

## بررسی نظری ویژگی‌های ساختاری و الکترونی در ترکیبات $UY_2(Y=Ga,Ge)$

نوع مقاله: علمی پژوهشی

حمدالله صالحی<sup>\*</sup>، فاطمه اسدی، پیمان امیری

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

<sup>\*</sup> salehi\_h@scu.ac.ir**چکیده:**

در این کار برخی از ویژگی‌های الکترونی و ساختاری ترکیبات  $UY_2(Y=Ga,Ge)$  بررسی می‌شود. محاسبات با استفاده از روش شبیه پتانسیل در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از کد pwsf انجام شده است. تابعی تبادلی-همبستگی آن از نوع GGA-PBE و LDA می‌باشد. همچین زیاد شدن فشار، تعییرات مثبت آلتالی سامانه را به دنبال دارد که این امر بیانگر گرمایگیر بودن سامانه است و نتایج به دست آمده از ساختار نواری و چگالی حالت‌ها نشان می‌دهد که این ترکیبات فاز بوده و دارای خاصیت مغناطیسی است. نتایج به دست آمده سازگاری خوبی با دیگر نتایج موجود دارند.

**اطلاعات مقاله:**

دريافت: ۱۳۹۷ آذر

پذيرش: ۱۳۹۹ خداد

**كليد واژه:**نظریه‌ی تابعی چگالی  $UGa_2$ ؛  
نظریه‌ی شبیه پتانسیل  $UGe_2$ .

آزاد بزرگتر است. به این شبیه ذرات سامانه‌ی فرمیونی سنگین گفته می‌شود. از جمله سامانه‌های فرمیونی سنگین می‌توان به ترکیباتی که دارای لایه‌های داخلی f پرنشده هستند مانند برخی ترکیبات آکتینیدها و لانتانیدها اشاره کرد. ضریب گرمای ویژه‌ی الکترونی سامانه‌ی فرمیونی سنگین به مراتب از ضریب گرمای ویژه‌ی الکترونی گاز الکترونی آزاد بزرگتر است. طی چند سال گذشته رشد قابل توجهی داشته است. جرم مؤثر الکترون‌های این ترکیبات چند صد برابر جرم الکترون‌های آزاد می‌باشد و الکترون‌های سامانه‌های فرمیونی سنگین نوار انرژی باریکی دارند. الکترون‌های لایه‌های داخلی پر بر ویژگی‌های فیزیکی

**۱- مقدمه**

ترکیب‌های  $UY_2(Y=Ga,Ge)$  مورد نظر از عناصر اورانیوم، گالیم، ژرمانیوم تشکیل شده‌اند. امروزه با توجه به جنبه‌های کاربردی ترکیبات اورانیوم در صنعت مانند صنعت برق؛ مهندسی پزشکی و تشدید مغناطیسی هسته، این ترکیبات از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. مطالعات تجربی و نظری بر روی سامانه‌های فرمیونی<sup>۱</sup> سنگین (سامانه‌ی فرمیونی سنگین) می‌توان گاز الکترون آزاد متشكل از شبیه ذرات درنظر گرفت که جرم مؤثر شبیه ذرات آن به مراتب از جرم الکترون

<sup>1</sup> Formion system



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 معروف کار نظری و تجربی انجام شده بر روی آن؛ در این مقاله ویژگی‌های الکترونی و ساختاری این ترکیبات؛ مانند پارامترهای شبکه، مدول حجمی، چگالی حالتها و ساختار نواری با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی انجام شد. دلیل انتخاب این روش این بود که بنابر اطلاعات موجود تاکنون ویژگی‌های این ترکیبات با نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو مورد بررسی قرار نگرفته است.

## ۲- روش

محاسبات انجام شده در این مقاله در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی<sup>۵</sup> (این نظریه یکی از کارآمدترین و موفق‌ترین روش‌های فیزیک و شیمی است. این نظریه که نسخه‌ی تقریبی اولیه‌ی آن در سال ۱۹۲۷ بنا نهاده شد، یک نظریه‌ی 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 بسته‌ی محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام گرفته است [۷] و پتانسیل تبادلی-همبستگی از طریق تقریب‌های چگالی موضعی<sup>۶</sup>؛ LDA؛ (این تقریب اساس تمام تقریب‌های تابعی تبادلی-همبستگی است. در این تقریب از عبارت انرژی تبادلی-همبستگی گاز الکترونی همگن به صورت موضعی استفاده می‌شود) و تقریب

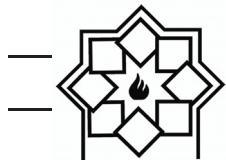
سامانه تأثیر چندانی ندارند، اما الکترون‌های لایه‌های داخلی پرنشده (d,f) در خواص تراپریدی و سایر ویژگی‌های فیزیکی سامانه شرکت می‌کنند. ترکیب UGa<sub>2</sub> یکی از بیشترین ترکیبات میان فلزی اورانیوم و یک ترکیب فرومغناطیس با دمای کوری ۱۲۵ کلوین است [۱]. مطالعات گسترده در مورد UGe<sub>2</sub> نشان داده است که این ترکیب اولین ابررسانای فرومغناطیس می‌باشد [۲]. ترکیب UGa<sub>2</sub> دارای ساختار بلوری هگزاگونال (ALB<sub>2</sub>) با گروه فضایی (P6/mmm) دارای سه اتم در سلول واحد می‌باشد [۳] در حالی که ترکیب UGe<sub>2</sub> دارای ساختار بلوری اورتورومبیک دارای ۱۲ اتم در سلول واحد می‌باشد [۴]. در سال ۲۰۰۰ هونما<sup>۱</sup> و همکاران مطالعاتی پیرامون خواص مغناطیسی ترکیب UGa<sub>2</sub> انجام دادند و خواص الکترونی، ثابت کشسانی و توان الکتریکی این ماده را با کمک گرفتن از روش دوهاس ون آلفن (dHVA) به دست آورند [۵]. در سال ۱۹۵۹ ماکرو<sup>۲</sup> و همکاران بررسی‌هایی بر روی ماده‌ی UGe<sub>2</sub> 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 [۶]. یک سال بعد مطالعات آن‌ها توسط اوسلن<sup>۳</sup> و همکاران کامل تر شد [۶]، اما هنوز شباهتی پیرامون ساختار این ماده وجود داشت. ۲۵ سال بعد منووسکی<sup>۴</sup> [۶] با مطالعات تجربی خود نتایج کامل‌تری از ساختار و خواص ابررسانایی این ماده عنوان کرد. در سال‌های بعد مطالعات بیشتری بر روی این ماده انجام گرفت. از آن‌جا که کار کردن در آزمایشگاه با

