

«مقاله پژوهشی»

بررسی خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی آلیاژ نیم-هویسلر PtFeBi و سطوح (001) آن به روش نظریه تابعی چگالی

حامد رضازاده^۱، محمدرضا حنطهزاده^{۲*}، آرش بوچانی^۳

۱. دانشجوی دکتری، فیزیک، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

۲. دانشیار، گروه فیزیک، گروه فیزیک، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

۳. دانشیار، گروه فیزیک، واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۲/۲۰

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۱/۱۶

Investigation of the Electronic, Magnetic and Optical Properties of PtFeBi Half-Heusler Aand Its (001) Surfaces by Density Functional Theory Method

H. Rezazadeh¹, M.R. Hantehzadeh^{2*}, A. Boochani³

1. Ph.D. Student, Physics, Science and Research Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

2. Associate Professor, Department of Physics, Science and Research Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

3. Associate Professor, Department of Physics, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran

Received: 2021/04/05

Accepted: 2021/05/10

Abstract

We predicted that half-Heusler alloy PtFeBi is a potential candidate for using in spintronic and optoelectronic devices. By using first principle calculations based on density functional theory (DFT) within generalized gradient approximation (GGA), we studied the structural, electronic, magnetic and optical properties of PtFeBi half-Heusler alloy in bulk state and (001) surfaces and for FeBi and PtPt terminations. Spin polarization at Fermi level is -77.7% for bulk and -70.5% and -70.2% for FeBi and PtPt terminations, respectively. The real part of the dielectric function for the incident light in both the xx and zz directions for energies greater than 8eV for all three terminations is the same, and for energies greater than 15eV they converge to one, indicating that they act as an isotropic insulator. Also, the refractive index for energies greater than 7.5 eV is less than one, indicating super-luminescence.

Keywords

(001) Films, DFT, Heusler Alloy, Half-Metallicity

چکیده

با این فرض که آلیاژ نیم هویسلر PtFeBi می‌تواند در وسایل اسپینترونیکی و اپتوالکترونیک به کار رود، با استفاده از محاسبات اصول اولیه بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT) با تقریب گرادیان شبه تعمیم یافته (GGA)، خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی آلیاژ نیم-هویسلر PtFeBi در حالت بالک و سطوح (001) و برای پایانش‌های FeBi و PtPt مورد مطالعه قرار گرفت. قطبش اسپینی در سطح فرمی برای بالک عدد $77/7\%$ - و برای پایانش‌های FeBi و PtPt به ترتیب اعداد $70/5\%$ - و $70/2\%$ - به دست آمد. بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک برای نور فرودی در هر دو راستای xx و zz برای انرژی‌های بیشتر از 8 eV برای هر دو پایانش یاد شده، مشابه هم هستند و برای انرژی‌های بیشتر از 15 eV به عدد یک همگرا شده‌اند که نشان می‌دهد این پایانش‌ها به عنوان یک عایق ایزوتروپیک رفتار می‌کنند. همچنین ضریب شکست برای انرژی‌های بیشتر از 7.5 eV کمتر از عدد یک شده که معرف پدیده فوق‌العاده درخشان است.

واژه‌های کلیدی

فیلم‌های (001)، نظریه تابعی چگالی، آلیاژ هویسلر، نیم - فلزی

مقدمه

به طور کلی آلیاژهای هویسلر به دو دسته آلیاژهای نیم هویسلر و تمام هویسلر تقسیم می‌شوند. آلیاژهای نیم هویسلر XYZ با ساختار کریستالی $C1_b$ مشاهده می‌شوند که می‌توانند با کسر کردن یک اتم X از آلیاژهای تمام هویسلر X_2YZ با ساختار کریستالی $L2_1$ به دست آیند. به طور معمول در این آلیاژها، X و Y از عناصر گروه فلزات واسطه و Z از عناصر گروه اصلی هستند [۲۴-۲۵]. برای آلیاژهای نیم هویسلر XYZ سه ترتیب قرارگیری اتم‌ها وجود دارد که فازهای α ، β و γ نامیده می‌شوند. مکان اتم‌ها مطابق با ویکوف (Wyckoff) برای این سه فاز یاد شده در جدول شماره (۱) داده شده است [۶].

جدول ۱. مکان‌های اشغال شده به وسیله اتم‌ها در فازهای α ، β و γ . مکان 4d خالی از اتم است.

