۱

پژوهشهای نوین فیزیک

ویژگی نیمهفلزی، رفتار اپتیکی و پایداری ترمودینامیکی سطوح فیلم[۰۰۱] آلیاژهای نیمههویسلری (XVSi(X=Co, Rh

آرش بوچانی*، ملیحه امیری

گروه فیزیک، واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران

دریافت: ۱۳۹۹/۹/۱۶ پذیرش: ۱۴۰۳/۸/۲۷

چکیدہ

بر مبنای نظریهی تابعی چگالی و تقریب GGA، با اعمال پتانسیل بهبود یافته TB-mbJ خواص ساختاری، الکترونی، اپتیکی و پایداری ترمودینامیکی ترکیبهای نیمهویسلری (XSi(X=Co, Rh و فیلمهای[۰۰۱] آنها مورد مطالعه قرارگرفت. این دو ترکیب هویسلری با بروز رفتار نیمه رسانایی غیرمغناطیسی در ساختار مکعبی نوع-MgAgAs با گروه فضایی F4-3m پایدار می-باشند. به واسطهی دریافت پاسخهای خوب قسمتهای حقیقی و موهومی تابع دیالکتریک برای iOVSi و KNVSi در محدودهی طیف مرئی و پایین بودن تابع اتلاف الکترونی، این دو هویسلر برای کاربردهای اپتیکی در این محدودهی انرژی مناسب خواهند بود. بررسی نمودار پایداری فازی فیلمهای[۱۰۰] این ترکیبها نشان داد که هر ۶ پایانش ممکن به لحاظ ترمودینامیکی پایدار خواهند بود. ساختار الکترونی این فیلمهای[۱۰۰] این ترکیبها نشان داد که هر ۶ پایانش ممکن به لحاظ ترمودینامیکی پایدار خواهند بود. ساختار الکترونی این فیلمها نشان دهندهی ظهور رفتار نیمه فلزی مغناطیسی فقط برای دو پایانش[۱۰۰] و V-Si:CoVSi و Iov

کلمات کلیدی: نظریه تابعی چگالی، ترکیبات هویسلر، فیلم لایه نازک، پایداری ترمودینامیکی، تابع دی الکتریک، نمودار فازی، خواص الکترونی، (XVSi(X=Co, Rh.

۱.مقدمه

با کشف مواد نیمهفلزی پنجره جدیدی به دنیای الکترونیک و اسپینترونیک گشوده شد. این مواد تحت تاثیر میدان خارجی رفتارهای متفاوتی را از خود نشان میدهند، بطوریکه در یک راستای اسپینی فلز و در راستای اسپینی دیگر با دریافت یک گاف نواری در سطح فرمی ، نیمهرسانا هستند. نکتهی قابل توجه آن است که این رفتار نیمهفلزی تحت تاثیر عوامل بیرونی همچون فشار، دما، نقصهای شبکه و یا افزودن ناخالصیها براحتی میتواند ازبین رفته و یا تغییر کند، لذا دستیابی به نیمهفلزاتی با گاف نواری مطلوب برای کاربردهای اسپینترونیکی بسیار حائز اهمیت میباشد [۱] . یک رده بسیار مهم از این مواد، خانوادهی هویسلرها هستند که شامل دو گروه نیمه-هویسلر و تمام-هویسلر میشوند. این دسته از مواد به واسطهی داشتن رفتار نیمهفلزی و مغناطیسی قوی توجهات بسیاری را در دهههای اخیر به خود جلب نمودهاند.[۲-۴]در این بین، ترکیبهای نیمه هویسلر یا آلیاژهای سهتایی هویسلر(XYZ) با ویژگیهای جالب ترموالکتریکی^۱ [۵-۷]، اسپینترونیکی [۸و ۹]، ابررسانایی^۲ [۱۰و ۱۱]، سنتز ارزان قیمت و پایداری گرمایی مطلوب [۱۲-۱۴] در سالهای اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفتهاند. امروزه یکی از موارد کاربرد این ترکیبات، ساخت و رشد فیلمهای لایه نازک^۳ آنها است [۱و ۱۶]، همچنین در سالهای اخیر تعداد زیادی از ترکیبات نیمه-هویسلر پیش بینی

