

بررسی خواص الاستیک، مکانیکی، الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیب نیم هویسلر NbBiCs به روش نظریه تابعی چگالی

حامد رضازاده*

استادیار، گروه فیزیک، واحد نورآباد ممسنی، دانشگاه آزاد اسلامی، نورآباد ممسنی، ایران

تاریخ دریافت: 1401/04/01 تاریخ پذیرش: 1401/06/31

Investigation of the Elastic, Mechanical, Electronic, Magnetic and Optical Properties of NbBiCs Half-Heusler by Density Functional Theory Method

H. Rezazadeh*

Assistant Professor, Department of Physics, Nourabad Mamasani Branch, Islamic Azad University, Nourabad Mamasani, Iran

Received: 2022/06/22 Accepted: 2022/09/25

چکیده

Abstract

We predicted using density functional theory (DFT) that half-Heusler alloy NbBiCs to be potential candidate for using in spintronic and optoelectronic devices. Using first principle calculations based on density functional theory within generalized gradient approximation (GGA), we studied the elastic, mechanical, electronic, magnetic and optical properties of NbBiCs half-Heusler alloy in bulk state. Spin polarization at Fermi level is 97.6% and 100% within GGA and GGA+mBJ, respectively. The real part of the dielectric function for half-Heusler alloy NbBiCs in α phase for energies greater than 20eV converge to one, indicating that it act as an isotropic insulator and also the refractive index for energies greater than 7.5 eV is less than one, indicating super-luminescence.

Keywords

Spintronic, DFT, Heusler Alloy, Half-Metallicity

با استفاده از نظریه تابعی چگالی پیش‌بینی شد که آلیاژ نیم هویسلر NbBiCs می‌تواند کاندیدای بالقوه‌ای برای به کار رفتن وسایل در وسایل اسپینترونیکی و اپتوالکترونیک باشد. با استفاده از محاسبات اصول اولیه بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT) با تقریب گرادیان شبه تعمیم یافته (GGA)، خواص الاستیک، مکانیکی، الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیب نیم هویسلر NbBiCs در حالت انبوه مطالعه شد. قطبش اسپینی در سطح فرمی برای ترکیب نیم هویسلر NbBiCs، اعداد 97/6% و 100% به ترتیب با استفاده تقریب‌های GGA و GGA+mBJ به دست آمده است. بخش حقیقی تابع دی الکتریک برای ترکیب NbBiCs در فاز α برای انرژی‌های بیشتر از 20 eV به عدد یک همگرا شده‌اند که نشان می‌دهد آن به عنوان یک عایق ایزوتروپیک رفتار می‌کند و همچنین ضریب شکست برای انرژی‌های بیشتر از 7/5 eV کمتر از عدد یک شده است که این معرف پدیده فوق‌العاده درخشان است.

واژه‌های کلیدی

اسپینترونیکی، نظریه تابعی چگالی، ترکیب هویسلر، نیم-فلزی

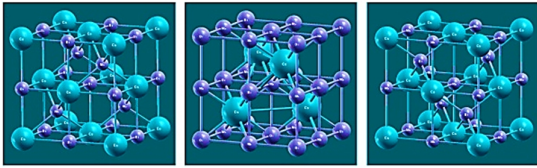
مقدمه

ترکیبات نیم-فلزی فرومغناطیس دسته‌ای جدید از مواد هستند که امروزه به خاطر ساختار الکترونی آنها، توجه بسیاری از محققین را به خود جلب کرده است [1-4]؛ زیرا ساختار الکترونی این دسته از مواد، ویژگی نیم رسانا (عایق) را در یک کانال اسپینی و ویژگی فلزی را در کانال اسپینی دیگر نشان می‌دهد [5-7]. به عبارت دیگر قطبش اسپینی در سطح فرمی برای این ترکیبات 100% است [8]. قطبش اسپینی بالای این ترکیبات دلیل اصلی کاربرد آنها در وسایل اسپینترونیک به خصوص در بخش تزریق اسپین [9] و فیلترهای اسپینی [10] است.

ترکیبات زیادی هستند که رفتار نیم-فلزی از خود نشان می‌دهند؛ از جمله می‌توان به ترکیبات هویسلر [11-17] اکسیدهای فرومغناطیس [18]، پروسکایت‌ها [19] و نیم رساناهای رقیق شده [20-21] اشاره کرد. از بین این ترکیبات، گزینه ایده‌آل برای اسپینترونیک، ترکیبات هویسلر هستند؛ زیرا این ترکیبات عموماً قطبش اسپینی بالا، دمای کوری بالا و ساختاری متناسب با زیرلایه دارند. ترکیبات هویسلر علاوه بر استفاده در وسایل اسپینترونیک، همچنین در اپتوالکترونیک [22]، فتوولتائیک و ترموالکترونیک [23] کاربرد ویژه‌ای دارند.