<sup>1</sup> T. Honma

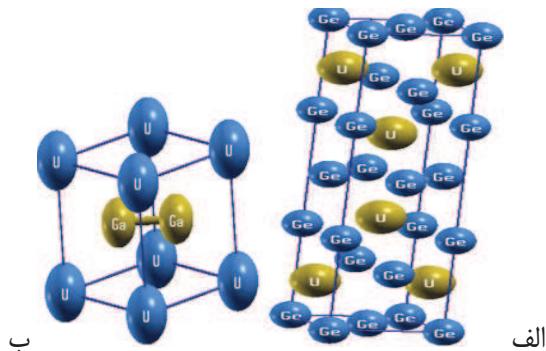
<sup>2</sup> Makarov

<sup>3</sup> Oslen

<sup>4</sup> Menovsky



نرم افزار xrysden رسم و در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱ - ساختار بلوری (الف)  $\text{UGa}_2$  و (ب)  $\text{UGe}_2$

شیب تعمیم یافته<sup>۱</sup>:GGA.PBE؛ (در این تقریب انرژی تبادلی-همبستگی علاوه بر چگالی الکترونی به شیب چگالی نیز وابسته است) محاسبه شده است. در این مطالعه برای ساخت شبه‌پتانسیل عناصر تشکیل دهنده‌ی این ترکیبات از روش شبه‌پتانسیل بار پایسته<sup>۲</sup> (در این نوع شبه‌پتانسیل حین رعایت اصل پایستگی بار، شرط انتقال‌پذیری 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 شبکه‌ی تجربی برای ترکیب  $\text{UGa}_2$  به صورت  $a=4.21\text{\AA}^0$ ,  $c=4.01\text{\AA}^0$  و برای  $a=4.036\text{\AA}^0$ ,  $b=14.928\text{\AA}^0$ ,  $c=4.116\text{\AA}^0$  استفاده شده است [۳؛۸]. در این محاسبات انرژی قطع برای ترکیبات  $\text{UGa}_2$  و  $\text{UGe}_2$  را به ترتیب برابر با  $50$  ریدبرگ و  $65$  ریدبرگ انتخاب شد. انتگرال‌های منطقه‌ی اول بریلوئن با استفاده از مشبندي  $7\times7\times7$  برای ساختار هگزاگونال و  $12\times4\times12$  برای ساختار اورتورومبیک در نظر گرفته شد. 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 مرتبه‌ی  $10^{-7}$  ریدبرگ به همگرایی رسید. اریتال‌های ظرفیت که در این شبه‌پتانسیل‌ها در نظر گرفته شدند برای اتم اورانیوم اریتال‌های  $7s$ ,  $5f$ ,  $6d$ , و برای اتم گالیم و ژرمانیوم اریتال‌های  $4s$ ,  $4p$  است. ساختار بلوری ترکیبات  $\text{UGa}_2$  و  $\text{UGe}_2$  در فاز هگزاگونال و اورتورومبیک با استفاده از

<sup>1</sup> Generalized gradient approximation

<sup>2</sup> Norm Conserving



مقادیر بهینه‌ی ثابت‌های شبکه در جدول‌های ۱ و ۲ برای ترکیبات  $UGe_2$  و  $UGa_2$  با استفاده از تقریب‌های GGA و LDA همراه با درصد خطا نسبت به مقادیر تجربی آورده و با نتایج دیگران مقایسه شده است.

محاسبات vc-relax هم ثابت شبکه و هم مکان اتم‌ها تغییر می‌کند و زمانی محاسبات پایان می‌گیرد که هم انرژی ساختار دارای کمترین مقدار خود باشد هم نیروی وارد بر اتم‌ها از مقداری که در ورودی تعریف شده کمتر شود.

جدول ۱- پارامترهای ساختاری محاسبه شده برای ترکیب  $UGa_2$  و مقایسه با نتایج دیگران ([۳] کلومیتس و همکاران، [۹] شیکر<sup>۱</sup> و همکاران)

کار شیکر و همکاران	کار کلومیتس و همکاران	کار حاضر (LDA)	کار حاضر (GGA)	کمیت‌های محاسبه شده
a(A°)	۴,۲۳	۴,۰۶	۴,۲۱	۴,۲۲
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۰,۴۷	۳,۵۶	.....	۰,۲۳
c(A°)	۴,۱۱	۳,۹۸	۴,۰۱	۴,۰۳
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۲,۴۹	۰,۷۴	.....	۰,۴۹
c/a	۰,۹۷	۰,۹۸	۰,۹۵	۰,۹۵
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۲,۱	۳,۱۵	.....	.....

جدول ۲- پارامترهای ساختاری محاسبه شده برای ترکیب  $UGe_2$  و مقایسه با نتایج دیگران ([۸] بالت و همکاران)

کمیت‌های محاسبه شده	کار حاضر (GGA)	کار حاضر (LDA)	کار بالت و همکاران
a(A°)	۴,۰۴	۴,۰۲۱	۴,۰۳
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۰,۰۹	۰,۳۷	.....
b(A°)	۱۵,۴۸	۱۴,۶۴	۱۴,۹۲
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۳,۶۹	۱,۹۲	.....
c(A°)	۴,۲۷	۴,۰۸	۴,۱۱
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۳,۷۴	۰,۸۷	.....
b/a	۳,۸۳	۳,۶۴	۳,۷۰
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۳,۷۹	۱,۳۵	.....
c/a	۱,۰۵	۱,۰۱	۱,۰۱
درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	۳,۹۶	.....	.....

