

بررسی ویژگی‌های اپتیکی و مغناطیسی ترکیبات $UY_2(Y=Ga,Ge)$

نوع مقاله: علمی پژوهشی

حمداالله صالحی^{*}، فاطمه اسدی

^۱ گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

salehi_h@scu.ac.ir^{*}

چکیده:

در این کار ویژگی‌های اپتیکی و مغناطیسی ترکیبات $UY_2(Y=Ga,Ge)$ در فازهای هگزاگونال و اورتورومبیک بررسی می‌شود. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل‌های بار پایسته و فوق نرم در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از کد $pwscf$ انجام شده است. تابعی تبدیلی-همبستگی آن از نوع $GGA.PBE$ و LDA می‌باشد. با بررسی $\epsilon_1(\omega)$ مشاهده می‌شود که $\epsilon_1(\omega)$ در برخی از نقاط بازه انرژی مورد نظر، دارای مقداری منفی می‌باشد. بنابراین در این محدوده انرژی هیچ موجی در ترکیب منتشر نمی‌گردد. سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نشان‌دهنده مطابقت گاف اپتیکی با ساختار نواری است. ضرائب شکست به دست آمده از سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در فاز هگزاگونال UGa_2 و UGe_2 به ترتیب $11/21$ و $17/33$ در راستای X نتیجه می‌دهد. در محاسبه گشتاور کل، اتم اورانیوم بیش‌ترین سهم را در هر دو ترکیب دارد. سهم اتم‌های گالیم و ژرمانیوم بسیار ناچیز است. نتایج به دست آمده سازگاری خوبی با دیگر نتایج موجود دارند.

اطلاعات مقاله:

دریافت: ۱۰ بهمن ۱۴۰۰

پذیرش: ۲ مرداد ۱۴۰۱

صفحه ۱ تا صفحه ۱۵

در دسترس در نشانی:

www.ijcse.ir

زبان نشریه: فارسی

شاپاچاپی: ۲۳۲۲-۲۳۵۲

شاپالکترونیکی: ۳۷۸۳-۳۰۰۳

کلیدواژه:

نظریه تابعی چگالی، UGa_2 ، UGe_2

شبه پتانسیل؛ تابع دی‌الکتریک.

20.1001.1.23222352.1401.11.0.10.0

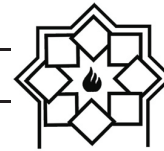
:DOR

۱- مقدمه

و UGa_2 متمرکز شده است. این ترکیبات با قرار گرفتن در دسته ترکیبات اورانیوم از اهمیت ویژه‌ای برخوردار می‌باشند. ابتدا در سال ۱۹۹۶ دیواس^۱ و همکاران با استفاده از تقریب چگالی موضعی اسپینی و انجام محاسبات لازم ساختار الکترونی این ماده را بررسی کردند، چرا که یکی از سؤال‌های اساسی پیرامون ترکیب UGa_2 با ساختار بلوری هگزاگونال

امروزه با توجه به جنبه‌های کاربردی ترکیبات اورانیوم در صنعت، این ماده از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. اما با توجه به خطراتی که در اثر کار کردن با ترکیبات اورانیوم برای انسان وجود دارد تحقیق بر روی این مواد به صورت نظری بسیار پر اهمیت است. لذا تحقیق‌ها بر روی دو ترکیب UGe_2

^۱ Divis



در سال ۲۰۰۱ هونما^۲ و همکاران مطالعاتی پیرامون خواص مغناطیسی ترکیب UGa_2 انجام دادند و خواص الکترونی، ثابت کشسانی و توان الکتریکی این ماده را با کمک گرفتن از روش دوهاس ون آلفن (dHVA) به دست آوردند [۱۱]. هم چنین پراکندگی نوترونی ابررسانای فرومغناطیس UGe_2 در سال ۲۰۰۱ نیز مطالعه شد [۱۲]. در سال ۱۹۵۹ ماکرو^۳ و همکاران بررسی‌هایی بر روی ماده UGe_2 انجام دادند و ساختار این ترکیب را اورتورومبیک با گروه فضایی (cmcm) عنوان کردند، که البته با خواص مشاهده شده از این ترکیب در تطابق کامل نبود [۱۳]. یک سال بعد مطالعات آن‌ها توسط اوسلن^۴ و همکاران کامل‌تر شد [۱۴]، اما هنوز شبیهاتی پیرامون ساختار این ماده وجود داشت. ۲۵ سال بعد منووسکی^۵ [۱۵] با مطالعات تجربی خود نتایج کامل‌تری از ساختار و خواص ابررسانایی این ماده عنوان کرد. در سال ۲۰۱۵ کلومیئس^۶ و همکاران نیز به بررسی ویژگی‌های مغناطیسی UGa_2 در فشارهای مختلف پرداختند [۱۶]. در سال ۲۰۰۱ هاکسلی^۷ و همکاران با توجه به رفتار عجیب این ماده که ابررسانایی در آن تنها در فاز فرومغناطیس و نه حتی در فشاری بالاتر از فشار بحرانی رخ می‌دهد، نتیجه گرفتند که ابررسانایی UGe_2 در فشار بالاتر از $kbar16$ ناپدید می‌شود. در همین سال

(ALB_2) شرکت و یا عدم شرکت الکترون‌های اوربیتال $5f$ اورانیوم در ترکیب‌های شیمیایی است [۱]. در سال ۲۰۰۱ گادلر^۱ و همکاران فیلم نازکی از UGa_2 تهیه کردند و بررسی‌هایی با استفاده از روش پراکندگی یونی روی این ماده انجام و رفتار الکترون‌های اوربیتال $5f$ این ماده را تحلیل کردند [۲]. ترکیب UGa_2 یکی از بیش‌ترین ترکیبات میان فلزی اورانیوم و یک ترکیب فرومغناطیس با دمای کوری ۱۲۵ کلوین است [۳]. مطالعات گسترده در مورد UGe_2 نشان داده است که این ترکیب اولین ابررسانای فرومغناطیس می‌باشد [۴]. ترکیب UGe_2 دارای ساختار بلوری هگزاگونال (ALB_2) با گروه فضایی ($P6/mmm$) دارای سه اتم در سلول واحد می‌باشد [۵] در حالی که ترکیب UGe_2 دارای ساختار بلوری اورتورومبیک دارای ۱۲ اتم در سلول واحد می‌باشد [۶]. مطالعات گسترده در مورد UGe_2 نشان داده است که این ترکیب اولین ابررسانای فرومغناطیس می‌باشد. ابررساناهای فرومغناطیس، هم به دلیل کاربردهای آن در صنعت مانند شتاب‌دهنده ذرات، سامانه عکسبرداری، تشدید مغناطیسی هسته، صنعت برق، مهندسی پزشکی و هم به لحاظ کارهای نظری بسیار مورد توجه قرار گرفتند. هم‌چنین رفتار بحرانی مغناطیسی، پایداری فاز، حالت‌های مغناطیسی و الکترونی و جفت‌شدگی بین گشتاور $5f$ در ابررسانای UGe_2 نیز مورد بررسی قرار گرفته است [۷-۱۰].