	4a	4b	4c	4d
فاز α	Z	Y	X	خالی
فاز β	X	Y	Z	خالی
فاز γ	Z	X	Y	خالی

آلیاژهای هویسلر می‌توانند در وسایل اسپینترونیک به کار روند به شرط آنکه به صورت یک لایه نازک (thin film) یا سطح درآیند. در اغلب اوقات، اثرات سطح باعث از بین رفتن خاصیت نیم فلزی مواد در حالت بالک می‌شوند و به دنبال آن کاهش قطبش اسپینی را در سطح فرمی خواهند داشت. بنابراین اثرات سطوح و مرز مشترک آنها یکی از نکات مهم و چالشی بوده است. در سال‌های اخیر کارهای نظری و تجربی زیادی در این زمینه انجام شده است. با توجه به اینکه ساختارهای هویسلر در پایه بلند روی متبلور می‌شوند، لذا اغلب دو نوع فیلم با جهت‌های کریستالی (۰۰۱) و (۱۱۱) امکان رشد بیشتری دارند.

روش انجام محاسبات

محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی استوار است [۲۷] و برای حل معادله معادلات بس ذره‌ای کوهن-شم نیز از تقریب گرادیان شیب تعمیم یافته (GGA) مورد استفاده قرار گرفته است [۲۸]. پس از بهینه‌سازی انرژی، در فضای وارون تعداد نقاط K و برای منطقه اول بریلوین

نخستین آلیاژ هویسلر در سال ۱۹۰۳ بنام Cu_2MnAl توسط فردریش هویسلر که یک دانشمند آلمانی بود کشف شد [۱]. این آلیاژ به طرز شگفت‌انگیزی یک ماده فرومغناطیس بود به طوری که هیچ عنصر مغناطیسی در آن وجود نداشت. آلیاژ هویسلر دیگری بنام $NiMnSb$ در سال ۱۹۸۳ توسط دی گروت و همکارانش کشف شد که این آلیاژ یک ماده نیم فلز (HM) فرومغناطیس بود [۲]. نیم فلزات موادی هستند که در یک کانال اسپینی، رفتار فلزی دارند و در کانال اسپینی دیگر، رفتار نیم رسانایی یا عایق گونه از خود نشان می‌دهند. قطبش اسپینی در سطح فرمی با رابطه:

$$P = \left(\frac{N \uparrow - N \downarrow}{N \uparrow + N \downarrow} \right) \times 100$$

داده می‌شود که در آن $N \uparrow$ و $N \downarrow$ به ترتیب چگالی حالات الکترونی در اسپین بالا و پایین در سطح فرمی می‌باشد. قطبش اسپینی در سطح فرمی برای نیم فلزات برابر با ۱۰۰٪ و برای فلزات فرومغناطیس کمتر از ۱۰۰٪ است. اخیراً نیم فلزات فرومغناطیس و فلزات فرومغناطیس با مغناطش بالا توجه بسیاری از محققین را به خود جلب کرده است. زیرا آنها می‌توانند قابلیت‌های جدیدی را در وسایل اسپینترونیک ایجاد کنند. اسپینترونیک شامل چندین پدیده است که دو پدیده مهم آن مقاومت مغناطیسی بسیار بزرگ (GMR) و مقاومت مغناطیسی تونلی (TMR) هستند. فلزات فرومغناطیس بیشتر در ساختن GMR و نیم فلزات فرومغناطیس بیشتر در ساختن (TMR) به کار می‌روند [۳-۵]. یکی از موضوعات مهم در اسپینترونیک و در پدیده TMR، تزریق اسپین از فلز فرومغناطیس به درون نیم‌رسانا است که برای افزایش بازدهی این کار، از فرومغناطیس‌ها با قطبش اسپینی بالا و نیم فلزات استفاده می‌کنند. آلیاژهای زیادی هستند که نیم فلز هستند از جمله آلیاژهای هویسلر [۱۲-۱۶]، اکسیدهای فلزی [۱۳-۱۵]، پروسکایت‌ها [۱۶-۱۹]، نیم‌رسانای مغناطیسی رقیق شده [۲۰-۲۳]. از میان این آلیاژها، آلیاژهای هویسلر به خاطر داشتن قطبش اسپینی بالا، دمای کوری بالا و ساختاری متناسب با زیرلایه برای استفاده در وسایل اسپینترونیک مناسب‌تر هستند.