شدهاند که رفتارهای نیمهفلزی و نیمهرسانایی داشته و پایداری مکانیکی و ترمودینامیکی را از خود نشان دادهاند. از این بین،در این تحقیق آلیاژهای سهتایی متشکل از اتمههای Co، AN، و Si پیش بینی شده ی قبلی بواسطه ی داشتن ویژگیهای جالب فیزیکی مورد توجه ما قرار گرفتهاند. پیش بینیهای صورت گرفته توسط Ma Ianhua. Ma محکارانش[۱۷] و یا فنگی شی و گروهش [۱۸]، پایداری گروهی از نیمه-هویسلرها از جمله ترکیبهای TovSi و همکارانش[۱۷] و یا فنگی شی و گروهش [۱۸]، پایداری گروهی از نیمه-هویسلرها از جمله ترکیبهای CoVSi و And از طریق محاسبه یا نرژیهای تشکیل بلوری[†] وفاصله از فاز پایدار^۵ در پایگاه دادههای کوانتومی مواد⁷ (OQMD) نشان دهندهی آن است که آلیاژهای هویسلر سه تاییXYZ شامل اتمهای مهای دادههای کوانتومی مواد⁷ بر Tir و X-Ni, Co, Rh را سریت که آلیاژهای هویسلر سه تاییXYZ شامل اتمهای نواری در گسترهی/۰، تا۱۹۲۹ الکترونولت میباشند که در شرایط مناسب سنتز، به طور آزمایشگاهی قابل دستیابی خواهند بود. بطور ویژهتر، چیبانی^۷ و تیمش[۱۹] با بکارگیری دو تقریب (GGA-PBE) و (GGA-PBE) ، پایداریهای ساختاری و الاستیکی و نیز رفتار الکترونیکی و ترموالکتریکی دو ترکیب نیمههویسلر (ز TB-mBJ) ، پایداریهای ساختاری و الاستیکی اند. نتایج بدست آمده نشان می دهد که این آلیاژهای هویسلری از منظر مکانیکی پایدار بوده و دارای ماهیتی شکل-و نیز رفتار الکترونیکی و ترموالکتریکی دو ترکیب نیمههویسلری از منظر مکانیکی پایدار بوده و دارای ماهیتی شکل-اند. نتایج بدست آمده نشان می دهد که این آلیاژهای هویسلری از منظر مکانیکی پایدار بوده و دارای ماهیتی شکل-و نیز رفتار الکترونیکی و ترموالکتریکی دو ترکیب نیمهرسانایی با گافهای نواری غیرمستقیم حدود ۸۸/۰ و ۲/۰ پذیر^۸ هستند. محاسبات ساختار الکترونی بیانگر رفتار نیمهرسانایی با گافهای نواری غیرمستقیم حدود داری ماست که در مرایلی موده-رو نیز رفتار و به برای محاسبه شده

زمانی که تعداد الکترونهای ظرفیت مادهای برابر با ۱۸ باشد، گاف انرژی در هر دو راستای اسپینی به علت هیبریداسیون قوی اربیتالهای d مشاهده می شود. لذا رفتار نیمه رسانایی در این مواد علی رغم وجود فلزات واسطه ی دارای لایه d نیمه پر همچنان باقی می ماند. بنابراین این دسته از مواد پتانسیل بلقوه ای برای کاربردهای نیمه-رساناهای ترموالکتریکی [۲۰–۲۴]، مواد اپتوالکترونیک [۲۵]، سلولهای خورشیدی [۲۶] و عایق های توپولوژیکی [۲۷] به شمار می روند. باتوجه به مطالب عنوان شده، ترغیب شدیم تا رفتار الکترونی، ویژگی های ساختاری و پایداری

¹. Thermoelectric

². Superconductivity

³. Thin films

⁴. Formation energy

⁵. convex hull stable phase

⁶. Open Quantum Material Database

⁷. Chibani

⁸. ductile

ترمودینامیکی نیمهرساناهای (XVSi(X=Co,Rh و نیز اثرات سطح در فیلم لایه نازک بر رفتارهای الکترونی و اپتیکی آنها را در چارچوب محاسبات نظریهی تابعی چگالی مورد بررسی قرار دهیم.

۲.روش محاسباتی

خواص ساختاری و الکترونی ترکیبهای (XVSi(X=Co,Rh) در حالت بالکی ونیز فیلمهای لایه نازک [۰۰۱] آنها با استفاده از روش پتانسیل کامل امواج تخت بهبودیافته خطی (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی [۸۲و ۲۹] و اعمال تقریب گرادیان تعمیمیافته (GGA) و پتانسیل بهبود یافتهی (TB-mBJ) [۳۰] در محیط Wien2K محاسبه شد[۳۱]. مقادیر ۸هسته (RmtKmax ، مشبندی ۲۷×۲۱×۱۷ و ۲×۲×۷ نقطهی k طبق طرح مانخورست^۱ [۳۲] بترتیب برای بالک و فیلمهای[00] در نظر گرفته شد. شعاع کرات مافین-تین را ۸.۵ ممگرایی برای اتمهای CO، Vو Si و ۵.۵ ۲/۰۰ برای Rh انتخاب نمودیم. محاسبات خود سازگار برای رسیدن به همگرایی مطلوب تا زمانی که انحراف انرژی به کمتر از ^{۴–۱}۰ الکترونولت بر اتم برسد ادامه پیدا خواهد کرد. همچنین نیروهای اعمالی بر هر اتم در این فیلمها تا حدود ۲/۰ (ریدبرگ بر واحد اتمی) بهینه و مقدار ۳۰ بوهر خلاء در دو انتهای فیلم

