

مطالعه نظری خواص اپتیکی ساختار FeTe با استفاده از محاسبات اصول اولیه

احمد موسی الحنتوشی، شعبان رضا قربانی*، هادی عربی، داود واحدی فخرآباد

گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران.

sh.ghorbani@um.ac.ir

چکیده

در بین ابررساناهای پایه آهن ترکیب FeTe به دلیل داشتن ساختار نسبتاً ساده گزینه بسیار خوبی برای پی بردن به علت پدیده ابررسانایی می باشد. وجود آهن اضافی (δ) در ساختار $Fe_{1+\delta}Te$ تاثیر زیادی در خواص فیزیکی این ترکیب دارد [1]. سلول واحد FeTe با گروه فضایی P4/nmm دارای دو اتم آهن و دو اتم تلوریم است [2]. با استفاده از محاسبات اصول اولیه و در چارچوب نظریه تابعی چگالی، خواص اپتیکی ساختار FeTe به کمک کد سایستا با استفاده از تقریب چگالی موضعی مطالعه شده است [3-4]. اثر تابش نور قطبیده و غیرقطبیده در جهت های مختلف x, y, z به ترکیب FeTe بررسی گردید. قسمت موهومی و قسمت حقیقی تابع دی الکتریک، ضریب جذب و بازتاب، رسانش اپتیکی، ضریب شکست و ضریب خاموشی این ساختار محاسبه و بررسی شده اند. نتایج بدست آمده نشان می دهند که خواص اپتیکی ساختار FeTe در جهت های x و y یکسان است بنابراین FeTe در این جهت ها رفتار همسانگردی دارد.

کلمات کلیدی: نظریه تابعی چگالی، ساختار FeTe، خواص اپتیکی، کد سایستا.

مقدمه

گروهی از ابررساناها، ابررساناهای بر پایه آهن می باشند که اولین بار در سال ۲۰۰۸ توسط اوسانو و همکارانش در ترکیب فلئور افزوده شده با ساختار چهار گوشه و دمای بحرانی ۲۶ کلوین کشف شد. جایگزین کردن لانتانیم در این ماده با عناصر نادر خاکی همانند سریوم Ce، پاراستودیمیم Pr، نتودیوم Nd، ساماریوم Sm و گادولینیوم Ga دمای بحرانی را تا ۵۶ کلوین افزایش می دهد.

سلول واحد FeTe با گروه فضایی P4/nmm دارای دو اتم آهن و دو اتم تلوریم است. پارامترهای شبکه بهینه شده این ساختار برابر $a = 3.8215 \text{ \AA}$ و $c = 6.2695 \text{ \AA}$ گزارش شده اند.

محققانی از ایتالیا در سال ۲۰۱۳ خواص ساختاری و مغناطیسی ترکیب FeTe را با استفاده از نظریه تابعی چگالی بررسی کرده اند و دیگرام فاز فشار آن را تا 30GPa بدست آورده اند. نتایج این گروه نشان می دهد که وجود نظم فرومغناطیسی باعث شده که ترکیب FeTe خاصیت ابررسانایی نداشته باشد. جانشانی Te بجای Se در ساختار FeSe و ایجاد ساختار $Fe_{1+\delta}Se_{1-x}Te_x$ باعث افزایش دمای ابررسانایی به حدود ۱۴,۵ کلوین شد. وجود آهن اضافی (δ) تاثیر زیادی در خواص فیزیکی و ابررسانایی ترکیب دارد. پس از آن ابررسانایی در ترکیبات Fe(Se,Te) مورد توجه قرار گرفت. کشف $A_xFe_{2-y}Se_2$ ($A = K, Cs \text{ and } Tl$) باعث شد دمای ابررسانایی به بالاتر از ۳۰ کلوین افزایش یابد. گزارش دمای گذار بالاتر از ۶۵ کلوین در فیلم تک لایه $FeSe/SrTiO_3$ هیجان بالایی در جامعه علمی ایجاد کرد. ابررسانایی در لایه FeTe نیز گزارش شده است اما این خاصیت ابررسانایی مربوط به حضور اکسیژن است.