یک از حالت‌های فرومغناطیس (FM) یا غیر مغناطیس (NM) پایدارتر است در شکل (۱-d) منحنی انرژی کل ترکیب بر حسب یک تابعی از حجم سلول واحد در دو حالت فرومغناطیس و غیر مغناطیس رسم شده‌اند. همان طور که شکل (۱-d) نشان می‌دهد ترکیب PtFeBi در فاز α در حالت فرومغناطیس به دلیل داشتن انرژی پایین‌تر، پایدارتر است. بنابراین در ادامه خواص فیزیکی این ترکیب در فاز α در حالت فرومغناطیس بررسی می‌شود. پارامترهای ساختار تعادلی این ترکیب در فاز α شامل ثابت شبکه تعادلی، مدول بالک و مشتق مدول بالک از نمودار انرژی کل ترکیب بر حسب یک تابعی از حجم سلول واحد استخراج شده و به ترتیب اعداد 6.373\AA ، 102.14Gpa و 4.95 به دست آمده است.

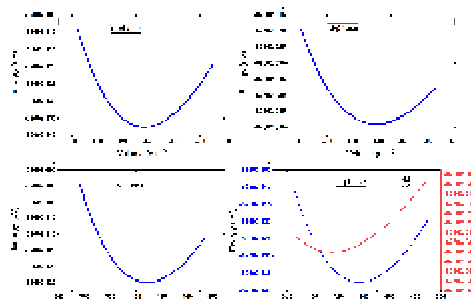
خواص الکترونی

ساختار الکترونی مواد اطلاعات سودمندی را در مورد رفتارهای فیزیکی آن نظیر رفتار الکتریکی، اپتیکی و ترانسپورت به دست می‌دهد. منحنی چگالی حالات الکترونی کل و جزئی ترکیب نیم-هوسلر PtFeBi در فاز α برای حالت بالک در شکل (۲) رسم شده است. ملاحظه می‌شود که چگالی الکترونی درباره انرژی 3eV تا 2eV دارای ناهمسانگردی است و رفتار الکترونی در اسپین بالا و پایین متفاوت است. از شکل (۲) پیداست که علت اصلی ناهمسانگردی مغناطیسی در تراز فرمی متعلق به حالات الکترونی اتم Fe و تا حدودی حالات الکترونی اتم‌های Pt است. همچنین ملاحظه می‌شود که حالات الکترونی اتم Bi در سطح فرمی سهم بسیار اندکی نسبت به دو اتم دیگر دارند. بنابراین نتیجه‌گیری می‌شود که این ترکیب نسبت به اعمال یک میدان مغناطیسی خارجی رفتار دوگانه‌ای از خود نشان می‌دهد. میدان مغناطیسی PtFeBi، $3.544\mu\text{B}$ به دست آمده است و با دیگر کارها [۲۶] در تطابق بسیار خوبی می‌باشد و قطبش اسپینی در سطح فرمی از رابطه $P = \frac{N\uparrow - N\downarrow}{N\uparrow + N\downarrow}$ عدد 77.7% به دست آمده است.

برای حالت بالک مش بندی $20*20*20$ ، $G_{\text{max}}=14$ و $R_{\text{mt}}*K_{\text{max}}=9$ و برای پایش‌ها مش بندی $14*14*1$ ، $G_{\text{max}}=12$ و $R_{\text{mt}}*K_{\text{max}}=8.5$ اختیار شده است. محاسبات با کد محاسباتی WIEN2k انجام شده است [۲۹]. محاسبات خودسازگار وقتی متوقف می‌شود که هم‌گرایی بار به کمتر از 0.0001e برسد.

خواص ساختاری

به طور کلی، ترکیبات نیم هوسلر، با فرمول شیمیایی XYZ و با ساختاری کریستالی به صورت fcc و متعلق به گروه فضایی ۲۱۶ می‌باشند. عموماً در این ترکیبات X و Y از عناصر واسطه و Z از عناصر گروه اصلی می‌باشند. سه ترتیب قرارگیری اتم‌ها برای ترکیبات نیم هوسلر وجود دارد که فازهای α ، β و γ نامیده می‌شوند و مکان اتم‌ها برای این فازها طبق نماد Wyckoff در جدول ۱ نشان داده شده‌اند.



