

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه اصفهان

حوزه معاونت پژوهشی

عنوان طرح

محاسبات گرادیانهای میدانهای الکتریکی در

ترکیب CeIn_3 حاصل از LDA+U

مجری طرح

سعید جلالی اسدآبادی

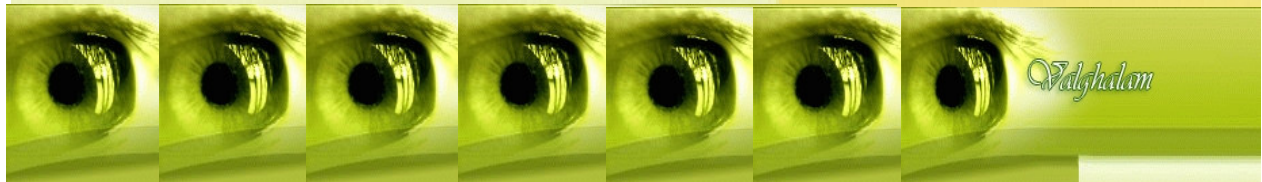
زمان اجرای طرح

هفدهم اسفند هشتاد و دو تا پنجم خرداد هشتاد و شش



ن وَالْقَلَمِ وَمَا يَسْطُرُونَ. مَا أَنْتَ بِنِعْمَةِ رَبِّكَ بِمَحْنُونٍ،
وَإِنْ لَكَ لَأَجْرًا غَيْرُ مَمْنُونٍ. وَإِنَّكَ لَعَلَىٰ خُلُقٍ عَظِيمٍ

ن، و سوگند به قلم و آنچه به سبب قلم (و یا با قلم) می‌نویسند، که تو (ای پیغمبر) به واسطه نعمتی که خدا به تو داده است دیوانه نمی‌باشی؛ و حَقّاً و حقیقهً تو دارای پاداش و مزد پیوسته و غیر منقطعی هستی؛ و حَقّاً و حقیقهً تو بر اخلاق عظیمی استوار می‌باشی



