

بررسی جامع پایداری استاتیکی و دینامیکی، الکترونیکی و نوری هویسلرن Zr_2TiSi : یک مطالعه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی (DFT)

نصرتعلی وهاب زاده

استادیار گروه فیزیک، واحد پارس آباد مغان، دانشگاه آزاد اسلامی، پارس آباد، ایران

چکیده

بر اساس تئوری تابعی چگالی، پایداری مکانیکی، خواص الکترونیکی و نوری ترکیب هویسلر Zr_2TiSi بررسی شده است. این ترکیب دارای پایداری فونون با نقطه حالت پایه منحنی انرژی - حجم و دارای گشتاور مغناطیسی $2 \mu_B$ است. خواص اپتیکی رفتار نیمه‌هادی را تأیید می‌کند به طوری که مقدار استاتیک تابع دی‌الکتریک در هر دو جهت X و Z به ترتیب ۳٫۸ و ۶٫۶ است. علاوه بر این، بخش خیالی تابع دی‌الکتریک در انرژی‌های پایین‌تر در جهت‌های X و Z بسیار کم نزدیک به صفر است، که تمایل دارد نیمه‌هادی‌هایی باشد که توسط تابع جذبش تأیید می‌شود. ضریب Seebeck این ترکیب مقدار قابل توجهی $1-230 \mu V/K$ در دماهای پایین و کمتر از $1-40 \mu V/K$ در دمای اتاق را نشان می‌دهد.

واژه‌های کلیدی: Zr_2TiSi Heuslerene، DFT، پایداری دینامیکی، ویژگی نوری

مقدمه

پس از تحقق نظری دی گروت در مورد مواد نیمه فلزی در سال ۱۹۸۳ [۱]، مطالعه مواد با خواص نیمه فلزی به یک رشته نوظهور در فیزیک تبدیل شده است. تلاش های زیادی برای درک، پیش بینی و توسعه مواد نیمه فلزی جدید انجام شده است

دلیل اصلی این تلاش، استفاده بالقوه از نیمه فلزات برای کاربردهای دستگاه اسپینترونیک [۲،۳]، مانند حافظه دسترسی تصادفی مغناطیسی [4] (MRAM) بوده است. خانواده ترکیبات هویسلر با بیش از هزار عضو توجه بسیاری از محققین را به خود جلب کرده است. خواص فیزیکی مختلف، مانند خواص نیمه فلزی، خواص مغناطیسی مختلف، اثر تشکیل حافظه [۵،۶]، اثر مغناطیسی-حرارتی بالا [۷-۹] و مقاومت بالا [۱۰،۱۱]، دلیل توجه گسترده به این ترکیبات است.

فرمول شیمیایی تمام ترکیبات هویسلر به طور کلی X_2YZ است که در آن اتم های X و Y معمولاً عناصر گروه انتقالی هستند و مغناطیسی هستند و اتم غیر مغناطیسی Z یکی از عناصر اصلی گروه است. آلیاژهای هویسلر ترکیبات بین فلزی سه گانه با ساختار X_2YZ هستند که X و Y عناصر انتقالی هستند. (Fe، منگنز، کروم، Ti، V، Ni، Co، ...) و Z عناصر گروه های IV، III، و V هستند (Al، Ga، Ge، As، Sn، In و غیره) ساختارهای کریستالی ترکیبات هویسلر به طور ایده آل در چهار شبکه FCC هستند که هر یک نسبت به بقیه در امتداد قطر اصلی به اندازه یک چهارم قطر جابه جا می شوند [۱۲-۱۴]

مواد دو بعدی (2d) یکی از مهم ترین موادی هستند که در طول تاریخ به طور گسترده مورد مطالعه قرار گرفته است.

این محبوبیت مواد دو بعدی به دلیل بارهای محدود و جریان گرما در یک صفحه دو بعدی است که منجر به پدیده های فیزیکی غیرعادی می شود. بسیاری از مواد خواص منحصر به فردی را به شکل 2D پیدا می کنند که این خواص را در ساختارهای سه بعدی نشان نمی دهند. به عنوان مثال، اکسیدهای مس و ترکیبات آهن خاصی در دماهای بالا در فاز ۲ بعدی، بسته به همبستگی قوی الکترون ها که فقط در فاز دو بعدی رخ می دهد، خواص ابررسانایی از خود نشان می دهند. [۱۵]

اگرچه ظهور گرافن با خواص منحصر به فردش پنجره جدیدی را به دنیای مواد گشوده است، اما برخی محدودیت ها مانند شکاف انرژی صفر، استفاده از گرافن را در صنایع الکترونیک محدود می کند. برای غلبه بر این مشکل، بسیاری از محققان تشویق شده اند تا به دنبال ترکیبات گرافن مانند دیگری مانند ZnS ، MoS_2 ، $MoTe_2$ و غیره باشند.

در ساختار دوبعدی هویسلر Zr_2TiSi به دلیل وجود بارهای آزاد بر روی سطح ناشی از اوربیتال های d و p اتم های Zr ، Ti و Si ، انتظار تغییراتی در رفتار مغناطیسی، الکترونیکی و اپتیکی این ترکیب نسبت به فاز توده ان داریم. کنترل و تغییر شکاف نواری و ممان مغناطیسی در مواد همیشه ابزار مفیدی برای دستیابی به ترکیبات ایده آل در صنعت است. ترکیبات هویسلر همچنین پتانسیل استفاده در صنایع اسپینترونیک و اپتیک دارند، بنابراین انتظار داریم با ساخت یک نمونه دو بعدی از این ترکیبات به عنوان Zr_2TiSi Heuslerene به نتایج قابل قبول تری در کاربردهای صنعتی دست یابیم.

جزئیات محاسباتی

چارچوب نظریه تابعی چگالی [17] (DFT) برای انجام محاسبات اصول اولیه استفاده شده است.

برهمکنش الکترون ها با هسته ها به عنوان یک مسئله چند جسمی به معادلات کوهن-شام به عنوان معادلات یک الکترونی تقلیل می یابد [۱۸]. روش امواج تخت تقویت شده خطی شده با پتانسیل کامل [19] (FP-LAPW) برای حل معادلات کوهن-شام با استفاده از بسته Wien2K [20] استفاده می شود.

