

## محاسبه ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، اپتیکی و ثابت‌های کشسانی

ترکیب هویسلر  $\text{Co}_2\text{CrZ}$  ( $\text{Z}=\text{Al}, \text{Ga}$ )

حمداله صالحی، مرضیه حلوائی\*، پیمان امیری

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

دریافت: 1395/09/23 ویرایش نهایی: 1397/01/27 پذیرش: 1397/03/20

## چکیده

در این مقاله ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، اپتیکی و ثابت‌های کشسانی ترکیب‌های هویسلر  $\text{Co}_2\text{CrZ}$  ( $\text{Z}=\text{Al}, \text{Ga}$ ) مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی با استفاده از تقریب GGA و کد محاسباتی Wien2k انجام گرفته است. در این تحقیق خواص ساختاری ترکیب‌های  $\text{Co}_2\text{CrZ}$  ( $\text{Z}=\text{Al}, \text{Ga}$ ) از جمله ثابت شبکه، مدول انبوهه و مشتق آن محاسبه شده است. در این محاسبات مقدار ثابت شبکه 5/6787 آنگستروم و 5/7235 آنگستروم به ترتیب برای ترکیب‌های  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  استفاده شده است. همچنین خواص الکترونی مانند ساختار نواری و چگالی حالت‌ها محاسبه شده است. برای ترکیب‌های  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  در کانال اسپینی اکثریت کافی مشاهده نشد اما در کانال اسپینی اقلیت گاف کوچکی به ترتیب به مقدار 0/4 الکترون‌ولت و 0/2 الکترون‌ولت مشاهده شد در نتیجه هر دو ترکیب نیم فلز هستند. هم‌چنین بررسی خواص کشسانی نشان داد ترکیب  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  نسبت به  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  پایداری کشسانی بیشتری دارد. ویژگی‌های اپتیکی نیز نشان داد تطابق خوبی میان چگالی حالت‌ها و سهم موهومی تابع دی‌الکتربریک برقرار است و مقدار 10 برای ضریب شکست استاتیک با استفاده از سهم حقیقی تابع دی‌الکتربریک برای هر دو ترکیب به دست آمد.

**کلیدواژه‌گان:** ترکیب‌های هویسلر، نظریه تابعی چگالی، مدول انبوهه، ضرایب کشسانی، مدول یانگ، ویژگی‌های اپتیکی

سرعت و ظرفیت بالا در ذخیره‌سازی اطلاعات از مزیت‌های فناوری اسپینترونیک در مقایسه با روش‌های معمول و در دسترس امروزی است. فرومغناطیس‌های نیم فلز<sup>1</sup> (HMF) که یک کانال اسپینی آن‌ها رفتار نارسانا و کانال دیگر رفتار رسانا از خود نشان می‌دهند اهمیت ویژه‌ای در کاربردهای اسپینترونیکی دارند [1]. از سال 1983 که برای اولین بار خاصیت HMF ترکیبات هویسلر  $\text{NiMnSb}$  و  $\text{PtMnSb}$  توسط گروت و

## مقدمه

یکی از مباحث جدید علمی که امروزه مورد توجه بسیاری از دانشمندان قرار گرفته است مبحث اسپینترونیک است. اسپینترونیک به مطالعه نقشی که الکترون در فیزیک حالت جامد ایفا می‌کند، می‌پردازد قابلیت ایجاد سرعت‌های بالا در پردازش اطلاعات، کاهش توان مصرفی، ساخت حافظه‌های غیر فرار با

\*نویسنده مسئول: Marzieh.halvaei@gmail.com

<sup>1</sup>-Half metal ferromagnetic

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

این مقاله تحت مجوز کپی‌رایت کامنز تخصصی 4.0 بین‌المللی می‌باشد.



مقادیر  $g_{\min} = 8/1$  و  $g_{\max} = 11/3$  انتخاب شده است. شعاع کره مافین تین را نیز پس از بررسی ساختار بلور، برای عناصر Cr و Co برابر با  $2/03$  بوهر و برای عناصر Ga و Al برابر با  $1/83$  بوهر در نظر گرفتیم. همچنین انرژی جدایی 6-ریدبرگ را برای جداسازی حالت‌های ظرفیت از حالت‌های مغزه مبنا قرار دادیم و با تعیین مبنای همگرایی  $0/0001$  ریدبرگ، بعد از 11 چرخه به همگرایی مورد نظر دست یافتیم.