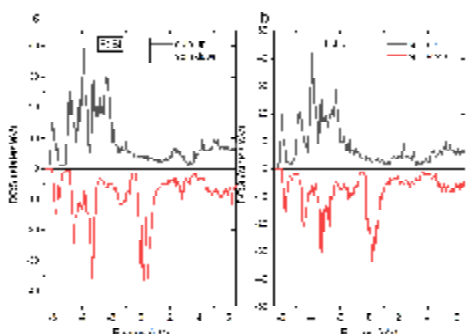
شکل ۱. منحنی انرژی کل ترکیب بر حسب یک تابعی از حجم سلول واحد

در این ترکیبات، اگر عنصری واسطه‌ای که الکترونگاتیوی بیشتری دارد در مکان 4c قرار گیرد پایداری بیشتری برای ترکیب تخمین زده می‌شود. در شکل (1-a, b & c) منحنی انرژی کل ترکیب PtFeBi بر حسب یک تابعی از حجم سلول واحد در حالت فرومغناطیس برای سه فاز α ، β و γ رسم شده‌اند. همان طور که از شکل (۱) مشخص است، پایین‌ترین انرژی مربوط به فاز α می‌باشد. بنابراین این ترکیب در فاز α نسبت به دو فاز دیگر یعنی β و γ پایدارتر است. همچنین برای اینکه دریابیم ترکیب PtFeBi در فاز α ، در کدام

است که نتایج حکایت از این دارد که خاصیت نیم فلزی برای پایش یاد شده در مقایسه با حالت بالک تغییر محسوسی نکرده و تنها کمی از حالت بالک کمتر شده است.

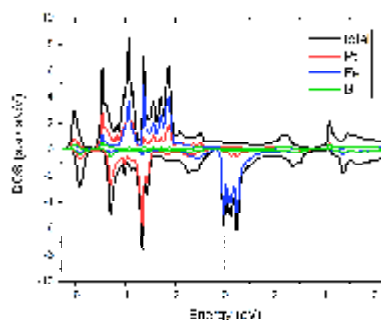
خواص اپتیکی در حالت سطحی و بالک

در این بخش ویژگی‌های اپتیکی در فیلم‌های [001]PtFeBi و در پایش‌های PtPt و PtBi هنگامی که جهت میدان الکتریکی نور موازی با سطح مقطع فیلم (محور XX) باشد و همچنین هنگامی که جهت میدان



شکل ۴. چگالی حالت‌های الکترونی برای دو پایش FeBi و PtPt در اسپین بالا و پایین

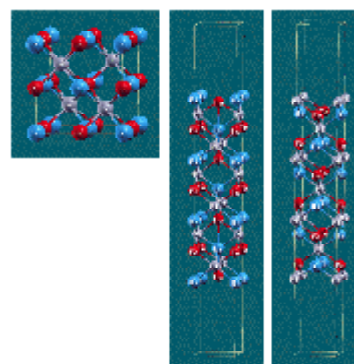
الکتریکی نور در راستای محور ZZ (راستای رشد بلور) باشد نسبت به حالت بالک آن بررسی شده‌اند. خصوصیات فیزیکی مواد در فیلم‌های لایه نازک به خاطر اثرات سطح نسبت به حالت بالک آن متفاوت است. با توجه به اینکه در فیلم [001] تقارن بلوری نسبت به حالت بالکی آن شکسته شده در نتیجه انتظار داریم که خصوصیات اپتیکی فیلم‌ها در راستای محورهای XX و ZZ متفاوت باشند. بخش حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک $\epsilon(\omega)$ را در هر دو راستای XX و ZZ نسبت به حالت بالک در شکل (5-a & b) نشان داده است. این شکل نشان می‌دهد که $\epsilon_1(\omega)$ و $\epsilon_2(\omega)$ تعدادی نوسان در ناحیه مادون قرمز (IR) وجود دارد که به خاطر جذب درون نواری هستند. همان طور که شکل (5-a & b) نشان می‌دهد $\epsilon_1(\omega)$ و $\epsilon_2(\omega)$ فیلم‌ها، رفتار غیرایزوتروپی در محدوده انرژی 0 تا 7.5eV دارند که این رفتار غیر ایزوتروپی بعد از 7.5eV ناپدید می‌شود. تابع دی‌الکتریک استاتیکی $\epsilon_1(0)$ که معرف پاسخ ماده به میدان الکتریکی استاتیکی است، در راستای محور XX، $\epsilon_1(\omega)$ برای بالک و فیلم‌ها در بعضی نواحی منفی شده‌اند.



شکل ۲. چگالی حالت‌های الکترونی کل و جزء برای ترکیب نیم-هویسلر PtFeBi.