^۱ Gouder

^۲ T. Honma

^۳ Makarov

^۴ Oslen

^۵ Menovsky

^۶ A.V. Kolomiets

^۷ Huxley



کرنانونیس^۱ و همکاران نیز پراکندگی نوترونی این ماده را مورد بررسی قرار دادند [۱۲، ۶]. در سال ۲۰۱۴ یوسو کینسکی^۲ و همکاران با استفاده از مدل شبکه اندرسون ویژگی‌های فرومغناطیس این ماده را بررسی کردند [۱۷]. در سال ۲۰۱۶ ابرام^۳ و همکاران نیز با استفاده از مدل شبکه اندرسون ساختار شبکه را به صورت میکروسکوپی تحلیل کردند [۱۸]. در سال‌های بعد مطالعات بیش‌تری بر روی این ماده انجام گرفت. از آن‌جا که کار کردن در آزمایشگاه با این ترکیبات خطرناک است لذا استفاده از کد محاسباتی و به دست آوردن خواص فیزیکی این ترکیبات اهمیت دارد. بنابراین با توجه به کاربردهای متنوع و محدود کار نظری و تجربی انجام شده بر روی آن؛ در این مقاله ویژگی‌های اپتیکی و مغناطیسی با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریه تابعی چگالی انجام شد. دلیل انتخاب این روش این بود که بنا بر اطلاعات موجود تاکنون ویژگی‌های این ترکیبات با نرم افزار کوانتوم اسپرسو مورد بررسی قرار نگرفته است.

۲- روش تحقیق

محاسبات انجام شده در این مقاله در چارچوب نظریه تابعی چگالی (این نظریه یکی از کارآمدترین و موفق‌ترین روش‌های فیزیک و شیمی است. این نظریه که نسخه تقریبی اولیه آن در سال ۱۹۲۷ بنا نهاده شد، یک نظریه ساختار الکترونی است که به جای تابع موج الکترون بر حسب تابعی چگالی

آن، که حاوی اطلاعات لازم برای تعیین هر ویژگی سامانه‌ی الکترونی می‌باشد، فرمولبندی شده است) با استفاده از کد PWscf از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام گرفته است [۱۹] و پتانسیل تبدیلی-همبستگی از طریق تقریب‌های چگالی-موضع^۴؛ LDA؛ و شیب تعمیم یافته؛ GGA.PBE-^۵ (در این تقریب انرژی تبدیلی - همبستگی علاوه بر چگالی الکترونی به شیب چگالی نیز وابسته است) محاسبه شده است. در این مطالعه برای ساخت شبه پتانسیل عناصر تشکیل‌دهنده این ترکیبات از روش شبه پتانسیل بار پایسته^۶ (در این نوع شبه پتانسیل حین رعایت اصل پایستگی بار، شرط انتقال پذیری به خوبی برآورده می‌شود. بنابراین از دقت بالا و حجم محاسبات بالایی برخوردار است و ویژه مقادیر انرژی الکترون‌های ظرفیت متناظر با شبه-تابع موج و تابع موج واقعی برابر هستند.) استفاده می‌شود. ثابت‌های شبکه تجربی برای ترکیب UGa_2 به صورت $a=4.21A^0$ ، $c=4.01A^0$ و برای ترکیب UGe_2 به صورت $a=4.036A^0$ ، $b=14.928A^0$ ، $c=4.116A^0$ استفاده شده است [۲۰، ۵]. در این محاسبات انرژی قطع برای ترکیبات UGe_2 و را به ترتیب برابر با ۵۰ ریذبرگ و ۶۵ ریذبرگ انتخاب شد. انتگرال‌های منطقه اول بریلوئن با استفاده از مش‌بندی $7 \times 7 \times 7$ برای ساختار هگزاگونال و $12 \times 4 \times 12$ برای ساختار اورتورومبیک در نظر گرفته شد که این مش‌بندی با استفاده از روش

^۱ N. Kernavanois

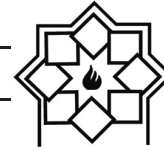
^۲ M.M. Wysokinski

^۳ M. Abram

^۴ Local density approximation

^۵ Generalized gradient approximation

^۶ Norm Conserving



نواری، برانگیختگی‌ها و نوسانات شبکه در اختیار ما قرار می‌دهند. برای دستیابی به ویژگی‌های اپتیکی یک جامد لازم است رفتار ثابت‌های اپتیکی مختلف برحسب انرژی تابش مورد بررسی قرار گیرد. یکی از مهم‌ترین کمیت‌های اپتیکی، تابع دی‌الکتریک مختلط است. این تابع نقطه شروع مناسبی برای دستیابی به سایرخواص اپتیکی است. تابع دی‌الکتریک تانسوری از مرتبه دو است که حداکثر دارای ۹ مؤلفه می‌باشد. تانسور دی‌الکتریک برای ساختارهای مکعبی، هگزاگونال و اورتورومبیک به صورت روابط (۱) نوشته می‌شود [۲۱].

تابع دی‌الکتریک از دو سهم حقیقی $\epsilon_1(\omega)$ و موهومی $\epsilon_2(\omega)$ تشکیل شده است و با رابطه (۲) نشان داده می‌شود [۲۲].

$$\epsilon_{hexagonal} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} \end{pmatrix}$$

$$\epsilon_{hexagonal} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$\epsilon_{cubic} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{xx} \end{pmatrix}$$

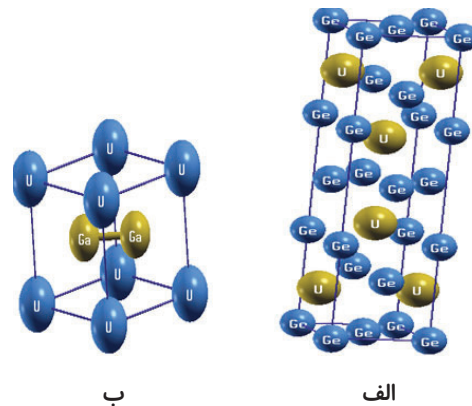
$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (2)$$

می‌توان به کمک معادلات کرامرز کرونیگ سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک را به هم مربوط ساخت، که در آن سهم موهومی تابع دی‌الکتریک به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۳]:

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{4\pi e^2}{m^2 \omega^2} \sum_j \langle i | M | j \rangle^2 f_i (1 - f_j) \delta(E_j - E_i - \omega) d^3 k \quad (3)$$

^۱ Monkhorst-Pack

مونخورست _ پک^۱ و برای محاسبه مقادیر بهینه تعداد نقاط k با تعیین مبنای همگرایی 10^{-7} برای انرژی کل، محاسبات خودسازگار انجام و تغییرات انرژی به ازای مقادیر مختلف k-point به دست می‌آید. تمامی پارامترها اعم از انرژی قطع تابع موج، تعداد نقاط k و ثابت‌های شبکه ابتدا بهینه‌سازی و سپس در محاسبات به کار رفته‌اند. همگرایی بر مبنای انرژی قرار داده شد که با اختلاف انرژی از مرتبه 10^{-7} ریدبرگ به همگرایی رسید. اوربیتال‌های ظرفیت که در این شبه‌پتانسیل ها در نظر گرفته شدند برای اتم اورانیوم اوربیتال‌های 6d، 7s، 5f، و برای اتم گالیوم و ژرمانیوم اوربیتال‌های 4s، 4p است. ساختار بلوری ترکیبات UGe_2 و UGa_2 در فاز هگزاگونال و اورتورومبیک با استفاده از نرم‌افزار xcrsden سم و در شکل (۱) نشان داده شده است.