روش محاسباتی

بررسی ساختار اتمی ترکیب FeTe توسط محاسبات نظریه تابعی چگالی و به کمک بسته محاسباتی سایستا siesta بر اساس روش ترکیب خطی اربیتال های اتمی جایگزیده (LCAO) انجام شده است [3]. تقریب چگالی موضعی LDA و تقریب گرادیان تعمیم یافته GGA-PBE برای تابعی همبستگی - تبدالی برهمکنش الکترون - الکترون بکار رفته است [4].

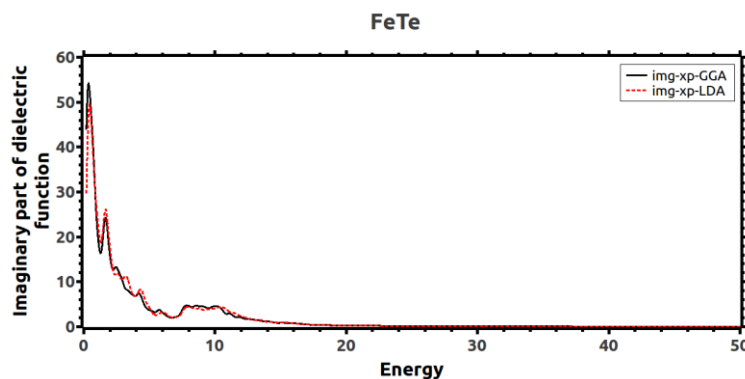
تقسیم بندی منطقه بریلوئن به روش مونخورست پک انجام شده و تعداد نقاط بهینه k برای ساختار برابر $30 \times 30 \times 30$ و انرژی قطع بهینه برابر 300 Ry در محاسبات مورد استفاده قرار گرفته است. سپس ساختار مورد نظر و اهلس یافت تا وقتی نیروهای اتمی کل کمتر از 0.02 eV/\AA شوند.

خواص اپتیکی ساختار FeSe با استفاده از پکیج سایستا و بر اساس روابط کرامرز - کرونینگ محاسبه گردیده است. بازه انرژی جهت بررسی خواص اپتیکی از صفر تا 50 eV انتخاب شده است. در کلیه محاسبات اپتیکی از نور قطبیده و غیر قطبیده در جهت محورهای x, y, z استفاده شده است.

