

## $Sr_xVO_{3-x}FeAs$

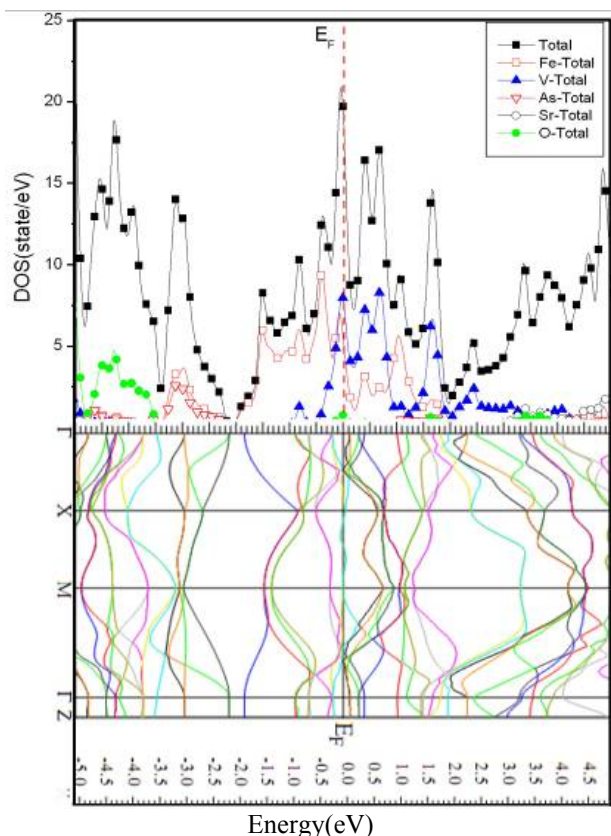
maria.jami81@gmail.com :

(FP-LAPW)	$Sr_xVO_{3-x}FeAs$ (GGA)	$C_V/T$	$N(E_F)$ DFT
			:

ابرسانایی و مغناطیس وجود دارد و مجموعه‌ای از نتایج مشاهده شده در این مورد باعث نظریات فراوانی درباره مشخصات اصلی این ابرساناها می‌شود [۴-۷]. در مورد ابرسانای نوع آهن  $Sr_xVO_{3-x}FeAs$  خواص مغناطیسی چندانی گزارش نشده است [۸-۹].

$Sr_xVO_{3-x}FeAs$  یک مشخصه ممتاز در رسیدگی ابرسانای پایه آهن به علت یک پوسته باز و دولایه فلزی یون V بین لایه-های  $FeAs$ ، با ثابت شبکه  $c=15/7 \text{ \AA}$  است. تفاوت ابرسانای  $Sr_xVO_{3-x}FeAs$  در دمای بالا (۳۷K) نسبت به دیگر کلاس‌های ابرسانا با پایه Fe، وجود ابرسانایی این ماده بدون نیاز به آلاییدن یا فشار می‌باشد [۹]. از آنجا که این ابرسانا جدیداً کشف شده است بررسی تجربی و تئوری آن اخیراً مورد توجه قرار گرفته است. در این مقاله نتایجی درباره خواص الکترونیکی این ترکیب ارائه شده است.

پس از کشف ابرسانایی در دمای ۲۶K در اکسیژن-آرسناید  $LaFeAsO_{1-x}F_x$ ، جستجوی ابرساناهای جدید در این کلاس بسیار مورد توجه قرار گرفت. ابرساناهایی با ساختارهای مختلف،  $T_c$  را تا دمای ۵۶K-۵۵ [۱-۳] در آرسناید-اکسیژن-آهن آلاییده ( $LnFeAsO$ ) آلاییده با آهن، که فاز ۱۱۱۱ نامیده می‌شود) بالا برده‌اند. اخیراً زو در سال ۲۰۰۹ ابرسانای ترکیب  $Sr_xVO_{3-x}FeAs$  با  $T_c=37K$  را کشف کرد و به‌طور استثنایی از اندازه‌گیری ضریب هال استنباط کرد که حامل بار شبه الکترون‌ها هستند و پیشنهاد کرد که دمای قوی وابسته به این ضریب ممکن است به خاطر مشخصه چند بانندی آن باشد [۶]. در  $Sr_xVO_{3-x}FeAs$ ، هیچ نشانه‌ای از نظم مغناطیسی حتی در دماهای قوی وابسته به قابلیت جذب، وجود ندارد. در بیشتر ابرسانای نوع آهن رقابت واضحی بین



شکل ۱. چگالی حالت‌ها و ساختار نواری ترکیب  $\text{Sr}_3\text{VO}_7\text{FeAs}$ .

