

Study the properties of electronic structure of Nb₃Ga Superconductor by Using Ab initio Method

H. Salehi¹
H. Tolabi Nejad²
M. Einhesari²

Received: 2012.7.4
Accepted: 2013.1.28

Abstract

In this paper the band structure, density of state and charge density of Nb₃Ga in cubic phase has been studied. The calculations have been performed using PWscf method in the framework of density functional theory by Espresso package. The results are in good agreement with other results.

Keywords: Band structure, Density functional theory, Nb₃Ga, PWscf

¹ Assistant Professor, Shahid Chamran University, Ahwaz, salehi_h@scu.ac.ir
² M. Sc. Student, Shahid Chamran University, Ahwaz

مجله فیزیک کاربردی دانشگاه الزهراء (س)

شماره ۱، بهار و تابستان ۱۳۹۲

مطالعه ویژگی‌های ساختار الکترونی ابررسانای Nb_3Ga به روش ابتدا به ساکن

حمدا... صالحی^۱

حسین طولابی نژاد^۲

محمد عین حصاری^۲

تاریخ دریافت: ۹۱/۴/۱۳

تاریخ تصویب: ۹۱/۱۱/۹

چکیده

در این مقاله ساختار نواری، چگالی حالت‌ها و چگالی ابر الکترونی ترکیب Nb_3Ga در فاز مکعبی مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت خود سازگار (PWscf) در چارچوب نظریه تابعی چگالی توسط بسته نرم‌افزاری Espresso انجام شده است و نتایج به دست آمده سازگاری خوبی با نتایج دیگر محاسبات دارد.

واژه‌های کلیدی: ساختار نواری، تابعی چگالی، Nb_3Ga ، PWscf

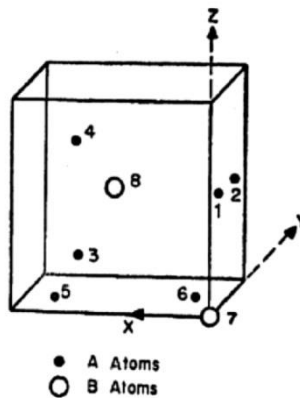
^۱استاد گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران، اهواز؛ salehi_h@scu.ac.ir

^۲دانشجوی کارشناسی ارشد فیزیک، دانشگاه شهید چمران، اهواز.

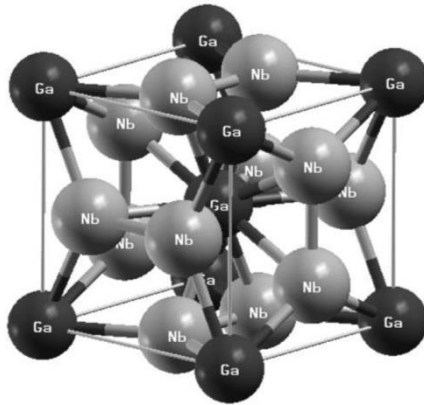
۱- مقدمه

ترکیب Nb₃Ga با نام شیمیایی نیوبیوم گالاید در دمای ۲۵°C در حالت جامد پایدار و دمای ذوب آن ۶۶۰°C می‌باشد [۱]. ترکیب Nb₃Ga دارای دمای گذار ابررسانایی، T_c، در حدود ۲۰ کلوین است، که بالاترین دمای گذار در بین ابررساناهای Nb₃Sn (T_c ۱۷/۷) می‌باشد و دارای میدان شکست بالایی است. از این رو دارای خواص جالب آن موضوع تعداد زیادی از تحقیقات علمی در سال‌های اخیر بوده است [۲].

تمام آلیاژهای Nb₃Ga دارای خاصیت ابررسانایی هستند. میزان حلالیت گالیوم در نیوبیوم در دمای ۸۰۰°C در حدود ۹ wt% است و این میزان با بالا رفتن دما تا مقدار ۱۶ wt% نیز افزایش می‌یابد. این وابستگی به دما در آلیاژهای نیوبیوم با قلع و یا وانادیوم با گالیوم نیز مشاهده شده است. به دلیل J_c پائین و T_c معمولی این ترکیب با روش‌های ساخت مختلف، در سال‌های اخیر مانع از گسترش Nb₃Ga شده است. در حال حاضر استوکیومتری Nb₃Ga با مرتبه دور برد خوب دمای گذار ۲۰/۷ کلوین و میدان شکست، H_c، برابر با ۳۰ تسلا در دمای ۴/۲ کلوین را نشان می‌دهد [۳]. این ترکیب در حالت جامد در فاز مکعبی مرکز سطحی با گروه فضایی Pm $\bar{3}$ m، ۲۲۳ و دارای ساختار A15 یا A3B می‌باشد [۴ و ۵]. شاخص پیرسون برای این ابررسانا cP8 است [۶]. سلول واحد آن دارای ۸ اتم می‌باشد (شکل ۱) [۷]. شکل (۲) نیز سلول واحد رسم شده را در این کار نشان می‌دهد [۸].