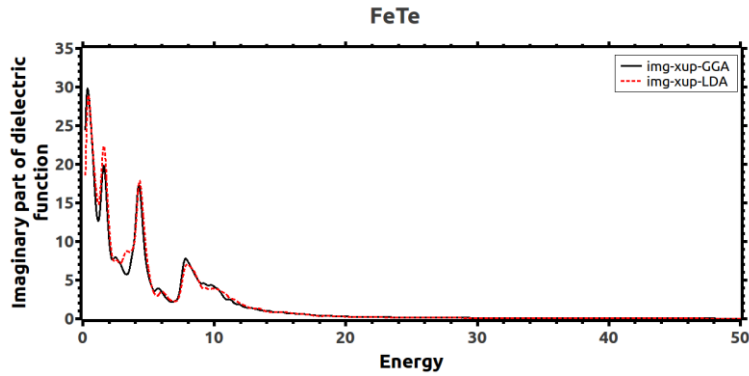
نتایج و بحث

۱- تابع دی الکتریک

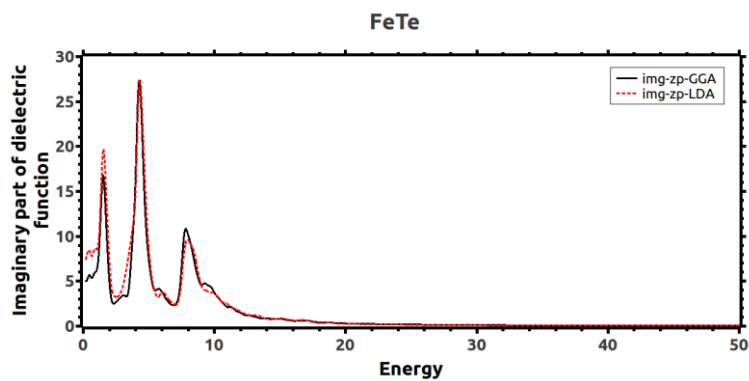
تابع دی الکتریک مختلط توصیف کننده خواص اپتیکی جامدات است و چگونگی برهمکنش نور با ماده را نشان می دهد. قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک به ترتیب پراکندگی و جذب نور را نشان می دهند [5]. در شکل های (1) تا (4) بخش موهومی تابع دی الکتریک ساختار FeTe با نور فرودی قطبیده و غیرقطبیده در جهت محورهای x و z با دو تقریب چگالی موضعی و شیب تعمیم یافته به ترتیب رسم شده اند. مطابق این شکل ها قله های اصلی در بازه $0-20 \text{ eV}$ قرار دارند بنابراین انتظار می رود که این ساختار امواج الکترومغناطیسی را در این گستره جذب کند. بعلاوه، همان طور که در تصاویر مشخص است تفاوت چندانی بین تقریب چگالی موضعی و شیب تعمیم یافته دیده نمی شود بنابراین در ادامه تنها نتایج بدست آمده با تقریب چگالی موضعی LDA گزارش شده است. قسمت موهومی تابع دی الکتریک در انرژی های بیشتر از 20 الکترون ولت نزدیک به صفر می باشد. این بدان معنا است که در این مقادیر، الکترون های ماده به راحتی و به سرعت با میدان الکتریکی فرودی برهمکنش نشان نمی دهند و همچنین گذاری بین بیشینه نوار ظرفیت و کمینه نوار رسانش صورت نمی گیرد. در نتیجه می توان گفت که در این گستره $20-50 \text{ eV}$ ساختار تلوراید آهن نسبت به تابش شفاف است و می توان آن را به عنوان یک ساختار رسانای شفاف معرفی نمود. قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک با نور فرودی قطبیده و غیرقطبیده در جهت محورهای x, z با تقریب چگالی موضعی در شکل های (5) و (6) رسم شده است. مقدار حقیقی ثابت دی الکتریک در انرژی صفر برای نور فرودی قطبیده در جهت محورهای x و z به ترتیب برابر $85/61$ و $34/97$ برای نور غیر قطبیده در جهت محورهای x و z به ترتیب برابر $60/29$ و $85/61$ است. در شکل (7) قسمت موهومی تابع دی الکتریک برای نور فرودی قطبیده در جهت محورهای x, y رسم شده است. همان طور که در این شکل واضح است این دو نمودار کاملاً بر یکدیگر منطبق هستند که بیانگر همسانگردی ساختار در صفحه $x-y$ و ناهمسانگردی آن در صفحه $x-z$ و $y-z$ است. در ادامه با استفاده از قسمت موهومی تابع دی الکتریک، سایر خواص اپتیکی محاسبه و رسم شده اند.



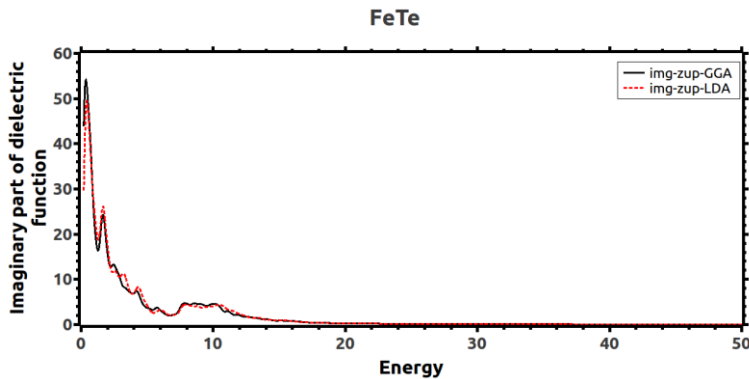
شکل (1). قسمت موهومی تابع دی الکتریک ساختار FeTe با دو تقریب LDA و GGA برای نور قطبیده در جهت محور x .