<sup>1</sup> shekar



در صد اختلاف با مقدار تجربی دارد و با توجه به شرایط ایده‌آلی که در بسته‌ی محاسباتی کوانتموم اسپرسو (به‌جای استفاده از پتانسیل از روش جدیدتر و سریع‌تر شبه‌پتانسیل استفاده می‌شود و توزیع هسته‌های اتمی به‌وسیله‌ی شبه‌پتانسیل‌های باریابسته یا فوق‌نرم و یا به‌وسیله‌ی امواج تخت بهبودیافته قابل تنظیم است). در نظر گرفته می‌شود این میزان اختلاف تقریباً مقدار قابل قبولی است. با توجه به نتایج نظری که با بسته‌ی محاسباتی Wien2k (در این روش هامیتونی با پتانسیل کامل نوشته می‌شود و هیچ شکل خاصی بر تابع موج اعمال نمی‌شود و از روش امواج تخت بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل استفاده می‌شود) انجام شده است، بسته‌ی محاسباتی کوانتموم اسپرسو که از شبه‌پتانسیل (ایده‌ی اصلی در روش شبه‌پتانسیل این است که ابتدا الکترون‌های مغزه و ظرفیت را از هم جدا کرده و دیگر نیازی نیست معادلات کوهن-شم را برای الکترون‌های مغزه حل کرد. در عوض می‌توان پتانسیل کولنی قوی ناشی از هسته را با پتانسیل ضعیفتری جایگزین نمود. این پتانسیل ضعیفتر، بر الکترون‌های ظرفیت اثر کرده در نتیجه تابع موج هموارتر شده و به تعداد کمتری موج تخت نیاز است. این پتانسیل ضعیفتر را شبه‌پتانسیل می‌نامند. این تقریب و ساده‌سازی، حجم محاسبات را کاهش داده و تأثیر چشم‌گیری در دقت و نتایج حاصل از محاسبات نخواهد داشت.) استفاده می‌کند دقت بیشتری را نشان می‌دهد. همچنین مقدار مدول حجمی در تقریب LDA نسبت به تقریب GGA بزرگ‌تر است و این دور از انتظار نمی‌باشد. زیرا مقادیر ثابت‌های شبکه در تقریب LDA نسبت به تقریب GGA کوچک‌تر هستند، بنابراین در این تقریب بلور سخت‌تر است و از آن‌جا که مدول حجمی معیاری از سختی بلور است مقدار بیشتری دارد.

با توجه به جدول‌های ۱ و ۲، مقادیر پارامترهای شبکه‌ی محاسبه شده با نتایج دیگران در توافق خوبی است.

### ۲-۳- مدول حجمی و تراکم‌پذیری

مدول حجمی معیاری از سختی بلور است. به بیان دیگر مدول حجمی تمایل جسم به تغییر شکل در همه‌ی جهات را زمانی که نیروی ثابت در تمام جهات وارد می‌شود بیان می‌کند. برای به‌دست آوردن مدول حجمی نمودارهای انرژی بر حسب حجم را با معادله‌ی مورناگون<sup>۱</sup> که یک معادله‌ی تجربی است برآش داده شد و این معادله به شکل زیر نوشته می‌شود [۱۰]:

$$(1) \quad E(V) = E_o - \frac{B_o V_o}{B'_o - 1} + \frac{B'_o V'_o}{B_o} \left[ \frac{(V_o/V)^{B'_o}}{B'_o - 1} + 1 \right]$$

در این رابطه  $V_0$  حجم سلول اولیه،  $E_0$  انرژی حالت پایه در دما و فشار صفر،  $B_0$  مدول حجمی و  $B'_o$  مشتق آن نسبت به فشار است. تراکم‌پذیری عکس مدول حجمی است. مقادیر محاسبه شده‌ی مدول حجمی، مشتق مدول حجمی، تراکم‌پذیری و حجم تعادلی در جدول ۳ نشان داده شده است. همچنین منحنی انرژی بر حسب حجم در شکل‌های ۲ و ۳ نشان داده شده است.

مقایسه‌ی مدول حجمی  $\text{UGa}_2$  با مقدار آن برای  $\text{UGe}_2$  نشان می‌دهد که با جانشینی  $\text{Ge}$  به‌جای  $\text{Ga}$  که ثابت شبکه‌ی کوچکتری دارد مدول حجمی افزایش می‌یابد، یعنی مدول حجمی با افزایش ثابت شبکه کاهش می‌یابد.

در این محاسبات مقدار مدول حجمی کار حاضر برای ترکیب  $18/8$ ،  $81/2$  گیگاپاسکال است که با توجه به جدول

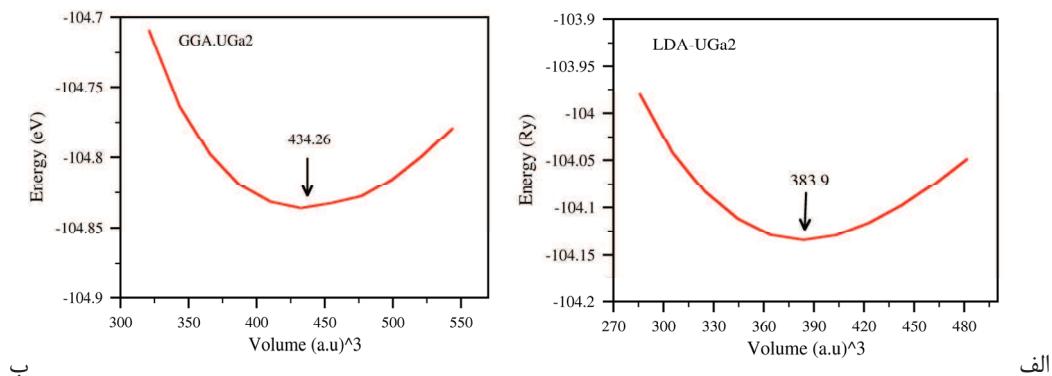
<sup>1</sup> Francis Dominic Murnaghan



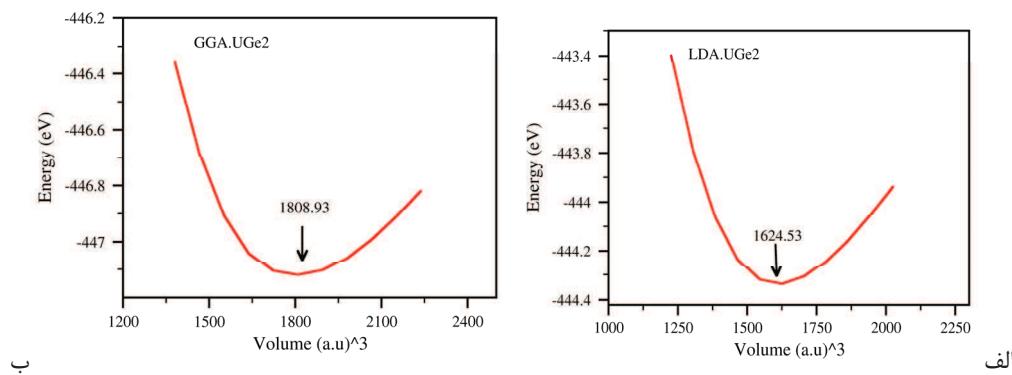
جدول ۳- نتایج محاسبات مدول حجمی، مشتق آن و تراکم‌پذیری ترکیبات  $\text{UGa}_2$  و  $\text{UGe}_2$  [۳] کلومیتس و همکاران، [۹] (شیکر و همکاران)