خواص الکترونی سطوح (001)

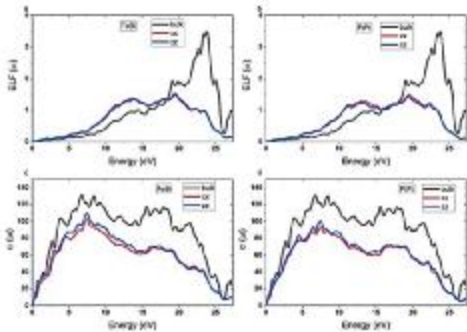
یک نوار شامل سیزده لایه اتمی از ترکیب PtFeBi از فاز α بنا کردیم. دو پایش FeBi و PtPt از این ترکیب در راستای (001) در نظر گرفته شدند. به دو طرف نوار ۳۰ بوهر خلا برای حذف برهمکنش‌ها اضافه کردیم. شکل (۳) نمایی از دو پایش یاد شده و ترکیب PtFeBi را نشان می‌دهد.



شکل ۳. نمایی از ساختار بالک PtFeBi در فاز α و پایش‌های PtPt و FeBi

در شکل (۴) چگالی حالات الکترونی فیلم‌های PtFeBi در دو اسپین بالا و پایین برای پایش‌های FeBi و PtPt برای راستای (001) رسم شده است. همان طور که از منحنی چگالی حالات این پایش‌ها مشخص است در هر دو اسپین بالا و پایین، هر دو پایش یاد شده رفتار فلزی از خود نشان داده‌اند. قطبش اسپینی پایش‌های FeBi و PtPt به ترتیب اعداد $-۷۰/۵\%$ و $-۷۰/۲\%$ به دست آمده

این به معنی آن است که در این نواحی امواج الکترومغناطیس در ماده منتشر نمی‌شود بلکه پراکنده و جذب می‌شود. در انرژی‌های بالاتر، منحنی $\epsilon_1(\omega)$ در هر دو راستای XX و ZZ به عدد مثبت ۱ همگرا شده‌اند که مشخص می‌کند در این محدوده از انرژی، پایداریها به عنوان عایق ایزوتروپیک رفتار می‌کنند.

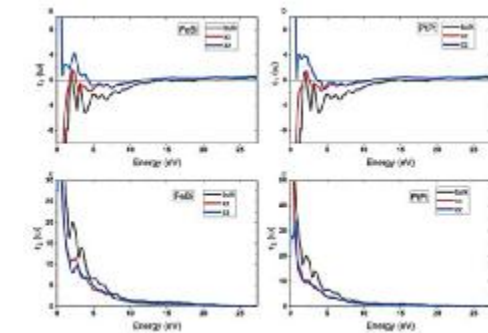


شکل ۶. (a) و (b) تابع اتلاف انرژی برای بالک و دو پایداری PtPt و FeBi و (c) و (d) ضریب جذب برای بالک و دو پایداری PtPt و FeBi

شکل ۵. (a) و (b) بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک برای بالک و دو پایداری PtPt و FeBi و (c) و (d) بخش موهومی تابع دی‌الکتریک برای بالک و دو پایداری PtPt و FeBi

پیک‌های تابع اتلاف انرژی می‌تواند معرف نوسانات پلاسمونی باشد به شرط آنکه در آن انرژی، همزمان بخش حقیقی دی‌الکتریک ریشه داشته باشد. تعدادی پیک برای بالک در محدوده 18eV تا 25eV وجود دارد که اصلی‌ترین آنها در انرژی 23.77eV واقع است. تعدادی پیک هم برای پایداریها در هر دو راستای XX و ZZ وجود دارد که اصلی‌ترین آنها در انرژی 19.77eV و 19.50eV (19.50eV و 19.47eV) به ترتیب برای پایداریهای PtPt و FeBi در راستای XX (ZZ) قرار دارد. مقدار اتلاف انرژی اپتیکی در نواحی مادون قرمز، مرئی و لبه ماورای بنفش برای حالت بالک خیلی کم است و حتی کمتر از مقدار اتلاف انرژی اپتیکی پایداریها در هر دو راستای XX و ZZ می‌باشد ولی در انرژی‌های بیشتر از 18eV مقدار اتلاف انرژی اپتیکی برای حالت بالک بیشتر از مقدار اتلاف انرژی اپتیکی برای پایداریها در هر دو راستای یاد شده به دست آمده است.