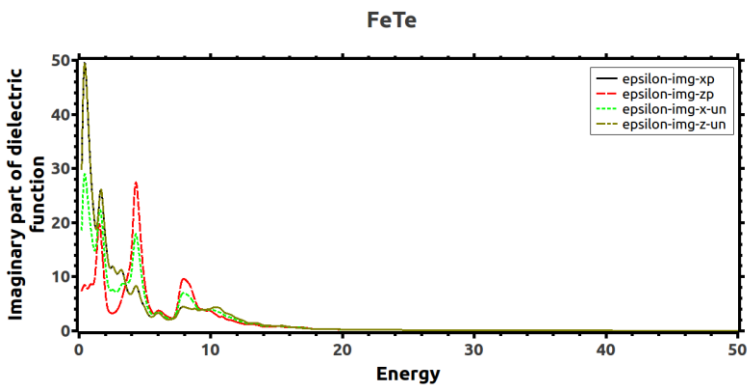
شکل (۲). قسمت موهومی تابع دی الکتریک ساختار FeTe با دو تقریب LDA و GGA برای نور غیرقطبیده در جهت محور X.



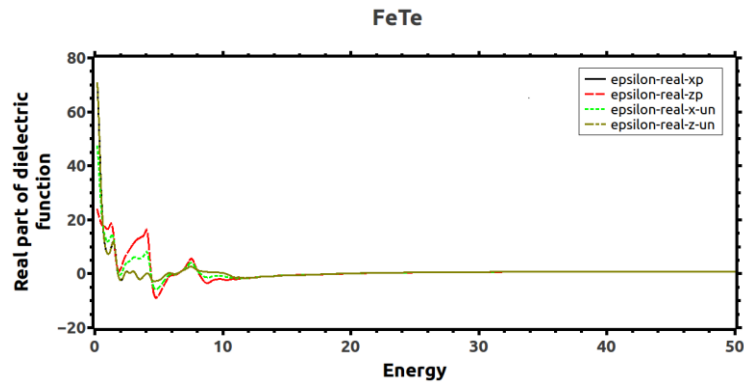
شکل (۳). قسمت موهومی تابع دی الکتریک ساختار FeTe با دو تقریب LDA و GGA برای نور قطبیده در جهت محور Z.



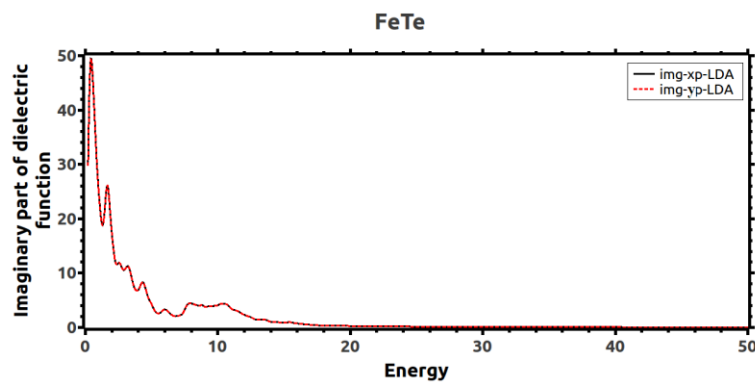
شکل (۴). قسمت موهومی تابع دی الکتریک ساختار FeTe با دو تقریب LDA و GGA برای نور غیرقطبیده در جهت محور Z.



شکل (۵). قسمت موهومی تابع دی الکتریک ساختار FeTe با تقریب LDA برای نور قطبیده و غیر قطبیده در جهت محورهای X, Z.



شکل (۶). قسمت حقیقی تابع دی الکتریک ساختار FeTe با تقریب LDA برای نور قطبیده و غیر قطبیده در جهت محورهای X,Z.



شکل (۷). قسمت موهومی تابع دی الکتریک ساختار FeTe با تقریب LDA برای نور قطبیده و غیر قطبیده در جهت محورهای X,Y.