## نتایج

### پارامترهای ساختاری

مدول حجمی معیاری از سختی بلور است. در واقع هرچه این کمیت بیشتر باشد بلور سخت‌تر و خاصیت تراکم‌پذیری آن کمتر است. تراکم‌پذیری (K) و ارون  $B_0$  است و با سختی بلور رابطه عکس دارد. با استفاده از پارامترهای بهینه شده، ثابت شبکه تعادلی توسط تقریب GGA محاسبه شده است. همچنین مدول حجمی و مشتق مدول حجمی با محاسبه انرژی سامانه در حجم‌های مختلف و سپس برازش منحنی‌های انرژی-حجم استخراج شده‌اند. با مقایسه انرژی مربوط به حجم‌های مختلف یاخته واحد، می‌توان پایدارترین حالت (کمترین انرژی) را شناسایی کرد و به کمک آن مؤلفه‌های ساختاری بهینه را به دست آورد. تغییرات انرژی برحسب حجم با استفاده از معادله مورناگون که با رابطه 1 تعریف می‌شود به دست می‌آید:

$$E(V) = E_0 + \frac{B_0 V_0}{B'} \left[ \frac{V}{V_0} + \frac{\left(\frac{V}{V_0}\right)^{1-B'} - B'}{B'-1} \right] \quad 1$$

در این رابطه  $V_0$  حجم سلول اولیه،  $E_0$  انرژی حالت پایه در دما و فشار صفر،  $B_0$  مدول حجمی و  $B'$  مشتق آن است. با توجه به نمودار حجم برحسب انرژی می‌توان پارامترهای ساختاری را به دست آورد. نتایج

همکاران کشف شد، تا به امروز ترکیب‌های فراوانی با این خاصیت کشف شده است. ترکیب‌های هویسلر به دو دسته تقسیم می‌شوند، ترکیب‌های نیم‌هویسلر و ترکیب‌های هویسلر کامل [2]. فرومغناطیس‌های نیم‌فلز با فرمول عمومی  $X_2YZ$  شناخته می‌شوند که X و Y از عناصر واسطه و Z از گروه فلزات اصلی انتخاب می‌شود. این مواد دارای ساختار fcc بوده و در ساختار بلوری  $L2_1$  و گروه فضایی  $(225fm-3m)$  نمایان می‌شوند. یکی از ویژگی‌های مهم این ترکیبات بالا بودن دمای کوری آن‌ها است و در میان این ترکیبات  $Co_2XY$  به دلیل داشتن گاف نواری بزرگ در حالت اسپین اقلیت و همچنین راحت‌تر بودن سنتز آزمایشگاهی، برای کاربردهای اسپینترونیکی گزینه بسیار خوبی محسوب می‌شود [3]. لذا در این مقاله ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، اپتیکی و ثابت‌های کشسانی ترکیب‌های هویسلر  $Co_2CrZ$  ( $Z=Al, Ga$ ) را مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

### روش انجام محاسبات

محاسبات با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) و روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل و با استفاده از کد محاسباتی Wien2k انجام شده است. در محاسبه پتانسیل تبادل همبستگی نیز از تقریب GGA بهره گرفته شده است. تعداد نقاط فضای k برای انتگرال‌گیری در منطقه اول بریلوین برای ترکیب‌های  $Co_2CrAl$  و  $Co_2CrGa$  به ترتیب 400 و 450 نقطه و  $RK_{\max}$  که میزان ماتریس همگرایی را مشخص می‌کند نیز به ترتیب 8 و  $8/5$  در نظر گرفته شده است. با توجه به حضور ارییتال‌های d و اینکه مواد مورد بررسی فرومغناطیس هستند، لذا در تمامی محاسبات قطبش اسپینی نیز در نظر گرفته شده است. در مسیر محاسبات

حاصل از محاسبه ثابت شبکه تعادلی، مدول حجمی، مشتق مدول حجمی و تراکم‌پذیری ترکیب‌های  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  در جدول 1 آورده شده است. نتایج به دست آمده نشان‌دهنده سازگاری خوبی با داده‌های تجربی می‌باشد.

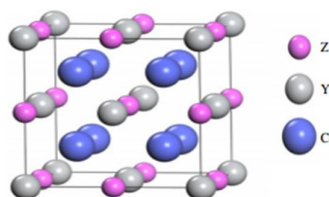
جدول 1. پارامترهای ساختاری محاسبه شده و مقایسه با نتایج دیگران