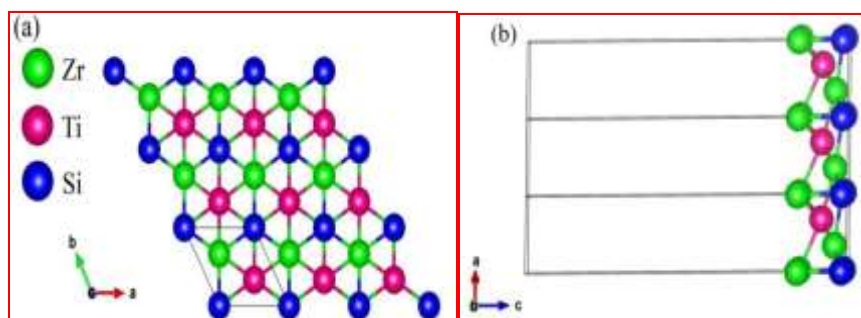
علاوه بر این، پارامتر Perdew-Burke-Ernzerhof از تقریب گرادیان تعمیم یافته [21] (PBE-GGA) برای محاسبه پتانسیل تبادل-همبستگی اعمال می شود. محاسبات پلاریزه اسپین برای هر دو کانال اسپین بالا و پایین انجام می شود [22]

شعاع مافین تین برای همه اتم ها 2.0 a.u. در نظر گرفته می شود و سایر پارامترهای ورودی روی $RK_{\text{max}}=8.0$ ، $l_{\text{max}}=10$ و $G_{\text{max}}=12(\text{a.u.})^{-1}$ تنظیم می شوند. علاوه بر این، انرژی قطع برای جداسازی الکترون های هسته و والانس و K point در ناحیه بریلوین تقلیل ناپذیر به ترتیب -8 Ry و $2 \times 12 \times 12$ در نظر گرفته می شود. تیرانس همگرایی بار و انرژی برای محاسبات خودسازگار به ترتیب کمتر از 10^{-4} الکترون و 10^{-4} رایان Ry است.

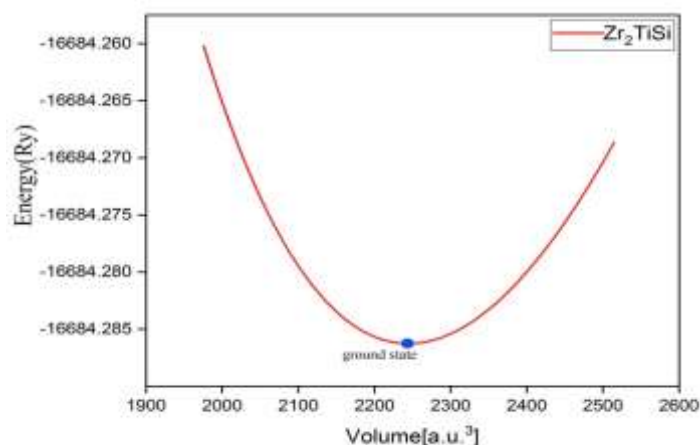
نتایج و بحث

ساختار

از آنجایی که Zr_2TiSi دارای پایه FCC است، برش تک لایه ای از این ساختار در جهت (۱۱۱) مطابق با شکل (الف) (۱) منجر به یک مقطع شش ضلعی گرافن مانند (Zr_2TiSi Heuslerene) می شود. شکل (ب) ضخامت این لایه را نشان می دهد. همانطور که در شکل (الف) نشان داده شده است، این ترکیبات در ساختارهای شش ضلعی با یک اتم در مرکز قرار دارند. با این حال، سلول های شش ضلعی در یک صفحه نیستند و در سه لایه تو در تو با تکینگی نسبتاً زیاد در کنار یکدیگر قرار می گیرند. انتظار می رود این ترکیب گرافن به دلیل نوع اتم های نوع فلز در این ترکیب مانند Ti و Zr و انتظار وجود اتم های pd و dd بین آن ها، پایداری مکانیکی خوبی داشته باشد. با این حال، عدم تقارن پیوندها و وجود اتم های Ti و Zr این انتظار را افزایش می دهد که این ترکیب دارای بار مغناطیسی است. شکل (۲) منحنی تغییر انرژی را بر حسب حجم نشان می دهد. وجود یک نقطه مینیمم حجم تعادلی این ترکیب و نقطه حالت پایه را نشان می دهد، اما شیب زیاد منحنی ها در دو طرف نشان می دهد که این کریستال دارای سختی بالایی باشد. نتایج این منحنی شامل ثابت های شبکه در حجم تعادل در نقطه حالت پایه در جدول (۱) آمده است. مدول حجمی این ترکیب حدود 20 گیگا پاسکال است مشروط بر اینکه سختی این ترکیب در محدوده فایبرگلاس باشد، اما مشتق مدول حجمی نشان دهنده وجود پیوند یونی بین اتم های این ترکیب است. بنابراین، رفتار مغناطیسی از این ترکیب انتظار می رود و گشتاور مغناطیسی کل ترکیب $2\mu_B$ است، که بیان می کند که این ترکیب از قانون اسلاتر پائولی پیروی می کند. در ادامه جهت بررسی ممان مغناطیسی این ترکیب با ترکیبات دیگر مانند Ti_2FeGe و Mn_2CoAl ، Cr_2CoP ، V_2CrGe این ترکیبات دارای ممان مغناطیسی مشابه ترکیب Zr_2TiSi دارند [23]. زیرا در انتخاب ضخامت این گرافن، نوع استوکیومتری آن به درستی رعایت شده است.



شکل (۱): شبکه کریستالی هویسلر Zr_2TiSi از نمای بالا و کنار.



شکل (۲): منحنی انرژی-حجم هویسلر Zr_2TiSi .

جدول (۱): پارامترهای شبکه (a, c)، حجم تعادل (V)، مدول توده (B) و مشتق آن (B')، گشتاور مغناطیسی کل (M_{tot})، و انرژی کل (E)

parametr	$a (A^0)$	$c (A^0)$	$V(Bohr^3)$	$B(Gpa)$	B'	$M_{tot}(\mu_B)$	$E(Ry)$
Zr_2TiSi -2D	4.5213	18.7696	2244.665	19.268	3.984	2.0	-16684.286274

جدول (۲): ضرایب الاستیک C_{ij} ، مدول یانگ (Y)، مدول برشی و نسبت پواسون ν .