ضریب شکست $n(\omega)$ و ضریب $k(\omega)$ مطابق با فرمول‌های زیر، برای بالک و پایداریها در شکل (۷) نشان داده شده است. با افزایش انرژی در ناحیه مادون قرمز، $n(\omega)$ با شیب تندی برای بالک و پایداریها در هر دو

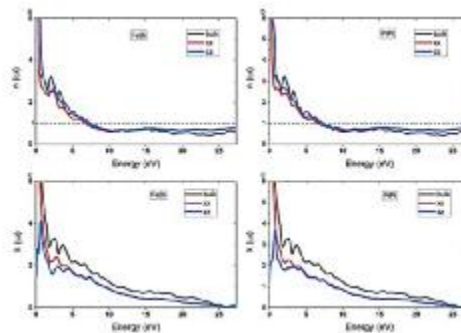


شکل ۵. (a) و (b) بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک برای بالک و دو پایداری PtPt و FeBi و (c) و (d) بخش موهومی تابع دی‌الکتریک برای بالک و دو پایداری PtPt و FeBi

در شکل (5-c & d) بخش موهومی دی‌الکتریک $\epsilon_2(\omega)$ در دو راستای XX و ZZ نشان داده شده است. پیک‌های بخش موهومی دی‌الکتریک هر کدام نشان دهنده یک گذار الکترون از تراز پر به یک تراز خالی است. از مقایسه بخش موهومی دی‌الکتریک در هر دو راستای XX و ZZ مشاهده می‌شود که در راستای XX مقدار استاتیکی هر سه پایداری یاد شده به سمت $+\infty$ میل می‌کند و در راستای ZZ از مقادیر صفر شروع می‌شوند و با شیب تندی به پیک‌های بزرگی در ناحیه مادون قرمز می‌رسند. از این نمودار درمی‌یابیم که در راستای XX رفتار فلزی پایداریها به شدت قوی است و در راستای ZZ این رفتار کاهش یافته است. با افزایش انرژی فوتون تابیده شده برای هر دو راستای XX و ZZ برای همه پایداریها مقادیر بخش موهومی دی‌الکتریک با شیب بسیار تندی کاهش یافته است. بنابراین مشاهده می‌کنیم که گذارهای الکترونی به دلیل رفتار فلزی قوی در پایداریها به خصوص در راستای XX در ناحیه مادون قرمز و مرئی رخ داده است. با توجه به شکل (۵) مشخص است که عملاً در انرژی‌های بالاتر از

دو پایانش یاد شده کاهش می‌یابد. همان طور که از شکل‌های (7-a & b) مشخص است در ناحیه مرئی و ماورای بنفش، $n(\omega)$ برای بالک بالاتر از $n(\omega)$ در پایانش‌ها قرار دارد که این نشان‌دهنده خاصیت بسیار قوی فلزی برای بالک در این نواحی است. همچنین در این نواحی از انرژی، ضریب شکست با شیب ملایمی برای بالک و پایانش‌ها کاهش یافته است تا اینکه در انرژی حدودا 7.5eV برای بالک و پایانش‌ها کمتر از یک شده است که این، رفتار فوق‌العاده درخشنده (super luminance) را نشان می‌دهد. $n(\omega)$ رفتار غیرایزوتروپی در محدوده 0 تا 8eV برای پایانش‌ها در راستاهای XX و ZZ دارد و بعد از انرژی 8eV، رفتار مشابهی از آنها در راستاهای یاد شده وجود دارد.

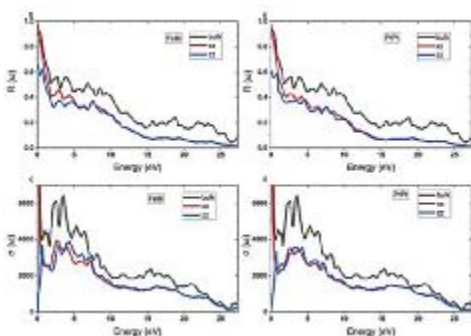
دو پایانش یاد شده کاهش می‌یابد. همان طور که از شکل‌های (7-a & b) مشخص است در ناحیه مرئی و ماورای بنفش، $n(\omega)$ برای بالک بالاتر از $n(\omega)$ در پایانش‌ها قرار دارد که این نشان‌دهنده خاصیت بسیار قوی فلزی برای بالک در این نواحی است. همچنین در این نواحی از انرژی، ضریب شکست با شیب ملایمی برای بالک و پایانش‌ها کاهش یافته است تا اینکه در انرژی حدودا 7.5eV برای بالک و پایانش‌ها کمتر از یک شده است که این، رفتار فوق‌العاده درخشنده (super luminance) را نشان می‌دهد. $n(\omega)$ رفتار غیرایزوتروپی در محدوده 0 تا 8eV برای پایانش‌ها در راستاهای XX و ZZ دارد و بعد از انرژی 8eV، رفتار مشابهی از آنها در راستاهای یاد شده وجود دارد.