کار شیکر و همکاران کار کلومیتس و همکاران کار حاضر (GGA) کار حاضر (LDA) ترکیب کمیت‌های محاسبه شده

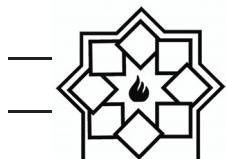
	$\text{UGa}_2$	۸۱/۲	۱۲۹	۱۰۰	۱۵۰
$B_0(\text{Gpa})$	$\text{UGe}_2$	۱۲۹/۲	۱۷۱/۴	.....	.....
$B'_\circ$	$\text{UGa}_2$	۳/۲۳	۲/۳۴	.....	۰/۳
	$\text{UGe}_2$	۴/۶۳	۴/۰۳	.....	.....
$K(\text{GPa})^{-1}$	$\text{UGa}_2$	۰/۰ ۱۲	۰/۰ ۰۷	.....	.....
	$\text{UGe}_2$	۰/۰ ۰۷	۰/۰ ۰۵	.....	.....
$V_0(\text{\AA}^3)$	$\text{UGa}_2$	۶۴/۳۵	۵۶/۸۹	.....	.....
	$\text{UGe}_2$	۲۶۸/۰۶	۲۴۰/۷۳	.....	.....



شکل ۲- نمودار تغییرات انرژی بر حسب حجم برای ترکیب (الف) GGA و (ب) LDA  $\text{UGa}_2$  در تقریب (الف) GGA و (ب) LDA



شکل ۳- نمودار تغییرات انرژی بر حسب حجم برای ترکیب (الف) GGA و (ب) LDA  $\text{UGe}_2$  در تقریب (الف) GGA و (ب) LDA



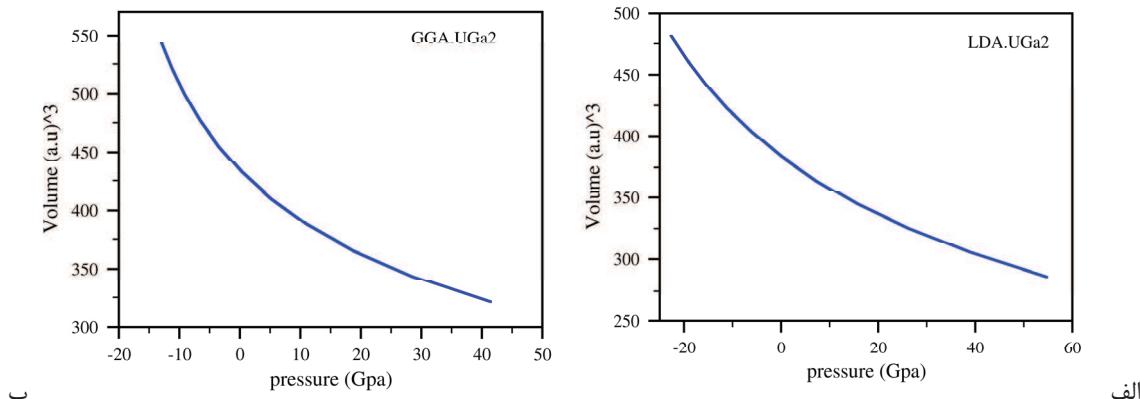
در این رابطه P فشار خارجی وارد بر سامانه است. نمودار تغییرات حجم بر حسب فشار با تقریب‌های GGA و LDA در شکل‌های ۴ و ۵ آمده است.

با توجه به نمودارهای تغییرات حجم بر حسب فشار برای هر دو ترکب در هر دو تقریب مشاهده می‌کنیم، همان‌طور که انتظار می‌رفت افزایش فشار باعث کاهش حجم می‌گردد اما این کاهش محسوس نیست که این امر تأییدی بر تراکم‌پذیری کم و سختی زیاد این ترکیبات است.

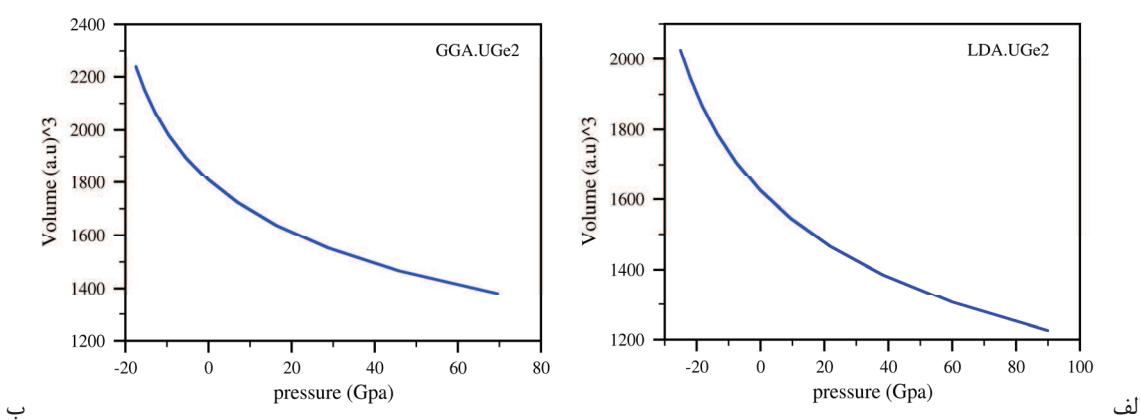
### ۳-۳- بررسی سامانه‌ها در فشارهای مختلف