ترکیب	کمیت محاسبه شده	مقدار محاسبه شده	مقدار تجربی	درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	مقدار نظری	درصد خطا نسبت به مقدار نظری
$\text{Co}_2\text{CrAl}$	ثابت شبکه a ( $\text{\AA}$ )	5,68	5,73[5]	0,920	5,73[6] 5,76[7]	0,8 1,4
	حجم یاخته واحد $(\text{a.u})^3$	46,35	-	-	-	-
	$B_0$ (GPa)	213,56	207,23[8]	2,96	193,20 [6]	9,5
	$B'$	5,0000	-	-	-	-
	$K$ (GPa) <sup>-1</sup>	0,005	-	-	-	-
$\text{Co}_2\text{CrGa}$	ثابت شبکه a ( $\text{\AA}$ )	5,75	5,76[5]	0,64	5,75[6] 5,88[7]	0,1 2,1
	حجم یاخته واحد $(\text{a.u})^3$	47,44	-	-	-	-
	$B_0$ (GPa)	207,24	208,81[8]	0,76	262,69[9]	26,7
	$B'$	5,57	-	-	-	-
	$K$ (GPa) <sup>-1</sup>	0,005	-	-	-	-

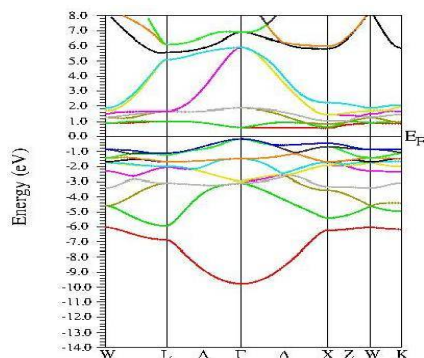
با استفاده از ساختار نواری می‌توان اطلاعاتی از ماهیت ماده مورد نظر به دست آورد. در شکل 2 و 3 ساختار نواری برای هر دو ترکیب  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  در هر دو حالت اسپین بالا و پایین با استفاده از تقریب GGA رسم شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌کنیم در هر دو ترکیب پایین‌ترین نوار ظرفیت در هر دو حالت بالا و پایین اسپینی مربوط به الکترون‌های اربیتال S عناصر Al و Ga هستند که کاملاً از حالت‌های دیگر جدا شده‌اند. همچنین انحنا مشاهده شده در نزدیکی سطح فرمی، ناشی از هم‌پوشانی اربیتال d کبالت با اربیتال d از Cr است و همچنین سهم اندکی نیز مربوط به اربیتال p اتم Cr می‌باشد. در نتیجه هر دو ترکیب در حالت اسپین اکثریت دارای خواص فلزی

### ساختار نواری

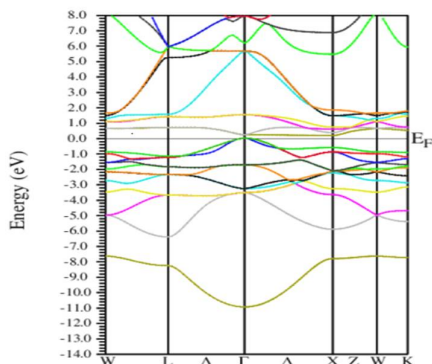
ساختار ترکیب‌های  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  با گروه فضایی  $225\text{fm-}3\text{m}$  دارای فرمول عمومی  $\text{X}_2\text{YZ}$  می‌باشد که اتم‌های X در موقعیت‌های (0,25, 0,25, 0,25) و (0,75, 0,75, 0,75) جای اتم‌های Y و Z نیز به ترتیب در موقعیت‌های (0,0,0) و (0,5,0,5,0,5) جای گرفته‌اند که در شکل 1 نشان داده شده است و در ساختار بلوری fcc ظاهر می‌شوند [10].



شکل 1. ساختار کلی ترکیب‌های  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  [10].



الف



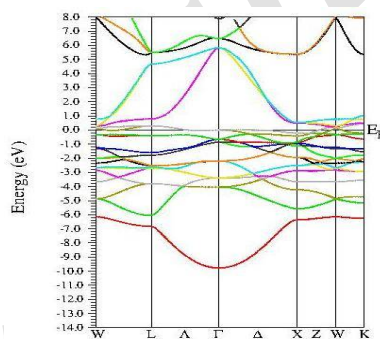
ب

شکل 3. نمودارهای ساختار نواری در حالت اسپین پایین برای  $\text{Co}_2\text{CrAl}$ : الف و  $\text{Co}_2\text{CrGa}$ : ب

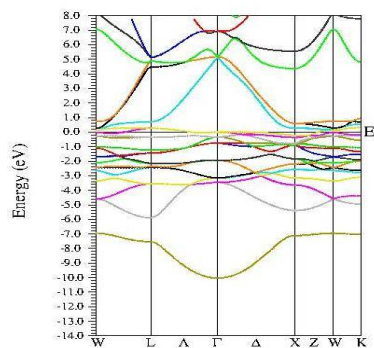
### چگالی حالت‌ها (DOS)

از دیگر ویژگی‌های الکترونی مهم، چگالی حالت الکترونی است که بیانگر تعداد حالت‌های مجاز در یک بازه معین انرژی می‌باشد. این تابع که در فرآیندهای الکترونی به‌ویژه در پدیده‌های تراپدی بسیار مهم است، نحوه توزیع الکترون‌ها را در هر یک از اربیتال‌های اتمی نشان می‌دهد. شکل 4 منحنی DOS کل مربوط به ترکیب‌های  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  را نشان می‌دهد.

