بررسی سطح فرمی در ترکیب UP_2

پورشیب ، مرضیه[۱] ؛ جلالی اسد آبادی ، سعید[۱] ؛ رحیمی ، شهربانو[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشگاه اصفهان، خیابان هزار جریب، اصفهان

چکیده:

سطوح فرمی برای ترکیب UP_2 با استفاده از نظریه تابعی چگالی و برنامه محاسباتی WIEN2K مورد بررسی قرار گرفته‌اند. ساختار نواری محاسبه شده برای این ترکیب نشان می‌دهد که سطح فرمی حداقل توسط ٦ نوار قطع شده است که در مجموع ٥ الکترون را در خود جای داده است. نوارهای انرژی به دست آمده نشان می دهند کمینه انرژی‌های نوارهای انرژی ای که سطح فرمی را قطع کرده اند در نقطه تقارن X قرار دارند. نوارهای انرژی و شاخه های سطح فرمی ترسیم شده برای این ترکیب نشان می دهند که نوارهایی که بخش زیادی از آن‌ها در زیر انرژی فرمی قرار دارند و دارای عدد اشغال بزرگتری هستند فضای کوچکی را در سطح فرمی اشغال کرده اند. این امر نشان می‌دهد که در این ترکیب حامل‌های اصلی حفره‌ها هستند. شاخه‌های سطح فرمی، عدد اشغال و نوع حامل‌های رسانش روی این شاخه‌ها برای این نوارها را مورد بررسی قرار داده‌ایم.

Investigation of Fermi surface in UP_2 compound

Pourshib, Marzieh[1]; Jalali-Asadabadi, Saeid[1]; Rahimi, Shahrbano[1]

[1]Department of Physics, University of Isfahan, Isfahan

Abstract

The Fermi surfaces are investigated for UP_2 compound in the framework of the density functional theory using WIEN2k computational code. The calculated band structure of this compound shows that at least its six energy bands cross the Fermi level which are occupied by five electrons. The minimum energies of these energy bands are located in the X symmetry point. Furthermore, small packets are observed in the Fermi surface branches which are attributed to the bands crossing the Fermi level with high occupation numbers. This shows that the main carriers in this compound are holes. For each of these six bands, the Fermi surface branches, number of occupied bands and kind of carriers are investigated.

مقدمه:

کمیت‌هایی که تنها به ثابت‌های جهانی همانند c، h یا e و متغیرهای قابل کنترل در آزمایشگاه مانند دما، بسامد، شدت میدان مغناطیسی، سختی بلور و کمیت‌های دیگر بستگی دارند، به دلیل قابلیت ارایه و در اختیار قرار دادن اطلاعاتی درباره ساختار هندسی سطوح فرمی مواد مورد توجه هستند، و در فیزیک فلزها از اهمیت ویژه‌ای برخوردارند. اندازه‌گیری های سطوح فرمی بیشتر مواقع بر روی تک بلورهایی از ماده بسیار خالص در دماهای بسیار پایین و بیشتر در میدان‌های مغناطیسی قوی انجام می شوند [۱]. شکل سطح فرمی ارتباط تنگاتنگی با ضرایب و ویژگی های اپتیکی و تعادلی یک فلز دارد [۲, ۳]. سطح فرمی یک فلز به صورت سطحی با انرژی ثابت در فضای تکانه و در دمای صفر مطلق تعریف می‌شود. این سطح حالت‌های الکترونی پر شده را از حالت‌های پر نشده جدا می‌کند [٤].

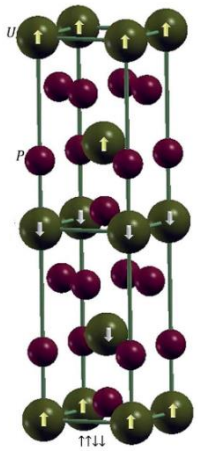
جایگزیدگی الکترون‌های 5f به محیط‌های بلوری بستگی دارد و می تواند از بلوری به بلور دیگر تغییر کند [۵]. خواص یک بلور به میزان جایگزیدگی الکترون‌های آن بستگی دارد [٦]. ترازهای 5f نیمه پر در آکتانیدها عامل رفتار مغناطیسی آلیاژهای آکتانیدی و ترکیب‌های آنهاست [۷]. ترکیب UP_2 که در این مقاله مورد بررسی قرار می‌گیرد دارای ساختار چهارگوشه [۸] و نظم پادفرومغناطیسی با دمای نیل نسبتا بالاست. ساختار پادفرومغناطیسی این ترکیب با پراکندگی نوترونی مشخص شده است [۹]. خاصیت پادفرومغناطیسی این ترکیب و اهمیت اربیتال f در اورانیوم و ویژگی‌های مغناطیسی و گرادیان‌های میدان الکتریکی مربوط به این ترکیب توسط قاسمی‌خواه و همکاران در سال ۱۳۹۰ مورد بررسی قرار گرفته اند [۱۰]. ما در این مقاله خواص الکترونی شامل ساختار نواری، چگالی حالتها و سطح فرمی برای ترکیب UP_2 مورد بررسی قرار داده‌ایم.