برای بررسی سامانه در فشارهای مختلف با توجه به رابطهٔ ترمودینامیکی  $dE = -PdV$  لازم است از معادلهٔ مورناگون مشتق گرفته و برابر با  $-PdV$  قرار دهیم. در نهایت نیز رابطهٔ ۲ به دست می‌آید.

$$V(P) = V_0 \left[ \left( \frac{B'}{B} P \right) + 1 \right]^{-\frac{1}{B'}} \quad (2)$$



شکل ۴- تغییرات حجم بر حسب فشار برای ترکیب (الف) GGA و (ب) LDA در تقریب (الف) UGa<sub>2</sub>



شکل ۵- تغییرات حجم بر حسب فشار برای ترکیب (الف) GGA و (ب) LDA در تقریب UGe<sub>2</sub>

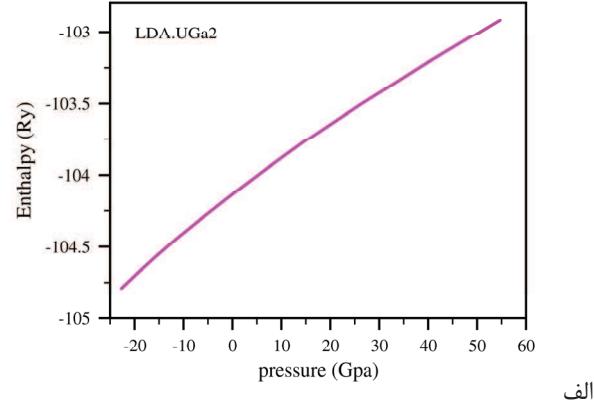
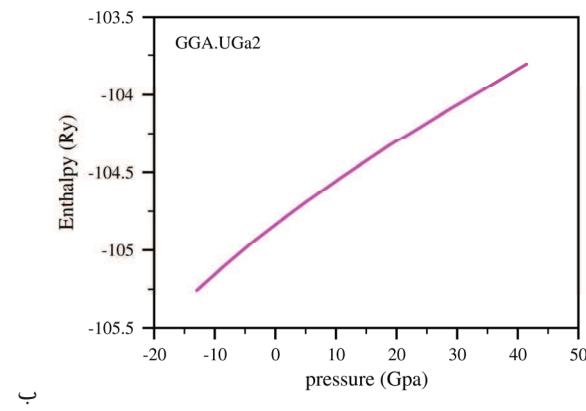


### ۴-۳- آنتالپی

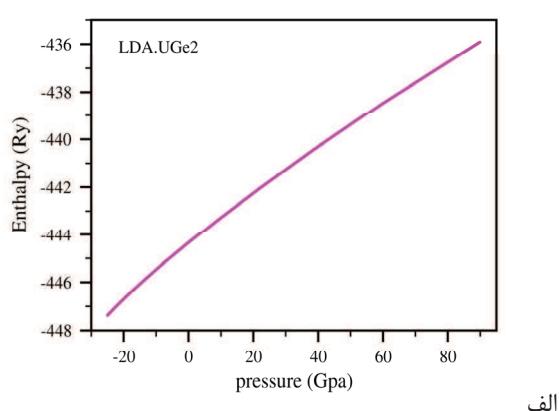
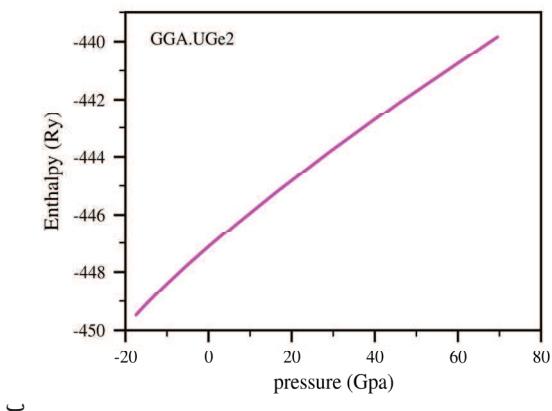
که در آن H آنتالپی، P فشار و V حجم یاخته می‌باشد. نمودار تغییرات آنتالپی بر حسب فشار با تقریب‌های GGA و LDA در شکل‌های ۶ و ۷ آورده شده است. با توجه به نمودارهای تغییرات آنتالپی بر حسب فشار برای هر دو ترکیب با افزایش فشار آنتالپی افزایش می‌یابد، بنابراین تغییرات آنتالپی سامانه برای این ترکیبات مثبت است که این امر بیانگر خاصیت گرماییری و به عبارت دیگر جذب گرما توسط سامانه است.

آنتالپی مقدار گرمای سامانه در فشار ثابت است به عبارت دیگر گرمای جذب شده به وسیله‌ی واکنشی که در فشار ثابت انجام می‌گیرد برابر آنتالپی سامانه است. در واکنش‌های گرماییر تغییرات آنتالپی سامانه مثبت و در واکنش‌های گرمایزا این تغییرات منفی است.تابع ترمودینامیکی آنتالپی با استفاده از رابطه‌ی زیر بیان می‌شود[۱۱]:

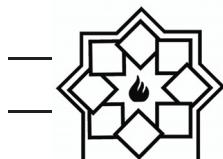
$$H = E + PV \quad (3)$$



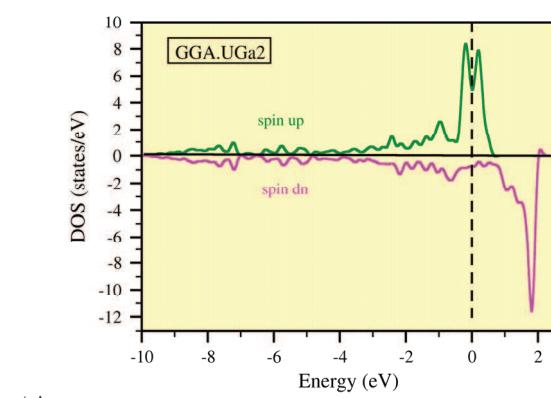
شکل ۶- نمودار تغییرات آنتالپی بر حسب فشار برای ترکیب (الف) GGA و (ب) LDA UGa<sub>2</sub> در تقریب



شکل ۷- نمودار تغییرات آنتالپی بر حسب فشار برای ترکیب (الف) GGA و (ب) LDA UGe<sub>2</sub> در تقریب