۳.بحث و نتایج

۳–۱. خواص ساختاری

نتایج بررسی پایداری ترکیبهای RhVSi و CoVSi در فاز نیمه-هویسلر از طریق رسم منحنی انرژی- حجم آن-ها با استفاده از معادله حالت مورناگون[۳۳] نشانداد که این دو ترکیب در ساختارمکعبی مرکزسطحی از نوع -MgAgAs با گروه فضایی F4-3m متبلور میشوند. در این ساختار اتمهای (RhO(Rh) و درمکانهای وایکوف:^۲ (۲۵,۰۰، ۲۵,۰۰، ۲۵,۰۰) ۴۰ ، (۵,۰۰، ۵,۰، ۵) ۴۰ و (۰٫۰۰، ۰٫۰۰) ۴۹ واقع شدهاند (طبق شکلهای ۱-۵ و d). برای هرکدام از ترکیبهای CoVSi و CoVSi و (۲۰٫۰، ۰٫۰۰) ۴۵ واقع شدهاند (طبق شکلهای معاوت: d). برای هرکدام از ترکیبهای CoVSi و CoVSi بر اساس چینش اتمی، سه فیلم لایدنازک با پایانشهای متفاوت: منحنیهای انرژی – حجم این فیلمها (شکلهای ۲-۵ تا ۲-۸) و V-Si خواهیم داشت که درشکل ۱ نشان داده شدهاند. منحنیهای انرژی – حجم این فیلمها (شکلهای ۲-۵ تا ۲-۸) نشاندادند که همهی این ۶ فیلم نقطهی کمینه که معرف خواهندبود. ثوابت شبکه بهینهشده (۵) و انرژیهای تشکیل بلوری برای بالک و فیلمهای آنها به لحاظ مکانیکی پایدار نواهندبود. ثوابت شبکه بهینهشده (۵) و انرژیهای تشکیل بلوری برای بالک و فیلمهای آنها به لحاظ مکانیکی پایدار

¹. Monkhorest-pack

².Wyckoff

جدول ۱ مشخص است فواصل لایههای میانی در تمام فیلمها به مقدار فاصلهی لایهها در حالت بالکی بسیار نزدیک است. که این اتفاق ابزاری بسیار مهم در تعیین ضخامت فیلمها میباشد. دو ترکیب CoVSi و RhVSi در حالت بالکی رفتاری غیرمغناطیسی را نشان دادهاند درحالی که بطور مشابه برای دو پایانش V-Si در آنها ممان مغناطیسی



شکل۱. سطوح[00]Co-Si (c) با پایانشهای: CoVSi (001 ، Co-V(a) و Co-Si (c) و سطوح[001]RhVSi با

پایانشهای: Rh-Si (b) ، Rh-V(a) و V-Si (c).



شکل۲. منحنی های انرژی-حجم a) بالک CoVSi و e-c) پایانش های آن: Co-V،V-Si و b ، Co-Si) بالک RhVSi و h-f و RhVSi یایانش های آن: N-V-Si و V-Si.

Compound	$a_0 (A^\circ)$	c/a(°A)	d(°A)
RhVSi	$\Delta_{/} V \cdot {}^{a}$	۱,۰	١,۴٢
Rh-Si term	٣٫٨۴	٣,٧۵	لایههای میانی :۱٫۵۲
			لایهی سطحی: ۱٬۲۱
V-Si term	٣؍٨۴	٣٫٧۵	لایههای میانی:۱٫۵۱
			لايەي سطحى : ١٫٣۶
Rh-V term	٣٫٨۴	۳,۷۵	لایههای میانی:۱٫۴۷
			لایهی سطحی: ۱٬۳۰
CoVSi	۵٫۴۱ ^a	\mathbf{h}_{I} .	١,۴٣
Co-Si term	٣,٨٢	۳,۶۸	لایههای میانی ۱٬۵۱:
			لايەي سطحى:١،٣۴
V-Si term	٣٫٨٢	٣,۶٨	لایههای میانی :۱٫۴۹
			لایهی سطحی: ۱٫۲۸
Co-V term	٣٫٨٢	٣,۶٨	لایههای میانی :۱٫۴۸
			لايەي سطحى: ١٣٥

(d) جدول (. ثوابت شبکه بهینه شده(a)، ممان مغناطیسی کل (M_{tot})، انرژی تشکیل بلوری (E_f) و فاصله بین لایه ها

^a . نتایج تئوری برگرفته از مرجع[۱۷].

RhVSi و فيلمهاي[٢٠١] أنها.				
Compound	E _f (eV)	$M_{tot}(\mu_B)$		
RhVSi	-•,٣٧٧	• / •		
Rh-Si term	-٠,١٨۵	• / •		
V-Si term	-•,174	۱,۰		
Rh-V term	-•,1Y۵	٧/١۵		
CoVSi	- •,۴۱۱	• / •		
Co-Si term	-•, Y Y A	٠٫٣٩		
V-Si term	-•,١٩٩	۱,۰		
Co-V term	-•,٢••	۵,۹۸		

(S. I. L. S. L. B. D. B.

۳-۲. پایداری ترمودینامیکی

در ادامه، پایداری ساختارهای بالک CoVSi و RhVSi و فیلمهای آنها را با مطالعهی نمودار پایداری فازی در چارچوب ترمودینامیک ابتدا بهساکن و شرایط تعادل ترمودینامیکی یعنی دما و فشار صفر مورد بررسی قرار دادهایم. در این شرایط انرژی آزاد سطحی هر فیلم بر حسب پتانسیل شیمیایی اتمهای تشکیل دهندهی آن از طریق رابطهی زیر محاسبه میشود:[۳۴و ۳۵]

$$\gamma = \frac{1}{r_A} \left[G - \sum_i (Ni\mu i) \right] \tag{1}$$

در این رابطه N_i و N_i به ترتیب تعداد اتمهای i ام موجود در ساختار، پتانسیل شیمیایی اتم i ام، G و A انرژی آزاد گیبس و سطح فیلم هستند. برای هر دو ترکیب CoVSi و RhVSi انرژی گیبس بالکی برحسب پتانسیلهای شیمیایی اتمی به شکل زیر محاسبه میشود.