Material	C_{11}	C_{22}	C_{12}	C_{66}	Y_x	Y_y	S_{xy}	ν_{xy}	ν_{yx}
s	(Gpa)	(Gpa)	(Gpa)	(Gpa)	(Gpa)	(Gpa)			
Zr_2TiSi	68.672	68.672	44.164	12.254	40.269	40.269	12.254	0.643	0.643

الاستیک

در راستای بررسی پایداری مکانیکی ترکیب Zr_2TiSi یکی از پارامترهای مهم بررسی ویژگی الاستیکی آن است ضرایب تانسور الاستیکی در ساختار دوبعدی عبارت است از C_{11}, C_{12}, C_{16} همانطور که در جدول (۲) مشاهده می‌شود تمامی این پارامترها مثبت هستند و تفاضل $C_{11}-C_{12}$ مثبت است بنابراین ترکیب در مقابل کشسانی مقاومت بالایی را از خود نشان می‌دهد و تحت تاثیر استرس های سطحی از خود مقاومت نشان می‌دهند همچنین SHEAR MODUL این ترکیب نشان

می‌دهد این ترکیب در مقابل برش های سطحی مقاوم است و *young modul* در راستای محورهای *x* و *y* عدد نسبتاً بزرگ $40.269(N/M)$ است. پس می‌توان انتظار داشت پیوند بین اتم های تشکیل دهنده این ترکیب از مقاومت لازم برخوردار است ضریب پواسون این ترکیب با توجه به آن که بزرگتر است ۰.۳ است تأیید کننده پیوند یونی بین اتم های تشکیل دهنده آن است بنابراین می‌توان ادعا کرد که از لحاظ تجربی در صورت ساخت این ترکیب از استحکام مکانیکی لازم جهت کاربردهای صنعتی برخوردار است چرا که در این ترکیب هم نقطه حالت پایه داریم هم پایداری کشسانی وجود دارد و هم پایداری فونونی بدست آمده است پس انتظار می‌رود که این ترکیب کاملاً به لحاظ مکانیکی پایدار باشد. [24-26]

با این حال، تاکنون هیچ تلاشی برای سیستم های دو بعدی گزارش نشده است. به طور کلی، شش عنصر مستقل $\{C_{11}, C_{12}, C_{16}, C_{26}, C_{66}\}$ به عنوان ثابت های الاستیک برای یک ماده دو بعدی مورد نیاز است، اما برای مورد خاص کریستال های شش ضلعی، آنها به یک ردیف به صورت $\{C_{11}, C_{12}, C_{66}\}$ کاهش می‌یابند. که در آن آخرین عضو به دو عضو دیگر توسط $C_{66} = (C_{11} - C_{12}) / 2$ وابسته است. ثابت های الاستیک مواد دوبعدی را می‌توان با رویکرد انرژی محاسبه کرد، مانند ساختارهای سه بعدی، با این تفاوت که واحد پاسکال (نیوتن بر متر مربع) باید با (نیوتن بر متر) جایگزین شود.

داریم $(\delta = 0)$ بنابراین، با استفاده از مشتق مرتبه دوم انرژی وابسته به کرنش در کرنش صفر

$$C_{ij} = \frac{1}{A_0} \left[\frac{\partial^2 E}{\partial \delta_i \partial \delta_j} \right]_{\delta_i = 0} \quad (1)$$

که در آن A_0 مساحت سیستم بدون کرنش (منطقه اصلی) در صفحه *x-y* است. سایر ضرایب مکانیکی را می‌توان با کمک ثابت های الاستیک به شرح زیر یافت [16].

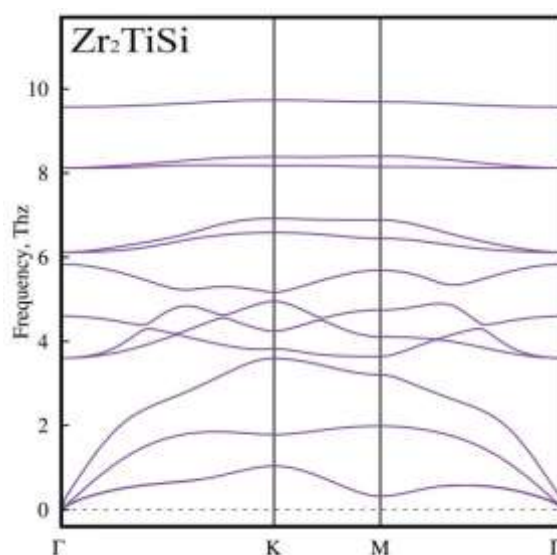
$$Y_x = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}C_{21}}{C_{22}} \quad (2)$$

$$Y_y = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}C_{21}}{C_{11}} \quad (3)$$