شکل ۸ چگالی حالت‌های کلی ترکیب  $\text{UGa}_2$  را در تقریب‌های GGA و LDA در بازه‌ی  $-10\text{--}2$  الکترون ولت و شکل ۹ چگالی حالت‌های کلی ترکیب  $\text{UGe}_2$  را در بازه‌های  $-10\text{--}2$  و  $-12\text{--}2$  الکترون ولت نشان می‌دهد. نمودارهای چگالی حالت‌های کلی برای هر دو ترکیب در تقریب‌های GGA و LDA نشان می‌دهند که بلندترین قله‌ها در حول انرژی صفر است و چگالی حالت‌ها برای هر ترکیب در هر دو تقریب تقریباً مشابه هم هستند، یعنی قله‌ها در حدود یک بازه ظاهر می‌شوند. مقایسه‌ی این نمودارها نشان می‌دهد که در هر دو ترکیب در حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین گاف نواری مشاهده نمی‌شود و خط فرمی که بر روی نقطه‌ی صفر با خط چین مشخص شده است در حالت‌های اسپین بالا و پایین قطع شده است که می‌تواند نشان دهنده‌ی رفتار فلزی ترکیب‌های  $\text{UGa}_2$  و  $\text{UGe}_2$  باشد.

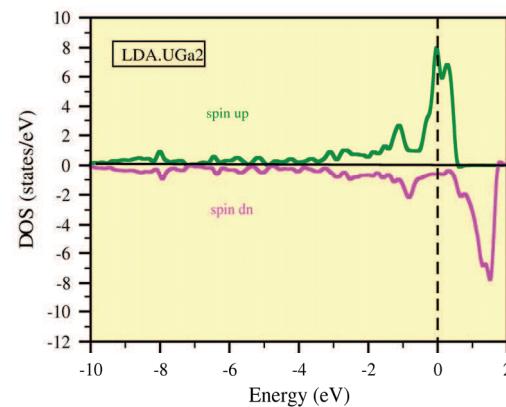


ب.

## ۴- خواص الکترونی

### ۴-۱- چگالی حالت‌های الکترونی

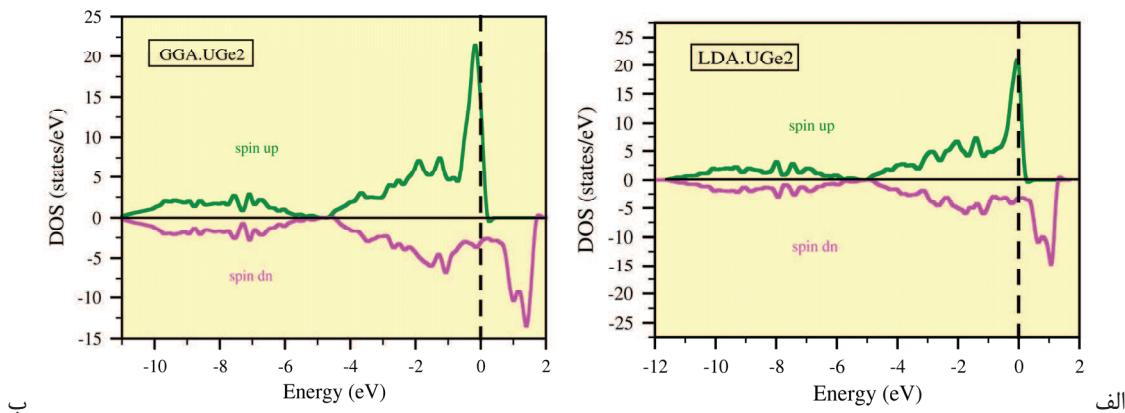
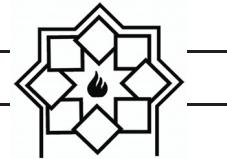
منحنی چگالی حالت‌های یک بلور یکی از کمیت‌های مهم در محاسبه‌ی ویژگی‌های الکترونی مواد است. منحنی چگالی حالت‌های الکترونی طیفی است که نحوه‌ی توزیع الکترون‌ها درون هر یک از اربیتال‌های اتمی را نشان می‌دهد و به کمک آن می‌توان سهم مردبوط به اربیتال هر اتم شرکت کننده در ترکیب در ساختار نواری بلور را بیان کرد. نمودار چگالی حالت‌های کلی برای هر دو ترکیب  $\text{LDA}$  و  $\text{GGA}$  با استفاده از تقریب‌های  $\text{UGa}_2$  و  $\text{UGe}_2$  در شکل‌های ۸ و ۹ با درنظر گرفتن اسپین در دو حالت اسپین بالا و اسپین پایین آمده است. سطح فرمی بر روی نقطه‌ی صفر قرار دارد. مهم‌ترین پارامتری که می‌توان از نمودار چگالی حالت‌های کلی برداشت کرد گاف نواری<sup>۱</sup> است.



الف

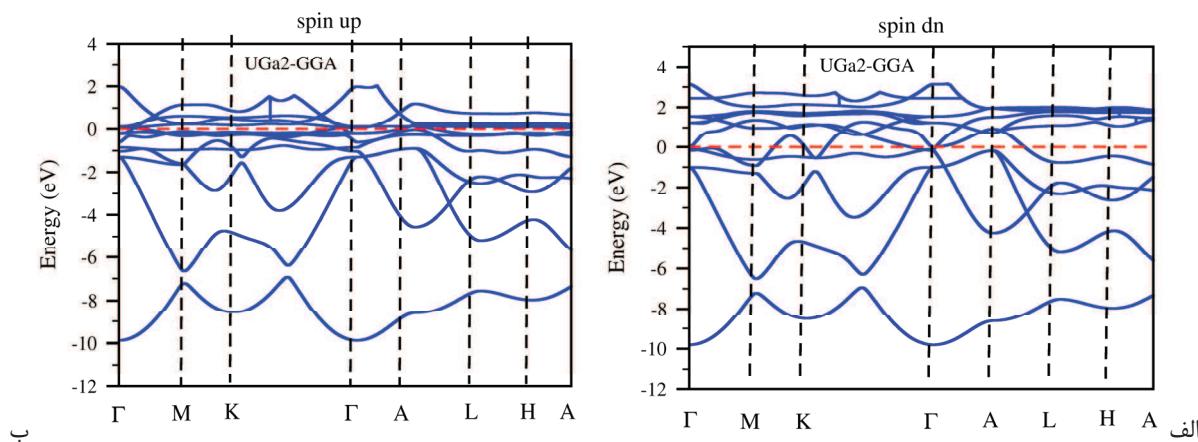
شکل ۸- نمودار چگالی حالت‌های کلی برای ترکیب  $\text{UGa}_2$  در تقریب (الف) LDA و (ب) GGA