هستند و هیچ گافی مشاهده نمی‌شود اما در حالت اسپین اقلیت گاف نواری برای  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  به مقدار 0/439 الکترون ولت و برای  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  به مقدار 0/217 الکترون ولت به دست آمد که در مقایسه با نتایج تجربی حاصل که گاف نواری برای این دو ترکیب در حالت اسپین اقلیت در محدوده 0/2 تا 0/5 الکترون ولت تخمین زده شده از سازگاری خوبی برخوردار است [11,12].

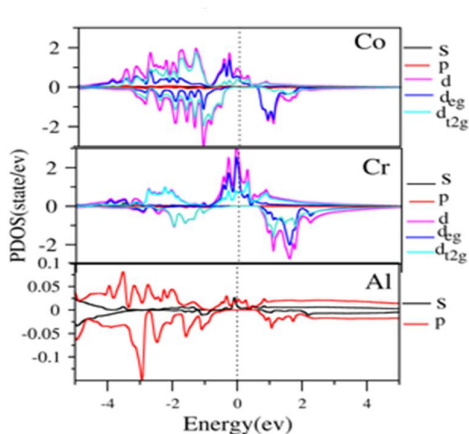


الف

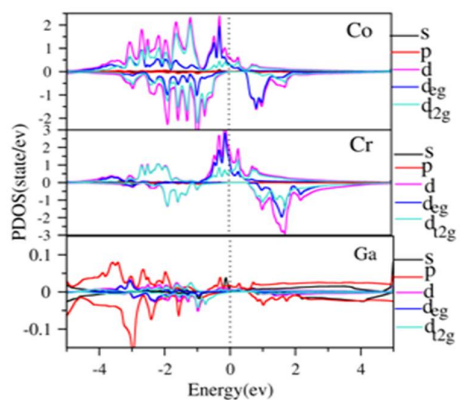


ب

شکل 2. نمودارهای ساختار نواری در حالت اسپین بالا برای  $\text{Co}_2\text{CrAl}$ : الف و  $\text{Co}_2\text{CrGa}$ : ب.



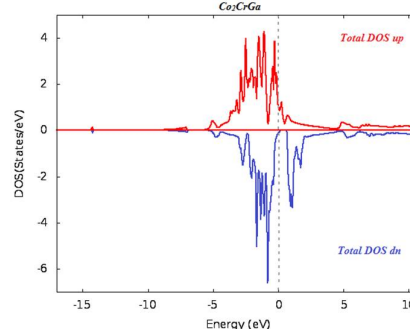
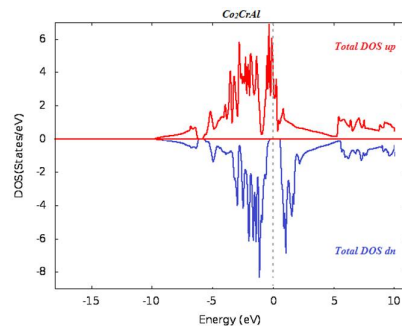
الف



ب

شکل 5. نمودار چگالی حالت‌های جزئی برای ترکیب‌های الف:  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و ب:  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  (اسپین اکثریت بالا و اسپین اقلیت پایین خط فرمی می‌باشد).

با توجه به نمودارهای شکل 5 برای هر دو ترکیب  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  نقش اربیتال‌های s و p اتم‌های کبالت، کروم، آلومینیوم و گالیم در تشکیل قله‌های نزدیک خط فرمی برای حالت اسپین اقلیت و اکثریت بسیار ناچیز است. در شکل 5الف مشاهده می‌کنیم نقش اصلی در تشکیل گاف در حالت اسپین اقلیت بر عهده اربیتال‌های d اتم کبالت می‌باشد. همچنین در شکل 5ب اربیتال‌های d اتم کبالت عامل اصلی در ایجاد گاف در حالت اسپین اقلیت می‌باشد.



شکل 4. منحنی چگالی حالت‌های ترکیب‌های  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  (اسپین اکثریت رنگ قرمز، اسپین اقلیت رنگ آبی).