$$s_{xy} = C_{66} \quad (4)$$

$$\nu_{xy} = \frac{C_{21}}{C_{22}} \quad (5)$$

$$\nu_{yx} = \frac{C_{21}}{C_{11}} \quad (6)$$

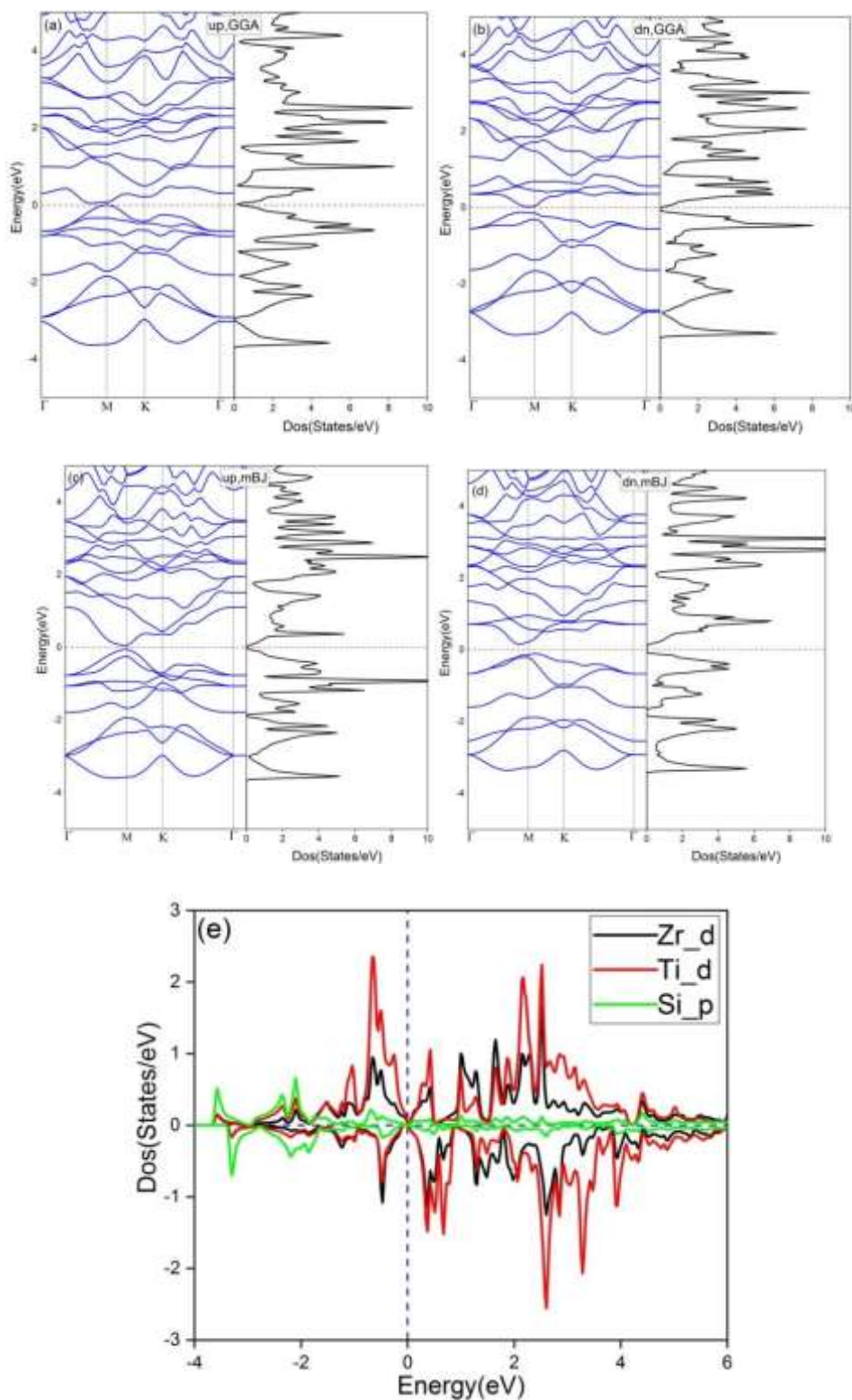


شکل (۳): ساختار باند فونونی. Zr_2TiSi Heuslerene.

در شکل (۴)، منحنی‌های چگالی کل حالت (DOS) این ترکیب در دو کانال چرخشی بالا و پایین در پانل‌های (a) تا (e) با دو تقریب GGA و mBJ بررسی شده‌اند. نقطه مشترک هر دو منحنی DOS ناهمسانگردی در دو چرخش بالا و پایین است، اما این ناهمسانگردی در تقریب mBJ بیشتر مشهود است، زیرا رفتار نیمه‌هادی مغناطیسی را می‌توان مشاهده کرد، به‌طوری‌که دارای یک شکاف 0.1 eV در اسپین بالا است. شکاف 0.24 eV در اسپین پایین می‌باشد. لازم به ذکر است که حالت‌های الکترونیکی زیر تراز فرمی کاملاً پیوسته هستند که نشان می‌دهد امکان رفتار یکنواخت حفره‌ها و الکترون‌ها در حالت برانگیخته در سطح فرمی وجود دارد. شکل دندان‌اره‌ای این نمودارها به دلیل وجود آن است. الکترون‌های آزاد روی سطح هوسلرن، این نمودارها را محلی‌تر می‌کند. با وجود این، منحنی‌های DOS به دلیل حجم بالای الکترون‌ها و حفره‌ها پیوسته هستند. نمودار DOS جزئی برای این ترکیب در پانل (c) برای اوربیتال‌های d اتم‌های Zr و Ti و اوربیتال p اتم Si رسم شده است. مشاهده می‌شود که بیشترین علت ناهمسانگردی در منحنی‌های DOS مربوط به Ti-d است که اکثر حالت‌های الکترونیکی زیر سطح فرمی در اسپین بالای متعلق به این اتم است. بالاتر از سطح فرمی، حالت‌های الکترون Ti-d در حداکثر اسپین از 2 eV به بعد است و یون‌های Zr-d بیشترین سهم را در اسپین بالا دارند که از 0 تا 1.7 الکترون ولت متغیر است. بیشترین سهم Si-p در اسپین بالا در انرژی‌های کمتر از 2 الکترون ولت رخ می‌دهد، اما حالت‌های الکترونیکی Zr-d در محدوده 0 تا 2 الکترون ولت غالب هستند و نقش مهمی بالاتر از سطح Ti-d فرمی بازی می‌کنند. باز هم مانند اسپین بالا، سهم Si-p در محدوده 2 تا 4 الکترون ولت است. همپوشانی حالت‌های الکترونیکی نشان می‌دهد که پیوندهای بین اتم‌های Zr و Ti از نوع d-d، بین اتم‌های Zr و Si از نوع pd و بین اتم‌های Ti و Si از نوع pd هستند. در هم تنیدگی چگالی حالات در ناحیه هدایت در هر دو اسپین بیانگر این است که الکترون‌ها در هر حالت راهی برای هدایت در هوسلرن پیدا می‌کنند.

در ادامه ساختار باند Zr_2TiSi را در دو اسپین بالا و پایین در پانل‌های (a) و (b) برای GGA، و همچنین در پانل‌های (c) و (d) برای تقریب mBJ در منطقه بریلوین اول نمایش داده شده است. نمودارها کاملاً با منحنی‌های DOS سازگار هستند. چگالی زیاد حالت‌های زیر و بالاتر از سطح فرمی نشان می‌دهد که وقتی الکترون‌های این ترکیب برانگیخته می‌شوند، در پانل

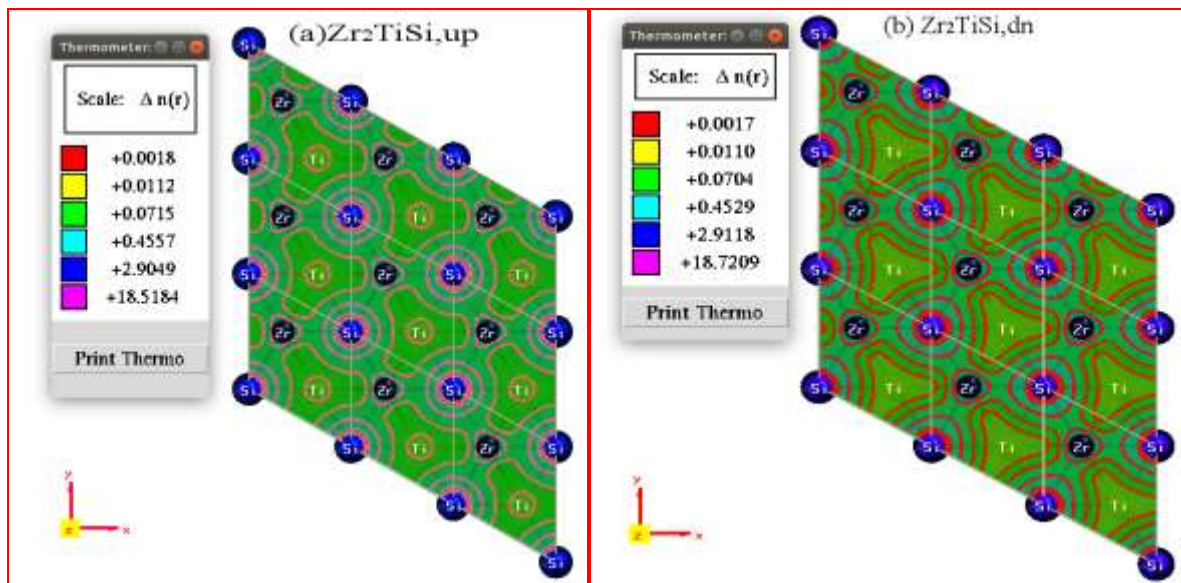
(c) مشاهده می‌شود که این ترکیب یک نیمه‌رسانا با شکاف مستقیم بسیار کوچک است در حالی که شکاف نواری اسپین پایین غیرمستقیم است.