از نظر ساختاری، ترکیبات هویسلر به دو دسته سه تایی (نیم هویسلر و تمام هویسلر) [24] و چهارتایی [25] تقسیم می‌شوند. ترکیبات نیم هویسلر دارای فرمول شیمیایی XYZ و با ساختار کریستالی C1b متبلور می‌شوند. به طور مشابه، ترکیبات تمام هویسلر فرمول شیمیایی X₂YZ دارند و به دو دسته نوع Hg₂TiCu مانند و نوع Cu₂MnAl مانند تقسیم می‌شوند. در این ترکیبات، عموماً X و Y از عناصر گروه واسطه و Z از عناصر گروه اصلی هستند. ترتیب قرارگیری اتم‌ها در ترکیبات نیم هویسلر به سه صورت است که فازهای α، β و γ نامیده می‌شوند [27-26].

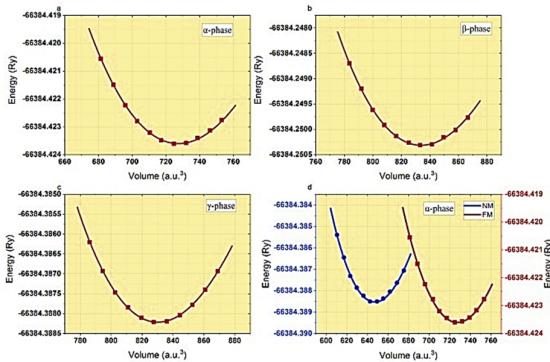
مکان اتم‌ها مطابق با نمادگذاری ویکوف (Wyckoff) برای این سه فاز یاد شده در جدول شماره (1) داده شده است. جدول (1) مکان‌های اشغال شده به وسیله اتم‌ها در فازهای α، β و γ. مکان 4d خالی از اتم است. در این ترکیبات، اگر عنصری واسطه‌ای که الکترونگاتیوی بیشتری دارد، در مکان 4c قرار گیرد پایداری بیشتری برای ترکیب تخمین زده می‌شود. شکل (1) نمایی از ترکیب نیم هویسلر NbBiCs در فازهای α، β و γ را نشان می‌دهد.



شکل 1. نمایی از ترکیب نیم هویسلر NbBiCs در فازهای α، β و γ

روش انجام محاسبات

محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی استوار است [28] و برای حل معادله معادلات بس ذره‌ای کوهن-شم نیز از تقریب گرادیان شیب تعمیم یافته (GGA) مورد استفاده قرار گرفته است [29]. پس از بهینه‌سازی انرژی، در فضای وارون تعداد نقاط K و برای منطقه اول بریلوین برای حالت انبوهه منش‌بندی 20*20*20، G_{max}=14 و R_{mt}*K_{max}=9 انتخاب شده است. محاسبات با کد محاسباتی WIEN2k انجام شده است [30]. محاسبات خودسازگار وقتی متوقف می‌شود که همگرایی بار به کمتر از 0.0001e برسد.



شکل 2. منحنی انرژی کل ترکیب بر حسب یک تابعی از حجم سلول واحد

جدول 1. مکان اتم‌ها مطابق با نمادگذاری ویکوف (Wyckoff)

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

NbBiCs محاسبه شده و نتایج آن در جدول (1) آمده است. معیارهای پایداری بورن- هوانگ برای ساختارهای مکعبی به صورت زیر هستند [32]:

$$C_{44} > 0 \text{ و } C_{11} + 2C_{12} > 0, C_{11} > |C_{12}|$$

که با توجه به ثابت‌های الاستیک محاسبه شده برای ترکیب NbBiCs در جدول (1)، همه معیارها را برآورده می‌کند و نشان می‌دهد که آن از نظر مکانیکی پایدار است. همچنین پارامترهای مهم دیگری را که از ثابت‌های الاستیک مشتق می‌شود، محاسبه کردیم مثل بالک مدول (B)، شیر مدول (G)، یانگ مدول (Y)، نسبت پواسون (ν) و ضریب ناهمسانگردی. رابطه این پارامترها به ثابت‌های الاستیک به صورت زیر هستند:

$$B = B_V = B_G = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (3)$$

$$G = \frac{G_V + G_R}{2} \quad (4)$$

$$G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} \quad (5)$$

$$G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \quad (6)$$

$$Y = \frac{9GB}{3G + B} \quad (7)$$

$$\nu = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} \quad (8)$$

$$A = \frac{2C_{44}}{(C_{11} - C_{12})} \quad (9)$$

یکی از پارامترهایی که شکل‌پذیری یا شکنندگی ترکیبات را نشان می‌دهد نسبت $\frac{B}{G}$ است. اگر این نسبت بزرگ‌تر از $1/75$ باشد، ماده شکل‌پذیر و اگر کوچک‌تر از $1/75$ باشد ماده شکننده است [33]. این نسبت برای ترکیب NbBiCs عدد $2/69$ به دست آمده که مؤید شکل‌پذیر بودن آن است.