روش محاسبه:

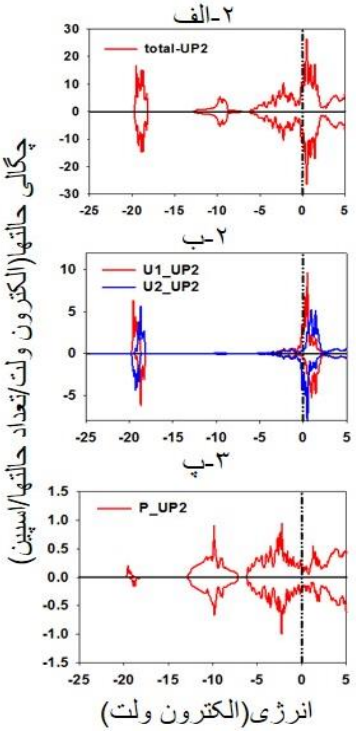
محاسبات اولیه بر مبنای نظریه تابعی چگالی و کد محاسباتی WIEN2k صورت گرفته است [۱۱]. در این راستا برای محاسبه انرژی تبادلی- همبستگی از رهیافت‌های تابعی GGA استفاده کرده-ایم. $R_{MT}K_{\max}$ را در محاسبه‌ها برابر ۷ در نظر گرفته‌ایم که در آن R_{MT} کوچکترین شعاع کرهٔ مافین- تین و $K_{\max}$ اندازه بزرگترین بردار موج قطع بسط امواج تخت هستند. اندازه بزرگترین بردار موج در بسط فوریه چگالی بار و پتانسیل، G_{max}، در ناحیه‌ی بین جایگاهی ١٤ در نظر گرفته شده است. تعداد نقاط در شبکه وارون برای تولید سطح فرمی ۱۰۰۰۰ انتخاب شده است. یاخته واحد این ساختار و چینش اسپینی ($\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$) اتمهای اورانیم در شکل ۱ نشان داده شده است [۱۲].

چگالی حالت‌های ترکیب UP_2 :

شکل ۲ چگالی حالت‌های الکترونی کلی بلور UP_2 نشان می‌دهد.



شکل ۱: ساختار مغناطیسی بلور UP_2 [۱۲].



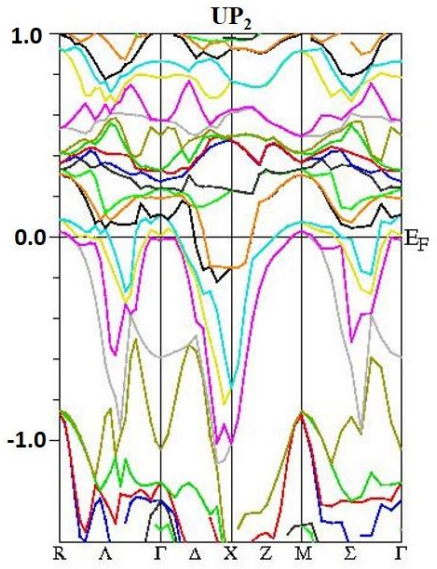
شکل ۲: چگالی حالت ترکیب UP_2.

شکل ۲-الف چگالی حالت‌های الکترونی کل بلور UP_2 را نشان می‌دهد. حالت‌هایی با اسپین بالا و پایین کاملا متقارن هستند و می توانند اثر همدیگر را خنثی کنند که نشان دهنده‌ی خاصیت پاد فرو

مغناطیسی این ترکیب است. شکل ۲-ب منحنی‌های مربوط به اسپین‌های بالا و پایین در اتم اورانیم متقارن نمی‌باشند. بنابراین، اتم اورانیم در بلور UP_2 خاصیت مغناطیسی از خود نشان می‌دهد. در شکل ۲-پ که مربوط به اتم فسفر می‌باشد؛ چگالی‌های حالت‌های با اسپین بالا و پایین متقارن می‌باشند. بنابراین، اتم فسفر بر خلاف اتم اورانیم یک اتم غیر مغناطیسی است و صفحات مغناطیسی اورانیم به وسیله صفحات غیر مغناطیس فسفر از هم جدا شده‌اند.