 $G_{CoVSi}^{bulk} = \mu_{Co} + \mu_{V} + \mu_{Si}$ (7)

 $G_{RhVSi}^{bulk} = \mu_{Rh} + \mu_{V} + \mu_{Si}$ (7)

که در آن (Pco(Rh ، γe و μ_{Si} به ترتیب مقادیر پتانسیل شیمیایی اتمهای (Co(Rh، V و Si در ترکیب (CoVSi) که در آن (Aμ میباشند. برای هر پتانسیل شیمیایی اتمی در این نمودار یک بازه یتغییرات (Δμ) ، بین دو مقدار مینیمم و ماکزیمم در نظر گرفته میشود. مثلا کمینه مقدار پتانسیل شمیایی اتم Rh زمانی رخ می دهد که اتم Rh ساختار بالکی in Rh را ترک کند و An بیشینه در شرایطی که این اتم در ساختار بالکی خود متبلور شود به دست می آید. برای اتمهای دیگر نیز این شرایط و این نموان این اتم علی اتم Rh را ترک کند و مقدار شد به این اتم در ساختار بالکی دیگر نیز این شرایط طبق روابط زیر قابل تعریف است:

 $G_{\text{CoVSi(RhVSi)}} - G_{\text{VSi}} \leq \Delta \mu_{\text{Co(Rh)}} \leq G_{Co(Rh)}^{bulk}$ (*)

 $G_{\text{CoVSi(RhVSi)}} - G_{\text{Co(Rh)Si}} \leq \Delta \mu_V \leq G_V^{bulk}$ (d)

 $G_{\text{CoVSi(RhVSi)}} - G_{\text{co(Rh)V}} \leq \Delta \mu_{\text{Si}} \leq G_{Si}^{bulk}$ (9)

نکتهی مهم آن است که برای برقراری تعادل ترمودینامیکی، $\Delta \mu$ ها نمیتوانند مقداری بزرگتر از صفر را داشته باشند بنابراین شرط $0 \ge \Delta \mu$ را درنظر میگیریم[۳۶و ۳۷]. از نمودارهای شکل ۳-a و ۳-d مشاهده میشود که هردوی RhVSi و CoVSi به لحاظ ترمودینامیکی در فاز نیمه-هویسلر پایدارند که از نواحی هاشور خورده در شکل قابل مشاهده است. همچنین هر ۶ پایانش مورد نظر در ناحیهی مجاز پایداری قرار دارند و لذا از نظر ترمودینامیکی قابل دستیابی هستند. طبق شکل ۳-۵ ، پایانش مورد نظر در ناحیهی مجاز پایداری قرار دارند و لذا از نظر ترمودینامیکی قابل نواحی بالاتر(یعنیCo-poor و Co-poor) و چه در نواحی پایین تر(یعنیTo-poor و V-poor) و چه در نواحی بالاتر(یعنیCo-rich و Co-rich) از انرژی سطحی کمتری نسبت به دو پایانش V-O و So-O برخوردار است و لذا پایدارتر از دو پایانش دیگر میباشد. بهطور مشابه در شکل ۳-b مشاهده میشود که پایانش V-S برخوردار داشتن پایین ترین مقدار انرژی آزاد پایدارتر از دو تای دیگر یعنی V-R و Rh-S خواهد بود. نتایج بدست آمده در توافق با قسمت ساختاری است که پایانشهای Sh-S و Sh و Si می الاترین مقدار انرژی سطحی را به خود اختصاص







شکل۲. نمودارهای پایداری فازی محاسبه شده : a e (b) بالک CoVSi e RhVSi e RhVSi و CoVSi e NFVSi و $h = h c_{O(Rh)}$ و خورده است، c e (b) انرژی سطحی(برحسب A^2 ریدبرگ) بر حسب پتانسیل های شیمیایی پایانش های $\mu_{Co(Rh)}$ و $\mu_{Co(Rh)}$ (بر حسب ریدبرگ) انرژی سطحی(برحسب A^2 ریدبرگ) بر حسب پتانسیل μ_{V} (بر حسب ریدبرگ) برای P - Si و CoVSi[001] و CoVSi[001] و Rh-Si (V-Si e CoVSi[001]