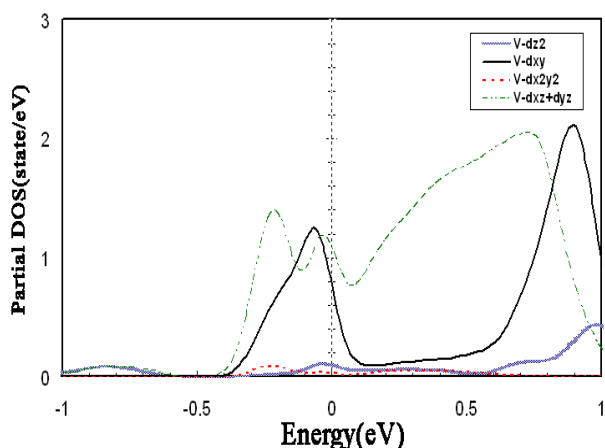
ترکیب را نشان می‌دهد. نقاط و امتدادهای با تقارن بالا در شکل ۳ دیده می‌شوند. بیشترین سهم در تراز فرمی و نزدیک آن مربوط به اربیتال‌های  $3d$  اتم‌های  $\text{Fe}$  و  $\text{V}$  است. انرژی فرمی در شکل ۱ به صورت خط چین نشان داده شده است. تعداد حالت‌ها در واحد انرژی در انرژی فرمی  $17/45 \text{ State/eV}$  است. از این مقدار ۴۲ درصد مربوط به اتم‌های  $\text{V}$ ، ۲۷ درصد مربوط به اتم‌های  $\text{Fe}$  و ۴ درصد مربوط به اتم‌های اکسیژن می‌باشد. این در حالی است که لی و پیکت در کاری تئوری به وسیله تقریب چگالی موضعی (LDA)، برای محاسبه جمله همبسته-تبادلی، مقدار  $11/2 \text{ State/eV}$  را برای  $N(E_F)$  به دست آورده‌اند. همچنین درصد مشارکت اتم  $\text{V}$  را در چگالی حالت‌های کل حدود ۶۰ درصد تخمین زده‌اند [۸]. در هر صورت نکته قابل توجه این است که اتم‌های  $\text{V}$ ، مؤثرترین سهم را در چگالی حالت‌ها در تراز فرمی و در ابررسانایی این ترکیب دارند. از مقایسه ساختار نواری با چگالی حالت‌ها نیز می‌توان

جدول ۱. جایگاه اتمی ابررسانای  $\text{Sr}_3\text{VO}_7\text{FeAs}$ .

اتم	جایگاه بلوری	جایگاه اتمی [۸-۹]	$R_{MT}(\text{a.u.})$
V	2c	(0/2500, 0/2500, 0/3082)	1/93
Fe	2a	(0/2500, 0/7500, 0/0000)	2/42
Sr	2c	(0/7500, 0/7500, 0/1903)	2/26
Sr	2c	(0/7500, 0/7500, 0/4145)	2/26
As	2c	(0/2500, 0/2500, 0/0909)	2/14
O	4f	(0/2500, 0/7500, 0/2922)	1/71
O	2c	(0/2500, 0/2500, 0/4318)	1/71

