPdSb}_x\text{As}_{1-x}$ ($x=0,0.25,0.5,0.75,1$) همانند ثابت شبکه در حضور برهم کنش اسپین-مدار محاسبه و با نتایج تجربی موجود مقایسه شده است. همچنین چگالی حالت‌های الکترونی و ساختار نواری آلیاژهای $\text{ScPdSb}_x\text{As}_{1-x}$ ($x=0,0.25,0.5,0.75,1$) بررسی شده است. تمامی محاسبه‌های این پایان‌نامه در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسباتی وین نسخه ۲۰۱۶ انجام شده است. برای محاسبه انرژی تبادلی-همبستگی رهیافت‌های GGA به کار گرفته شده است.

واژه‌های کلیدی: نظریه تابعی چگالی، فاز توپولوژی، آلیاژهای هویسلر، وارونی ساختار نواری، چگالی حالت‌های الکترونی

مطالعات علوم کاربردی در مهندسی

دوره ۶، شماره ۲، تابستان ۱۳۹۹، صفحات ۹۲-۱۱۹