٣-٣. خواص الكتروني

منحنیهای DOS در قسمتهای a,b شکل ۴ ، پیدایش رفتار نیمهرسانایی را برای دو ترکیبCoVSi و CoVSi ارRhVSi GGA با گافهای حدود ۲٫۹۹ الکترونولت و ۲٫۹۷ الکترونولت از تقریب GGA (۲٫۱ الکترونولت و ۲٫۹۷ الکترونولت و ۲٫۹۷ الکترونولت از TB-mbJ (۲٫۱ الکترونولت و ۲٫۹۷ الکترونولت و ۲٫۹۷ الکترونولت از RhVSi GGA دو هر دو ساختار TB-mbJ را نشان میدهند. بطور مشابه مشاهده میشود که در هر دو ساختار TB-mbJ و CoVSi در مجاورت فرمی(از ۱- الکترونولت تا صفر) و در ناحیهی رسانش سهم عمده در چگالی حالات مربوط به اتمهای در مجاورت فرمی(از ۱- الکترونولت تا صفر) و در ناحیهی رسانش سهم عمده در چگالی حالات مربوط به اتمهای و VBM) در مجاورت فرمی(از ۱- الکترونولت تا صفر) و در ناحیهی رسانش سهم عمده در چگالی حالات مربوط به اتمهای وانادیوم و پس از آن اتمهای Co و Rh میباشد. همچنین مشاهده میشود که لبههای نوار ظرفیت و رسانش(NBM) و VBM) در هروی این ترکیب ها از شیب تندی برخوردار هستند که این پارامتری بسیار موثر در بحث انتقال الکترونی و رفتار ترموالکتریکی مواد میباشد. نمودار ساختار نواری این ترکیبها (در شکل ۶۹-۹) منحنیهای DOS را و CoVSi تای کردون و رفتار ترموالکتریکی مواد میباشد. نمودار ساختار نواری این ترکیبها (در شکل ۶۹-۹) منحنیهای DOS را و کاملا تایید میکند و رفتار ترموالکتریکی مواد میباشد. نمودار ساختار نواری این ترکیبها (در شکل ۶۹-۹) منحنیهای XVSi را ترموالکتریکی مواد میباشد. نمودار ساختار نواری این ترکیبها (در شکل ۶۹-۹) منحنیهای XVSi را تایید میکند و رفتار نیمهرسانایی با گاف غیرمستقیم در راستای W-X را برای (Ne (Ne (Ne (Ne) کرملا تایید میکند و رفتار نیمهرسانایی با گاف غیرمستقیم در راستای XUSi (X=Co, Rh) را برای (Coy (Re) و Coy Re) کاملا تایید میکند و رفتار نیمهرسانایی با گاف غیرمستقیم در راستای W-X را برای (Ne (Ne) و Coy Re) کرد تار میمون کرماندی در نقطه X واقع شده اند. مقدار بدست آمدهی این می دهان را بای زادی (Ne (Ne) و Coy Re) کرد و در باین در نقطه X واقع شده اند. مقدار بدست آمده داین کرمای ای از می و Coy Re) میبازی می در میمون و کرد به میند (Ne) کرمای میرون و کرمای و Coy Re) مینان می در نقطه X واقع شده اند. میون و می دار بای کرمای ای درمای در واین ترازها بیشتر نامی و Coy Re) مینای کرمای در میمو و در در دان و Coy Re) میبازی دا در دان و Coy Re)

در ادامه منحنیهای DOS کلی را برای ۶ پایانش ممکن فیلم لایهنازک [001]CoVSi و RhVSi و RhVSi در شکل-های (a-۵ تا f-۵) رسم کردهایم. همانگونه که مشاهده می شود فقط۲ پایانش V-Si برای [001]CoVSi و

¹.transport

RhVSi[001] با اعمال پتانسیل TB- mbJ در اسپین اقلیت یک گاف نواری باریک پیداکرده و رفتار نیمهفلزی فرو-مغناطیسی با قطبش اسپینی نزدیک به ۱۰۰٪ در سطح فرمی را از خود نشان دادهاند. ۴ پایانش باقی مانده یعنی: Rh-V، Co-Si، Co-V و Rh-Si و Rh-Si رفتار فلزی قوی در هر دو راستای اسپینی را نشان دادهاند. چگالی حالات جزئی پایانشهای V-Si بطور مشترک در شکل(a-a و h) مورد بررسی قرار گرفتهاند. در محدودهی فرمی، سهم عمده در چگالی حالات مربوط به اتمهای Si، V ،Co و Rh واقع در سطح فیلمها میباشد و اندرکنش اربیتالی همین اتمها شکل گیری گافنواری را در پی داشته است. در صورتی که چگالی حالات اتمهای واقع در لایههای میانی فیلمها^۲ در هر دوی نوار ظرفیت و رسانش سهم بسیار بسیار اندکی را دارند. شکل ساختارنواری این ۲ پایانش نیز در راستاهای تقارنی منطقه اول بریلوئن تحت محاسباتGGA+ mbJ در شکلهای (۶-b تا e) رسم شدهاند. ملاحظه می شود که درهم-تنیدگی و شیبهای زیاد ترازهایی که سطح فرمی را در اسپین اکثریت قطع کردهاند معرف یک فلز بسیار خوب در این اسپین میباشند. اما در نقطه مقابل در اسپین اقلیت شاهد یک شکافتگی باریک بین نوارها در سطح فرمی هستیم. برای پایانش Γ و BM ، V-Si:CoVSi[001] بین دو نقطه ی Γ و Δ و CBM در نقطه ی Γ واقع شدهاند. در حالی که برای پایانشV-Si:RhVSi[001] هردوی VBM و CBM در نقطه ی Γ جایگزیده شدهاند. مقادیر گاف بدستآمده به ترتيب حدود ۰٬۱۴ الكترونولت برای V-Si:CoVSi[001] و ۰٬۰۹ الكترونولت برای V-Si:RhVSi[001] می باشند. نکته ی دیگر آنکه در نقطه ی ۲، گرادیان ترازهای ظرفیت و رسانش نسبت به حالت بالکی این دو ترکیب افزایش داشته است که این بیانگر افزایش تحرک پذیری حامل های بار شامل الکترون و حفرهها برای این دو فیلم میباشد.