شکل ۱- ساختار بلوری (الف) UGa_2 و (ب) UGe_2

۳- نتایج

۳-۱- تابع دی‌الکتریک

ویژگی‌های اپتیکی مواد زمینه‌ای مناسب برای مطالعه ساختار



۳-۱-۱- سهم حقیقی تابع دی الکتریک

ساختار ترکیب UGa_2 هگزاگونال می باشد. در این ساختار دو ثابت شبکه a و c با هم برابر و با ثابت شبکه c اختلاف دارند. بنابراین مؤلفه های اصلی تابع دی الکتریک در این ساختار به صورت $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} \neq \epsilon_{zz}$ می باشد که می توان نتیجه گرفت ساختار هگزاگونال در راستای x و y ساختاری همسانگرد می باشد. تانسور دی الکتریک در این فاز با معادله (۱) داده می شود. تغییرات سهم حقیقی تابع دی الکتریک ترکیب UGa_2 در فاز هگزاگونال در راستاهای y, x, z با تقریب های GGA و LDA در شکل (۲) و (۳) در بازه صفر تا ۱۴ الکترون ولت نشان داده شده است. از نمودار سهم حقیقی تابع دی الکتریک ترکیب UGa_2 مشاهده می شود که این سهم ابتدا با افزایش انرژی زیاد شده و سپس کاهش می یابد. سهم حقیقی تابع دی الکتریک UGa_2 در انرژی ۱ الکترون ولت در سه راستای x, y و z بیشینه می شود و سپس روند کاهشی می گیرد تا صفر شوند. ریشه $\epsilon_1(\omega)$ ، یا به بیان دیگر مقدار انرژی که به ازای آن کمیت $\epsilon_1(\omega)$ صفر می گردد دارای مفهوم فیزیکی می باشد و در واقع شرط لازم برای پلاسمون های حجمی در ماده هستند ولی شرط کافی برای آن ها، وجود اتلاف انرژی است. هم چنین در ناحیه ای که $\epsilon_1(\omega)$ منفی است، امواج منتشر نمی شوند و فرایندهای جذب و اتلاف صورت می گیرد. با توجه به شکل (۲) با بررسی $\epsilon_1(\omega)$ که با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته محاسبه شده است، مشاهده می شود که در انرژی ۶ الکترون ولت سهم حقیقی تابع دی الکتریک صفر می شود و می تواند یکی از انرژی های لازم برای پلاسمون حجمی باشد و به ازای موج الکترومغناطیس با انرژی بیشتر از ۴ الکترون ولت موج در ترکیب انتشار نمی یابد.

در شکل (۳) تغییرات سهم حقیقی تابع دی الکتریک در بازه

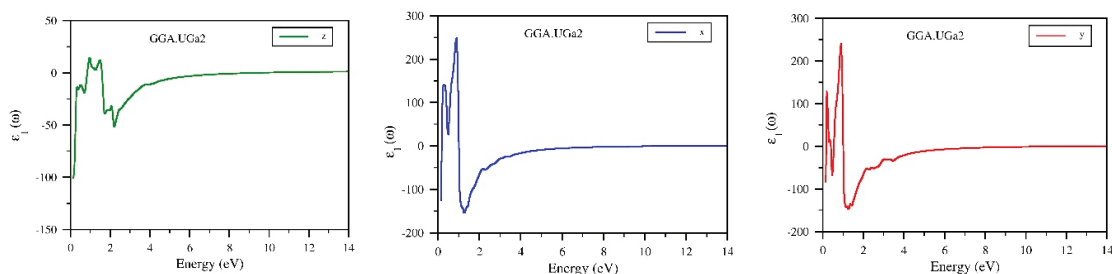
که در آن M ماتریس دو قطبی، ω به ترتیب حالت های اولیه و نهایی f_i ، تابع توزیع فرمی برای حالت λ_m و E_i انرژی الکترون در حالت λ_m است. سهم حقیقی تابع دی الکتریک را می توان با استفاده از سهم موهومی آن و با استفاده از روابط کرامرز-کرونیک برای همه بسامدها به دست آورد [۲۱].

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \epsilon_2(\omega') d\omega'}{(\omega'^2 - \omega^2)} \quad (4)$$

به طور کلی در پاسخ ماده به نور تابش شده، دو نوع گذار الکترونی سهیم هستند. نوع اول گذارها که با عنوان گذارهای درون نواری شناخته می شوند، در ناحیه تابش های کم انرژی تر محتمل تر است و فوتون تابش شده تنها قادر است الکترون را درون نواری که در آن قرار دارد، به سمت انرژی های بالاتر جابه جا کند. به بیان دیگر جذب انرژی فوتون تنها سبب افزایش انرژی الکترون درون نوار خودش می شود و قادر نیست که الکترون را از نوار حالت ابتدایی اش جابه جا کند، این نوع گذار بیشتر در فلزات حائز اهمیت است. نوع دوم گذارها مربوط به زمانی است که انرژی جذب شده توسط الکترون برای جابه جا کردن آن از یک نوار به نوار دیگر کفایت می کند که این فرآیند منجر به گذارهای بین نواری در ثابت های اپتیکی می شود و در مواد نیم رسانا و عایق نقش اصلی را دارد. حد بسامد صفر سهم حقیقی تابع دی الکتریک از اهمیت ویژه ای برخوردار است. جذر $\epsilon(0)$ ضریب شکست استاتیک را نتیجه می دهد [۲۳].

$$n(0) = \sqrt{\epsilon_1(0)} \quad (5)$$

در ناحیه ای که $\epsilon(0)$ منفی است، امواج منتشر نمی شوند و فرایندهای جذب و اتلاف صورت می گیرد. در ادامه نمودار سهم های حقیقی و موهومی برای ترکیبات UGa_2 و UGe_2 نمایش داده شده است.

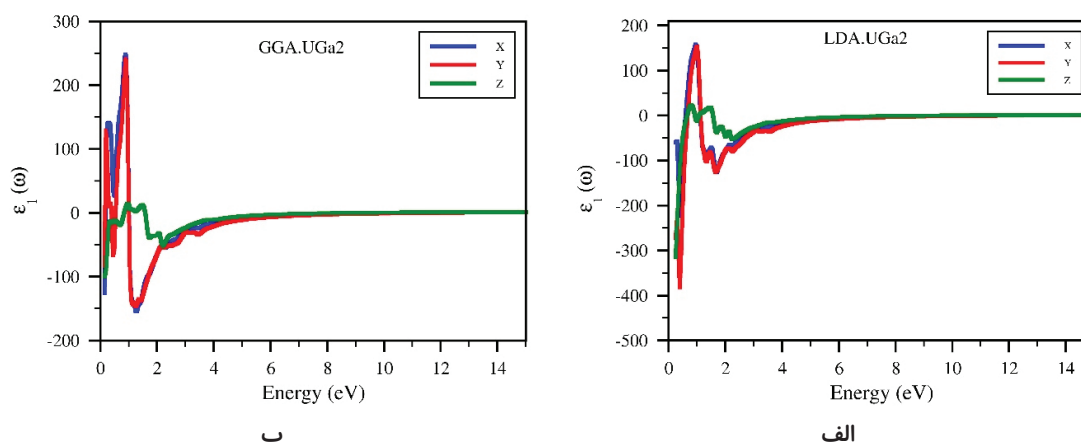


ج

ب

الف

شکل ۲- نمودار تغییرات سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی در ترکیب UGa_2 با استفاده از تقریب GGA در راستای (الف) x، (ب) y و (ج) z



ب

الف

شکل ۳- نمودار تغییرات سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی در راستاهای x, y, z در ترکیب UGa_2 با استفاده از تقریب (الف) GGA و (ب) LDA

شکست استاتیکی در راستاهای x, y و z در جدول (۱) آورده شده است. در این شکل هم مشاهده می‌شود که در تقریب چگالی موضعی از انرژی ۶ الکترون‌ولت به بعد سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک صفر می‌شود که می‌تواند یکی از انرژی‌های لازم برای پلاسمون حجمی باشد. از نمودار سهم حقیقی برای ترکیب UGa_2 دیده می‌شود که این نمودارها در محدوده ای از انرژی دارای مقادیر منفی است. در ناحیه‌ای که ϵ منفی است در این راستاها و در این بازه انرژی هیچ موجی در ترکیب منتشر نمی‌شود و فرآیندهای جذب و اتلاف صورت می‌گیرد.