۲- رسانش اپتیکی

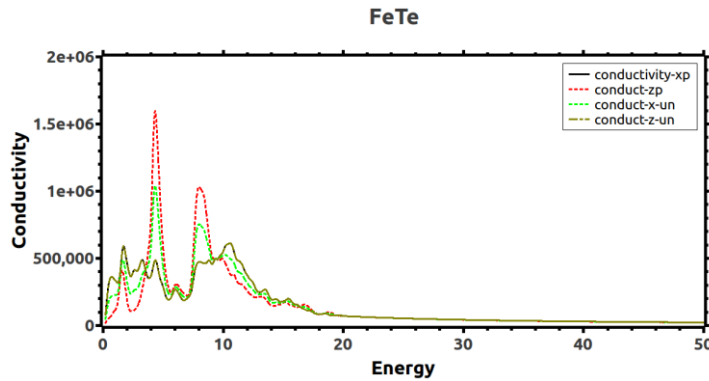
الکترون‌های حالت‌های اشغال شده در اثر جذب فوتون، به حالت‌های اشغال نشده در بالای تراز فرمی برانگیخته می‌شوند، به این گذار بین‌نواری (معروف به گذار درود)، رسانش اپتیکی و به جذب فوتون توسط الکترون‌ها، جذب بین‌نواری گفته می‌شود. رسانش اپتیکی با رابطه زیر داده می‌شود [۶]:

$$\text{Re } \sigma_{ij}(\omega) = \frac{\omega}{4\pi \text{Im}} \epsilon_{ij}(\omega) \quad (1)$$

شکل (۸) رسانش اپتیکی ساختار FeTe با تقریب LDA برای نور قطبیده و غیر قطبیده در جهت محورهای X,Z را نشان می‌دهد. نمودار رسانندگی اپتیکی با قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک متناسب است. به طور کلی در انرژی‌هایی که در قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک قله وجود دارد، در قسمت حقیقی رسانندگی اپتیکی هم این قله‌ها دیده می‌شوند که این مسأله صحت رابطه (۱) را بیان می‌کند.

در این طیف، رسانندگی تا حدود انرژی ۲۰ eV مقدار قابل توجهی است و بعد از این انرژی نزدیک به صفر است. در انرژی‌هایی که بیشترین جذب اتفاق می‌افتد، بیشینه رسانندگی اپتیکی دیده می‌شود.

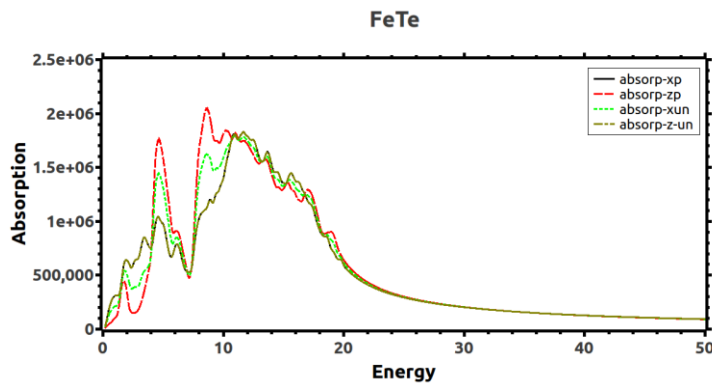
طیف رسانندگی در انرژی‌های کوچک دارای مقدار مخالف صفر است که این نیز دلالت دیگری بر رفتار فلزی ساختار FeTe است که در تطابق با نتایج ساختار نواری است.



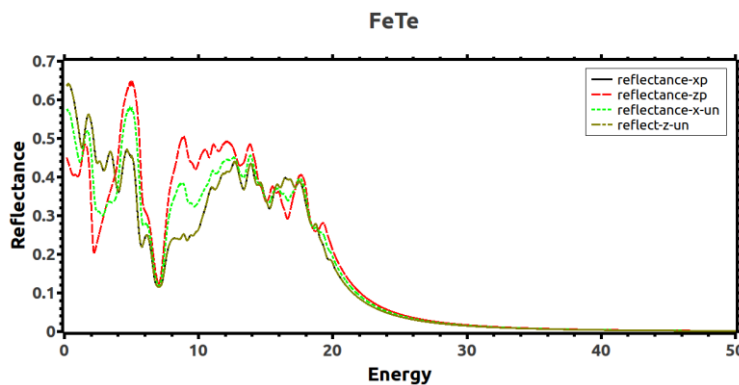
شکل (۸). رسانش اپتیکی ساختار FeTe با تقریب LDA برای نور قطبیده و غیر قطبیده در جهت محورهای x,z.