شکل ۷. (a) و (b) ضریب شکست برای بالک و دو پایانش PtPt و FeBi و (c) و (d) ضریب خاموشی برای بالک و دو پایانش PtPt و FeBi

در شکل (8-a & b) ضریب انعکاس $R(\omega)$ برای بالک و پایانش‌ها در راستای XX و ZZ نشان داده شده است. همان طور که از شکل (8-a & b) مشخص است $R(0)$ برای بالک و پایانش‌ها در راستای XX، همگی بالای ۹۶٪ است در صورتی که این مشخصه در راستای ZZ برای پایانش‌ها کمتر از ۶۵٪ شده است که این نشان دهنده رفتار فلزی بسیار قوی در آنها برای بالک و پایانش‌ها در راستای XX است. ضریب انعکاس با افزایش انرژی فوتون فرودی در ناحیه مادون قرمز (IR) با شیب تندی برای بالک و پایانش‌ها در راستای XX کاهش می‌یابد. سپس در ناحیه مرئی و بعد از آن با شیب ملایمی کاسته شده و در انرژی‌های بالا به مقادیر صفر رسیده است و با توجه به اینکه در انرژی‌های بالا (بعد از 8eV) ضریب شکست نیز کمتر از عدد یک شده بود و همان طور که از شکل (۸) می‌بینیم ضریب انعکاس نیز بعد از 10eV کمتر از 0.2 شده است و همچنین با توجه به مقادیر بسیار جزئی بخش حقیقی و موهومی دی‌الکتریک، این ترکیب‌ها شفاف (transparent) هستند و قسمت اعظم نور تابیده شده به آنها از آنها عبور می‌کند.

ضریب خاموشی $k(\omega)$ معرف نفوذپذیری نور در ماده است و پیک‌های آنها معرف میزان کاهش دامنه موج نور ورودی به ماده است. مشابه با دیگر خصوصیات اپتیکی برای پایانش‌ها، این مشخصه نیز تقریباً قبل 8eV رفتار غیرایزوتروپی دارد. همان‌طور که در شکل (7-c & d) مشخص است در راستای XX، بیشترین افت دامنه موج در ناحیه مادون قرمز مشاهده می‌شود؛ زیرا این ترکیب‌ها رفتاری به شدت فلزی دارند و نور ورودی به آنها به شدت طول موجش کم می‌شود و جذب می‌گردد. همچنین در این راستا، با افزایش انرژی فوتون فرودی، ضریب خاموشی نیز با شیب ملایمی کم می‌شود به طوری که میزان افت دامنه نور ورودی به آنها برای انرژی‌های بزرگتر از 8eV بسیار ناچیز شده است. در راستای محور ZZ ضریب خاموشی برای



شکل ۸. (a) و (b) ضریب انعکاس برای بالک و دو پایانش PtPt و FeBi و (c) و (d) رسانایی اپتیکی برای بالک و دو پایانش PtPt و FeBi

بحث و نتیجه‌گیری

بالا می‌توانند در صنعت اسپینترونیک و به ویژه در ساخت TMRها به کار روند.

بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک برای نور فرودی در هر دو راستای xx و zz برای انرژی‌های بیشتر از 8 eV برای هر دو پایانش FeBi و PtPt، مشابه هم هستند و برای انرژی‌های بیشتر از 15 eV به عدد یک همگرا شده‌اند که نشان می‌دهد این پایانش‌ها به عنوان یک عایق ایزوتروپیک رفتار می‌کنند و همچنین ضریب شکست برای انرژی‌های بیشتر از 8 eV کمتر از عدد یک شده است که این معرف پدیده فوق‌العاده درخشان است.

در این پژوهش خصوصیات ساختاری، الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی آلیاژ PtFeBi و سطوح (۰۰۱) بر اساس محاسبات DFT و روش FP-LAPW+lo بررسی شد و مهمترین نتایج آن در فهرست زیر آمده است: (۱) قطبش اسپینی در سطح فرمی برای بالک عدد $77/7\%$ و برای پایانش‌های FeBi و PtPt به ترتیب اعداد $70/5\%$ و $70/2\%$ به دست آمده است که همگی بالای ۷۰ درصد هستند و به خاطر قطبش اسپینی