شكل۴. منحنىهاى DOS كلى بالكهاى CoVSi (a و CoVSi (b عالم الكرفي الكرفي الكرفي الكرفي الكرفي الكرفي الكرفي الكرفي

¹. surface layers

² .middle layers





شكل۵. منحنىهاى DOS پايانش هاى DOS پايانش (e ، Rh-Si (d، Rh-V (c ،Co-V (b ،Co-Si (a پايانش BOS) of ، V-Si:RhVSi V-Si:RhVSi[001] و h,g و v-Si:RhVSi[001] دو پايانش V-Si:CoVSi[001]





شکل۶. نمودارهای ساختارنواری: RhVSi (a و c,b ، CoVSi) اسپین up و dn پایانش V-Si:CoVSi[001] و V-Si:RhVSi[001] و اسپین up اسپین dn اسپین (e,d

۳-۴. خواص اپتيكى

پاسخ به نور تابیده شده یکی از ویژگی های مهم برگرفته از ساختار الکترونی مواد می باشد. این پاسخ از طریق پاسخ به نور تابیده شده یکی از ویژگی های مهم برگرفته از ساختار الکترونی مواد می باشد. این پاسخ از طریق (۵-۵) پارامترهای اپتیکی تعریف شده بر اساس روابط کرامرز-کرونیگ [۳۹ و ۳۹] مورد ارزیابی قرار می گیرند. در شکل (۷-۵) قسمت حقیقی (۵۰) عبرای فازهای بالکی CoVSi و RhVSi و نیز فیلم لایه نازک آن ها در پایانش V-Si در دو حالت نور موازی با محور رشد بلور(z) و عمود بر محور z(z) مورد مقایسه قرار گرفته اند. در حالت بالکی مقدار حالت نور موازی با محور رشد بلور(z) و عمود بر محور z(z) مورد مقایسه قرار گرفته اند. در حالت بالکی مقدار استاتیکی (۵۰) تقریبا دو برابر فیلم های[۰۰۰] شده است. برای CoVSi و CoVSi و RhVSi و CoVSi و RhVsi مقدار استاتیکی (۵۰)

طیفمرئی رخداده است در صورتی که برای دو پایانش[001]V-Si:CoVSi و V-Si:RhVSi (001] در هر دو حالت E I z و EL در انرژی های بسیار پایین(محدودهی فروسرخ) شاهد بروز این افت هستیم. همزمان با این افت در شدت (۵) ۵ در طیف (۵) 62 بالاترین پیک ها را برای RhVSi ، CoVSi و همچنین برای دو پایانش آن ها دریافت نموده ایم. نکته ی قابل تامل آنکه در تمام بازه ی طیف مرئی و فرابنفش (۲ تا ۱۰ الکترون ولت)، مقادیر (۵) متا برای CoVSi و RhVSi منفی شده است که این اتفاق برای دو پایانش مدنظر به صورت جزئی تری رخداده است. این پدیده در مقایسه با نمودارهای طیف اتلاف و جذب اپتیکی(قسمتهای c b شکل ۷) برای Sicov و RhVSi و RhVSi و RhVSi و ناشی از جذب بسیار بالا در این محدوده ی انرژی و برای دو پایانش آنها به واسطهی اتلاف انرژی الکترونها رخ داده است. مسئله ی حائز اهمیت در اینجا آغاز جذب از لبه ی مرئی برای CoVSi و RhVSi و RhVSi و CoVSi و داده پایانش در انرژی های کمتر از این هم مقداری جذب جزئی دیده می شود. همانطور که می دانیم در دستگاههای دیودهای پیایانش در انرژی های کمتر از این هم مقداری جذب جزئی دیده می شود. همانطور که می دانیم در دستگاههای دیودهای گسیل نوری (LEDs) عمده ی جذب در محدوده مرئی و پس از آن در فرابنفش به وقوع می پیوندد. لذا می توان گفت که این دو ترکیب هویسلری و بعد از آن دو پایانش آن ها می توانند جهت کاربرد در این گسیل های نوری مفید واقع شوند.





V- شكل L(ω) (c ، ε₂(ω) (b ،ε₁(ω)) (a.۷ و دو پايانش d و دو پايانش - XVSi(X=Co, Rh) و دو پايانش (a.۷ د برای بالک های (b ،ε₁(ω)) (a.۷ د برای بالک د مای (b ،ε₁(ω))) (b ،ε₁(ω)) (b ،ε₁(ω))