<sup>1</sup> Band gap



شکل ۹- نمودار چگالی حالت‌های کلی برای ترکیب  $\text{UGe}_2$  در تقریب (الف) GGA و (ب) LDA

وارون) به دست می‌آیند. برای بررسی خواص الکترونی ترکیبات  $\text{UGa}_2$  و  $\text{UGe}_2$ ، نمودارهای ساختار نواری در راستای نقاط تقارن بالا در تقریب GGA و LDA محاسبه شدند و با توجه به نتایج یکسان در دو تقریب نمودارها در تقریب GGA در بازه‌ی ۱۲-۱۰-۴ الکترون ولت در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ رسم شده است.

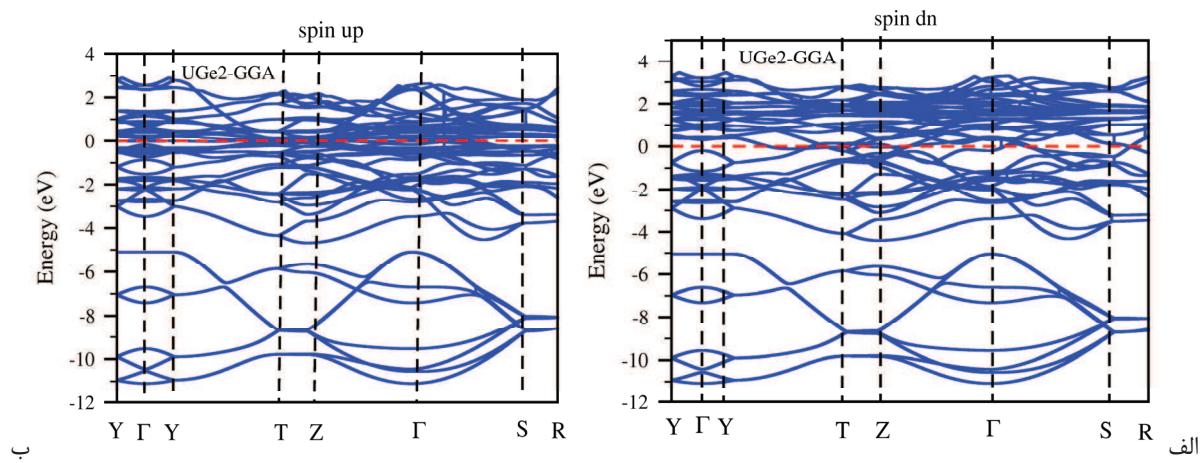
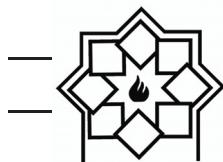


شکل ۱۰- نمودار ساختار نواری ترکیب  $\text{UGa}_2$  با استفاده از تقریب GGA

(الف) در کانال اسپینی بالا و (ب) در کانال اسپینی پائین

## ۲-۴- ساختار نواری

گاف نواری یکی از سودمندترین جنبه‌های ساختار نواری است و به مقدار زیادی روی ویژگی‌های اپتیکی و الکتریکی تأثیر می‌گذارد. چگالی حالت‌ها و ساختار نواری از حل معادلات کوهن شم و محاسبه‌ی ویژه مقادیر انرژی در نقاطی از منطقه‌ی اول بریلوئن (کوچکترین سلول شبکه‌ی

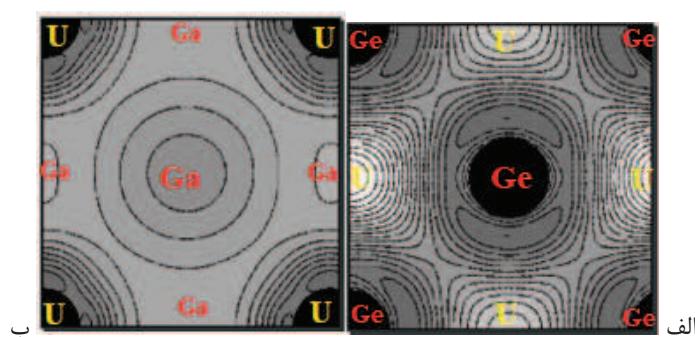


شکل ۱۱- نمودار ساختار نواری ترکیب  $\text{UGe}_2$  با استفاده از تقریب GGA  
 (الف) در کanal اسپینی بالا و (ب) در کanal اسپینی پایین

پایین قطع کرده‌اند و هیچ‌گونه گافی وجود ندارد تأییدی بر خاصیت فلزی این ترکیبات در هر دو تقریب می‌باشد که با نتایج بیان شده در مراجع [۱؛ ۲] در تطابق می‌باشد.

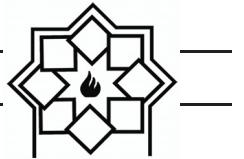
### ۳-۴- چگالی ابر الکترونی

چگالی ابر الکترونی در واقع نحوه‌ی توزیع بار در اطراف اتم‌های تشکیل دهنده‌ی بلور را نشان می‌دهد از طرف دیگر احتمال یافتن الکترون در هر ناحیه متناسب با چگالی ابر الکترونی در آن ناحیه است. این احتمال در ناحیه‌ای که ابر الکترونی متراکم‌تر باشد، بیش‌تر خواهد بود.



شکل ۱۲- چگالی ابر الکترونی در صفحه‌ی (۰۰۱) برای ترکیب (الف)  $\text{UGa}_2$  و (ب)  $\text{UGe}_2$  با استفاده از تقریب GGA

در شکل ۱۰ بر طبق نمودارهای نوار انرژی، ترکیب  $\text{UGa}_2$  در تقریب GGA جز مواد فرومغناطیس محسوب می‌شود زیرا در هر دو حالت اسپین بالا و اسپین پایین، نوارهای انرژی سطح فرمی را قطع می‌کنند. در شکل ۱۱ برای ترکیب  $\text{UGe}_2$  نیز نوارهای انرژی سطح فرمی را در هر دو کanal اسپین بالا و اسپین پایین قطع می‌کنند. با توجه به نمودار ساختار نواری برای ترکیب  $\text{UGe}_2$  مشارکت اتم‌ها اطراف سطح فرمی بیشتر از ترکیب  $\text{UGa}_2$  می‌باشد که این امر می‌تواند ناشی از بیشتر بودن الکترون‌های ظرفیت در ترکیب  $\text{UGe}_2$  باشد. از آنجاکه نوارهای انرژی تراز فرمی را در هر دو کanal اسپین بالا و اسپین



است که ترازهای فرمی همدیگر را قطع می‌کنند، لذا این ترکیبات فلز است.