سپاسگزاری

الْحَمْدُ لِلَّهِ الْأَوَّلِ بَلَا أَوَّلَ كَانَ قَبْلَهُ، وَ الْآخِرِ بَلَا آخِرَ يَكُونُ بَعْدَهُ الَّذِي قَصُرَتْ عَنْ رُؤْيِيهِ أَبْصَارُ النَّاظِرِينَ، وَ عَجَزَتْ عَنْ نَعْتِهِ أَوْهَامُ الْوَاصِفِينَ. ابْتَدَعَ بِقُدْرَتِهِ الْخَلْقَ ابْتِدَاعاً، وَ اخْتَرَهُمْ عَلَى مَشِيَّتِهِ اخْتِرَاعاً. ثُمَّ سَلَكَ بِهِمْ طَرِيقَ إِرَادَتِهِ، وَ بَعَثَهُمْ فِي سَبِيلِ مَحَبَّتِهِ، لَّا يَمْلِكُونَ تَأْخِيراً عَمَّا قَدَّمَهُمُ إِلَيْهِ، وَ لَّا يَسْتَطِيعُونَ تَقْلُماً إِلَى مَا آخَرَهُمْ عَنْهُ. وَ جَعَلَ لِكُلِّ رُوحٍ مِنْهُمْ قُوَّةً مَعْلُوماً مَقْسُوماً مِنْ رِزْقِهِ، لَّا يَنْقُصُ مِنْ زَادِهِ نَاقِصٌ، وَ لَّا يَزِيدُ مِنْ نَقْصٍ مِنْهُمْ زَائِدٌ. ثُمَّ ضَرَبَ لَهُ فِي الْحَيَاةِ أَجَلاً مَوْفُوتاً، وَ نَصَبَ لَهُ أَمَداً مَحْدُوداً، يَنْخَطِئُ إِلَيْهِ بِأَيَّامِ عُمْرِهِ، وَ يَرَهْفُهُ بِأَعْوَامِ دَهْرِهِ، حَتَّى إِذَا بَلَغَ أَقْصَى أَثَرِهِ، وَ اسْتَوْعَبَ حِسَابَ عُمْرِهِ، قَبِضَهُ إِلَى مَا نَدَبَهُ إِلَيْهِ مِنْ مَوْفُورِ ثَوَابِهِ، أَوْ مَحْنُورِ عِقَابِهِ، لِيَجْزِيَ الَّذِينَ أَسَاءُوا بِمَا عَمِلُوا وَ يَجْزِيَ الَّذِينَ أَحْسَنُوا بِالْحُسْنَى. عَدَلْنَا مِنْهُ، تَقَدَّسَتْ أَسْمَاؤُهُ، وَ تَنَظَّاهَرَتْ أَلْوَدُ، لَّا يُسْأَلُ عَمَّا يَقَعُ وَ هُمْ يُسْأَلُونَ. وَ الْحَمْدُ لِلَّهِ الَّذِي لَوْ حَبَسَ عَنْ عِبَادِهِ مَعْرِفَةَ حَمْدِهِ عَلَى مَا أَبْلَاهُمْ مِنْ مِثْلِهِ الْمُتَابِعَةِ، وَ أَسْبَغَ عَلَيْهِمْ مِنْ نِعَمِهِ الْمُتَظَاهِرَةِ، لَتَصَرَّفُوا فِي مِثْلِهِ فَلَمْ يَحْمَدُوهُ، وَ تَوَسَّعُوا فِي رِزْقِهِ فَلَمْ يَشْكُرُوهُ. وَ لَوْ كَانُوا كَذَلِكَ لَخَرَجُوا مِنْ حُدُودِ الْإِسْلَامِيَّةِ إِلَى حَدِّ الْبَهِيمِيَّةِ فَكَانُوا كَمَا وَصَفَ فِي مُحْكَمِ كِتَابِهِ «إِنْ هُمْ إِلَّا كَالْأَنْعَامِ بَلْ هُمْ أَضَلُّ سَبِيلًا»، وَ الْحَمْدُ لِلَّهِ عَلَى مَا عَرَّفَنَا مِنْ نَفْسِهِ، وَ أَلْهَمَنَا مِنْ شُكْرِهِ، وَ فَتَحَ لَنَا مِنْ أَبْوَابِ الْعِلْمِ بِرَبُّوبِيَّتِهِ، وَ دَلَّنَا عَلَيْهِ مِنَ الْإِخْلَاصِ لَهُ فِي تَوْحِيدِهِ، وَ جَنَّبَنَا مِنَ الْإِلْحَادِ وَ الشُّكِّ فِي أَمْرِهِ. حَمداً نُعَمَّرُ بِهِ فِيمَنْ حَمَدَهُ مِنْ خَلْقِهِ، وَ نَسْبِقُ بِهِ مَنْ سَبَقَ إِلَى رِضَاةٍ وَ عَقُودِهِ. حَمداً يُضِيءُ لَنَا بِهِ ظُلُمَاتِ الْبَرَزَخِ، وَ يُسَهِّلُ عَلَيْنَا بِهِ سَبِيلَ الْمَبْعَثِ، وَ يُشَرِّفُ بِهِ مَنَازِلَنَا عِنْدَ مَوَاقِفِ الْأَشْهَادِ، يَوْمَ تُجْزَى كُلُّ نَفْسٍ بِمَا كَسَبَتْ وَ هُمْ لَّا يَظْلَمُونَ، يَوْمَ لَّا يُعْطَى مَوْلًى عَنْ مَوْلًى شَيْئاً وَ لَّا هُمْ يُنْصَرُونَ. حَمداً يَرْتَفِعُ مِنَّا إِلَى أَعْلَى عَلَيَّيْنِ فِي كِتَابِ مَرْقُومٍ يَشْهَدُهُ الْمُقَرَّبُونَ. حَمداً نَقْرُ بِهِ عُيُونَنَا إِذَا بَرَقَتْ الْأَبْصَارُ، وَ تَبَيَّضَ بِهِ وَجُوهُنَا إِذَا اسْوَدَّتْ الْأَبْشَارُ. حَمداً نَعْتَقُ بِهِ مِنْ أَلِيمِ نَارِ اللَّهِ إِلَى كَرِيمِ جِوَارِ اللَّهِ. حَمداً نُرَاحِمُ بِهِ مَلَائِكَتَهُ الْمُقَرَّبِينَ، وَ نَضَامُ بِهِ أَنْبِيََاءَهُ الْمُرْسَلِينَ فِي دَارِ الْمَقَامَةِ الَّتِي لَّا تَزُولُ، وَ مَحَلِّ كَرَامَتِهِ الَّتِي لَّا تَحُولُ. وَ الْحَمْدُ لِلَّهِ الَّذِي اخْتَارَ لَنَا مَحَاسِنَ الْخَلْقِ، وَ أَجْرَى عَلَيْنَا طَيِّبَاتِ الرَّزْقِ. وَ جَعَلَ لَنَا الْفَضِيلَةَ بِالْمَلَكَةِ عَلَى جَمِيعِ الْخَلْقِ، فَكُلَّ خَلِيقَتِهِ مُنْقَادَةً لَنَا بِقُدْرَتِهِ، وَ صَابِرَةً إِلَى طَاعَتِنَا بِعِزَّتِهِ. وَ الْحَمْدُ لِلَّهِ الَّذِي أَغْلَقَ عَنَّا بَابَ الْحَاجَةِ إِلَّا إِلَيْهِ، فَكَيْفَ يُطِيقُ حَمْدَهُ أَمْ مَتَى تُودِي شُكْرَهُ لَّا، مَتَى. وَ الْحَمْدُ لِلَّهِ الَّذِي رَغَّبَ فِينَا آثَاتِ الْبَسْطِ، وَ جَعَلَ لَنَا أَدْوَاتِ الْقَبْضِ، وَ مَتَّعَنَا بِأَرْوَاحِ الْحَيَاةِ، وَ أَثَبَّتَ فِينَا جَوَارِحَ الْأَعْمَالِ، وَ عَذَّابًا بِطَيِّبَاتِ الرَّزْقِ، وَ أَغْنَانًا بِقُضْيَاهِ، وَ أَقْنَانًا بِمَتْنِهِ. ثُمَّ أَمَرَنَا لِيُخْتَبِرَ طَاعَتَنَا، وَ نَهَانَا لِيُنَبِّلِي شُكْرَنَا، فَخَالَقَنَا عَنْ طَرِيقِ أَمْرِهِ، وَ رَكِبَنَا مَثُونَ رَجَرِهِ، فَلَمْ يَبْتَدِرْنَا بِعُقُوبَتِهِ، وَ لَمْ يُعَاجِلْنَا بِنِقَمَتِهِ، بَلْ تَأَنَّنَا بِرَحْمَتِهِ تَكْرَماً، وَ انْتَظَرَ مُرَاجَعَتَنَا بِرَأْفَتِهِ حِلْماً. وَ الْحَمْدُ لِلَّهِ الَّذِي دَلَّنَا عَلَى التَّوْبَةِ الَّتِي لَمْ نُفْذِهَا إِلَّا مِنْ فَضْلِهِ، فَلَوْ لَمْ نَعْتِدْ مِنْ فَضْلِهِ إِلَّا بِهَا لَقَدْ حَسَنَ بِلَاؤُهُ عِنْدَنَا، وَ جَلَّ إِحْسَانُهُ إِلَيْنَا وَ جَسَمَ فَضْلُهُ عَلَيْنَا فَمَا هَكَذَا كَانَتْ سُنَّتُهُ فِي التَّوْبَةِ لِمَنْ كَانَ قَبْلَنَا، لَقَدْ وَضَعَ عَنَّا مَا لَّا طَاقَةَ لَنَا بِهِ، وَ لَمْ يَكَلِّفْنَا إِلَّا وَسْئعاً، وَ لَمْ يُجَسِّمْنَا إِلَّا يُسْراً، وَ لَمْ يَدْعُ لِأَحَدٍ مِمَّا حُجَّةٌ وَ لَّا غُثْرًا. فَالْهَالِكُ مِمَّا مِنْ هَلَكٍ عَلَيْهِ، وَ السَّعِيدُ مِمَّا مِنْ رَغْبٍ إِلَيْهِ وَ الْحَمْدُ لِلَّهِ بِكُلِّ مَا حَمَدَهُ بِهِ أَذْنَى مَلَائِكَتِهِ إِلَيْهِ وَ أَكْرَمُ خَلِيقَتِهِ عَلَيْهِ وَ أَرْضَى حَامِدِيهِ لَدَيْهِ حَمداً يَقْضِلُ سَائِرَ الْحَمْدِ كَقُضْلِ رَبَّنَا عَلَى جَمِيعِ خَلْقِهِ. ثُمَّ لَهُ الْحَمْدُ مَكَانَ كُلِّ نِعْمَةٍ لَهُ عَلَيْنَا وَ عَلَى جَمِيعِ عِبَادِهِ الْمَاضِينَ وَ الْبَاقِينَ عِنْدَ مَا أَحَاطَ بِهِ عِلْمُهُ مِنْ جَمِيعِ الْأَشْيَاءِ، وَ مَكَانَ كُلِّ وَاحِدَةٍ مِنْهَا عَدَدُهَا أَضْعَافاً مُضَاعَافَةً أَبَداً سَرْمَداً إِلَى يَوْمِ الْقِيَامَةِ. حَمداً لَّا مُنْتَهَى لِحَدِّهِ، وَ لَّا حِسَابَ لِعَدَدِهِ، وَ لَّا مَبْلَغَ لِعَالِيَّتِهِ، وَ لَّا انْقِطَاعَ لِأَمَدِهِ حَمداً يَكُونُ وَصْلَةً إِلَى طَاعَتِهِ وَ عَقُودِ، وَ سَبَباً إِلَى رِضْوَانِهِ، وَ ذَرِيعَةً إِلَى مَغْفِرَتِهِ، وَ طَرِيقاً إِلَى جَنَّتِهِ، وَ خَفِيرًا مِنْ نَقِمَتِهِ، وَ أَمناً مِنْ غَضَبِهِ، وَ ظَهيراً عَلَى طَاعَتِهِ، وَ حَاجِزاً عَنْ مَعْصِيَتِهِ، وَ عَوْنًا عَلَى تَأْدِيَةِ حَقِّهِ وَ وَظَائِفِهِ. حَمداً نُسَعِّدُ بِهِ فِي السُّعْدَاءِ مِنْ أَوْلِيَائِهِ، وَ نُصِيرُ بِهِ فِي نَظْمِ الشُّهَدَاءِ بِسُيُوفِ أَعْدَائِهِ، إِنَّهُ وَلِيُّ حَمِيدٍ