همان‌طور که از شکل 4 برداشت می‌شود در حالت‌های اسپین اکثریت (بالا) برای هر دو ترکیب گافی مشاهده نمی‌شود چرا که حالت‌های الکترونی سطح فرمی را قطع کرده و ترکیب‌های مورد نظر رفتار فلزی از خود نشان می‌دهند اما در کانال اسپینی اقلیت (پایین) در هر دو ترکیب گاف‌نواری مشاهده شد. رفتار نیم فلزی در این ترکیب‌ها به‌طور کلی از گاف حالت اقلیت نتیجه می‌شود. از آنجا که تشخیص اربیتال‌هایی که در ایجاد گاف، نقش بیشتری دارند از روی نمودار چگالی حالت‌های کلی امکان‌پذیر نیست به‌منظور بررسی دقیق‌تر و تفکیک اربیتال‌های ظرفیت، نمودار چگالی حالت‌های جزئی نیز با تقریب GGA در شکل‌های 5 رسم شده است.

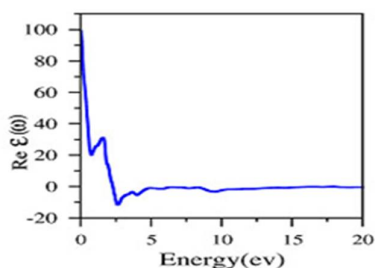
## ویژگی‌های اپتیکی

## تابع دی‌الکتریک

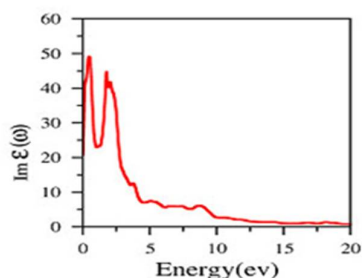
طیف اپتیکی منبع وسیعی از اطلاعات را برای مطالعه ساختار نواری، خواص الکترونی، برانگیختگی‌ها و نوسانات شبکه در اختیار ما قرار می‌دهد. یکی از مهم‌ترین کمیت‌های اپتیکی، تابع دی‌الکتریک مختلط است. تابع دی‌الکتریک بارابطة زیر تعریف می‌شود [13].

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \quad 2$$

تابع دی‌الکتریک از دو سهم حقیقی و موهومی تشکیل شده است که دانستن هر دو برای درک دقیق توابع اپتیکی مانند ضریب شکست و ضریب خاموشی ضروری است، تابع دی‌الکتریک ترکیب‌های  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  و  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  در شکل 6 و 7 رسم شده است.



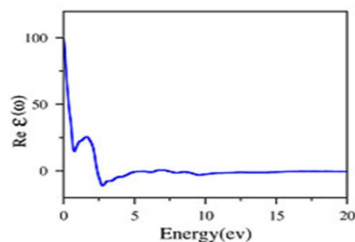
(الف)



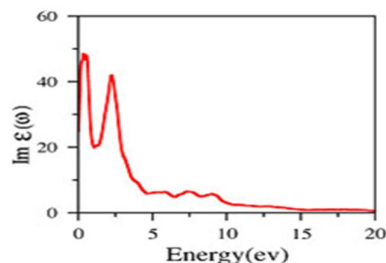
(ب)

شکل 7. تابع دی‌الکتریک ترکیب  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  الف: سهم حقیقی و ب: سهم موهومی.

با توجه به شکل 6 سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی 2/5 الکترون‌ولت دارای یک کمینه می‌باشد که در این انرژی باید سهم موهومی این تابع بیشینه شود و هم‌چنین در محدوده انرژی 1/2 الکترون‌ولت نیز سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک دارای یک کمینه می‌باشد و در همین نقطه سهم موهومی این تابع بیشینه شده است. در شکل 7 الف نیز که مربوط به سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک است، در انرژی 0/6 و 2/5 الکترون‌ولت دارای کمینه‌ایی است که باید در این محدوده سهم موهومی تابع دی‌الکتریک بیشینه شود که با نمودار شکل 7 ب در تطابق است. در هر دو ترکیب همان‌گونه که مشاهده می‌شود سهم موهومی تقریباً بعد از انرژی 2/8 الکترون‌ولت دارای تغییرات آرام است که ناشی از جذب فوتون‌های کم‌انرژی است که منجر به گذارهای درون‌نواری می‌شود. گاف اپتیکی با استفاده از سهم

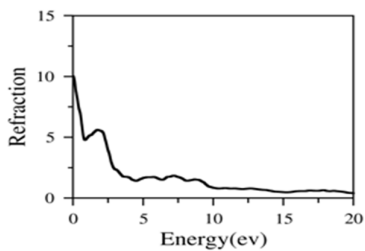


(الف)

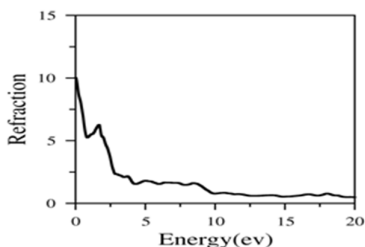


(ب)

شکل 6. تابع دی‌الکتریک ترکیب  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  الف: سهم حقیقی و ب: سهم موهومی.