۳- طیف جذبی و بازتابی

قسمت موهومی تابع دی الکتریک بیانگر طیف جذبی ماده است. بازتاب ناشی از جریان قطبشی القا شده در اثر نوسان الکترون های ظرفیت با اختلاف فاز 180° درجه در اثر پرتو فرودی است و تداخل موج فرودی با امواجی که توسط الکترون های ظرفیت تابش می شود، سبب ایجاد بازتاب می شود. طیف جذبی و بازتابی ساختار FeTe با تقریب LDA برای نور قطبیده و غیر قطبیده در جهت محورهای x,z در شکل های (۹) و (۱۰) آورده شده است. طیف جذبی گذارهای اپتیکی مجاز الکترون را بین حالت های اشغال شده نوار ظرفیت و حالت های خالی نوار رسانش نشان می دهند. آستانه جذب برای ساختار FeTe در حدود 0/02 eV است. از بررسی نمودار بازتاب می بینیم که بطور کلی بزرگی بازتاب در انرژی های مختلف بسیار کوچک است.



شکل (۹). طیف جذبی ساختار FeTe با تقریب LDA برای نور قطبیده و غیر قطبیده در جهت محورهای x,z.



شکل (۱۰). طیف بازتابی ساختار FeTe با تقریب LDA برای نور قطبیده و غیر قطبیده در جهت محورهای x,z.

۴- ضریب شکست

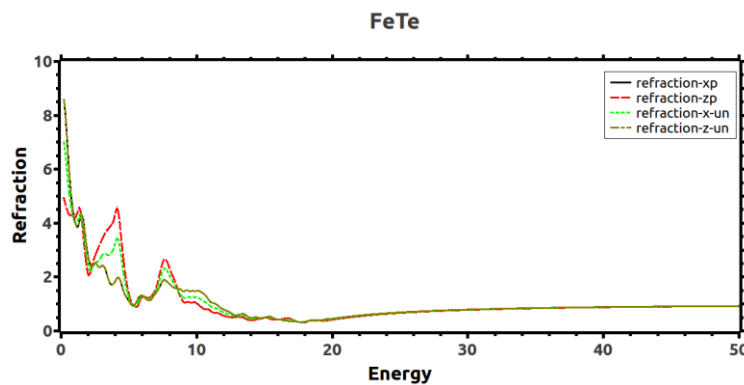
ضریب شکست نیز مانند تابع دی الکتریک یک تابع مختلط بوده و از رابطه زیر محاسبه می شود:

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \quad (2)$$

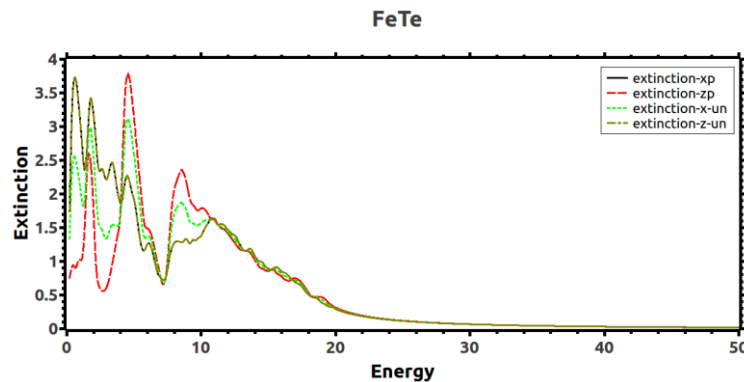
که در آن $n(\omega)$ قسمت حقیقی و $k(\omega)$ قسمت موهومی (ضریب خاموشی) ضریب شکست است. ضریب خاموشی برای یک ماده، نشان دهنده میزان جذب پرتوی الکترومغناطیسی توسط آن ماده است [7].