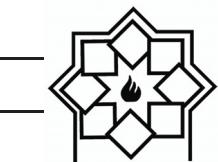
## مراجع

- [1] V. N. Antonov, B. N. Harmon, "Electronic structure and magneto-optical Kerr effect in UGa<sub>2</sub>", Journal of Applied Physics, Vol.94, pp. 7240-7245, 2003.
- [2] H. Kotegawa ,V. Taufour, D. Aoki, G. Knebel, J. Flouquet , "Evolution toward Quantum Critical End Point in UGe<sub>2</sub>", Journal of the Physical Society of Japan, Vol.80, pp.0837031-4, 2011.
- [3] A. V. Kolomiets, J. C. Griveau ,J. Prchal, A. V. Andreev, L. Havela, "Variations of magnetic properties of UGa<sub>2</sub> under pressure", Physical Review, Vol. 91, pp. 0644051-0644061, 2015.
- [4] A. Huxley, I. Sheikin, E. Ressouche, N. Kernavanois, D. Braithwaite, R. Calemczuk., J. Flouquet, "UGe<sub>2</sub>: A ferromagnetic spin-triplet superconductor", Physical Review B, Vol. 63, pp. 1445191-13, 2001.
- [5] T. Honma, Y. Inada, Sh. Araki, Y. Tokiwa, T. Takeuchi, H. Sugawara, H. Sato, K. Kuwahara, M. Yokoyama, H.

در شکل ۱۲ برای ترکیب UGa<sub>2</sub> اتم‌هایی که در نمایش دو بعدی چگالی ابر الکترونی در گوشه جای گرفته‌اند، اتم اورانیوم و اتم‌هایی که در مرکز هر ضلع واقع شده‌اند اتم‌های گالیم می‌باشند. که برای اتم گالیم فقط تصویری از این اتم‌ها نمایش داده شده‌اند. برای ترکیب UGe<sub>2</sub> اتم‌هایی که در گوشه قرار گرفته‌اند، اتم ژرمانیوم و اتم‌هایی که در مرکز هر ضلع واقع شده‌اند اتم‌های اورانیوم می‌باشند. اختلاف الکترونگاتیوی عناظر مورد نظر در ترکیبات UGa<sub>2</sub> و UGe<sub>2</sub> به ترتیب ۰/۴۷ و ۰/۷۳ به دست می‌آیند که نشان‌دهنده‌ی پیوند کووالانسی قوی است و با مقایسه با شکل ۱۲ در تطابق می‌باشند. برای تقریب LDA نیز نتایج کاملاً یکسانی با تقریب GGA مشاهده شد.

## ۵- نتیجه‌گیری

در این کار ویژگی‌های ساختاری و الکترونی ترکیبات UGa<sub>2</sub> و UGe<sub>2</sub> با استفاده از روش شبه‌پتانسیل در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی با استفاده از تقریب‌های GGA و LDA مورد مطالعه قرار گرفتند. نتایج به دست آمده از پارامترهای ساختاری از توافق مناسبی با تجربه برخوردار است و با توجه به مقدار مدول حجمی در می‌باییم که این ترکیبات از تراکم‌پذیری کم و سختی زیادی برخوردار است. با توجه به نتایج به دست آمده از بررسی سامانه در فشارهای مختلف برای هر دو ترکیب در می‌باییم که تغییر حجم سامانه در برابر فشار چشمگیر نیست که این امر نیز تأییدی بر سختی این ترکیبات است. بررسی تغییرات آنتالپی با افزایش فشار نیز بیانگر جذب گرما توسط سامانه و یا به عبارتی گرمایگیر بودن آن است. ساختار نواری بیانگر این



- uranium digermanide  $\text{UGe}_2$ ", Journal of Alloy and Compounds, Vol. 247, pp.104-108, 1997.
- [9] N. V. Ch. shekar, P. Ch. Sahu, V. Kathirvel ,S. Chandra, "Electronic structure of  $\text{UAL}_2$  and  $\text{UGa}_2$ ", Indian Journal of Physics, Vol.86: (11), pp. 971-976, 2012.
- [10] توکلی، ب، "بررسی خواص الکترونی و ساختاری  $\text{SrS}$  با استفاده از روش شبېپتانسیل"، پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه شهید چمران اهواز، ۱۳۹۰.
- [11] J. P. Wright, J. P. Attfield, P. G. Radaelli, "Long Range Charge Ordering in Magnetite Below the Verwey Transition", Physical Review Letters. Vol. 87, 26, pp. 26640, 2001.
- [12] H. Yamagami, A. Hasegawa., "Fermi surface of the ferromagnetic heavy-electron compound  $\text{UGe}_2$ ,"Physica. B, Vol. 186, pp.182-184, 1993.
- Amitsuka ,T. Sakakibara, E. Yamamoyo, Y. Haga, A. Nakamura, H. Harima, H. Yamagami, Y.Onuki, "Magnetic and Fermi Surface Properties of the Ferromagnetic Compound  $\text{UGa}_2$ ", Journal of the Physical Society of Japan, Vol.69, pp. 2647-2659, 2000.
- [6] N. Kernavanois, B. Grenier, A. Huxley, E. Ressouche, J. P. Sanchez, J. Flouquet , "Neutron scattering study of the ferromagnetic superconductor  $\text{UGe}_2$ ", Physical Review B, Vol.64, pp. 1745091-7,2001.
- [7] P. Giannozzi, et al., "Quantumespresso a modular and open- source software project for quantum simulations of materials", Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 21, pp. 395502, 2009.
- [8] P. Boulet, A. Daoudi, M. Potel, H. Noel, G. M. Gross, G. Andre, F. Bouree, "Crystal and magnetic structure of the