محاسبات این مقاله در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT)، تحت تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA)، با روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی (FP-LAPW) صورت گرفته است [۱۰-۱۱]. به علت کشف اخیر این ابررسانا تا کنون بررسی تجربی خواص الکترونیکی آن به صورت کامل انجام نشده است و در محاسبات تئوری نیز فقط با تقریب چگالی موضعی (LDA) محاسبه شده است [۸]. با توجه به این نکات و تقریب انتخاب شده این مقاله مناسب‌ترین تقریب برای مقایسه با نتایج دیگران می‌باشد. انرژی جدایی بین الکترون‌های ظرفیت و مغزی  $6/\text{Ryd}$  در نظر گرفته شده است. تعداد نقاط  $k$  در اولین منطقه بریلوئن ۱۰۰۰ نقطه،  $Rk_{max}$  برابر ۵ و معیار همگرایی بر اساس نیرو در نظر گرفته شده است.  $\text{Sr}_3\text{VO}_7\text{FeAs}$  در گروه فضایی  $P4/nmm$  تبلور می‌شود و دارای ساختار تتراگونال با ثوابت شبکه  $a=b=3/9296 \text{ \AA}$  و  $c=15/6732 \text{ \AA}$  است [۸-۹]. شعاع کره‌های مافین-تین و جایگاه‌های اتمی این ترکیب در جدول ۱ خلاصه شده است.

یکی از پارامترهای مهم در بررسی خواص ابررسانایی، چگالی حالت‌ها در نزدیکی و در سطح فرمی است. شکل ۱ چگالی حالت‌های کل ترکیب و سهم چگالی‌های کل هر یک از اتم‌های



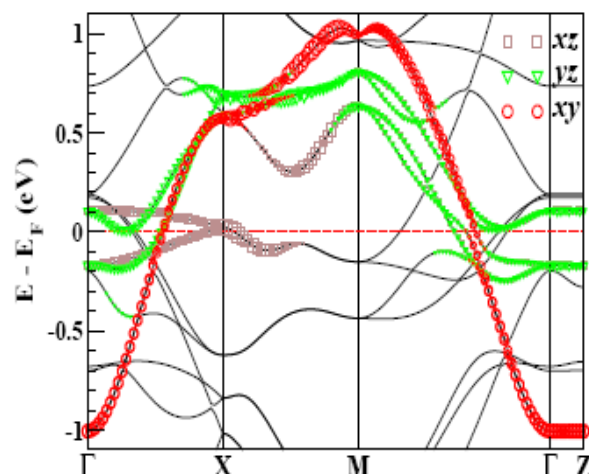
شکل ۳. چگالی حالت‌های جزئی اوربیتال ۳d اتم V.

بنابراین، این مقدار تخمینی به همراه مقادیر ظرفیت گرمایی فونونی و شبکه می‌تواند در بررسی نسبت تغییرات  $m^*/m$  به صورت تجربی مفید باشد.

با استفاده از چگالی ابر الکترونی در صفحات بلوری می‌توانیم نوع پیوند بین اتم‌ها در ترکیب را بررسی نمود. شکل‌های ۴ و ۵ و ۶ چگالی ابر الکترونی اتم‌ها را به ترتیب در صفحات (۰۴۰)، (۰۰۳) و (۱۱۰) نشان می‌دهند. از کشیدگی ابر الکترونی بین اتم‌های O و V در صفحه (۰۴۰) می‌توان استنباط کرد که نوع پیوند بین V-O به صورت کووالانی است.

چگالی ابر الکترونی در صفحه (۰۰۳) نیز مؤکد این موضوع می‌باشد. اتم Sr در جهت محور C به صورت جزئی ابر الکترونی O را به سوی خود جذب کرده است. همچنین می‌توان مشاهده کرد که در پیوند Sr-Sr اتم‌ها ساختار ابر الکترونی یونی خود را حفظ کرده‌اند بنابراین نوع پیوند بین Sr-Sr یونی قوی و Sr-O یونی است. از سوی دیگر اتم‌های Fe توانسته‌اند به طور مشخص ابر الکترونی اتم As را به سوی خود جذب کنند که نشان‌دهنده مشخصه کووالانسی پیوند در Fe-As است.