شکل (۴): کل DOS و ساختار باند (a,b) توسط GGA، (c,d) توسط mBJ، DOS (e) جزئی توسط mBJ.

چگالی الکترونی ساختار هولسرن Zr_2TiSi در شکل (۵) در دو اسپین بالا و پایین ترسیم شده است. کاملاً واضح است که با چرخش میدان مغناطیسی خارجی، شکل چگالی الکترون در سطح صفحه هولسرن تغییر می‌کند که نشان دهنده رفتار مغناطیسی این ترکیب است. فراوانی چگالی الکترون در اطراف اتم های Ti و Si در اسپین بالا بسیار زیاد است در حالی که این چگالی الکترون در اسپین پایین به شدت کاهش می‌یابد. این تغییر چگالی به دلیل تغییر جهت میدان مغناطیسی نشان می‌دهد که این ورق گرافن مانند می‌تواند به عنوان یک صفحه کلید روشن/خاموش استفاده شود که می‌تواند تحت یک میدان مغناطیسی خارجی کنترل شود. همچنین مشاهده می‌شود که با تغییر جهت اسپین، گرادیان چگالی بار در اطراف اتم ها تغییر می‌کند که نشان دهنده تشکیل چندقطبی های الکتریکی در صفحه این گرافن مانند است، بنابراین این ترکیب مورد مناسبی برای اهداف ترموالکتریکی است. نکته دیگر افزایش بسیار زیاد چگالی الکترون در اسپین بالا، بستر مناسبی برای هدایت حرارتی، هدایت الکترون و هدایت الکتریکی فراهم می‌کند. تکینگی نزدیک سطح، لایه و زیرسطح، دریایی از الکترون ها را در این اسپین ایجاد می‌کند.

همانطور که در پانل (a) مشاهده می‌شود، در اسپین بالا در سطح گرافن، چگالی بالایی در اطراف Si و لایه زیر سطح و همچنین چگالی بالا در اطراف اتم های Ti مشاهده می‌شود، اما با تغییر جهت اسپین و در اسپین پایین، این چگالی های بالا کاهش قابل توجهی را تجربه می‌کنند به طوری که چگالی بار در اسپین بالا تقریباً ۱۸۰۰۰ بزرگتر از اسپین پایین در صفحات هولسرن است.



شکل (۵): چگالی الکترون هولسرن Zr_2TiSi در دو اسپین بالا و پایین.

خواص نوری

برای بررسی برهمکنش فوتون ها با ماده و به دست آوردن خواص نوری، تابع دی الکتریک آن ماده بررسی می‌شود. این تابع، پاسخ کریستال به میدان الکترومغناطیسی است. تابع دی الکتریک به شکل $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ مختلط است. با داشتن بخش موهومی برای همه فرکانس ها، بخش حقیقی را می‌توان از تبدیل کرامرز-کرونینگ [۲۸،۲۷] به دست آورد:

$$\text{Re } \epsilon^{-1}(q, \omega) = 1 + P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im } \epsilon^{-1}(q, \xi)}{\pi} \frac{d\xi}{\xi - \omega},$$

$$\text{Im } \varepsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega) = -P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{[\text{Re } \varepsilon^{-1}(\mathbf{q}, \xi) - 1]}{\pi} \frac{d\xi}{\xi - \omega},$$

تابع دی‌الکتریک مختلط، $(\omega)\varepsilon$ ، نشان‌دهنده خواص نوری است و به ساختار نوار الکترونیکی بلور بستگی دارد. مطالعات تابع دی‌الکتریک با استفاده از طیف‌سنجی نوری در تعیین ساختار نواری کل مفید هستند. این تابع دارای دو گذار درون باندی و بین باندی است. گذار درون باندی به دلیل برانگیختگی پلاسمون‌های حجمی (جذب توسط الکترون‌های آزاد) و گذار بین باندی به دلیل برانگیختگی در لبه‌های جذب است. مقدار تابع دی‌الکتریک در انرژی‌های بسیار پایین (تقریباً صفر) تابع دی‌الکتریک استاتیک (دی‌الکتریک ثابت) است. شکل ۶ پارامترهای نوری مختلف ترکیب هویسلر Zr_2TiSi را در دو جهت در صفحه (xx) و عمود بر صفحه (zz) از شکل (a) تا (g) نشان می‌دهد. در شکل (a) بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک قابل مشاهده است که رفتار نیمه‌هادی را در هر دو جهت نشان می‌دهد، اما مقدار استاتیک آن در امتداد محور Z کمتر است.

بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک، نشان‌دهنده پاسخ نوری ماده به نور تابیده شده بر آن است. بخش استاتیک آن $\varepsilon_1(\omega)$ (at $\omega=0$) اطلاعات مهمی در مورد ماهیت ماده به ما می‌دهد، به‌طوری‌که در فلزات مقدار آن به بی‌نهایت و مقادیر زیاد، در نیمه‌رساناها کمتر از چهار و در مواد عایق کمتر از یک است. مقادیر منفی $\varepsilon_1(\omega)$ نشان‌دهنده رفتار فلزی ماده در هر انرژی است. بنابراین، انتظار می‌رود خواص نیمه‌رساناها برجسته تر باشد.

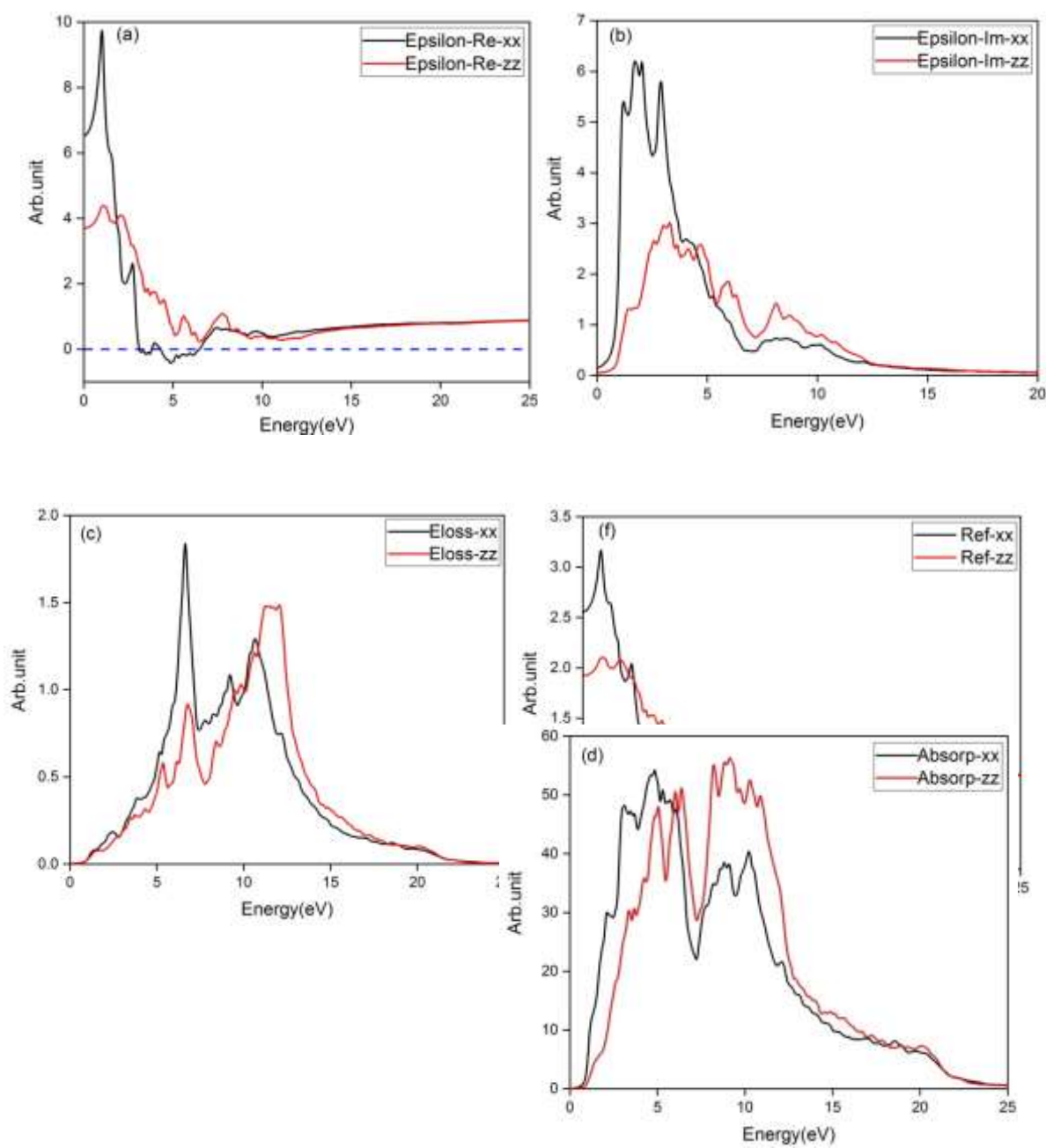
در امتداد محور X، با افزایش انرژی فوتون فرودی، به حداکثر مقدار در انرژی ۱,۵ eV می‌رسد و سپس با شیب بسیار تندی کاهش می‌یابد. در این جهت، پیک دیگری در ناحیه مرئی و در لبه UV تا ۵/۷ eV وجود دارد که مقدار آن یا منفی یا مقداری نزدیک به صفر است، که نشان می‌دهد پاسخ نوری در این جهت و این محدوده انرژی، پاسخ واضحی نیست زیرا چگالی بار آزاد زیادی در این جهت روی صفحه هویسلرن وجود دارد. این منجر به پاسخی مشابه فلزات می‌شود، اما مقدار اپسیلون از ۵/۷ eV به بعد به مقدار اشباع کمتر از یک می‌رسد و مانند خلأ رفتار می‌کند. در جهت محور Z نیز مشاهده می‌شود که با افزایش انرژی فوتون فرودی، بزرگی بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک با شیب ملایم‌تری در مقایسه با جهت محور X کاهش می‌یابد و از محدوده ۵/۷ eV به بعد، رفتاری مشابه جهت X دارد، با این تفاوت که مقادیر آن گاهی منفی است. بنابراین، با افزایش انرژی فوتون فرودی در جهت Z، رفتاری نیمه‌هادی و خلأ مانند برای این ترکیب مشاهده می‌شود.