شکل ۱: سلول واحد Nb₃Ga: A=Nb و B=Ga



شکل ۲: ساختار بلوری ترکیب Nb_3Ga توسط نرم افزار Xcrysden

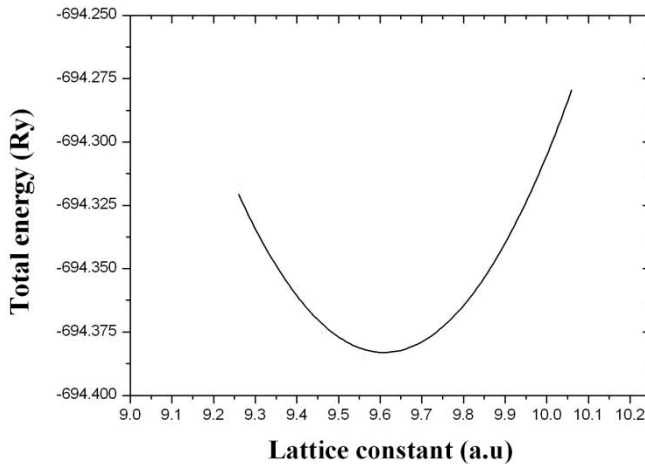
۲- محاسبات

محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی و حل معادلات کوهن-شم با استفاده از پایه‌های موج تخت توسط بسته نرم‌افزاری اسپرسو انجام می‌گیرد [۹]. از آنجا که در روش تابعی چگالی به روش موج تخت، حجم محاسبات بالاست شبه پتانسیلی که بتواند خواص بلور را توصیف کند و حجم محاسبات را کاهش دهد از اهمیت بالایی برخوردار است. لذا در این مقاله برای ساخت شبه پتانسیل از روش شبه پتانسیل بقاء نرم استفاده شده است. ثابت شبکه‌ای که در این محاسبات از آن استفاده شده است برابر با $5/168$ آنگستروم می‌باشد. همگرایی را بر مبنای انرژی قرار دادیم که با 6 چرخه و با دقت 1×10^{-6} ریدبرگ به همگرایی رسیدیم. نمونه برداری از منطقه بریلوئن با یک توزیع $8 \times 8 \times 8$ از نقاط k و با روش دونخورست-پک صورت گرفته است. از آنجا که برای توصیف ساختار Nb_3Ga فقط به یک پارامتر نیاز داریم با شبه پتانسیل‌های تولید شده و پس از حل معادلات خودسازگار کوهن-شم، ویژه مقادیر همگرا شده انرژی ساختار را برای پارامترهای مختلف شبکه محاسبه کردیم. از طرف دیگر برای شروع محاسبات با این نرم‌افزار ابتدا باید برخی از پارامترها را بهینه کنیم. یکی از این پارامترها که باید در شروع کار بهینه شود نحوه انتخاب انرژی قطع است که بعد از انجام محاسبات لازم مقدار آن را 27 ریدبرگ را بدست آوردیم.

۳- نتایج

۳-۱- ساختار الکترونی

پارامتر مهم در این محاسبات، ثابت شبکه است که با توجه به مقادیر تجربی آن، جهت تایید دوباره آن را محاسبه می‌کنیم. در این محاسبات انرژی قطع را برابر ۲۷ ری‌دبرگ انتخاب نمودیم. پارامتر شبکه بلور Nb₃Ga را با استفاده از کد PWscf محاسبه کردیم. در شکل (۳) نمودار انرژی بر حسب پارامتر شبکه a رسم شده است که با توجه به شکل، مقدار کمینه آن به عنوان پارامتر شبکه انتخاب می‌شود. مقدار کمینه پارامتر شبکه ۵/۳۸۱ آنگستروم به دست می‌آید که با مقدار تجربی ۵/۱۷۱ سازگاری خوبی دارد [۱۰]. نتایج به دست آمده در این کار و نتایج دیگران در جدول (۱) آمده است شکل (۳) نمودار انرژی کل بلور بر حسب تغییرات پارامتر شبکه رانشان می‌دهد.



شکل ۳: نمودار انرژی کل بر حسب پارامتر شبکه a

از آنجا که همیشه حالت با کمترین انرژی، حالت تعادل می‌باشد، هدف از رسم این نمودار تعیین حجم یاخته قراردادی ترکیب به ازای کمترین مقدار انرژی است. از طرفی با استفاده از شیب این نمودار می‌توان مدول حجمی را محاسبه کرد. این کمیت معیاری برای

سنجش سختی بلور و برابر عکس تراکم پذیری است. چون محاسبات در دمای صفر انجام می‌گیرد و آنتروپی ثابت است. بنابراین داریم [۱۱]:

$$B = \frac{d^2U}{dV^2} \quad (۱)$$

که در آن V حجم بلور و U انرژی است. هر چه مدول حجمی بیشتر باشد، بلور سخت‌تر است و تراکم‌پذیری آن کمتر مشاهده می‌کنیم که مدول حجمی Nb_3Ga برابر ۱۲۲ GPa می‌باشد که مقدار نسبتاً بالایی دارد و در مقایسه با مقدار محاسبه شده در [۱۰] از دقت خوبی برخوردار است.

جدول ۱: پارامترهای ساختاری محاسبه شده در این کار و نتایج دیگران

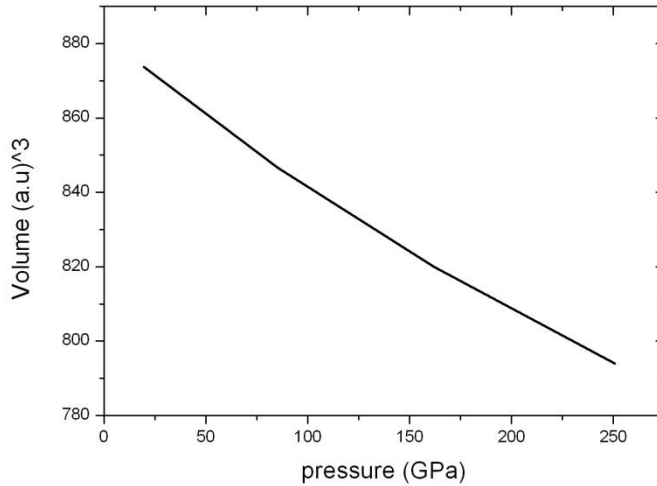
کار دیگران [۱۰]	کار حاضر	کمیت‌های محاسبه شده
۵/۱۷۱	۵/۰۷۶	(A^0) پارامتر شبکه
۱۳۸/۲۶۸	۱۳۰/۸۰۴	$(A^0)^3$ حجم کیمینه
۱۵۶	۱۸۶/۳	مدول حجمی (GPa)
-	۴/۳۶	مشتق مدول حجمی
۱۸/۲۳	۱۳	چگالی حالت در انرژی فرمی (state/eV.cell)

۲-۳- بررسی تأثیر فشار بر روی ساختار Nb_3Ga

برای بررسی تأثیر فشار روی ساختار Nb_3Ga مکعبی، وابستگی حجم به فشار را از معادله حالت مورناگون به دست می‌آوریم. برای بدین منظور از معادله نسبت به حجم مشتق و سپس با توجه به رابطه ترمودینامیکی $dE = -PdV$ وابستگی حجم به فشار را به صورت زیر بدست می‌آوریم [۱۲]:

$$V(p) = V_0 \left[\left(\frac{B}{B_0} \right) P + 1 \right]^{-1/B} \quad (۴)$$

مقادیر اولیه V_0 ، B و B_0 را با توجه به جدول (۱) در معادله (۳) جایگذاری می‌کنیم نمودار وابستگی حجم به فشار در بازه ۰-۲۵۰ در شکل (۴) نشان داده شده است.