چگالی ابر الکترونی در صفحه (۱۱۰) بر پیوند کووالانسی قوی V-O و پیوند یونی قوی Sr-Sr و Sr-O تأکید می‌کند همچنین این صفحه مشخص می‌کند که نوع پیوند در Sr-As یونی قوی است.

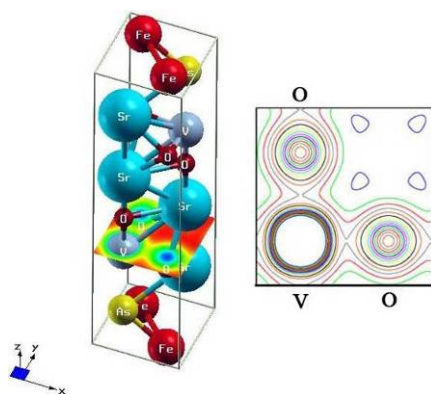


شکل ۴. نوارهای انرژی اوربیتال ۳d اتم V.

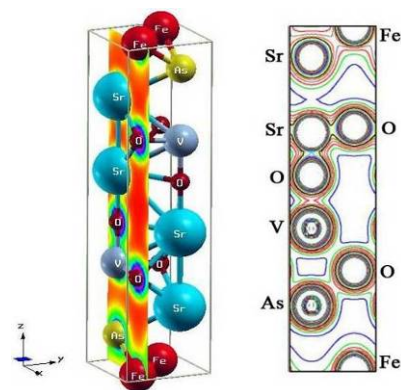
مشاهده کرد که تعداد نوارها در فاصله بین انرژی  $-1\text{eV}$  تا  $1\text{eV}$  نسبتاً بالا است. نکته قابل توجه در مورد ساختار نواری وجود نوارهای تخت در راستای  $\Gamma-Z$  است که می‌تواند دلیلی برای ابرسانایی در دمای بالا برای این ترکیب باشد. اوربیتال‌های  $d_{xz}$  و  $d_{yz}$  اتم V در نزدیکی  $0.3\text{eV}$  به پهنای حدود  $1\text{eV}$  و اوربیتال  $d_{xy}$  این اتم در حدود  $E_F$  متمرکز شده‌اند که در تطابق با نتایج دیگران [۸] است. نوارهای انرژی مربوط به این اوربیتال‌ها با دایره‌هایی بر روی منحنی‌های شکل ۲ تمیز داده شده‌اند. همچنین در محاسبات چگالی حالت‌های جزئی مشاهده شد که اوربیتال‌های  $d_{xy}$  به صورت کامل از یکدیگر جدا شده‌اند. در مطالعه نوارهای انرژی اتم Fe توسط لی و پیکت سهم اوربیتال  $d_{xz-yz}$  در اطراف  $E_F$  با عرض  $1\text{eV}$  مشاهده می‌شود [۸]. همچنین یک گاف تونل زنی در حدود  $0.4\text{eV}$  از ذره X به نقطه ما بین دو ذره X و M نیز با توجه به شکل مشاهده می‌شود. از آنجایی که محاسبات برای حالت پایه انجام می‌گیرد، می‌توانیم بر اساس رابطه ظرفیت گرمایی در حجم ثابت و داشتن تعداد حالت‌ها در انرژی فرمی مقدار  $\gamma$  را تخمین زد:

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} N(E_F) K_B^2 T = \gamma T \quad (1)$$

مقدار محاسبه شده برای  $\gamma$  در حدود  $(50/56) \text{ mJ/mol.K}^2$  است. با این مقدار می‌توان سهم ظرفیت گرمایی را در دمای بحرانی  $T_c$  محاسبه کرد. این مقدار برای  $T_c=37\text{K}$  در این ترکیب حدود  $(1880) \text{ mJ/mol.K}$  تخمین زده شده است.