نسبت پواسون که برابر نسبت استرین عرضی به استرین طولی است اطلاعات نسبتاً مفیدی را در مورد ماهیت پیوند میان اتم‌های ماده به ما می‌دهد. اگر مقادیر ν تقریباً $0/1$ باشند، پیوند میان اتم‌ها از نوع کووالانت و اگر مقادیر ν تقریباً $0/25$ باشند، پیوند میان اتم‌ها از نوع یونی است و چنانچه مقادیر ν بین $0/28$ و $0/42$ باشد پیوند از نوع فلزی است [34]. مقدار ν برای ترکیب NbBiCs عدد

خواص ساختاری

در این ترکیبات، اگر عنصری واسطه‌ای که الکترونگاتیوی. در شکل (2-a, b & c) منحنی انرژی کل ترکیب NbBiCs 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 (2) مشخص است، پایین‌ترین انرژی مربوط به فاز α است. بنابراین این ترکیب در فاز α نسبت به دو فاز دیگر یعنی β و γ پایدارتر است. همچنین برای اینکه دریابیم ترکیب NbBiCs در فاز α، در کدام یک از حالت‌های فرومغناطیس (FM) یا غیر مغناطیس (NM) پایدارتر است در شکل (2-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 (2-d) نشان می‌دهد، ترکیب NbBiCs در فاز α در حالت فرومغناطیس به دلیل داشتن انرژی پایین‌تر، پایدارتر است. لذا در ادامه خواص فیزیکی این ترکیب در فاز α در حالت فرومغناطیس بررسی می‌شود.

خواص الاستیک

در این بخش، پایداری ترکیب، نوع پیوند میان اتم‌ها و شکل‌پذیری آن از طریق ثابت‌های الاستیک با روش انرژی-استرین مورد بررسی قرار می‌گیرد. در این روش، انرژی بر حسب استرین بیان می‌شود [31]:

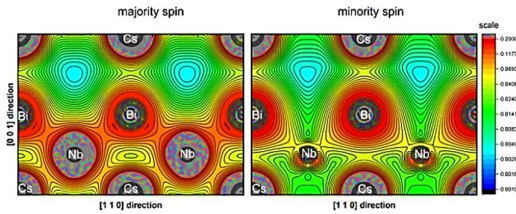
$$E(\epsilon) = E(0) + \sum_{i=1}^6 \frac{\partial E}{\partial \epsilon_i} \epsilon_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^6 \frac{\partial^2 E}{\partial \epsilon_i \partial \epsilon_j} \epsilon_i \epsilon_j \quad (1)$$

که در آن ثابت‌های الاستیک به صورت مشتق دوم انرژی در نظر گرفته می‌شود:

$$C_{i,j} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial \epsilon_i \partial \epsilon_j} \quad (2)$$

به خاطر تقارن مکعبی ساختار (ماده)، تنها سه ثابت الاستیک مستقل ($C_{11} = C_{22} = C_{33}$) و ($C_{12} = C_{13} = C_{23}$) وجود دارد و ($C_{44} = C_{55} = C_{66}$) وجود دارد که این ثابت‌های الاستیک برای ترکیب نیم هویسلر

Bi به صورت ضعیف‌تر نسبت به همین پیوند در کانال اسپینی اکثریت شده است.



شکل 3. کانتور پلات چگالی الکترونی برای ترکیب NbBiCs در دو کانال اسپینی اکثریت و اقلیت

خواص الکترونی ترکیب NbBiCs در حالت انبوه

مطالعه ساختار الکترونی مواد، اطلاعات ارزشمندی را در مورد مدل‌سازی تجربی مواد و نهایتاً کاربرد آنها در صنعت اسپینترونیک مهیا می‌کند. ساختار الکترونی ترکیب NbBiCs در فاز α ، به وسیله محاسبه چگالی حالات الکترونی کل و جزء و ساختار نواری بررسی می‌شود. به همین منظور در شکل (4) و شکل (5)، چگالی حالات الکترونی کل و جزء برای ترکیب NbBiCs نمایش داده شده‌اند. در شکل (4)، چگالی حالات الکترونی کل به وسیله دو تقریب GGA و GGA + mBJ نمایش داده شده است. ملاحظه می‌شود که در تقریب GGA، چگالی الکترونی در بازه انرژی -3eV تا 3eV دارای ناهمسانگردی است؛ به عبارت دیگر، رفتار الکترونی در اسپین بالا و پایین متفاوت است. همان‌گونه که از شکل (5) پیداست که علت اصلی ناهمسانگردی مغناطیسی در تراز فرمی متعلق به حالات الکترونی اتم Nb و تا حدودی حالات الکترونی اتم‌های Bi است. حالات الکترونی اتم Cs در سطح فرمی سهم بسیار اندکی نسبت به دو اتم دیگر دارند. بنابراین نتیجه می‌شود که این ترکیب نسبت به اعمال یک میدان مغناطیسی خارجی رفتار دوگانه‌ای از خود نشان می‌دهد. ممان مغناطیسی NbBiCs، $3.000\mu_B$ به دست آمده است و قطبش اسپینی در سطح فرمی از رابطه $P = \frac{N\uparrow - N\downarrow}{N\uparrow + N\downarrow}$ عدد 97,6% به دست آمده است ولی این قطبش اسپینی در تقریب GGA+mBJ عدد 100% و گاف نیم رسانایی به اندازه 1/69 الکترون ولت به دست آمده است.