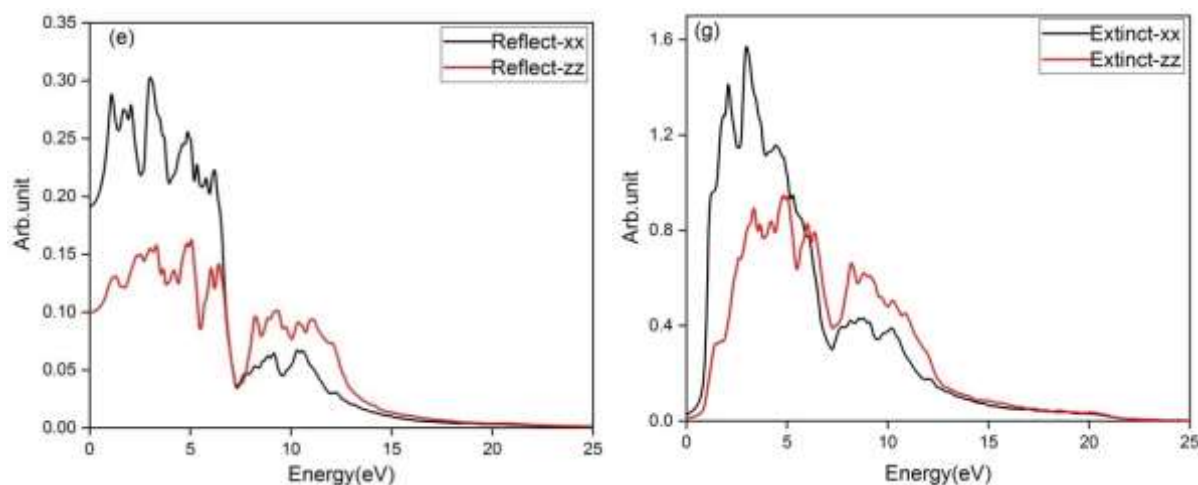
در شکل (ب)، تغییرات منحنی‌های بخش موهمی اپسیلون در دو جهت رسم شده‌اند. پیک‌های بخش موهمی تابع دی‌الکتریک $(\omega)\varepsilon_2$ نشان‌دهنده گذارهای الکترونی درون باندی و بین باندی در هر انرژی نوری هستند. در مواد عایق و نیمه‌رسانا، نمودار این تابع دارای یک شکاف نوری است. همانطور که انتظار می‌رود، رفتار نیمه‌هادی در هر دو جهت X و Z مشاهده می‌شود با این تفاوت که یک شکاف صفر در جهت X قابل تشخیص است. اما در جهت Z شکافی در حدود 1 eV وجود دارد. قله‌های این منحنی نشان‌دهنده گذارهای الکترونی هستند. همانطور که مشاهده می‌شود، قله‌های اصلی در لبه‌های IR، مرئی و UV در امتداد محور X رخ می‌دهند که نشان‌دهنده گذارهای بین باندی و درون باندی است، اما قله‌ها دارای یک تغییر رنگ آبی در امتداد محور Z هستند که در انرژی‌های بالاتر رخ می‌دهد. علاوه بر این، قله‌های در جهت محور X تا ۵ eV بزرگتر هستند و قله‌های در محور Z پس از ۵ eV طولانی‌تر می‌شوند. پس از ۱۰ eV، عملاً هیچ گذار الکترونی رخ نمی‌دهد و ترکیب هویسلر Zr_2TiSi به عنوان یک ماده شفاف در هر دو جهت عمل می‌کند. با مقایسه بخش‌های حقیقی و موهمی با ترکیبات CaC_2Li و SrC_2Li ، بخش تابع استاتیک و بخش موهمی با Zr_2TiSi [۳۰، ۲۹] مطابقت خوبی دارند.

در شکل (c)، منحنی‌های طیف اتلاف انرژی در دو جهت ذکر شده نشان داده شده‌اند. لازم به ذکر است که در اینجا، به طور مشابه، قله‌های اصلی در امتداد محور Z نسبت به X دارای یک تغییر رنگ آبی هستند و یک شکاف در ناحیه IR وجود دارد. مقادیر تلفات در ناحیه IR و لبه‌های UV کوچک هستند، که نشان می‌دهد این ترکیب برای اپتیک مناسب است. شکل ۶. (الف، ب) بخش‌های حقیقی و موهمی تابع دی‌الکتریک، (ج) تلفات، (د) جذب، (ه) بازتاب‌ها، (و) شکست، (ز) خاموشی در امتداد دو جهت X و Z. و کاربردهای اپتوالکترونیکی در ناحیه IR و UV. وجود یک پیک بزرگ دیراک در ناحیه ۶ eV، که با

مقدار صفر بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک همزمان است، نوسانات پلاسمون را در این انرژی تأیید می‌کند. در شکل (d)، منحنی‌های جذب رسم شده‌اند و همانطور که انتظار می‌رود، جذب در هر دو جهت با شکاف ۱ eV شروع می‌شود. مقدار اصلی جذب در جهت محور X در انرژی‌های پایین‌تر (۱ تا ۵ eV) رخ می‌دهد، اما در جهت محور Z در ناحیه ۱۰ eV، با تغییر جهت نور فرودی به نمونه، رفتار جذب نوری نیز تغییر می‌کند. در نتیجه، با چرخش جهت نور، تغییری در رفتار نوری هوسیلا Zr_2TiSi مشاهده می‌شود. در شکل (e)، ضریب بازتاب در دو جهت بررسی شده است. مشاهده می‌شود که مقادیر استاتیک آن برای جهت X و Z به ترتیب ۰.۱۹ و ۰.۱ است و در هر دو حالت، با افزایش انرژی نور فرودی، به حداکثر مقدار خود به ترتیب در حدود ۰.۳ و ۰.۱۵ می‌رسد. با این حال، پس از ۷.۵ به سمت مقادیر پایین‌تر جابجا می‌شود.

این نتایج نشان می‌دهد که به طور کلی، این ترکیب رفتار فلزی از خود نشان نمی‌دهد و بیشترین نور را در ۵ eV جذب می‌کند. در مقایسه با شکل (b)، ۷.۵ تا ۱۲ الکترون ولت بیشتر عبور می‌دهد، بنابراین ترکیب در انرژی‌های بالاتر شفاف است. در پنل (f)، ضریب شکست در هر دو جهت X و Z بررسی شده است، با مقادیر استاتیک به ترتیب ۱.۶ و ۱.۹ که نشان دهنده رفتار نیمه‌رسانا است. در هر دو ترکیب، با افزایش انرژی فوتون فرودی، به یک مقدار حداکثر می‌رسد و سپس کاهش می‌یابد. با کاهش ضریب شکست در هر دو ترکیب، پس از انرژی ۵ eV به مقادیر کمتر از ۱ می‌رسد که نشان‌دهنده پدیده ابرتابناکی است، به این معنی که سرعت فاز امواج الکترومغناطیسی در هر دو جهت سریع‌تر از سرعت فاز نور در خلأ است. از ۴.۵ eV به بعد، مقدار $\epsilon_1(\omega)$ در هر دو جهت X و Z کمتر از یک است که نشان می‌دهد ترکیب Zr_2TiSi در این انرژی‌ها شفاف است.





شکل (۶): (a, b) بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، (c) افت، (d) جذب، (e) بازتاب، (d) شکست، (g) محوشدگی در دو جهت x و z .

نتیجه‌گیری

بر اساس نظریه تابعی چگالی و روش FP-LAPW، خواص مکانیکی، الکترونیکی، نوری و ترموالکتریکی ترکیب هویسلر Zr_2TiSi مورد بررسی شده است.

منحنی انرژی بر حسب حجم نشان می‌دهد که این ترکیب دارای حجم تعادلی با سفتی کریستالی نسبتاً قابل قبول است. خروجی نمودار انرژی-حجم که به نوع پیوندها در این ترکیب اشاره دارد، یونی است و گشتاور مغناطیسی آن ۲ میکروبر است. ارتعاشات فونونی این ترکیب دارای شاخه‌های نوری مثبت است که نشان‌دهنده پایداری آن است. تفاوت در وزن اتمی منجر به ایجاد چهار شکاف نوسانگر می‌شود، به‌طوری‌که سطوح بالاتر از ۸ تراهرتز عملاً خطوط صافی با شیب تقریباً صفر هستند. بنابراین، انتقال انرژی در این محدوده یا رخ نمی‌دهد یا به سختی اتفاق می‌افتد، اما در فرکانس‌های پایین (صوتی)، شاخه‌ها شیب لازم را برای انتقال انرژی حرارتی دارند.