مقدار ضریب شکست در انرژی صفر را ضریب شکست استاتیکی می گویند که برابر با جذر ثابت دی الکتریک استاتیکی می باشد. اگر ضریب شکست با افزایش فرکانس افزایش یابد این رفتار پاشیدگی بهنجار نام دارد که رفتار معمول کلیه مواد شفاف است. در نواحی که شیب نمودار ضریب شکست منفی است مربوط به جذب می باشد. در این ناحیه نور با طول موج بلندتر در عبور از ماده بیشتر از نور با طول موج کوتاه می شکند که این رفتار پاشیدگی بی هنجار نام دارد [8].

قسمت حقیقی و موهومی ضریب شکست ساختار FeTe با تقریب LDA برای نور قطبیده و غیر قطبیده در جهت محورهای x,z در شکل های (۱۱) و (۱۲) رسم شده اند. مطابق شکل ضریب شکست استاتیکی ساختار FeTe برای نور قطبیده در جهت محورهای x,z به ترتیب برابر 9/26 و 5/93 و برای نور غیرقطبیده به ترتیب برابر 7/77 و 9/26 است.



شکل (۱۱). قسمت حقیقی ضریب شکست ساختار FeTe با تقریب LDA برای نور قطبیده و غیر قطبیده در جهت محورهای x,z.



شکل (۱۲). قسمت موهومی (ضریب خاموشی) ضریب شکست ساختار FeTe با تقریب LDA برای نور قطبیده و غیر قطبیده در جهت محورهای x,z.

نتیجه گیری

در این پژوهش خواص اپتیکی ساختار FeTe مطالعه شده است. محاسبات با استفاده از نرم افزار محاسباتی سایستا با استفاده از دو تقریب چگالی موضعی و شیب تعمیم یافته با رهیافت نظریه تابعی چگالی انجام شده است. خواص اپتیکی نظیر تابع دی الکتریک، طیف جذب، ضریب شکست و ضریب خاموشی محاسبه و مورد بررسی قرار گرفتند. بررسی خواص

اپتیکی برای نور فرودی قطبیده و غیرقطبیده در جهت محورهای x , y و z انجام شد. در جهت x, y قسمت موهومی تابع دی الکترونیک کاملاً بر یکدیگر منطبق هستند که نشان دهنده همسانگردی ساختار در صفحه $x-y$ است اما قسمت موهومی تابع دی الکترونیک در جهت x, z تفاوت دارد بنابراین در صفحه $x-z$ و $y-z$ ناهمسانگرد است.

مراجع

- [1] C Mirri, P Calvani, F M Vitucci, A Perucchi, K W Yeh, M K Wu and S Lupi, (2012) *Supercond. Sci. Technol.* 25, 045002.
- [2] A Charnukha, (2014) *J. Phys.: Condens. Matter*, 26, 253203.
- [3] J M Soler, E Artacho, J D Gale, A García, J Junquera, P Ordejón and D Sánchez-Portal, (2002) *J. Phys. Cond. Matt.* 14, 2745.
- [4] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, (1996) *J. Phys. Rev. Lett.* 77, 3865.
- [5] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, "Electrodynamics in continus media", *Pergamon Press*, (1960).
- [6] M. S. Dresselhaus, "Solid state physics, Part II", (2001).
- [7] کتاب مبانی نظریه الکترومغناطیس؛ نوشته‌ی ریتمس، میلفورد، کریستی؛ ترجمه‌ی جلال صمیمی، ناصر علیزاده قمصری و مجتبی آقامیر؛ مرکز نشر دانشگاهی؛ (۱۳۸۵).
- [8] کتاب آشنایی با اپتیک؛ نوشته‌ی فرانک ال. پدروتی، لئون اس. پدروتی؛ ترجمه‌ی محی الدین شیخ الاسلامی؛ مرکز نشر دانشگاهی؛ (۱۳۸۲).