0/33 به دست آمده که نشان دهنده وجود پیوندهای فلزی بین اتم‌های آن است.

جدول 1. ثابت‌های الاستیک و خصوصیات الاستیک برای

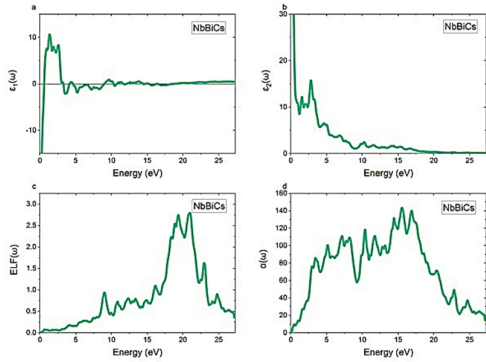
ترکیب NbBiCs در فاز α

C_{11}	C_{12}	C_{44}	B	G_V
60.13	10.55	4.95	20.08	12.88
G_R	B/G	Y	ν	A
7.28	2.69	26.90	0.33	0.2

آخرین پارامتری که برای این ترکیب بررسی شده است، ضریب ناهمسانگردی است. درجه ناهمسانگردی مواد می‌تواند از طریق ضریب ناهمسانگردی آن بیان شود و از رابطه (9) محاسبه می‌شود. مقدار A برای یک ماده همسانگرد عدد 1 است. هر چقدر این ضریب از عدد یک فاصله داشته باشد، نشان دهنده ناهمسانگردی الاستیکی آن است. ضریب ناهمسانگردی برای ترکیب NbBiCs عدد 0/20 به دست آمده است که انحراف کمی از عدد یک را نشان می‌دهد بنابراین این ترکیب تقریباً یک ماده همسانگرد است [33].

خواص پیوند ترکیب NbBiCs در حالت انبوه

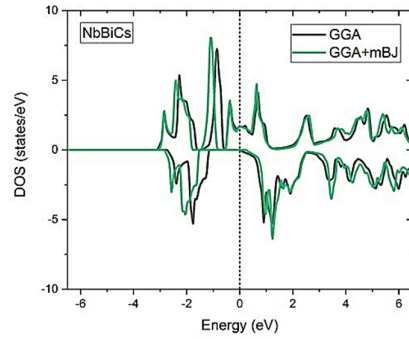
چگالی بار الکترونی می‌تواند نقش مهمی در تعیین ماهیت پیوند میان اتم‌ها ایفا کند. به این خاطر چگالی بار الکترونی در هر دو کانال اسپینی اکثریت و اقلیت برای NbBiCs محاسبه و کانتور پلات آن در صفحه (110) در شکل (3) رسم شده است. صفحه (110) به این دلیل انتخاب شده است که تمام پیوندهای موجود در این ترکیب نمایش داده شود. همان‌طور که از شکل (3) در کانال اسپینی اکثریت مشخص است، انباشت بار بین اتم‌ها وجود دارد که بیانگر وجود پیوندهای کوالانس و فلزی میان اتم‌های این ترکیب است. انباشت زیاد بار بین اتم Nb و اتم Bi و هم‌پوشانی این دو با همدیگر بیانگر تشکیل پیوند کوالانس قوی‌تر نسبت به پیوند بین دو اتم Nb و Cs است و دو اتم Bi و Cs به علت اینکه همسایه اول هم نیستند، پیوند ضعیف‌تری بین آنها تشکیل شده است. همچنین می‌توان بیان داشت که پیوند قوی بین دو اتم Nb و Bi سبب افزایش پایداری ترکیب شده است. در اسپین اقلیت وضعیت کمی متفاوت است به این صورت که انباشت بار نزدیک اتم Nb سبب شده است که پیوند بین اتم Nb و اتم Cs به شکل یونی شود و پیوند میان دو اتم Nb