جدول ۱- نتایج مربوط به ضریب شکست ترکیب UGa_2 با

استفاده از تقریب LDA و GGA

کمیت‌های محاسبه شده	GGA	LDA
$\epsilon_{xx}(0)$	۱۲۵٫۷۵۶	۶۰٫۰۰۲
n_{xx}	۱۱٫۲۱	۷٫۷۴
$\epsilon_{yy}(0)$	۸۳٫۱۶۶	۳۲۹٫۶۵۲
n_{yy}	۹٫۱۱	۱۵٫۱۵
$\epsilon_{zz}(0)$	۱۰۰	۳۱۴٫۲۰۲
n_{zz}	۱۰	۱۷٫۷۲

انرژی صفر تا ۱۴ الکترون ولت رسم شده است و نتایج ضریب



می‌شود که این سهم ابتدا با افزایش انرژی زیاد شده و سپس کاهش می‌یابد. سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک $U\text{Ge}_2$ به ترتیب در انرژی ۱ الکترون ولت در راستای x بیشینه می‌شود و سپس روند کاهشی می‌گیرد تا صفر شوند. در شکل (۴) تغییرات سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در بازه انرژی صفر تا ۱۴ الکترون ولت رسم شده است و نتایج ضریب شکست استاتیکی در راستاهای x , y و z محاسبه و در جدول (۲) آورده شده است.

جدول ۲- نتایج مربوط به ضریب شکست ترکیب $U\text{Ge}_2$ با

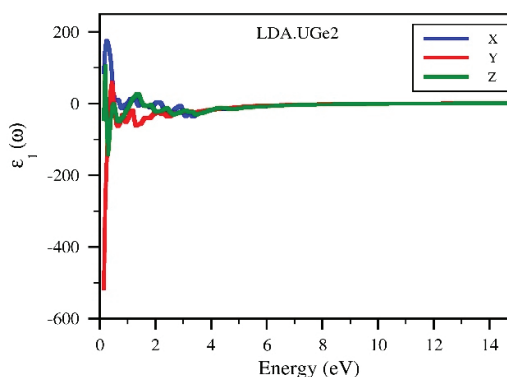
استفاده از تقریب GGA و LDA

کمیت‌های محاسبه شده	GGA	LDA
$\epsilon_{xx}(0)$	۳۰۰	۸۷٫۲۰۲
n_{xx}	۱۷٫۳۲	۹٫۳۳
$\epsilon_{yy}(0)$	۵۸۹٫۱۰۴	۵۱۶٫۹۳۹
n_{yy}	۲۴٫۲۷	۲۲٫۷۳
$\epsilon_{zz}(0)$	۴۵۰	۱۰۳٫۲۴۱
n_{zz}	۲۱٫۲۱	۱۰٫۱۶

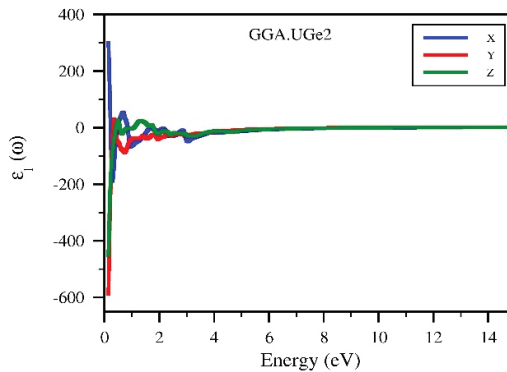
۳-۱-۲- سهم موهومی تابع دی‌الکتریک

در شکل (۵) و (۶) نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک برای ترکیب $U\text{Ga}_2$ در راستاهای x , y و z در بازه صفر تا ۵ الکترون ولت نشان داده شده است. در این شکل‌ها مشاهده می‌شود که سهم موهومی از انرژی صفر تا حدود ۱/۵ الکترون ولت به صورت ناگهانی افزایش می‌یابد که این امر بیانگر جذبی است که به دنبال آن گذارهای میان‌نواری رخ می‌دهد. در حالی که از انرژی ۳ الکترون ولت به بعد دارای تغییراتی آرام است که ناشی از جذب فوتون‌های کم انرژی است و منجر به گذارهای درون‌نواری می‌شوند. از نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک چنین بر می‌آید که

در فاز اورتورومبیک مؤلفه‌های اصلی تانسور دی‌الکتریک در راستاهای مختلف با یکدیگر برابر نیستند و به شکل $\epsilon_{xx} \neq \epsilon_{yy} \neq \epsilon_{zz}$ می‌باشد. تانسور دی‌الکتریک در فاز اورتورومبیک با معادله (۱) داده شده است. در شکل (۴) نمودار سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک ترکیب $U\text{Ge}_2$ در راستاهای y, x و z با تقریب‌های GGA و LDA نمایش داده شده است.



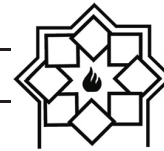
الف



ب

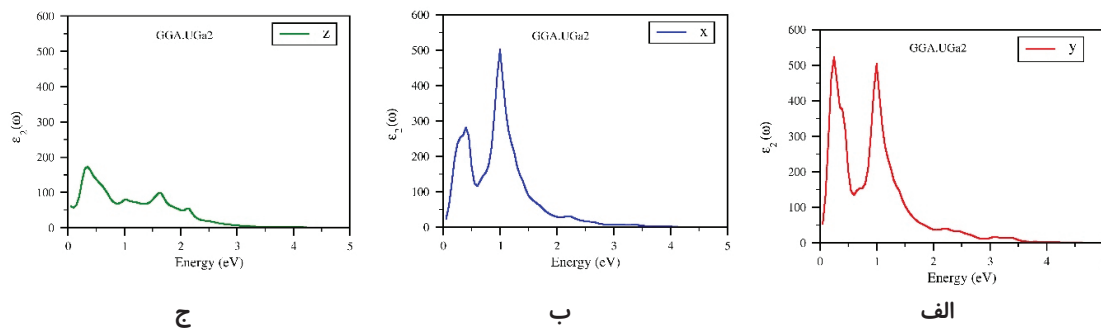
شکل ۴- نمودار تغییرات سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی در راستاهای x , y و z در ترکیب $U\text{Ge}_2$ با استفاده از تقریب (الف) GGA و (ب) LDA

از نمودار سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک ترکیب $U\text{Ge}_2$ مشاهده