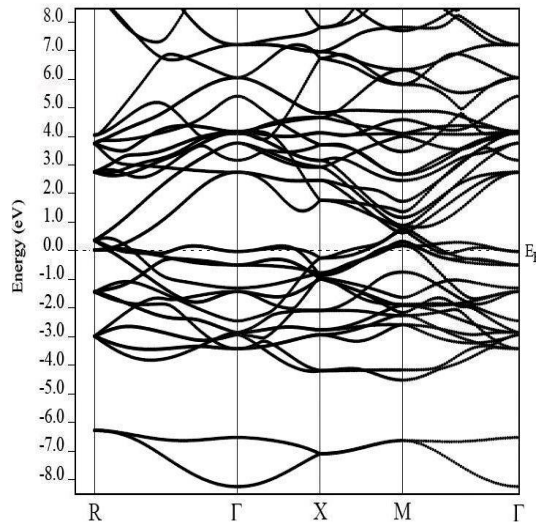


شکل ۴: تغییرات حجم سلول واحد ترکیب Nb₃Ga بر حسب فشار

۳-۳- ساختار نوارهای انرژی

ساختار نوارهای انرژی Nb₃Ga در راستای خطوط تقارنی مختلف در شکل (۵) رسم شده است. از این نمودار می‌توان اطلاعاتی در مورد ماهیت بلور از لحاظ فلزی یا غیرفلزی بودن، اندازه گاف انرژی در صورت وجود و نوع آن از لحاظ مستقیم یا غیر مستقیم بودن و نحوه توزیع حالت‌های الکترونی در انرژی‌های مختلف و ... به دست آورد.

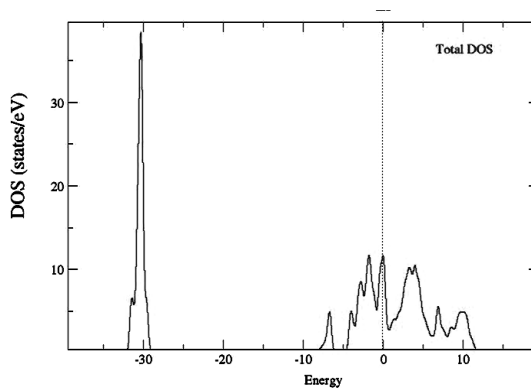
در انجام این محاسبات از ۲۰ نقطه استفاده شده است که با روش خودسازگار به همگرایی رسیده‌اند. در اجرای برنامه همگرایی انرژی را مد نظر قرار دادیم که با ۶ چرخه و با اختلاف انرژی از مرتبه 10^{-6} ریدبرگ به این همگرایی رسیدیم. در این منحنی انرژی فرمی در مبدأ مختصات قرار دارد و مقیاس انرژی بر حسب الکترون ولت است. همانگونه که شکل (۵) نشان می‌دهد سطح انرژی فرمی نوارهای انرژی متفاوتی را قطع می‌کند که دلالت بر خاصیت فلزی ماده دارد. همچنین چگالی حالت‌ها بیانگر این است که مشارکت عمده اربیتال‌های Nb ۴s و Ga ۲p در بالای نوار ظرفیت و در ته نوار رسانش است. نتایج بدست آمده با روش شبه پتانسیل سازگاری خوبی با دیگر نتایج دارد [۱۰].



شکل ۵: نمودار ساختار نوارهای انرژی ترکیب Nb₃Ga

۳-۴ چگالی حالت‌ها

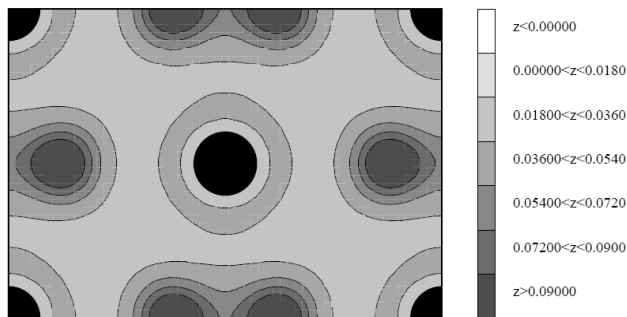
توزیع الکترون در طیف انرژی توسط چگالی حالت‌ها توصیف می‌شود. طیف چگالی حالت‌های کل Nb₃Ga بر حسب انرژی در گستره ۴۰- الکترون ولت تا ۲۰ الکترون ولت در شکل (۶) رسم شده است. در این نمودار مقیاس انرژی صفر نشان‌دهنده تراز فرمی است. همچنین عدم فاصله در تراز فرمی بیانگر خاصیت فلزی این ترکیب است که با نتایج به دست آمده در شکل (۳) سازگاری دارد.