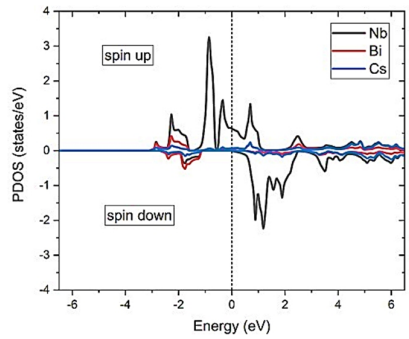
شکل 6. بخش حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، اتلاف انرژی اپتیکی و ضریب جذب ترکیب نیم هویسلر NbBiCs در فاز α بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک ترکیب در برخی از انرژی‌ها یک یا چندین ریشه دارد و در این نقاط از ناحیه منفی به مثبت گذار کرده‌اند. این ریشه‌ها همان جایی است که اتلاف انرژی اپتیکی (ELF) ترکیب هم پیک داشت. بنابراین نوسانات پلاسمونی این ترکیب در این انرژی‌ها اتفاق افتاده است. شکل (c-6) منحنی تابع اتلاف انرژی اپتیکی ترکیب را نشان می‌دهد.

بخش موهومی تابع دی‌الکتریک $\epsilon_2(\omega)$ معرف گذار الکترونی از ترازهای پر به ترازهای خالی است و هر پیک آن معرف این انتقال الکترون است. در شکل (b-6) همان‌طور که از ماهیت فلزی ترکیبات NbBiCs انتظار داریم اصلی‌ترین پیک‌های $\epsilon_2(\omega)$ در ناحیه مادون قرمز و مرئی رخ داده است و با افزایش انرژی فوتون تابیده شده با یک شیب تند میل به کاهش دارد و عملاً بعد از 10 eV به بعد گذار چشمگیری اتفاق نمی‌افتد.

شکل (d-6) نمودار جذب ترکیب NbBiCs را نشان می‌دهد. همان‌طور که از ماهیت فلزی این ترکیب انتظار داریم، جذب نور در همان انرژی‌های پایین (ناحیه مادون قرمز) با شیب تند شروع می‌شود و تا 5 الکترون‌ولت افزایش می‌یابد و پس از نوسانات چند تا محدوده 18 الکترون‌ولت افزایش نشان می‌دهد. پس از آن مجدداً با شیب تندی سیر نزولی از خود نشان داده است. این طیف نشان می‌دهد که بر اساس رفتار فلزی ترکیب جذب نور به صورت پیوسته است و در تمام بازه‌های انرژی و تا 25 الکترون‌ولت کماکان برای این ترکیب جذب وجود دارد. جذب می‌تواند دلایل مختلفی داشته باشد از جمله آن انتقال الکترون‌ها از ترازهای پایین‌تر به ترازهای بالاتر و یا شتاب‌گیری الکترون‌های داخل جسم است. نمودار رسانندگی اپتیکی ترکیب NbBiCs در شکل



شکل 4. چگالی حالت‌های الکترونی کل برای ترکیب نیم-هویسلر NbBiCs. با تقریب‌های GGA+mBJ و GGA



شکل 5. چگالی حالت‌های الکترونی جزء برای ترکیب نیم-هویسلر NbBiCs. با تقریب GGA

خواص اپتیکی ترکیب NbBiCs در حالت انبوه

پاسخ هر جسم به نور تابیده شده به آن را با تابع دی‌الکتریک نشان می‌دهند. $\epsilon(\omega)$ یک تانسور ریاضی مختلط است. تابع دی‌الکتریک که بستگی به فرکانس نور فرودی به مواد جامد دارد، نقش مهمی در تعیین خصوصیات اپتیکی مواد جامد ایفا می‌کند و از دو بخش حقیقی و موهومی تشکیل شده است [35].

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$$

شکل (a-6) بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک $\epsilon_1(\omega)$ برای ترکیب NbBiCs در فاز α . در حالت انبوه را نشان داده است. در انرژی‌های پایین $\epsilon_1(\omega)$ به سمت $-\infty$ میل کرده است که نشان دهنده ماهیت فلزی قوی آن است. جالب آنکه ترکیب در بازه‌های انرژی هیچ‌گونه پاسخ مثبتی به نور نمی‌دهند به‌خصوص محدوده 0 - 8 eV. علامت منفی بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک در برخی نواحی از انرژی به معنی آن است که امواج الکترومغناطیس با فرکانس‌های مربوطه در ماده نمی‌تواند منتشر شود و تمامی نور فرودی به ماده انعکاس می‌یابد [37-38].

نسبیت نیست. سرعت گروه طیف الکترومغناطیس در ماده نمی تواند بیشتر از سرعت نور شود؛ زیرا سرعت گروه، سرعت انتقال انرژی است و هیچ وقت نمی تواند بیشتر از سرعت نور شود [37]. با کاهش بیشتر ضریب شکست در انرژی های بالاتر باز هم شفافیت این ترکیب در انرژی های بالاتر از 25eV تأیید می گردد.