بررسی ساختار نواری و سطح فرمی در UP_2:

ساختار نواری در اصل از روی هم افتادگی تابع‌های موج اتمی اتم-های یک بلور در فضای K ایجاد می‌شود و دربردارنده تمام ویژگی-های الکترونی بلور است. ساختار نواری برای ترکیب UP_2 در رهیافت GGA در شکل ۲ رسم شده است.



شکل ۲: ساختار نواری ترکیب UP_2.

تعداد نوارهایی که انرژی فرمی را قطع می‌کنند و عدد اشغال آنها، نشان دهنده تعداد الکترون‌ها و حفره‌ها بر روی سطح فرمی است.

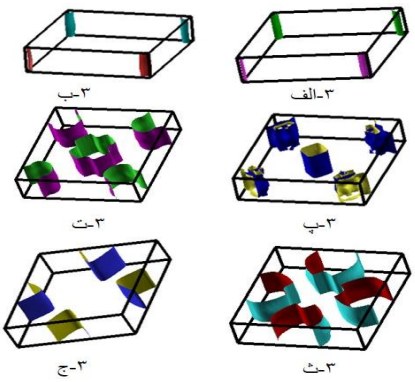
ساختار نواری این ترکیب نشان می دهد که سطح فرمی با ٦ نوار قطع شده است که در مجموع حدود ۵ الکترون را در خود جای داده‌اند. عدد اشغال این نوارها به ترتیب با افزایش شماره نوار، کاهش می‌یابد. اطلاعات این نوارها در جدول شماره ۱ نمایش داده شده اند.

جدول ۱: اطلاعات نوارها در ترکیب UP2.

شماره نوار	رنگ نوار	کمینه‌ی نوار	بیشینه‌ی نوار	عدد اشغال
۶۵	طوسی	-۰/۰۸۹۹	۰/۰۰۱۶	۱/۰۰۰۰
۶۶	صورتی	-۰/۰۸۸۲	۰/۰۰۱۸	۱/۰۰۰۰
۶۷	زرد	-۰/۰۶۴۱	۰/۰۰۵۵	۰/۹۶۶۷
۶۸	نیلی	-۰/۰۵۴۷	۰/۰۰۸۰	۰/۹۳۵۳
۶۹	نارنجی	-۰/۰۱۷۲	۰/۰۲۲۱	۰/۷۶۵۵
۷۰	مشکی	-۰/۰۱۱۶	۰/۰۲۲۲	۰/۶۶۰۶
مجموع عدد اشغال نوارها				۵/۳۲۸۱

در تحلیل سطح فرمی باید به این نکته توجه داشت که حجم کل محصور شده به وسیله هر شاخه از سطح فرمی مربوط به یک نوار فقط به عدد اشغال نوار بستگی دارد و مستقل از جزئیات برهمکنش شبکه است. از این رو نسبت حجم هر پوسته به حجم کلی منطقه اول بریلوین نشان دهنده میزان حضور حامل‌ها در آن پوسته می-باشد. ولی همان طور که در جدول ۱ مشاهده می کنیم نوارهای پایین‌تر عدد اشغال بزرگتری دارند ولی حجم کمتری را به خود اختصاص می‌دهند. این تناقض به دلیل آن است که حامل‌های اصلی در این ترکیب حفره‌هامی‌باشند بلور UP_2 یک فلز با تعداد مساوی از حامل‌های الکترونی و حفره‌ای است [۱۳و ١٤]. شاخه‌های سطوح فرمی برای ترکیب UP_2 در رهیافت GGA در شکل ۳ رسم شده است. شکل‌های ۳-الف و ۳-ب شاخه‌های مربوط به نوارهای شماره ٦٥ و ٦٦ را نمایش می‌دهند. این شکل‌ها که به صورت ورقه-های استوانه‌ای موج‌دار هستند، در گوشه‌های ناحیه‌ی اول بریلوین