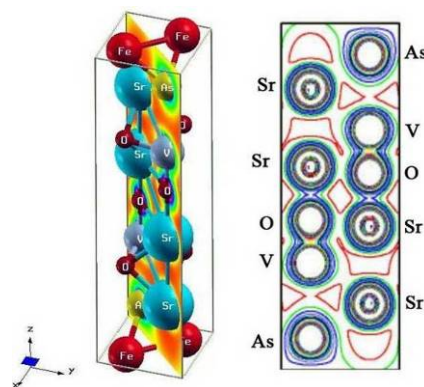
شکل ۵. چگالی ابر الکترونی در صفحه (۰۰۳).



شکل ۴. چگالی ابر الکترونی در صفحه (۰۴۰).

جدول ۲. طول پیوند در  $\text{Sr}_2\text{VO}_7\text{FeAs}$ .

پیوند	جهت	طول پیوند در کار حاضر	طول پیوند محاسبه شده [۹]
V-O	c	$1/9387 \text{ \AA}$	$1/94 \text{ \AA}$
V-O	ab	$1/9805 \text{ \AA}$	$1/98 \text{ \AA}$
Fe-Fe	ab	$2/7786 \text{ \AA}$	$2/78 \text{ \AA}$



شکل ۶. ابر الکترونی در صفحه (۱۱۰).

می‌تواند دلیلی بر دمای ابررسانایی بالای این ترکیب باشد. با به دست آوردن مقدار چگالی حالت‌ها در انرژی فرمی مقدار  $\gamma$  در حالت پایه محاسبه شد. بررسی چگالی ابر الکترونی در صفحات (۰۴۰)، (۰۰۳) و (۱۱۰) نشان می‌دهد که نوع پیوندها بین V-O و Fe-As به صورت کوالانسی است در صورتی که نوع پیوند بین Sr-O و Sr-As یونی می‌باشد. مقدار طول پیوندهای محاسبه شده با نتایج دیگران توافق بسیار خوبی دارد. ولی به علت کشف این ابررسانا در سال ۲۰۰۹ امکان مقایسه تمامی نتایج با کارهای دیگران در حال حاضر میسر نمی‌باشد.

در جدول ۲ طول پیوند در برخی پیوندها همراه با مقایسه تئوری دیگران خلاصه شده است. طول پیوندهای محاسبه شده در کار حاضر در توافق بسیار خوبی با نتایج دیگران است.

بر اساس چگالی حالت‌های کل مشخص شد که بیشترین سهم در چگالی حالت‌ها در انرژی فرمی مربوط به اتم‌های وانادیوم و آهن است و سهم اتم‌های وانادیوم بیشتر از آهن می‌باشد. بررسی نوارهای انرژی این ترکیب نشان می‌دهد که نوارهای انرژی در راستای  $\Gamma-Z$  به صورت تقریباً تخت است و این

Lograsso, A I Goldman, and P C Canfield, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 024516.

- M S Torikachvili, S L Budko, N Ni and P C Canfield, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 104527.
- A S Sefat, R Jin, M A Mcguire, B C Sales, D J Singh

- T Park, E Park, H Lee, T Klimczuk, E D Bauer, F Ronning and J D Thompson, *Condens. Matter* **20** (2008) 322204.
- J Q Yan, A Kreyssig, S Nandi, N Ni, S L Bud'ko, A Kracher, R J McQueeney, R W McCallum, T A

8. K W Lee, W E Pickett, *arXiv:0908.2698v2* (2009).
9. X Zhu, F Han, G Mu, P Cheng, B Shen, B Zeng and H H Wen, *arXiv:0904.1732v5*(2009).
10. P Blaha, D Singh, P I Sarrantin and K Schwarz, *Phys. Rev B* **46** (1992) 1321-1325.
11. P Blaha, D Singh and K Schwarz, Wien2k.Vienna University of Technology Austria (2002). [www.wien2k.at](http://www.wien2k.at).
5. D R Parker, M J Pitcher, P J Baker, I Franke, T Lancaster, S T Blundell and S J Clark, *Chem. Comm.* **2189** (2009).
6. G F Chen, W Z Hu, J L Luo and N L Wang, *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 227004.
7. H Kotegawa, S Masaki, Y Awai, H Tou, Y Mizuguchi and Y Takano, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77** (2008) 113703.