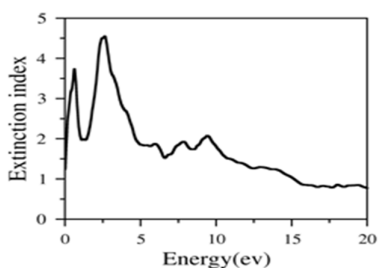


الف

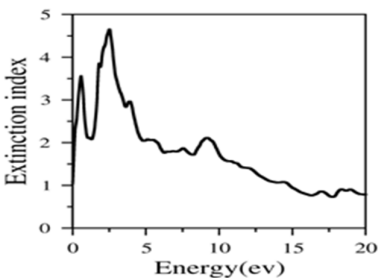


ب

شکل 8. ضریب شکست ترکیب‌های الف:  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و ب:  $\text{Co}_2\text{CrGa}$



الف



ب

شکل 9. ضریب خاموشی ترکیب‌های الف:  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و ب:  $\text{Co}_2\text{CrGa}$

در حالت کلی می‌توان گفت که ضریب شکست رفتاری مشابه با سهم موهومی و ضریب خاموشی رفتاری مانند سهم موهومی تابع دی‌الکتریک از خود نشان می‌دهد که با توجه به نمودارهای شکل 8 و 9 تطابق آن‌ها کاملاً

موهومی تابع دی‌الکتریک قابل محاسبه است، اما با توجه به سهم موهومی تابع دی‌الکتریک در شکل‌های 6 و 7 نمودار به یک‌باره با قله‌هایی آغاز شده است که امکان تشخیص گاف اپتیکی را فراهم نمی‌کند. در توصیف این حالت می‌توان گفت با بررسی طیف اپتیکی یک ماده به دلیل این که حالت‌های اسپینی بالا و پایین قابل تفکیک نمی‌باشند، حالت کلی ماده در نظر گرفته می‌شود. با مقایسه با نمودارهای چگالی حالت‌های کلی، همان‌گونه که مشاهده شد تنها در حالت‌های اسپینی پایین برای ترکیب‌های  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  گاف نواری مشاهده شده است و این نتیجه با نتیجه حاصل از خواص اپتیکی که در حالت کلی کافی مشاهده نمی‌شود در تطابق کامل است.

#### ضریب شکست و ضریب خاموشی

ضریب شکست پارامتر فیزیکی مهمی است که وابسته به اثر متقابل میکروسکوپی اتمی می‌باشد از دیدگاه نظری ضریب شکست را می‌توان براساس تابع دی‌الکتریک به شکل رابطه زیر تعریف نمود [14]:

$$n_{ij}(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{ij}(\omega) + \text{Re} \varepsilon_{ij}(\omega)}{2}} \quad (3)$$

ضریب خاموشی برای یک ماده ویژه، سنجشی از میزان جذب پرتوی الکترومغناطیس توسط آن ماده است و از رابطه 4 به دست می‌آید:

$$k_{ij}(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{ij}(\omega) - \text{Re} \varepsilon_{ij}(\omega)}{2}} \quad (4)$$

جذر سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر منجر به ضریب شکست استاتیک می‌شود [14]. نمودارهای مربوط به ضریب شکست و ضریب خاموشی ترکیب‌های  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  در شکل‌های 8 و 9 رسم شده است.

جدول 2. محاسبه ضریب کشسانی برای ترکیب  $\text{Co}_2\text{CrAl}$ 

کار نظری [6]	تقریب GGA	ضرایب کشسانی (Gpa)
223/30	278/07	$C_{11}$
178/16	187/94	$C_{12}$
143/10	151/91	$C_{44}$

جدول 3. محاسبه ضرایب کشسانی برای ترکیب  $\text{Co}_2\text{CrGa}$ 

کار نظری [6]	تقریب GGA	ضرایب کشسانی (Gpa)
199/04	250/09	$C_{11}$
189/98	187/16	$C_{12}$
137/77	150/59	$C_{44}$

با در دست داشتن ضرایب کشسانی می‌توان خواص کشسانی مواد را بررسی کرد که به شرح زیر است:

### مدول یانگ

از دیگر کمیت‌هایی که به مدول حجمی و برشی وابسته است، مدول یانگ می‌باشد. مدول یانگ چگونگی کشیدگی یا فشردگی یک ماده را در واکنش به یک نیروی اعمالی توصیف می‌کند و نسبت تنش به کرنش است و در واقع معیاری از سختی مواد است. مقادیر به دست آمده از مدول یانگ برحسب تقریب ویت، رئوس و هیل برحسب گیگاپاسگال در جدول 4 آورده شده‌اند.