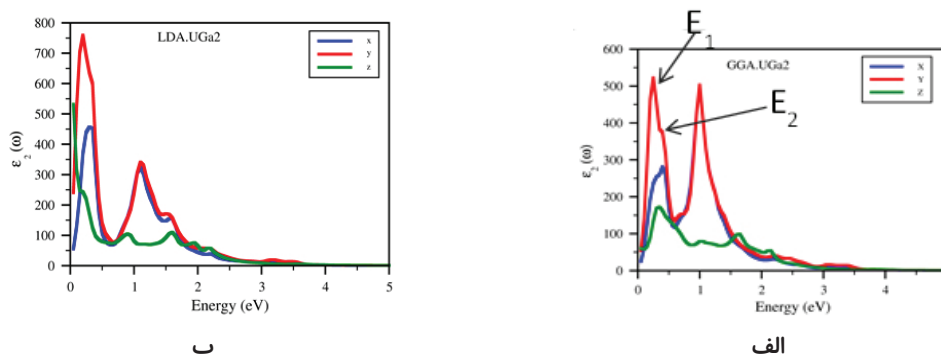


الکترونیک در کنار ساختار نواری در شکل (۷) رسم شده است. به دلیل کاهش یافتن احتمال گذار در انرژی‌های بالاتر، در این نواحی قله‌های ظاهر شده در $\epsilon_2(w)$ به طور قابل ملاحظه ای کاهش می‌یابند و قله‌های ضعیف بعدی ناشی از گذارهای بین نوارهای ظرفیت و نوارهای رسانش بالاتر هستند. با توجه به نمودار (۷) گاف نواری صفر را نتیجه می‌دهد. دو قله موجود در نمودار سهم موهومی می‌تواند دو گذار احتمالی از نوار ظرفیت به نوار رسانش باشد. قله اول E_1 که در انرژی ۰/۴۲ الکترون ولت واقع است می‌تواند متناظر با گذار درون نواری باشد. قله دوم E_2 در انرژی ۱ الکترون ولت نیز می‌تواند متناظر با گذار درون نواری باشد.

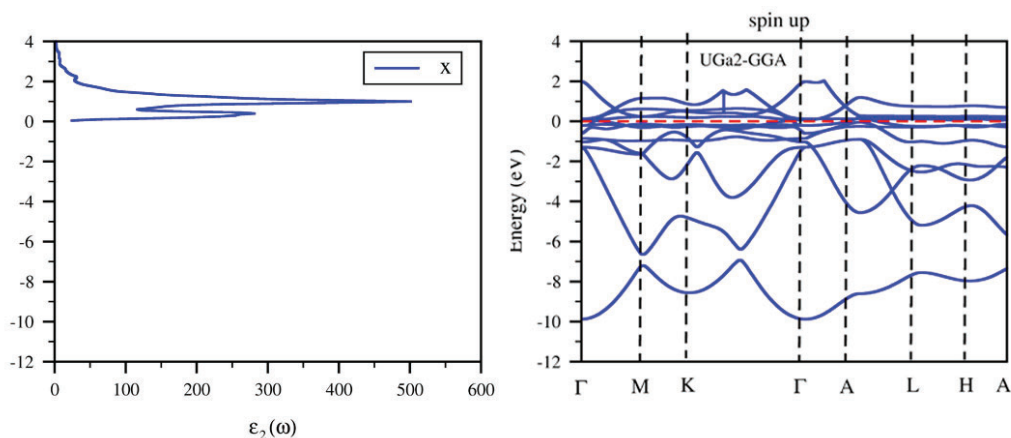
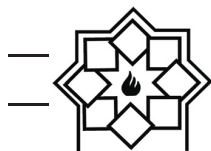
جذب از انرژی‌های بسیار کوچک شروع شده است، که این امر بیانگر عدم وجود گاف انرژی در این فاز است. سپس نمودار با شیب تندی افزایش می‌یابد و این افزایش ناگهانی بیانگر جذبی است که به دنبال آن گذارهای میان‌نواری اتفاق می‌افتند که با توجه به صفر بودن گاف انرژی، الکترون‌ها بدون نیاز به انرژی قادر خواهند بود از نوار ظرفیت وارد نوار رسانش شوند و گاف صفر ساختار نواری را تأیید می‌کند. نقاط E_1 و E_2 قله‌های اصلی این منحنی را تشکیل می‌دهند که این قله‌ها می‌توانند بیانگر انرژی مورد نیاز برای گذارهای احتمالی از نوار ظرفیت به رسانش باشند. برای نمایش انطباق این نقاط یا گذارهای احتمالی، نمودار سهم موهومی تابع دی



شکل ۵- نمودار تغییرات سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی در ترکیب UGa_2 با استفاده از تقریب GGA در راستای (الف) x، (ب) y و (ج) z



شکل ۶- نمودار تغییرات سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی در راستای x، y و z در ترکیب UGa_2 با استفاده از تقریب (الف) GGA و (ب) LDA

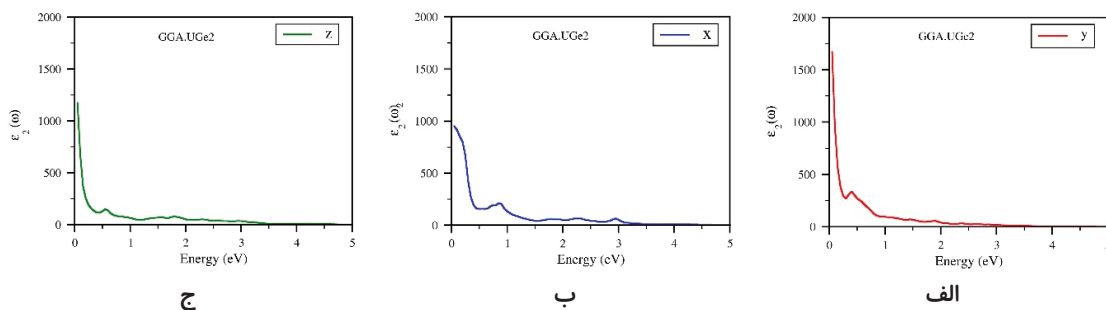


شکل ۷- نمودار تطابق سهم موهومی تابع دی‌الکتریک و ساختار نواری

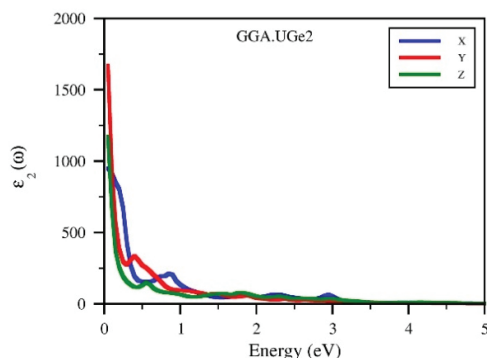
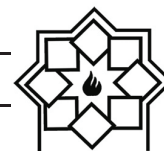
۳-۲- تابع اتلاف انرژی

طیف اتلاف الکترون کمیت مهمی برای بررسی خواص ماکروسکوپی و میکروسکوپی جامدات است. این طیف دربردارندهٔ تحریک دسته جمعی الکترون‌های ظرفیت به داخل حالت‌های اشغال شده در نوار رسانش می‌باشد. تابع اتلاف سهم موهومی معکوس تابع دی‌الکتریک مختلط است، به این معنا که در بازه‌هایی از انرژی که تابع اتلاف دارای قله است سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مقادیر بسیار کوچکی دارند و از رابطه (۶) به دست می‌آید [۲۴]:

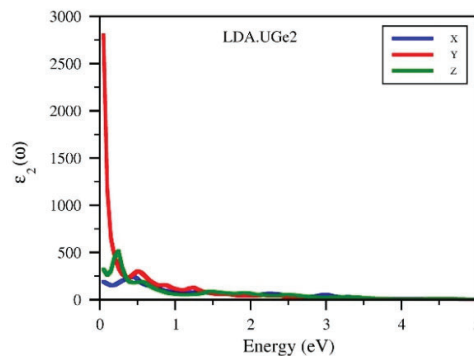
در شکل‌های (۸) و (۹) نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک برای ترکیب UGe_2 نشان داده شده است. از نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک در شکل (۹) چنین به نظر می‌آید که اثر ناگهانی سهم موهومی تابع دی‌الکتریک ناشی از جذبی است که به دنبال آن گذارهای درون نواری اتفاق می‌افتد. برای نمایش انطباق این نقاط یا گذارهای احتمالی، نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک در کنار ساختار نواری در شکل (۱۰) رسم شده است.