ضریب خاموشی یکی از پارامترهای مهم فیزیکی است که میزان نفوذ نور به ماده را نشان می دهد. شکل (d-7) نشان می دهد که ترکیبات NbBiCs در انرژی های پایین (محدوده مادون قرمز و مرئی) بیشترین ضریب خاموشی را دارد. اما در لبه ی ماورای بنفش (uv) و انرژی های بالاتر میزان افت دامنه نور ورودی به جسم به شدت کاهش نشان می دهد و در 25eV به بعد عملاً ضریب خاموشی برای این ترکیب صفر شده است و از نمودار (d-6) هم دیدیم که جذب نور هم بسیار کم شده بود؛ بنابراین در انرژی های بالا عملاً تمام نور از جسم عبور کرده و ترکیبات NbBiCs عملاً مانند یک جسم شفاف رفتار می کند اما از مقایسه ضریب خاموشی و تابع اتلاف انرژی اپتیکی می توان گفت که این ترکیبات برای کاربردهایی در محدوده انرژی لبه uv سودمندتر خواهد بود.

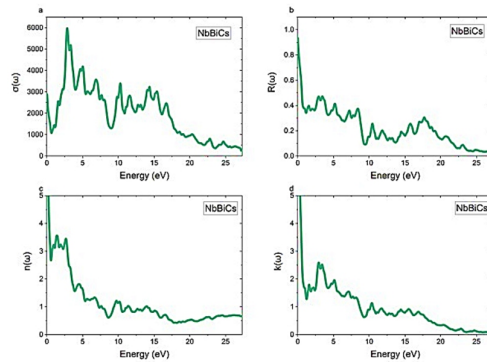
بحث و نتیجه گیری

نتایج خصوصیات ساختاری به ما نشان می دهد که ترکیب NbBiCs در فازهای a در حالت مغناطیسی نسبت به حالت غیر مغناطیسی پایدارتر است. همچنین محاسبات الاستیک نشان می دهد که ترکیب یاد شده از نظر مکانیکی پایدار و یک ماده شکل پذیر است. نتایج خصوصیات الکترونی و مغناطیسی بیانگر آن است که ترکیب NbBiCs، یک ترکیب نیم فلز مغناطیسی با قطبش اسپینی 100% در سطح فرمی است و می تواند در وسایل اسپینترونیک به کار برود. بخش حقیقی تابع دی الکترونیک در ناحیه مادون قرمز به سمت $-\infty$ میل کرده است که نشان دهنده ماهیت فلزی قوی آن است و در ناحیه ماورای بنفش (uv) مانند یک جسم شفاف رفتار می کند.

References

- [1] Ameri M, Touia A, Khenata R, Al-Douri Y, Baltache H. Structural and optoelectronic properties of NiTiX and CoVX (X= Sb and Sn) half-Heusler compounds: An

(a-7) نشان داده است که در انرژی های پایین این ترکیب رسانندگی اپتیکی بسیار بالایی دارد از طرف دیگر هم دیدیم که $\epsilon_2(\omega)$ برای این ترکیب در این ناحیه (مادون قرمز) گذار الکترونی بالایی داشتند و این نشان می دهد که تمام نور جذب شده خرج رسانندگی می شود. از لبه نور مرئی تا حدود 15eV رسانندگی اپتیکی نوساناتی دارد اما کاهش میانگین جزئی دارد و بعد از 25eV رسانندگی صفر شده است که گواه دیگری بر شفاف بودن این ترکیب است.



شکل 7. رسانندگی اپتیکی، ضریب انعکاس، ضریب شکست و ضریب خاموشی ترکیب نیم هوسلر NbBiCs در فاز α همان طور که از شکل (b-7) مشخص است، ضریب انعکاس برای ترکیب NbBiCs در انرژی های پایین تقریباً 100% است که ماهیت فلزی بسیار قوی آن را در ناحیه مادون قرمز نشان می دهد اما در ناحیه مرئی به بعد با جذب بیشتر و کاهش پیک های $\epsilon_2(\omega)$ میزان ضریب انعکاس رو به کاهش است و به تدریج رفتار فلزی آن کمتر شده است و در انرژی های بالاتر از 25eV عملاً رفتار این ترکیب به صورت نیم رسانایی و یا حتی عایق است و رفتار شفاف گونه دارد.

ضریب شکست بالا در شکل (c-7) برای ترکیب NbBiCs رفتار فلزی را نشان داده است و با افزایش انرژی فوتون تابیده شده با شیب تندی کاهش یافته و از لبه ماورای بنفش به بعد اندازه ضرب شکست کمتر از یک شده است و این نشان می دهد که سرعت فاز طیف الکترومغناطیس در جسم بیشتر از سرعت نور در خلا شده است و این در تضاد با

ab initio study. Optik. 2013 Apr 1;124(7):570-4.