جدول 4. مدول یانگ محاسبه شده

Hill	Reuus	Voight	ترکیب
245/57	208/98	280/66	$\text{Co}_2\text{CrAl}$
216/07	163/94	265/12	$\text{Co}_2\text{CrGa}$

با استفاده از تقریب ویت حد بالای کشسانی ماده و با استفاده از تقریب رئوس حد پایین کشسانی ماده

مشخص است و هماهنگی بسیار خوبی را نتیجه می‌دهند. جذر سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر منجر به ضریب شکست استاتیک می‌شود که با توجه به نمودار شکل 6 و 7 محل برخورد نمودار با محور عمودی عدد 100 را در هر دو ترکیب نشان می‌دهد در نتیجه مقدار 10 برای ضریب شکست برای هر دو ترکیب پیش‌بینی می‌شود. از طرفی محل برخورد نمودارهای ضریب شکست در شکل 7 نیز با محور عمودی عدد 10 را نشان می‌دهد که با نتیجه شکل 6 و 7 در تطابق کامل است.

### ویژگی‌های کشسانی

قابلیت کشسانی به خاصیتی از ماده گفته می‌شود که به سبب آن ماده بعد از تجربه کردن فشردگی یا کشیدگی در اثر اعمال نیروی خارجی، به اندازه و شکل اولیه‌اش باز می‌گردد. نسبت میزان تغییر شکل ماده نسبت به اندازه اولیه‌اش، کرنش نامیده می‌شود اگر نیروی خارجی وارد شده خیلی قوی باشد ماده تغییر شکل دائم پیدا می‌کند و قانون هوک به شکل قبل دیگر به کار نمی‌رود. نسبت تنش به کرنش نیز ضریب کشسانی نامیده می‌شود [15]. با توجه به محاسبات انجام شده در این تحقیق یا ثابت‌های کشسانی ترکیب‌های  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  در ساختار مکعبی در حالت تعادل با استفاده از کد محاسباتی Wien2k برحسب گیگاپاسگال به دست آمده‌اند که در جدول 3 و 2 آورده شده است. لازم به ذکر است داده تجربی برای این محاسبات وجود ندارد.



با توجه به مقادیر حاصل برای ضریب پواسون می‌توان میزان سختی مواد را به‌خوبی بررسی کرد و بر اساس رابطه 5 ترکیب‌های مورد نظر در دسته مواد شکننده قرار می‌گیرند.

### نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از روش FP-LAPW خواص الکترونی، ساختاری اپتیکی و ثابت‌های کشسانی ترکیب‌های  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  و  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  مورد بررسی قرار گرفت. محاسبات با استفاده از تقریب GGA انجام شد. نتایج محاسبات گاف نواری بیانگر این است که هر دو ترکیب در حالت اسپین بالا رفتار فلزی داشته اما در حالت اسپین پایین گاف نواری غیر مستقیم برای  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  مقدار 0/439 الکترون ولت و برای  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  مقدار 0/217 الکترون ولت به دست آمد. در بررسی ویژگی‌های اپتیکی ضمن محاسبه ضریب شکست استاتیک و بررسی توابع دی‌الکتریک، نتایج هماهنگی با چگالی حالت‌ها به دست آمد و گاف نواری در حالت اپتیکی مشاهده نشد. ضرایب کشسانی بر اساس تقریب ویت-رئوس-هیل محاسبه شد و خواص کشسانی ترکیب‌های مورد نظر نیز مورد بررسی قرار گرفت.

### مرجع‌ها

- [1] T. Geaft, C. Felser, S.P. Parkin, *Heusler compounds: Applications in spintronics*, Springer Science+Business Media Dordrecht (2015) 1-24.
- [2] I. Galanakis, Ph. Mavropoulos, Spin-polarization and electronic properties of half-metallic Heusler alloys calculated from first principles, *Journal of Physics*, **19** 315213 (2007) 1-16.
- [3] H.C. Kandpal, G.H. Fecher, C. Felser, Calculated electronic and magnetic properties of the half-metallic, transition

به دست می‌آید و تقریب هیل نیز میانگینی از تقریب‌های ویت و رئوس می‌باشد. طبق نتایج حاصل از مدول یانگ، هر سه تقریب نتایج یکسانی را ارائه می‌دهند که با ساختار مکعبی و همسانگرد ترکیب‌های مورد نظر در تطابق است. هم‌چنین با توجه به مقادیر محاسبه شده مدول یانگ، ترکیب  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  در مقایسه با  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  از استحکام بیشتری برخوردار است.