شکل ۸- نمودار تغییرات سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی در ترکیب UGe_2 با استفاده از تقریب GGA در راستای (الف) x، (ب) y و (ج) z

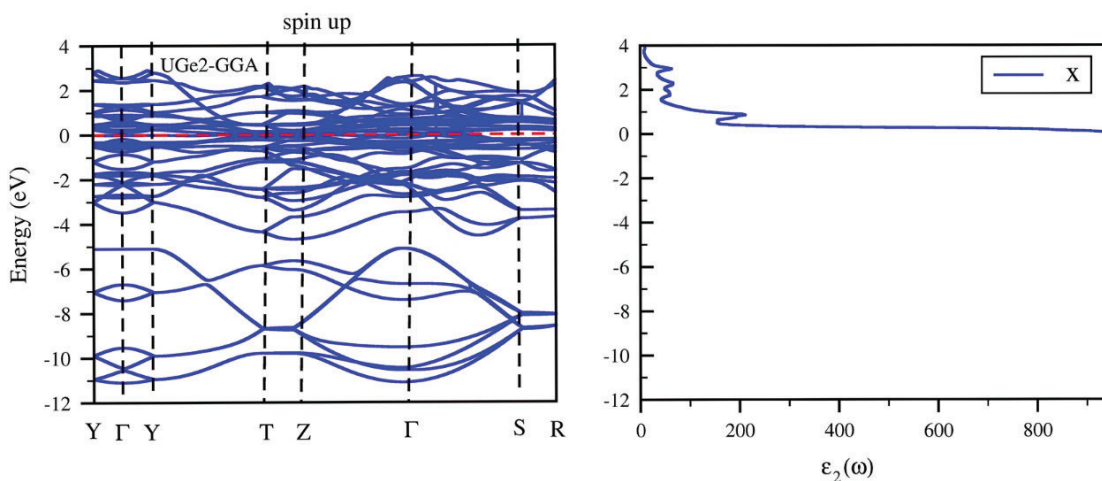


ب



الف

شکل ۹- نمودار تغییرات سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی در راستاهای Y, X و Z در ترکیب UGe_2 با استفاده از تقریب (الف) GGA و (ب) LDA

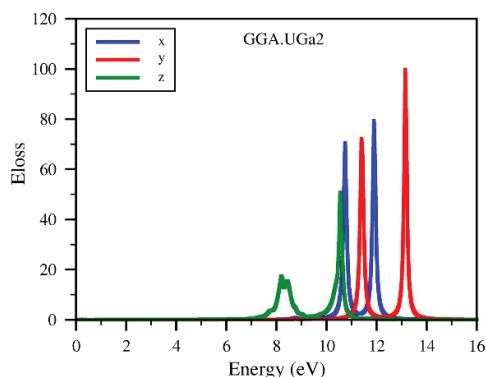
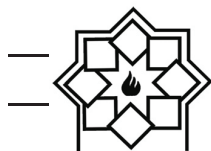


شکل ۱۰- نمودار تطابق سهم موهومی تابع دی‌الکتریک و ساختار نواری

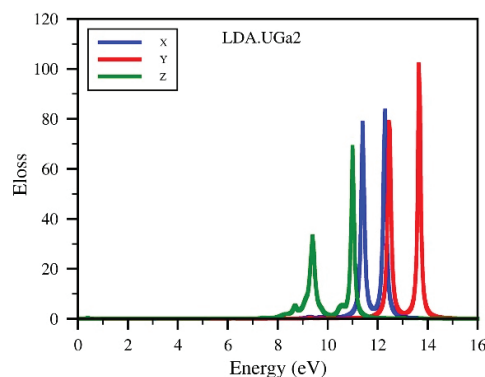
بسامد منطبق بر آن بسامد پلاسما نامیده می‌شود. طبق رابطه تابع اتلاف انرژی بسامد پلاسما منطبق بر بسامدهایی است که $\epsilon_1(\omega)$ در آن منفی است. همچنین در این انرژی‌ها $\epsilon_2(\omega)$ کوچک است و بنابراین دامنه اتلاف انرژی بزرگ است. در شکل‌های (۱۱) و (۱۲) طیف اتلاف انرژی در ترکیب UGa_2 و UGe_2 در بازه صفر تا ۱۶ الکترون ولت مربوط به راستاهای Y, X و Z در تقریب‌های شیب تعمیم یافته و چگالی موضعی رسم شده است.

$$eels = -Im \left[-\frac{1}{\epsilon(\omega)} \right] = \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \quad (6)$$

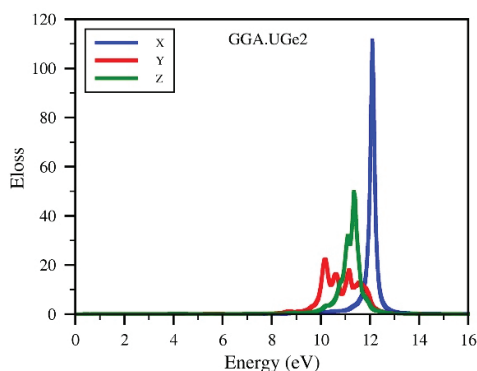
این تابع متناسب با احتمال اتلاف انرژی E در واحد طول برای یک الکترون در حال عبور از محیط است. شاخص‌ترین قله در طیف اتلاف انرژی به عنوان قله پلاسمونی شناخته می‌شود که بیان‌گر برانگیختگی‌های جمعی چگالی بار در محیط است. در یک بلور امکان وجود چند قله پلاسمونی وجود دارد. قله پلاسمونی مربوط به نوسان پلاسما است و



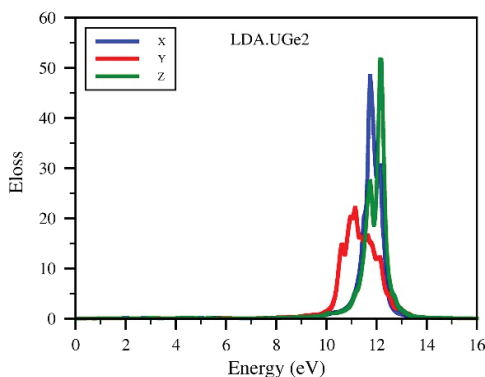
ب



الف

شکل ۱۱- نمودار طیف اتلاف انرژی ترکیب UGa_2 با استفاده از تقریب (الف) GGA و (ب) LDA

ب

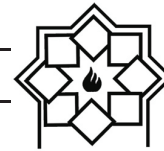


الف

شکل ۱۲- نمودار طیف اتلاف انرژی ترکیب UGe_2 با استفاده از تقریب (الف) GGA و (ب) LDA