با استفاده از تقریب mBJ این ترکیب در هر دو اسپین دارای یک شکاف مستقیم در سطح فرمی است که دلیل اصلی آن همپوشانی حالت‌های $d-Zr$ ، $d-Ti$ و $p-Si$ است. در طول انتقال، اوربیتال‌های d میزبان الکترون‌های برانگیخته هستند و چگالی حالت‌ها در اطراف سطح فرمی نشان می‌دهد که این ترکیب گزینه مناسبی برای انتقال است.

تابع دی‌الکتریک این ترکیب در هر دو جهت x و z ، رفتار نیمه‌هادی آن را تأیید می‌کند. با صفر بودن مقدار بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک در جهت x در محدوده انرژی ۷ الکترون‌ولت و پیک E_{loss} ، نوسانات پلاسمونی انتظار می‌رود. در محدوده انرژی ۴٫۵ الکترون‌ولت به بعد، ضریب شکست در هر دو جهت کمتر از یک می‌شود و سرعت فاز در این ماده بیش از سرعت نور افزایش می‌یابد. ضریب سبیک در دماهای زیر ۱۰۰ کلوین حدود یک است که نشان‌دهنده کیفیت بالای این ترکیب در این دما است. ضریب سبیک مقدار قابل توجهی معادل

$230 \mu V K^{-1}$ در دماهای پایین و کمتر از $40 \mu V K^{-1}$ در دمای اتاق را نشان می‌دهد. علاوه بر این، رسانایی الکتریکی و حرارتی تا محدوده دمای اتاق دارای شکاف‌های قابل توجهی هستند. در نتیجه، می‌توان از آن به عنوان عایق در این محدوده استفاده کرد. در دماهای بالا، ضریب توان این ترکیب نشان می‌دهد که می‌توان از آن به عنوان مولد برق استفاده کرد.

مراجع

- [1] R. De Groot, F. Mueller, P. Van Engen, K. Buschow, , Phys. Rev. Lett. 50 (25) 2024(1983).
- [2] J. Coey, M. Venkatesan, M. Bari, Springer, pp. 377–396 (2002).
- [3] I. Žutić, J. Fabian, S.D. Sarma, Rev.Mod. Phys. 76 (2) ,323(2004).
- [4] J. de Boeck, G. Borghs, Phys. World 12 (4) 27(1999).
- [5] Mahdjoub Kheireddine Zoubir et al, Materials Testing 63, 537-542 (2021).
- [6] Amal Mentefa et Al , Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 34, 269–283 (2021).
- [7]. T Krenke, E Duman, M Acet, E F Wassermann, X Moya, L Mañosa, and A Planes, Nature Materials 4 ,450(2005).
- [8]. Z D Han, D H Wang, C L Zhang, S L Tang, B X Gu, and Y W Du. Appl. Phys. Lett. 89 ,182507(2006).
- [9]. V K Sharma, M K Chattopadhyay, and S B Roy, J. Phys. D 40, 1869 (2007).
- [10] N. Chami et al , Journal of Electronic Martials 49, 4916-4922 (2020).
- [11] Amal moussali et al , Indian Journal of Physics 94 ,1733-1747(2020).
- [12] M. Ayad et al, Indian Journal of Physics 94, 767-777 (2020).
- [13] A.Jazideh, A.Boochani, B. A.Nia, Physics Letters A 414, 127622 (2021).
- [14] N. A.Vahabzadeh, A.Boochani,S. M.Elahi & H.Akbari, Silicon 12, 2165–2178 (2020).
- [15] Friha Khaelfaoui et al, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 31 ,3183-3192 (2018).
- [16] A Boochani, et al., Journal of Materials Chemistry C 7 (43), 13559-13572 (2019).
- [17] W. Kohn, A.D. Becke, R.G. Parr, J.Phys. Chem. 100 (31), 12974–12980 (1996).
- [18] W. Kohn, L.J. Sham, Phys. Rev. 140 (4A), A1133 (1965).
- [19] P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, S. Trickey, Comput. Phys. Commun. 59 (2), 399–415 (1990).
- [20] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, wien2k, An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties.

- [21] F.Semari et al. , Chinese Journal of Physics 56 , 567-573 (2018).
- [22] O. Amrich et al., Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 31 ,241-250 (2018).
- [23] Jianhua Ma et al., Phys. Rev. B 98, 094410 (2018).
- [24] Belkharroubi Fadila et al., Journal of Magnetism and Magnetic Materials 448 ,208–220 (2018).
- [25] Djillali Bensaid et al., Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 29 , 1843-1850 (2016).
- [26] B Abderrahim et al., Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 29 ,277 -283 (2016).
- [27] V. B. Bobrov, S. A. Trigger, G. j.F. van Heijst and P. P. J. M. Schram. EPL, 10003 ,90 (2010).
- [28] A.Khireddine et al., Solid State Sciences 114 , 106563-106574 (2021).
- [29] S. Mesbah et al., Solid State Communications 328 , 114238(2021).
- [30] M Ameri et al, Optik ,124 ,570-574,(2013).

Comprehensive investigation of the Static and Dynamic stability, electronic, optical of Zr_2TiSi Heuslerene: A Density Functional Theory (DFT)-Based Study

Nosratali Vahabzadeh

Assistant professor of Department of Physics, PaM.C., Islamic Azad University, Parsabad, Iran

Abstract

Based on the density functional theory, mechanical stability, electronic, optical and thermoelectric properties of Zr_2TiSi Heuslerene have been investigated. This compound has phonon stability with the ground state point of energy – volume curve and has $2\mu_B$ magnetic moment. It has a 0.24 eV energy gap along with M point by mBJ approximation. The optical properties confirm semiconductor behavior so that the static value of the dielectric function in both x and z directions is 3.8 and 6.6, respectively. Moreover, the imaginary part of the dielectric function has very minimal close to zero at lower energies in the x and z directions, tending to be semiconductor as confirmed by its absorption function. The Seebeck coefficient of this compound reveals a significant value of $230 \mu V K^{-1}$ at low temperatures and less than $40 \mu V K^{-1}$ at room temperature. The figure of merit provides that its highest thermoelectric coefficient occurs at low temperatures and 100 K.

Keywords: DFT, Zr_2TiSi Heuslerene, dynamic stability, optical properties