### سختی یا نرمی مواد

میزان سنجش سختی و نرمی مواد به دو روش انجام می‌پذیرد. در روش اول، نسبت مدول حجمی به مدول برشی، قابلیت چکش‌خواری را به ما نتیجه می‌دهد. هر چه این نسبت بالاتر باشد خاصیت چکش‌خواری و شکل‌پذیری ماده بیشتر است. نتایج در جدول 5 آورده شده است.

جدول 5: نسبت مدول حجمی به مدول برشی

ترکیب	$\frac{B_H}{G_H}$
$\text{Co}_2\text{CrAl}$	2/33
$\text{Co}_2\text{CrGa}$	2/56

روش دوم برای بررسی میزان سختی و نرمی مواد استفاده از ضریب پواسون است. در واقع ضریب پواسون برای مواد شکننده بسیار کوچک است و برای موادی با خاصیت مفتول‌شدگی به طول معمول برابر 0/33 است [16]. رابطه ضریب پواسون به صورت زیر است:

$$\gamma = \frac{3B - 2G_H}{2(3B + 2G_H)} \quad 5$$

مقادیر به دست آمده برای ضریب پواسون در جدول 6 آورده شده است.

جدول 6: ضرایب پواسون محاسبه شده

ترکیب	ضریب پواسون
$\text{Co}_2\text{CrAl}$	0/25
$\text{Co}_2\text{CrGa}$	0/29

- [12] P. Blaha, Wien97, Vienna University of Technology, 1997. Improved and updated Unix version of the original copyrighted Wien code, which was published by P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, and SB Trickey, *Computer Physics Communications* **59** (1990) 399-568.
- [13] G. Dresselhaus, M. Dresselhaus, Optical properties of solids, Proceedings of the International School of Physics Enrico Fermi, *J. Tauc, Editor, Academic Press. NY*, (1966).
- [14] M.P. Michael, Condensed matter physics John Wiley & Sons (2010).
- [15] C. Ambrosch-Draxl, J.O. Sofo, Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented planewavemethod, *Computer Physics Communications* **175** (2006) 1-14.
- metal based Heusler compounds, *Journal of physics*, **40** (2006) 1507-1523.
- [4] F.D. Murnaghan, Acad-sci. USA (1994) 30244-30256.
- [5] E.I. Shreder, A.D. Svyazhin, K.A. Belozerova, Optical properties of Heusler Alloys  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  and  $\text{Co}_2\text{CrGa}$ , *Electrical and magnetic properties* **114** (2013) 982-987.
- [6] Y. Li, H. Yuhan, J. Xia, G. Zhang, M. Zhong, A. Kuang, G. Wang, X. Zheng, H. Chen, First-principles study on structural, electronic, elastic and thermodynamic properties of the full-Heusler alloys  $\text{Co}_2\text{YZ}$  ( $\text{Y}=\text{Sc}, \text{Cr}$  and  $\text{Z}=\text{Al}, \text{Ga}$ ), *The European physical Journal Applied Physics*, **70** 31001 (2015) 1-24.
- [7] D.P. Rai, A. Shankar, A. Sandeep, M.P. Ghimire, R.K. Thapa, Electronic structure and magnetic properties of  $\text{Co}_2\text{YZ}$  ( $\text{Y}=\text{Cr}$ ,  $\text{Z}=\text{Al}, \text{Ga}$ ) type Heusler compounds; A first principle study, *International journal of modern physics* **26** (2012) 1250071.
- [8] N.I. Kourov, V.V. Marchenkov, V.G. Pushin, K.A. Belozerova, Electrical properties of ferromagnetic  $\text{Ni}_2\text{MnGa}$  and  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  Heusler alloys, *Journal of experimental and theoretical physics* **117** (2013) 121-125.
- [9] D.P. Rai, R.K. Thapa, An investigation of semiconducting behavior in the minority spin of  $\text{Co}_2\text{CrZ}$  ( $\text{Z}=\text{Ga}, \text{Ge}, \text{As}$ ): LSDA and LSDA+U method, *Journal of alloys and compounds* **542** (2012) 257-263.
- [10] M. Zhang, Z. Liu, H. Hu, G. Liu, Y. Cui, J. Chen, G. Wu, X. Zhang, X. Zhang, G. Xiao, Is Heusler compound  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  a half-metallic ferromagnet: electronic band structure and transport properties, *Journal of magnetism and magnetic materials* **277** (2004) 130-135.
- [11] A.P. Boreis, R.J. Schmidt, O.M. Sidebottom, Advanced mechanics of materials, **6** New York: Wiley (1993).