در شکل (۱۲) برای ترکیب UGe_2 در تقریب GGA بلندترین قله در راستای x در انرژی ۱۲/۱۶ الکترون ولت؛ در راستای y در انرژی ۱۰/۲۶ الکترون ولت و در راستای z در انرژی ۱۱/۳۵ الکترون ولت و در تقریب LDA بلندترین قله در راستای x، y و z به ترتیب در انرژی ۱۱/۸۳ الکترون ولت؛ ۱۱/۲۱ الکترون ولت و ۱۲/۲۲ الکترون ولت قرار دارد. به طور کلی در انرژی‌های پایین به دلیل حضور گذارهای بین‌نواری میان نوار ظرفیت و نوار رسانش تابع اتلاف مقدار کمی دارد و در نقطه‌ای که تابع اتلاف انرژی بیشینه است شدت

در شکل (۱۱) برای ترکیب UGa_2 در تقریب شیب تعمیم یافته بلندترین قله در راستای x در انرژی ۱۱/۹۴ eV و در راستای y در انرژی ۱۳/۲۳ eV و در راستای z در انرژی ۱۰/۵۵ و در تقریب LDA بلندترین قله در راستای x در انرژی ۱۲/۳۳ eV در راستای y در انرژی ۱۳/۶۲ eV در راستای z در انرژی ۱۱/۰۴ eV قرار گرفته است که این بیشینه‌ها متناظر با پلاسمون حجمی است و در این نقاط سهم موهومی تابع دی‌الکتریک به دلیل کاهش یافتن احتمال گذارهای بین‌نواری مقادیر بسیار کوچکی دارند.



گذارهای بین‌نواری به صفر می‌رسد. قله‌های دیگر بیانگر گذار بین‌نواری و متناظر با تغییر علامت انحناى نمودار تابع دی الکتریک می‌باشد.

۳-۳- بررسی ویژگی‌های مغناطیسی

همهٔ مواد از اتم‌ها ساخته شده‌اند و هر اتم شامل الکترون‌های در حال حرکت است. حرکت مداری الکترون (چرخش به دور هسته) و حرکت وضعی آن (چرخش الکترون به دور خودش) باعث ایجاد بردار گشتاور مغناطیسی می‌شوند. چنان چه الکترونی با بار e به دور هسته در یک مدار دایره‌ای به شعاع ρ و بسامد ω بچرخد حلقه جریانی معادل $\frac{-e\omega}{2\pi}$ و یک گشتاور مغناطیسی برابر با حاصل ضرب جریان در مساحت مدار و جهتی عمود بر صفحه حرکت را ایجاد می‌کند. چنانچه بردار یکه عمود بر صفحه حرکت الکترون را $\hat{z}$ در نظر بگیریم داریم [۳]:

$$\vec{m} = -\frac{e\omega}{2} \rho^2 \hat{z} \quad (7)$$

الکترون‌ها علاوه بر حرکت دورانی مداری حول هسته، یک حرکت دورانی ذاتی به نام اسپین حول محور خود دارند که موجب ایجاد گشتاور مغناطیسی اسپینی می‌شود. مقدار گشتاور مغناطیسی اسپینی الکترون با استفاده از محاسبات نظریه کوانتومی از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\vec{m}_{spin} = \frac{e\hbar}{2m} S \quad (8)$$

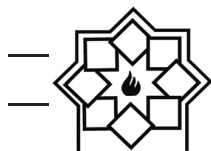
که S عدد کوانتومی اسپینی است. گشتاور مغناطیسی یک اتم برابر با مجموع گشتاور مغناطیسی مداری و اسپینی آن می‌باشد.

برای بررسی خواص مغناطیسی، گشتاور مغناطیسی کل،

مطلق و جزئی این ترکیبات محاسبه شده است. نتایج حاصل از این محاسبات در جدول‌های (۳) و (۴) آورده شده است. محاسبات حاصل از گشتاور مغناطیسی کل بلور با گشتاور مغناطیسی اتم‌های اورانیوم و گالیوم در ترکیب UGa_2 ، اورانیوم و ژرمانیوم در ترکیب UGe_2 برابر نیست و بیانگر این است که اتم‌های ژرمانیوم و گالیوم گشتاور مغناطیسی بسیار کوچکی دارند به همین دلیل سهم چندانی در خواص مغناطیسی این ترکیب ندارد. دلیل ناچیز بودن سهم اتم‌های گالیوم و ژرمانیوم در این ترکیبات به این دلیل است که چگالی حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین برای اتم‌های گالیوم و ژرمانیوم یکسان است.

۴- نتیجه‌گیری

در این کار ویژگی‌های اپتیکی و مغناطیسی ترکیبات UGa_2 و UGe_2 در فازهای هگزاگونال و اورتورومبیک با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و بستهٔ محاسباتی کوانتوم اسپرسو با تقریب‌های چگالی موضعی و شیب تعمیم‌یافته مورد مطالعه قرار گرفتند. نتایج حاصل از پارامترهای اپتیکی این ترکیب نشان دهندهٔ این است که گاف اپتیکی برابری تقریبی با گاف نواری دارد. بررسی سهم حقیقی تابع دی الکتریک ضرائب شکست را با تقریب شیب تعمیم یافته در فاز هگزاگونال UGa_2 و UGe_2 به ترتیب ۱۱/۲۱ و ۱۷/۳۳ در راستای x نتیجه می‌دهد. در مواردی که $\epsilon_1(\omega)$ دارای مقادیر کوچک‌تر از صفر است در این بازهٔ انرژی هیچ موجی در ترکیب منتشر نمی‌گردد. تغییرات آرام سهم موهومی ناشی از جذب فوتون‌های کم انرژی است، که این منجر به گذارهای درون نواری می‌شوند.



جدول ۳- گشتاور مغناطیسی کل ترکیبات UY_2 (Y=Ga,Ge) با تقریب GGA و مقایسه با نتایج دیگران.

ترکیب	$\mu_{absolute}$	U	Ga	Ge	μ_{tot}	کار تجربی [۲۵،۲۶]	کار نظری [۳]
UGa ₂	۲/۹۳	۲/۴۵۱	۰/۰۲۳۵		۲/۷۸	۲/۲۸	۲/۷
UGe ₂	۲/۵۲	۲/۰۸۵		۰/۰۳۰۴	۲/۳۴	۲/۳۷	

جدول ۴- گشتاور مغناطیسی کل ترکیبات UY_2 (Y=Ga,Ge) با تقریب LDA و مقایسه با نتایج دیگران

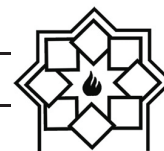
ترکیب	$\mu_{absolute}$ (μ_B)	U (μ_B)	Ga (μ_B)	Ge (μ_B)	μ_{tot} (μ_B)	کار تجربی [۱۸،۱۹]	کار نظری [۳]
UGa ₂	۲/۴۱	۲/۰۵۷	۰/۰۱۲۶		۲/۳۳	۲/۲۸	۲/۷
UGe ₂	۲/۰۶	۱/۶۹		۰/۰۲۷۲	۱/۹۶	۲/۳۷	