۴. نتیجه گیری

ویژگی های ساختاری، الکترونیکی، اپتیکی و پایداری ترمودینامیکی ترکیب های نیمه - هویسلر CoVSi و RhVSi و RhVSi و pDFT و بکارگیری تقریب GGA و پتانسیل نیز فیلم های لایه نازک [۰۰۱] آن ها با اعمال محاسبات اصول اولیه ی DFT و بکارگیری تقریب GGA و پتانسیل TB-mbJ مطالعه شد. نتایج بخش ساختاری و بررسی نمودارهای فازی نشان دهنده ی پایداری این دو ترکیب هویسلری در ساختار نوع-MgAgAs و نیز پایداری ترمودینامیکی ۲ پایانش ممکن برای فیلم های [۰۰۱] آن ها می-باشد. هویسلرهای iOVSi و MgAgAs ماهیت نیمه رسانایی غیر مغناطیسی با گاف های نواری غیر مستقیم در راستای باشد. هویسلرهای iOVSi و OVSi ماهیت نیمه رسانایی غیر مغناطیسی با گاف های نواری غیر مستقیم در راستای TB-mbJ دود ۹/۰ الکترون ولت و ۵/۰ الکترون ولت از تقریب GGA و ۱/۱ الکترون ولت و ۹/۰ الکترون ولت از TB-mbJ را نشان داده اند. از بین پایانش های V-S و iS-O برای [001] مای در ۱۰۰ الکترون ولت از و iS-Rh برای [001] Rh-Si فقط دو پایانش SV، V-S و iS-O برای [001] مایسینی نزدیک به ۰۰٪ را از خود نشان داده اند. بررسی رفتار اپتیکی این هویسلرها و فیلم هایشان نیز نشان دهنده یاسخ خوب قسمتهای حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک و جذب اپتیکی نسبتا بالا در محدوده ی طیف مرئی برای آن ها می باشد که این مواد را برای کاربردهای اپتوالکترونیکی و دیوودهای گسیل نوری مناسب می سازد.

منابع

- Li, Y., et al., "Half-metallicity of the bulk and (001) surface of NbFeCrAl and NbFeVGe Heusler compounds: a first-principles prediction." RSC advances, 7 50 (2017) 31707-31713.
- Baker, Doha N. Abu, et al., "Structural, magnetic, electronic and elastic properties of half-metallic ferromagnetism full-Heusler alloys: Normal-Co2TiSn and inverse-Zr2RhGa using FP-LAPW method." Materials Chemistry and Physics, 240 (2020) 122122.
- Picozzi, S., Continenza, A., and Freeman, A.J., "Co 2 Mn X (X= Si, Ge, Sn) Heusler compounds: An ab initio study of their structural, electronic, and magnetic properties at zero and elevated pressure." Physical Review B. 66 9 (2002) 094421.
- Casper, F., et al., "Half-Heusler compounds: novel materials for energy and spintronic applications." Semiconductor Science and Technology, 27 6 (2012) 063001.
- 5. Chenguang, Fu., et al., "Realizing high figure of merit in heavy-band p-type half-Heusler thermoelectric materials." Nature communications. 6 1 (2015) 1-7.
- Zheng, X. F., et al., "A review of thermoelectrics research–Recent developments and potentials for sustainable and renewable energy applications." Renewable and Sustainable Energy Reviews, 32 (2014) 486-503.
- Bell, L. E., "Cooling, heating, generating power, and recovering waste heat with thermoelectric systems." Science, 321 5895 (2008) 1457-1461.
- Hordequin, Ch., Nozieres, J. P., and Pierre, J., "Half metallic NiMnSb-based spinvalve structures." Journal of magnetism and magnetic materials, 183 1-2 (1998) 225-231.

- Saito, T., et al., "Spin injection, transport, and detection at room temperature in a lateral spin transport device with Co2FeAl0. 5Si0. 5/n-GaAs schottky tunnel junctions." Applied Physics Express, 6 10 (2013) 103006.
- Klimczuk, T., et al., "Superconductivity in the Heusler family of intermetallics." Physical Review B. 85 17 (2012) 174505.
- 11. Ran He., et al., "Studies on mechanical properties of thermoelectric materials by nanoindentation." physica status solidi (a), 212 10 (2015) 2191-2195.
- Huang, L., et al., "Recent progress in half-Heusler thermoelectric materials." Materials Research Bulletin, 76 (2016) 107-112.
- Zhu, T., et al., "High efficiency half-Heusler thermoelectric materials for energy harvesting." Advanced Energy Materials, 5 19 (2015) 1500588.
- Chen, S., and Ren, Z., "Recent progress of half-Heusler for moderate temperature thermoelectric applications." Materials Today, 16 10 (2013) 387-395.
- Hu, Y., and Zhang, J. M., "Thermodynamic stability, magnetism and half-metallicity of various (100) surfaces of Heusler alloy Ti2FeSn." Materials Chemistry and Physics, 192 (2017) 253-259.
- 16. Geng, X., et al., "Pure and stable metallic phase molybdenum disulfide nanosheets for hydrogen evolution reaction." Nature communications, 7 1 (2016) 1-7.
- 17. Ma, J., et al., "Computational investigation of half-Heusler compounds for spintronics applications." Physical Review B. 95 2 (2017) 024411.
- 18. Shi, F., et al., "Hybrid density functional study of bandgaps for 27 new proposed half-Heusler semiconductors." Journal of Applied Physics, 122 21 (2017) 215701.