حمد و سپاس خدای را، آن نخستین بی پیشین را و آن آخرین بی پسین را، خداوندی را که دیده بینایان از دیدارش قاصر آید و اندیشه واصفان از نعمت او فروماند. آفریدگان را به قدرت خود ابداع کرد و به مقتضای مشیت خویش جامه هستی پوشید و به همان راه که ارادت او بود روان داشت و رهسپار طریق محبت خویش

گردانید. چون ایشان را به پیش راند، کس را یارای واپس گراییدن نبود، و چون واپس دارد، کس را یارای پیش تاختن نباشد. هر زنده جانی را از رزق مقسوم خویش توشه‌ای معلوم نهاد آن سان که کس نتواند از آن که افزونش داده، اندکی بکاهد و بر آن که اندکش عنایت کرده، چیزی بیفزاید. سپس هر یک از آدمیان را عمری معین مقرر کرد و مدتی محدود که با گامهای روزها و سالهای می‌پیماید، تا آنگاه که به سر آردش آنسان که چون آخرین گامها را بر دارد و پیمانه عمرش لبریز شود، او را فرو گیرد: یا به ثواب فراوانش بنوازد، یا به ورطه عقابی خوفناکش اندازد، تا بدکاران را به کیفر عمل خویش برساند و نیکوکاران را به پاداش کردار نیک خویش و این خود عین عدالت اوست. منزّه و پاک است نامهای او و ناگسستنی است نعمتهای او. کس را نرسد که او را در برابر اعمالش باز خواست کند و اوست که همگان را به باز خواست کشد. [۱] حمد و سپاس خداوندی را که اگر معرفت حمد خویش را از بندگان خود دریغ می‌داشت، در برابر آن همه نعمتها که از پس یکدیگر بر آنان فرو می‌فرستاد، آن نعمتها به کار می‌داشتند و لب به سپاسش نمی‌گشادند، به رزق او فراخ روزی می‌جستند و شکرش نمی‌گفتند. و اگر چنین می‌بودند از دایره انسانیت برون می‌افتادند و در زمره چارپایان در می‌آمدند. چنان می‌شدند که خدای تعالی در محکم تنزیل خود گفته است: «چون چارپایانند، بل از چارپایان هم گمراه‌تر. [۲] حمد و سپاس خداوندی را که خود را به ما شناسانید و شیوه سپاسگزاری‌اش را به ما الهام کرد و ابواب علم ربوبیت خویش را به روی ما بگشاد و ما را به اخلاص در توحید او راه نمود و از الحاد و تردید در امر وی به دور داشت. او را سپاس گوئیم، چنان سپاسی که چون در میان سپاسگزارانش زیستن گیریم، همواره با ما باشد و به یاری آن از همه آنان که خواستار خشنودی و بخشایش او هستند گوی سبقت بر بایم. آن چنان سپاسی که تابشش تاریکی وحشت افزای گور بر ما روشن گرداند و راه رستخیز برای ما هموار سازد و در آن روز که هر کس به جزای عمل خویش رسد و بر کس ستم نرود و هیچ دوستی از دوست خویش دفع مضرت نتواند و کس به کس یاری نرساند، چون در موقف بازخواست ایستیم، منزلت ما برافرازد و بر مرتبت ما بیفزاید. حمد و سپاسی آنچنان که نوشته در نامه عمل ما به اعلیٰ علین فرا رود و فرشتگان مقرب بر آن گواهی دهند. حمد و سپاسی آنچنان که در آن روز که دیدگان را پرده حیرت فرو گیرد، دیدگان ما بدان روشنی گیرد و در آن روز که گروهی سیه‌روی شوند، ما سپیدروی گردیم. حمد و سپاسی آنچنان که ما را از آتش دردناک خداوندی برهاند و در جوار کرمش بنشانند. حمد و سپاسی آنچنان که ما را با فرشتگان مقرب او همنشین سازد و در آن سرای جاوید که جایگاه کرامت همیشگی اوست با پیامبران مرسل همدوش گرداند. حمد خداوندی را که سیرتها و صورتهای پسندیده را برای ما برگزید و روزیهای خوش و نیکو را به ما ارزانی داشت. خداوندی که ما را آن گونه برتری داد که بر همه آفریدگان سلطه یابیم، چندان که به قدرت او هر آفریده فرمانبردار ماست و به عزت او در ربه طاعت ما. سپاس خداوندی را که جز به خود، در نیاز را به روی ما فرو بست. چگونه از حمد او بر آییم؟ کی سپاسش توانیم گفت؟ نمی‌توانیم، کی توانیم؟ حمد خداوندی را که در پیکر ما ابزارهایی نهاد که توان بست و گشادمان باشد و به نعمت روح، زندگیمان عنایت فرمود و اندامهایی داد که به نیروی آنها کارها توانیم ساخت و ما را از هر چه خوش و گوارنده است روزی داد و به فضل خویش بی‌نیاز گردانید و به من و کرم خود سرمایه بخشید. و تا فرمانبرداری و