- "Surface electronic structure of UGa_x films," J. Alloy. Comp. 314 (1), 7-14 (2001)
- [3]. V.N. Antonov and B. N. Harmon, "Electronic structure and magneto-optical Kerr effect in UGa₂," J. Appl. Phys. 94 (11), 7240-7245 (2003)
- [4]. H. Kotegawa, V. Taufour, D. Aoki, G. Knebel, and J. Flouquet, "Evolution toward Quantum Critical End Point in UGe₂," Journal of the Physical Society of Japan, 80, 0837031-4 (2011)
- [5]. A.V. Kolomiets, J. C. Griveau, J. Prchal, A.V. Andreev and L. Havela, "Variations of magnetic properties of UGa₂ under pressure," Phys. Rev. 91. 0644051-0644061 (2015)
- [6]. A. Huxley, I. Sheikin, E. Ressouche, N. Kernavanois, D. Braithwaite, R. Calemczuk, and J. Flouquet, "UGe₂: A ferromagnetic spin-triplet superconductor," Phys. Rev. B 63, 1445191-1445204 (2001)
- [7]. Y. Takeda, T. Okane, Y. Saitoh, H. Yamagami, E. Yamamoto and Y. Haga, "Soft x-ray magnetic circular dichroism study on UGe₂," Progress in Nuclear Science and Technology 5, 171-174 (2018)
- [8]. V.P. Mineev, "On the phase diagram of UGe₂," arXiv: 1102.5034v2 [cond-mat.str-el] 31 October (2018)
- [9]. N. Tateiwa, Y. Haga, and E. Yamamoto, "Novel critical behavior of

لذا در این انرژی‌ها بلور هیچ شفافیتی از خود نشان نمی‌دهد. نتایج به دست آمده از از سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نشان دهنده مطابقت گاف صفر با ساختار نواری است و محاسبات مربوط به گشتاور مغناطیسی کل و گشتاور اتم‌های تشکیل دهنده این ترکیبات نشان داد که اتم‌های گالیم و ژرمانوم سهم بسیار ناچیزی در گشتاور کل دارند. ترکیب UGe₂ به دلیل کاربردهای آن در صنعت مانند شتاب دهنده ذرات، سامانه عکسبرداری، تشدید مغناطیسی هسته، صنعت برق، مهندسی پزشکی و هم به لحاظ کارهای نظری بسیار مورد توجه قرار گرفتند.

مراجع

- [1]. M. Divis, M. Richter, H. Eschrig, and L. Steinbeck, "Ab initio electronic structure, magnetism, and magnetocrystalline anisotropy of UGa₂," Phys. Rev. B 53(15), 9658-9665 (1996)
- [2]. T. Gouder, L. Havela, M. Divis, J. Rebizant, P.M. Oppeneer and M. Richter,



- [۲۱]. ز. جاودانی، " بررسی ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی با استفاده از نظریه تابعی چگالی $SrFe_2O_4$ ترکیب مونوفریت استرانسیوم، " پایان‌نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه شهید چمران اهواز، (۱۳۹۱).
- [22]. M.Dresselhaus, "Optical properties of solids", Proceedings of the international school of physics (1966)
- [۲۳]. ش. مخاوات، " بررسی ویژگی‌های فیزیکی گالیوم-فسفید با استفاده از نظریه تابعی چگالی اختلالی، " پایان‌نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه شهید چمران اهواز (۱۳۹۲).
- [24]. M.Biasini and R. Trok, "Fermi surface of UGe_2 in the paramagnetic phase" Phys. Rev. B 68 (24), 2451181-2451187 (2003)
- [25]. A.V. Andreev, K. P. Belov, A. V. Deriagin, R. Z. Levitin, and A. Menovsky, "Magnetic and magnetoelastic properties of the UGa_2 intermetallic compound," J.Phys. Colloques. 40(4), 81-83 (1979)
- [26]. A.N. Yaresko, P. Dalmas de Reotier, A. Yaounac, N. Kernavanis, J. P. Sanchez, A. A. Menovsky, and V. N. Antonov, "On the 5f electronic ground state in UGe_2 at ambient pressure," J. Phys. Cound. Matt. 17, 2443-2452 (2005).
- magnetization in $URhSi$: Similarities to uranium ferromagnetic superconductors UGe_2 and $URhGe$," arXiv:1903.06841v1 [cond-mat.str-el] 15 Mar (2019)
- [10]. V.G. Storchak, J. H. Brewer, D. G. Eshchenko, P. W. Mengyan, O. E. Parfenov and A. M. Tokmachev, "Dynamics of Heavy Carriers in the Ferromagnetic Superconductor UGe_2 ", JETP Letters volume 107, 470–476 (2018)
- [11]. T.Honma, Inada Y., Araki Sh., Tokiwa Y., Takeuchi T., Sugawara H., Sato H., Kuwahara K., Yokoyama M., Amitsuka H., Sakakibara T., Yamamoyo E., Haga Y., Nakamura A., Harima H., Yamagami H., and Onuki Y, "Magnetic and Fermi Surface Properties of the Ferromagnetic Compound UGa_2 ," J. phys society of jap, 69. 2647-2659 (2000)
- [12]. N.Kernavanois, B. Grenier, A. Huxley, E. Ressouche, J.P. Sanchez, and J. Flouquet, "Neutron scattering study of the ferromagnetic superconductor UGe_2 ," Phys. Rev. B 64 (17), 1745091-1745098 (2001)
- [13]. E.S. Makarov and V.N. Bykov, Sov. Phys. Crystallogr. 4, 164 (1959)
- [14]. C.E. Olsen, "Magnetic Properties of Uranium Digermanide," J. Appl. Phys. 31, 340S (1960)
- [15]. A.Menovsky, F. R. de Boer, P. H. Frings, and J. J. M. Franse, in High Field Magnetism, edited by M. Date (North-Holland, Amsterdam), 189 (1983)
- [16]. H.Yamagami. and Hasegawa.A, "Fermi surface of the ferromagnetic heavy-electron compound UGe_2 ," Phys. B 186, 182-184 (1993)
- [17]. M.M. Wysokinski, M. Abram, and J. Spalek, "Ferromagnetism in UGe_2 : A microscopic model," Phys. Rev. B 90 (8), 0811141-0811146 (2014)
- [18]. M.Abram, M.M. Wysokinski, J. Spalek, "Tricritical wings in: A microscopic interpretation," J. Magn. Magn. Mater. 400, 27-30 (2016)
- [19]. P.Giannozzi. et al., "QUANTUMESPRESSO a modular and open- source software project for quantum simulations of materials," J. Phys: Condensed Matter, 21. 395502 (2009)
- [20]. P.Boulet, Daoudi A., Potel M., Noel H., Gross G. M., Andre G., and F. Bouree, "Crystal and magnetic structure of the uranium digermanide UGe_2 ," J. Alloy. Compounds, 247. 104-108 (1997)

Investigation of Optical and Magnetic Properties of $UY_2(Y=Ga,Ge)$ Compositions

H.Salehi*, F.Asadi

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

* Salehi_h@scu.ac.ir

Abstract: In this study, the optical and magnetic properties of compounds in hexagonal and orthorhombic phases are investigated. The calculations have been carried out in the framework of the density functional theory with various approximations such as local density approximation, Generalized gradient approximation with the pseudopotential and stationary load method, and using the quantum-espresso computational code. In this study, the optical and magnetic properties are calculated and the results obtained Compare with other available data. The dynamic contribution of the dielectric function indicates that the gap is zero with the strip structure. In calculating the total torque, the uranium atom has the highest share in both combinations. The share of gallium and germanium atoms is negligible. The study shows $\epsilon_1(\omega)$ that $\epsilon_1(\omega)$ in some points of the energy interval, it has a negative value. Therefore, no waves are emitted in the composition in this energy range.

Keywords: density functional theory, optical properties, UGa_2 , UGe_2 .