- [2] Felser C, Fecher GH, editors. Spintronics: from materials to devices. Springer Science & Business Media; 2013 Mar 20.

- [3] Abderrahim B, Ameri M, Bensaïd D, Azaz Y, Doumi B, Al-Douri Y, Benzoudji F. Half-metallic magnetism of quaternary Heusler compounds $Co_2Fe_xMn_{1-x}Si$ ($x=0, 0.5, \text{ and } 1.0$): First-principles calculations. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*. 2016 Feb;29(2):277-83.
- [4] Yahiaoui IE, Lazreg A, Dridi Z, Al-Douri Y, Bouhafis B. Electronic and Magnetic Properties of $Co_2CrGa_{1-x}Si_x$ Heusler Alloys. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*. 2017 Feb;30(2):421-4.
- [5] Mahmood Q, Hassan M, Yaseen M, Laref A. Half-metallic ferromagnetism and optical behavior in alkaline-earth metals based Beryllium perovskites: DFT calculations. *Chemical Physics Letters*. 2019 Aug 16;729:11-6.
- [6] Felser C, Wollmann L, Chadov S, Fecher GH, Parkin SS. Basics and perspectives of magnetic Heusler compounds. In: *Heusler Alloys 2016* (pp. 37-48). Springer, Cham.
- [7] Zadeng L, Chhana L, Zuala L, Rai DP. Surface half metallicity and thermodynamic stability of 001-plane Ti_2XSi ($X=Mn, Co$) Heusler alloys (HAs): A DFT approach. *Surfaces and Interfaces*. 2022 Feb 1;28:101602.
- [8] Hohenberg P, Kohn W. Band structure of new $ReFeAsO$ superconductors. *Physical Review B*. 1964;136:864-71.
- [9] Kohn W, Sham LJ. Softness and the Fukui function in the electronic theory of metals and catalysis. *Phys. Rev. A*. 1965; 140: 1133-8.
- [10] Perdew JP, Chevary JA, Vosko SH, Jackson KA, Pederson MR, Singh DJ, Fiolhais C. Erratum: Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation. *Physical Review B*. 1993 Aug 15;48(7):4978.
- [11] Galanakis I, Dederichs PH, Papanikolaou N. Slater-Pauling behavior and origin of the half-metallicity of the full-Heusler alloys. *Physical Review B*. 2002 Nov 18;66(17):174429.
- [12] Amrich O, Amine Monir ME, Baltach H, Omran SB, Sun XW, Wang X, Al-Douri Y, Bouhemadou A, Khenata R. Half-metallic ferrimagnetic characteristics of Co_2YZ ($Z=P, As, Sb, \text{ and } Bi$) new full-Heusler alloys: a DFT study. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*. 2018 Jan;31(1):241-50.
- [13] Mentefa A, Boufadi FZ, Ameri M, Gaid F, Bellagoun L, Odeh AA, Al-Douri Y. First-principles calculations to investigate structural, electronic, elastic, magnetic, and thermodynamic properties of full-Heusler Rh_2MnZ ($Z=Zr, Hf$). *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*. 2021 Jan;34(1):269-83.
- [14] Zhao JS, Gao Q, Li L, Xie HH, Hu XR, Xu CL, Deng JB. First-principles study of the structure, electronic, magnetic and elastic properties of half-Heusler compounds $LiXGe$ ($X=Ca, Sr \text{ and } Ba$). *Intermetallics*. 2017 Oct 1;89:65-73.
- [15] Belbachir S, Abbes C, Belkaid MN, Belbachir AH. First-principle study of structural, elastic, electronic and magnetic properties of the quaternary Heusler $CoZrFeP$. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*. 2020 Oct; 33(10): 2899-905.
- [16] Cherid S, Benstaali W, Abbad A, Bentata S, Lantri T, Abbar B. Theoretical prediction of half metallic ferromagnetic full-Heusler alloys Cs_2CrGe . *Solid State Communications*. 2017 Jul 1;260:14-8.
- [17] Yao W, Zhou J, Zeng D, Wan H, Ruan W, Liu L, Wen Y. Computational discovery of the novel half-metallic full-Heusler alloys Mn_2LiAs and Mn_2LiSb . *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2020 Jun 1; 503:166642.
- [18] Matar SF, Etourneau J. Local spin density investigations in oxide systems with half metallic ferromagnetic properties. *International Journal of Inorganic Materials*. 2000 Dec 1;2(6):523-32.
- [19] Tomioka Y, Okuda T, Okimoto Y, Kumai R, Kobayashi KI, Tokura Y. Magnetic and electronic properties of a single crystal of ordered double perovskite Sr_2FeMoO_6 . *Physical Review B*. 2000 Jan 1; 61(1):422.
- [20] Liu Y, Liu BG. First-principles study of half-metallic ferromagnetism and structural stability of $CrxZn_{1-x}Te$. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2007 Oct 19; 40(21):6791.
- [21] Pan H, Feng YP, Wu QY, Huang ZG, Lin J. Magnetic properties of carbon doped CdS : a first-principles and Monte