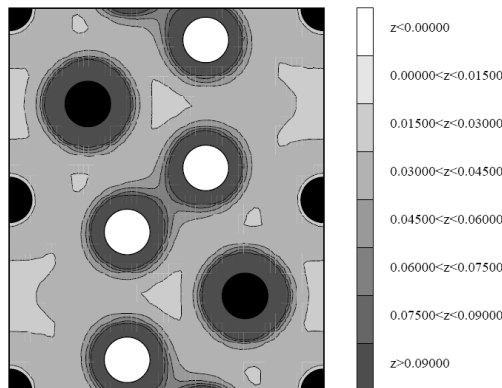
شکل ۶: چگالی حالت‌های کل Nb₃Ga بر حسب انرژی

۳-۵- چگالی ابرالکترونی

چگالی ابرالکترونی که همان چگالی بار است، در واقع نحوه توزیع بار در اطراف اتم‌ها را نشان می‌دهد. با توجه به میزان توزیع بار در اطراف اتم‌ها می‌توان نوع پیوند بین آن‌ها را تعیین کرد. تراکم زیاد الکترون بین دو اتم نشان‌دهنده قوی بودن پیوند بین آن‌هاست و تراکم کمتر الکترون بین دو اتم پیوند ضعیف‌تری را بین آن‌ها نشان می‌دهد. چگالی ابرالکترونی ترکیب Nb₃Ga در فاز مکعبی در صفحه (۱۱۰) در شکل (۷) و در صفحه (۱۰۰) در شکل (۸) نشان داده شده است. با توجه به وجود کاتیون Ga⁺³ و آنیون Nb⁻³ بین اتم‌های نیوبوم و گالیوم پیوند قوی کووالانسی برقرار است.



شکل ۶: چگالی ابرالکترونی ترکیب Nb₃Ga در صفحه (۱۱۰)



شکل ۷: چگالی ابرالکترونی ترکیب Nb₃Ga در صفحه (۱۱۰)

۴- نتیجه گیری

محاسبات انجام شده بر روی ویژگی‌های ساختار الکترونی این ترکیب نشان می‌دهد که درجه مشارکت Nb به طور محسوسی هم در نوار رسانش و هم در نوار ظرفیت بیشتر از اتم Ga است. نتایج به دست آمده سازگاری خوبی با دیگر نتایج دارد.

۵- منابع

- [1] Internet; <http://www.freepatentsonline.com>
- [2] K. Inoue, A. Kikuchi, Y. Yoshida, and Y. Iijima; "A new practical superconductor: rapidly heated and quenched Nb₃Ga wire" *Physica C* **384**, No. 3 (2003) 267–273.
- [3] A. V. Narlikar; "*Frontiers in Superconducting Materials*"; Springer Berlin Heidelberg (2005).
- [4] C. P. Poole, Jr; "*Handbook of Superconductivity*"; Academic Press (2000).
- [5] F. J. Owens and C. P. Poole, Jr; "*The New Superconductor*"; Kluwer Academic Publishers. (2002).
- [6] W. B. Pearson; "*A Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals and Alloys*"; Pergamon Press (1985).
- [7] J. Philip and C. S. Menon; "Inter-lattice displacements and elastic constants of the A-15 compounds V₃Si, V₃Ga and Nb₃Sn"; *Pramana - J. Phys.* **10**, No. 3 (1977) 311.
- [8] Internet; <http://www.xcrysden.org>
- [9] Internet; <http://www.quantum-espresso.org>
- [10] C. Paduani, J. A. Valcanover, J. D. Ardisson, C. A. Samudio Pérez, M. I. Yoshida, "Characterization of the structural and magnetic properties of Nd₁₆Co_{76-x}Ru_xC₇B alloys"; *Brazilian Journal of Physics* **37**, No. 3b (2007).
- [11] F. Birch; *Phys. Rev.* **71** (1947) 809–824.
- [12] H. Salehi; *India Journal of Physics* **80**, No. 12 (2006) 1167-1246.