مرز این ناحیه را قطع می‌کنند و بنابراین نشان دهنده حامل‌هایی از نوع الکترون در سطح فرمی می‌باشند. البته با توجه به کوچک بودن آنها و این که فقط در گوشه‌ها می‌توان آنها را مشاهده کرد می‌توان گفت سهم این قسمت از سطح فرمی در تعداد حامل‌های رسانشی سطح فرمی کم می‌باشد. از طرفی کمینه این دو نوار در راستای تقارنی X قرار گرفته اند و تقریبا به طور کامل در زیر سطح فرمی قرار دارند که این ویژگی های فوق شبه حفره بودن این نوارها را تایید می‌کند. شکل‌های ۳–پ و ۳–ت شاخه‌های مربوط به نوارهای شماره ٦٧ و ٦٨ است. در هرکدام از این شکل‌ها یک ورقه استوانه-ای اطراف نقطه مرکزی وجود دارد که نشان دهنده حامل‌هایی از نوع حفره در سطح فرمی می‌باشد. همچنین در این شکل‌ها ورقه-های استوانه‌ای وجود دارد که مرز ناحیه اول بریلوین را قطع می-کنند، که نشان دهنده حامل‌هایی از نوع الکترون می‌باشند. شکل‌های ۳–ث و ۳–ج شاخه‌های مربوط به نوارهای شماره ٦٩ و ٧٠ است. هر کدام از این شکل‌ها، ورقه‌های ناکاملی هستندکه مرز ناحیه اول بریلوین را قطع کرده‌اند. با توجه به ساختار نواری، بخش زیادی از این نوارها در بالای سطح فرمی قرار دارد و شامل حالت‌های خالی از الکترون است. بنابراین این نوارها شبه الکترون می‌باشند.



شکل ۳: سطوح فرمی ترکیب UP_2.

نتیجه‌گیری:

در این ترکیب دو نوع سطح فرمی در ناحیه اول بریلوین وجود دارد. یکی سطوح فرمی کروی و استوانه‌ای حول نقطه مرکزی که نشان دهنده حامل‌های حفره‌ای و دیگری ورقه-های ناکاملی هستند که منطقه اول بریلوین را قطع می‌کنند که نشان دهنده حامل‌هایی از الکترون در سطح فرمی می-باشند.

مرجع‌ها:

[1] Neil W. Ashcroft, N. David Mermin, "*Solid State Physics*"; Cornell University (1957).

[2] K. Akiba, A. Miyake, H. Yaguchi, A. Matsuo and M. Tokunaga, "Possible excitonic phase of graphite in the quantum limit state," *Journal of the Physical Society of Japan* **84**, 054709 (2015).

[3] K. Kubo, "Lifshitz Transitions in Magnetic Phases of the Periodic Anderson Model," *Journal of the Physical Society of Japan* **84**, 094702 (2015).

[4] S. Julian, "Numerical extraction of de Haas–van Alphen frequencies from calculated band energies," *Computer Physics Communications* **183**, 324-332 (2012).

[5] W. Potzel, J. Moser, L. Asch, and G. Kalvius, "Mössbauer spectroscopy with actinide elements," *Hyperfine Interactions* **13**, 175-198 (1983).

[6] H. Iwasawa, T. Saitoh, Y. Yamashita, D. Ishii, H. Kato, N. Hamada, "Strong correlation effects of the Re 5d electrons on the metal-insulator transition in Ca_2FeReO_6," *Physical Review B* **71**, 0751061 (2005).

[7] R. Trok, and Z. Żolnierek, "Magnetic properties of some tetragonal uranium compounds," *Le Journal de Physique Colloques* **40**, C4-79-C4-81 (1979).

[8] Z. Henkie, and Z. Kletowski, "Transversal electrical propertiesof the uniaxial antiferromagnets UAs_2 and USb_2," *Jornal of Acta Physical.Pol.A42*:**4**, 405-11 (1972).

[9] G. Amoretti, A. Blaise, and J. Mulak, "Crystal field interpretation of the magnetic properties of UX2 compounds (X= P, As, Sb, Bi)," *Journal of magnetism and magnetic materials* **42**, 65-72 (1984).

[۱۰] ا.قاسمی خواه، س .جلالی اسد آبادی، رساله کارشناسی ارشد، دانشگاه اصفهان (۱۳۹۰).

[11] T. Oguchi, and A. J. Freeman, "Local density band approach to f-electron systems—heavy fermion superconductor UPt3," *Journal of magnetism and magnetic materials* **52**, 174-178 (1985).

[12] E. Ghasemikhah, S. J. Asadabadi, I. Ahmad, and M. Yazdani-Kacoei, "Ab initio studies of electric field gradients and magnetic properties of uranium dipnicties," *RSC Advances* **5**, 37592-37602 (2015).

[13] D. Aoki, P. Wi´ niewski, K. Miyake, N. Watanabe, "Cylindrical Fermi surfaces formed by a fiat magnetic Brillouin zone in uranium dipnictides," *Philosophical Magazine* B **80**, 1517-1544 (2000).

[۱۴] ا. قاسمی خواه, س. جلالی اسدآبادی, و م. دهقانی, "محاسبه‌ی گرادیان‌های میدان الکتریکی در ترکیبات UX2 (X= Bi, Sb)," پژوهش سیستم های بس ذره ای ۱, ۲۱-۳۱ (۲۰۱۱).