References

- [1] F. Heusler, W. Starck, E. Haupt, *Verh. Dtsch. Phys. Ges.* 5, 219 (1903).
- [2] R.A. de Groot, F.M. Mueller, P.G. van Engen, K.H.J. Buschow, *Phys. Rev. Lett.* 50, 2024–2027 (1983).
- [3] S.A. Wolf, A.Y. Chtchelkanova, D.M. Treger, *IBM J. Res. Dev.* 50, 101–110 (2006).
- [4] L.B. Chandrasekar, K. Gnanasekar, M. Karunakaran, *Superlattices Microstruct.* 136, 106322 (2019).
- [5] A. Hirohata, K. Yamada, Y. Nakatani, I.-L. Prejbeanu, B. Diény, P. Pirro, B. Hillebrands, *J. Magn. Magn. Mater.* 509, 166711 (2020).
- [6] R.L. Zhang, L. Damewood, C.Y. Fong, L.H. Yang, R.W. Peng, C. Felser, *AIP Adv.* 6, 115209 (2016).
- [7] Z. Hao, R. Liu, Y. Fan, L. Wang, *J. Alloys Compd.* 820, 153118 (2020).
- [8] M. Ram, A. Saxena, A.E. Aly, A. Shankar, *RSC Adv.* 10, 7661–7670 (2020).
- [9] S. Idrissi, H. Labrim, S. Ziti, L. Bahmad, *Appl. Phys. A* 126, 190 (2020).
- [10] C. Wu, W. Zheng, W. Feng, W. Jiang, *J. Phys. Soc. Japan* 89, 064713 (2020).
- [11] M. Mushtaq, M.A. Sattar, S.A. Dar, I. Qasim, I. Muhammad, *Mater. Chem. Phys.* 245, 122779 (2020).
- [12] J. Ma, V.I. Hegde, K. Munira, Y. Xie, S. Keshavarz, D.T. Mildebrath, C. Wolverton, A.W. Ghosh, W.H. Butler, *Phys. Rev. B* 95, 024411 (2017).
- [13] K. Schwarz, *J. Phys. F Met. Phys.* 16, L211–L215 (1986).
- [14] S.F. Matar, M.A. Subramanian, R. Wehrich, *Chem. Phys.* 310, 231–238 (2005).
- [15] B. Amin, F. Majid, M.B. Saddique, B. Ul Haq, A. Laref, T.A. Alrebdi, M. Rashid, *Comput. Mater. Sci.* 146, 248–254 (2018).
- [16] S.E.A. Yousif, O.A. Yassin, *J. Alloys Compd.* 506, 456–460 (2010).
- [17] Bouadjemi, S. Bentata, A. Abbad, W. Benstaali, B. Bouhafs, *Solid State Commun.* 168, 6–10 (2013).
- [18] M. Retuerto, M.-R. Li, P.W. Stephens, J. Sánchez-Benítez, X. Deng, G. Kotliar, M.C. Croft, A. Ignatov, D. Walker, M. Greenblatt, *Chem. Mater.* 27, 4450–4458 (2015).
- [19] Y.P. Liu, H.R. Fuh, Y.K. Wang, *J. Magn. Magn. Mater.* 341, 25–29 (2013).
- [20] R.K. Singhal, A. Samariya, Y.T. Xing, S. Kumar, S.N. Dolia, U.P. Deshpande, T. Shripathi, E.B. Saitovitch, *J. Alloys Compd.* 496, 324–330 (2010).
- [21] S. Kervan, N. Kervan, *J. Magn. Magn. Mater.* 382, 63–70 (2015).
- [22] B. Prajapati, S. Kumar, M. Kumar, S. Chatterjee, A.K. Ghosh, *J. Mater. Chem. C* 5, 4257–4267 (2017).

- [23] D. Saikia, J. Jami, J.P. Borah, *Phys. B Condens. Matter* 56525–3, 25–32 (2019).
- [24] A. Boochani, B. Nowrozi, J.
- [25] M.K. Hussain, *Appl. Phys. A* 124, 343 (2018).
- [26] W. Huang, X. Wang, X. Chen, W. Lu, L. Damewood, C.Y. Fong, *J. Magn. Magn. Mater.* 377, 252–258 (2015).
- [27] P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, S. B. Trickey, *Comput. Phys. Commun.* 59 (2), 399-415(1990).
- [28] K. Schwarz, P. Blaha, *Computational Materials Science.* 28 (2), 259-273 (2003).
- [29] C. Ambrosch-Draxl, J.O. Sofo, *Comput. Phys. Commun.* 175 (1), 1-14 (2006).
- [30] Khodadadi, S. Solaymani, S. Jalali-Asadabadi, *J. Phys. Chem. C* 121, 3978–3986 (2017).

COPYRIGHTS



© 2022 by the authors. Licensee PNU, Tehran, Iran. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY4.0) (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0>)