- Carlo study. *Physical Review B*. 2008 Mar 13;77(12):125211.
- [22] Amudhavalli A, Rajeswarapalanichamy R, Iyakutti K, Kushwaha AK. First principles study of structural and optoelectronic properties of Li based half Heusler alloys. *Computational Condensed Matter*. 2018 Mar 1;14:55-66.
- [23] Kamlesh PK, Kumari S, Verma AS. Effect of hybrid density functionals on half-Heusler LiZnX ($X= \text{N, P}$ and As) semiconductors: potential materials for photovoltaic and thermoelectric applications. *Physica Scripta*. 2020 Aug 10; 95(9): 095806.
- [24] Boochani A, Jamal M, Shahrokhi M, Nowrozi B, Gholivand MB, Khodadadi J, Sartipi E, Amiri M, Asshabi M, Yari A. Ti_2VGe Heuslerene: theoretical prediction of a novel 2D material. *Journal of Materials Chemistry C*. 2019;7(43):13559-72.
- [25] Bahnes A, Boukortt A, Abbassa H, Aïmouch DE, Hayn R, Zaoui A. Half-metallic ferromagnets behavior of a new quaternary Heusler alloys CoFeCrZ ($Z= \text{P, As}$ and Sb): Ab-initio study. *Journal of Alloys and Compounds*. 2018 Jan 15; 731: 1208-13.
- [26] Behbahani MA, Moradi M, Rostami M, Davatolhagh S. First principle study of structural, electronic and magnetic properties of half-Heusler IrCrZ ($Z= \text{Ge, As, Sn}$ and Sb) compounds. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2016 May 1; 92: 85-93.
- [27] Huang W, Wang X, Chen X, Lu W, Damewood L, Fong CY. Structural and electronic properties of half-Heusler alloys PtXBi (with $X= \text{Mn, Fe, Co}$ and Ni) calculated from first principles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2015 Mar 1; 377:252-8.
- [28] Blaha P, Schwarz K, Sorantin P, Trickey SB. Full-potential, linearized augmented plane wave programs for crystalline systems. *Computer physics communications*. 1990 Jun 1;59(2):399-415.
- [29] Schwarz K, Blaha P. Solid state calculations using WIEN2k. *Computational Materials Science*. 2003 Oct 1; 28(2): 259-73.
- [30] Ambrosch-Draxl C, Sofo JO. Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented planewave method. *Computer physics communications*. 2006 Jul 1;175(1):1-4.
- [31] Merawa M, Noel Y, Civalleri B, Brown R, Dovesi R. Raman and infrared vibrational frequencies and elastic properties of solid BaFCl calculated with various Hamiltonians: an ab initio study. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2005 Jan 7; 17(3):535.
- [32] Born M, Huang K, Lax M. Dynamical theory of crystal lattices. *American Journal of Physics*. 1955 Oct;23(7):474-
- [33] Dhakal R, Nepal S, Galanakis I, Adhikari RP, Kaphle GC. Prediction of half-metallicity and spin-gapless semiconducting behavior in the new series of FeCr -based quaternary Heusler alloys: An Ab initio study. *Journal of Alloys and Compounds*. 2021 Nov 15; 882: 160500.
- [34] Uğur ŞU, Güler M, Uğur GÖ, Güler E. Elastic, mechanical, optical and magnetic properties of Ru_2MnX ($X= \text{Nb, Ta, V}$) Heusler alloys. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2021 Apr 1; 523: 167614.
- [35] Ahmad I, Amin B, Maqbool M, Muhammad S, Murtaza G, Ali S, Noor NA. Optoelectronic Response of GeZn_2O_4 through the Modified Becke—Johnson Potential. *Chinese Physics Letters*. 2012 Sep 1; 29(9):097102.
- [36] Boochani A, Nowrozi B, Khodadadi J, Solaymani S, Jalali-Asadabadi S. Novel graphene-like Co_2VAl (111): case study on magnetoelectronic and optical properties by first-principles calculations. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2017 Feb 23;121(7):3978-86.
- [37] Fox M. *Optical Properties of Solids*: Oxford University Press. New York. 2010.
- [38] Boochani A, Nowrozi B, Khodadadi J, Solaymani S, Jalali-Asadabadi S. Novel graphene-like Co_2VAl (111): case study on magnetoelectronic and optical properties by first-principles calculations. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2017 Feb 23;121(7):3978-86.

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>)