سپاسگزاریمان بیازماید، به کارهایی فرمان داد و از کارهایی نهی فرمود. چون از فرمانش سر برتافتیم و بر مرکب عصیان برنشستیم، به عقوبت ما نشتافت و در انتقام از ما تعجیل روا نداشت، بلکه به رحمت و کرامت خویش ما را زمان داد و به رأفت و حلم خود مهلت عطا فرمود، باشد که بازگردیم. حمد و سپاس خداوندی را که ما را به توبه راه نمود. و اگر پرتو فضل او نبود، هرگز بدان راه نمی‌یافتیم. و اگر از فضل او تنها به همین یک نعمت بسنده می‌کردیم، بازهم دهش او به ما نیکو و احسان او در حق ما جلیل و فضل و کرمش بس کرامند می‌بود، که روش او در قبول توبه پیشینیان نه چنین بود. ما را از هر چه فراتر از تاب و توانمان بود معاف داشت و جز به اندازه توانمان تکلیف نفرمود و جز به اعمال سهل و آسانمان و نداشت، تا هیچ یک از ما را عذری و حجتی نماند. آن که از ما سر از فرمانش برتابد، کارش به شقاوت کشد و آن که به درگاه او روی کند، تاج سعادت بر سر نهد. حمد و سپاس خدای را، بدان سان که مقرب‌ترین فرشتگانش و گرمی‌ترین آفریدگانش و ستوده‌ترین ستاینده‌هایش می‌ستایند. حمدی برتر از هر حمد دیگر، آن سان که پروردگار ما از همه آفریدگان خود برتر است. حمد باد او را به جای هر نعمتی که بر ما و بر دیگر بندگان در گذشته و زنده خود دارد، به شمار همه چیزها که در علم بی‌انتهای او گنجد و چند برابر نعمتهایش، حمدی بی‌آغاز و بی‌انجام و تا روز رستاخیز، حمدی که حدی و مرزی نشناسد و حسابش به شمار در نیاید و پایانش نبود و زمانش در نگسلد. حمدی که ما را به فرمانبرداری و بخشایش او رساند و خشنودی‌اش را سبب گردد و آمرزش او را وسیله باشد و راهی بود به بهشت او پناهگاهی بود از عذاب او و آسایشی بود از خشم او و یابوری بود بر طاعت او و مانعی بود از معصیت او و مددی بود بر ادای حق و تکالیف او. حمدی که ما را در میان دوستان سعادت‌مندش کامروا کند و به زمره آنان که به شمشیر دشمنانش به فوز شهادت رسیده‌اند درآورد. انه ولی حمید.

[۱] لا یسئل عما یفعل و هم یسئلون (سوره ۲۱/آیه ۲۳).

[۲] ان هم الا کالانعام بل هم اضل سبیلا (سوره ۲۵/آیه ۴۴)

تقديم به:

ملت پراغتجار ايران

برون دادها

اجرای این طرح با راه اندازی یک خوشه (کلاستر) محاسباتی متشکل از سه پردازشگر پنتیوم ۴ آغاز شد، که این امر زمانی حدود چهار ماه از کل مدت اجرای طرح را به خود اختصاص داد و برخی از جنبه های آن به همراه جنبه های علمی طرح طی دو گارگاه آموزشی به ترتیب در دانشگاه علم و صنعت ایران در سال ۱۳۸۴ پیرو دعوت انجمن فیزیک ایران (PSI) و در دانشگاه صنعتی اصفهان در سال ۱۳۸۵ پیرو دعوت استاد بزرگوار جناب آقای دکتر هادی اکبرزاده به مخاطبین ارایه شد. برخی از نتایج این طرح در کنفرانس ماده چگال سال ۱۳۸۴ و همچنین سه هفته متوالی پژوهش سالهای ۱۳۸۳، ۱۳۸۴ و ۱۳۸۵ ارایه شدند. یکی دیگر از دستاوردهای علمی این طرح پژوهشی در یکی از مجلات انجمن فیزیک آمریکا (APS) به نام *Physical Review B* در سال ۲۰۰۷ میلادی به چاپ رسیده است.

Workshop:

- 1) S. Jalali Asadabadi, WIEN2k workshop (invited speaker to present a workshop on WIEN2k code), Seventh conference of condensed matter physics, University of Science and Technology, Tehran, Iran (2004).
- 2) S. Jalali Asadabadi, A preliminary introduction to WIEN2k code, Advanced workshop of WIEN2k code, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran (2006).
- 3) S. Jalali Asadabadi, Brand new topics in WIEN2k code (I), Advanced workshop of WIEN2k code, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran (2006).
- 4) S. Jalali Asadabadi, Brand new topics in WIEN2k code (II), Advanced workshop of WIEN2k code, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran (2006).