- Chibani, S., et al. "Structural, elastic, electronic and transport properties of CoVX (X= Ge and Si) compounds: A DFT prediction." Computational Condensed Matter, (2020) e00475.
- Wang, L. L., et al, "Thermoelectric performance of half-Heusler compounds TiNiSn and TiCoSb." Journal of Applied Physics, 105 1 (2009) 013709.
- 21. Kong, B., et al., "Structural, mechanical, thermodynamics properties and phase transition of FeVSb." Physica B: Condensed Matter, 406 15-16 (2011) 3003-3010.
- 22. Kong, F., et al., "Thermoelectric and thermodynamic properties of half-Heulser alloy YPdSb from first principles calculations." Journal of Solid State Chemistry ,196 (2012) 511-517.
- Qiu, P., et al., "Effect of antisite defects on band structure and thermoelectric performance of ZrNiSn half-Heusler alloys." Applied Physics Letters, 96 15 (2010) 152105.
- 24. Yang, J., et al., "Evaluation of half-Heusler compounds as thermoelectric materials based on the calculated electrical transport properties." Advanced Functional Materials, 1819 (2008) 2880-2888.
- 25. Kieven, D., et al., "I-II-V half-Heusler compounds for optoelectronics: Ab initio calculations." Physical Review B, 81 7 (2010) 075208.
- 26. Yan, F., et al., "Design and discovery of a novel half-Heusler transparent hole conductor made of all-metallic heavy elements." Nature communications, 6 1 (2015) 1-8.
- 27. Yang, J., et al. "Evaluation of half-Heusler compounds as thermoelectric materials based on the calculated electrical transport properties." Advanced Functional Materials, 18 19 (2008) 2880-2888.

- Schwarz, K., and Blaha, P., "Description of an LAPW DF program (WIEN95)." *Quantum-Mechanical Ab-initio Calculation of the Properties of Crystalline Materials.* Springer, Berlin, Heidelberg, 1996 139-153.
- 29. Sjöstedt, E., Nordström, L., and Singh, D. J., "An alternative way of linearizing the augmented plane-wave method." Solid state communications, 114 1 (2000) 15-20.
- 30. Koller, D., Tran, F., and Blaha, P., "Improving the modified Becke-Johnson exchange potential." Physical Review B, 85 15 (2012) 155109.
- 31. Wimmer, E., et al., "Full-potential self-consistent linearized-augmented-plane-wave method for calculating the electronic structure of molecules and surfaces: O 2 molecule." Physical Review B, 24 2 (1981) 864.
- Monkhorst, H. J., and Pack, J. D., "Special points for Brillouin-zone integrations." Physical review B, 13 12 (1976) 5188.
- Murnaghan, F. D., "The compressibility of media under extreme pressures." Proceedings of the national academy of sciences of the United States of America, 30 9 (1944) 244.
- 34. Wang, Y., et al., "First-principles studies of polar perovskite KTaO 3 surfaces: structural reconstruction, charge compensation, and stability diagram." Physical Chemistry Chemical Physics, 20 27 (2018) 18515-18527.
- 35. Shi, H., et al., "Prospective high thermoelectric performance of the heavily p-doped half-Heusler compound CoVSn." Physical Review B, 95 19 (2017) 195207.
- 36. Reuter, K., and Scheffler M., "Composition, structure, and stability of RuO 2 (110) as a function of oxygen pressure." Physical Review B, 65 3 (2001) 035406.
- 37. Baima, J., et al., "Surface thermodynamics of silicate compounds: the case of Zn 2
 SiO 4 (001) surfaces and thin films." Physical Chemistry Chemical Physics, 21 24
 (2019) 13287-13295.

- 38. Sarkar, B. K., et al., "Optical Properties Of Cd 1-x Zn x Se From Density Functional Theory." TMS 2014: 143rd Annual Meeting & Exhibition. Springer, Cham, 2014.
- Bobrov, V. B., et al., "Kramers-Kronig relations for the dielectric function and the static conductivity of Coulomb systems." EPL (Europhysics Letters) 90 1 (2010) 10003.

Half-metallic properties, optical behavior and thermodynamic stability of film surfaces [001] XVSi (X = Co, Rh) half-Heusler alloys.

Arash Boochani^{*}, Malihe Amiri

Department of Physics, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran

Abstract

Based on the density functional theory and the GGA approximation, by applying the improved potential of TB-mbJ the structural, electronic, optical, and thermodynamic properties of the XVSi semiconductor compounds (X = Co, Rh) and its [001] films Were studied. These two heusler compounds with the nonmagnetic semiconductor behavior are stable in the MgAgAs-type cubic structure with F4-3m space group. Due to the good responses of the real and imaginary parts of the dielectric function for CoVSi and RhVSi in the visible spectrum range and the low electronic loss function, these two heuslers will be suitable for optical applications in this energy range. An examination of the stability phase diagram of [001] films showed that all 6 of its possible terminations would be thermodynamically stable. The electronic structure of these films indicates the emergence of half-metallic magnetic behavior only for two terms of V-Si: CoVSi [001] and V-Si: RhVSi[001]. The responses of the dielectric function, as well as the absorption spectra of the two terms, are similar to those of the Bulk state, but with less intensity, while the electron loss in these two films is greater than that of the Bulk.

Key Words: Density functional theory, Heusler compounds, Thin films, Thermodynamic stability, Dielectric function, Phase diagram, Electronic properties, XVSi (X = Co, Rh).

۲.