Research Week:

- 5) S. Jalali Asadabadi, Electronic properties of CeIn_3 , Seventh research week, University of Isfahan, 11-17 December (2004).
- 6) S. Jalali Asadabadi, Properties predictions of solid states Ce-based compounds within ab initio calculations, Eight research week, University of Isfahan, 10-16 December (2005).
- 7) S. Jalali Asadabadi, Electric-field gradients in CeIn_3 , Ninth research week, University of Isfahan, Winter (2006).

Conference:

- 8) S. Jalali Asadabadi, Electric Field Gradients within first principles of quantum mechanics calculations in CeIn_3 , Seventh conference of condensed matter physics, University of Science and Technology, Tehran, Iran (2004).

American Physical Society (APS) ISI-Paper

- 9) S. Jalali Asadabadi, Electronic structure and electric-field gradient analysis in CeIn_3 , *Phys. Rev. B* **75**, 205130 (2007).

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

یک	برون دادها	
دو	فهرست مطالب	
۱	چکیده	
۲	پیشینه نظری و تجربی تحقیق	فصل اول
۴	روش انجام تحقیق	فصل دوم
۶	ساختارهای بلوری، مغناطیسی و الکترونی	فصل سوم
۶	ساختار بلوری	بخش ۱-۳
۶	ساختار مغناطیسی	بخش ۲-۳
۷	ساختار الکترونی	بخش ۳-۴
۱۷	ظرفیت گرمایی ویژه	فصل چهارم
۱۹	گرادیان میدان الکتریکی	فصل پنجم
۲۶	نتیجه گیری	
۲۷	مراجع	
۲۹	برون داد شماره ۹: (2007) PRB75, 20153	پیوست

چکیده

گرادیانهای میدان الکتریکی (EFG's) ترکیب CeIn_3 به عنوان یک ماده چگال کندو در نقاط شبکه Ce و In محاسبه شده اند. محاسبات بر مبنای نظریه تابعی چگالی با بکاربردن روش پتانسیل کامل-امواج تخت بهبود یافته بعلاوه اوربیتالهای موضعی (FP-APW+lo) و استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) برای تابعی تبدلی-همبستگی در غیاب و در حضور قطبش اسپینی و جفت شدگی اسپین-مدار (SOC) با در نظر گرفتن حالت های غیر مغناطیسی، مغناطیسی و پادفرومغناطیسی برای ترکیب CeIn_3 انجام شده اند. به منظور بهبود محدودیتهای GGA در نحوه رفتار با طبیعت جایگزیده حالت های 4f برهمکنش LDA+U در محاسبات لحاظ شده است. نتایج با داده های تجربی و محاسبات نظری دیگر که در آنها با الکترونهای 4f همچون الکترونهای نوار-گونه رفتار شده است مقایسه شده اند. مقایسه انجام شده نشان می دهد که نتایج محاسبات GGA+U ما با اعمال ممانهای مغناطیسی 4f Ce به طور پادفرو مغناطیسی با چینش اسپینی ($\uparrow\downarrow$) در جهت (111) با تجربه سازگارترند. تجزیه و تحلیل ما از چگالی حالات در ترازهای فرمی متناظر و همچنین از سهمهای Im-گونه گرادیانهای میدان الکتریکی پیش بینی می کند که مقدار محاسبه شده EFG-ها به ترتیب در Ce و In به طور عمده متاثر از توابع عدم تقارن حالت های In-5p و Ce-4f باشند. تجزیه و تحلیل گرادیانهای میدان الکتریکی ما همچنین یک رابطه تقریباً خطی بین مولفه اصلی گرادیانهای میدان الکتریکی و چگالی حالات در سطح فرمی ($\text{DOS}(E_F)$) را نشان می دهد.

فصل اول

پیشینه نظری و تجربی تحقیق

برهمکنشهای فوق ریز کمیت‌های فیزیکی حساسی، همچون گرادیانهای میدان الکتریکی (EFG's) و میدانهای مغناطیسی فوق ریز (HFF's)، را به منظور مطالعه تجربی [۱-۲] و نظری [۳-۴] ساختار الکترونی ترکیب CeIn_3 ، به عنوان یک دستگاه مورد علاقه متشکل از الکترونهای 4f به طور قوی همبسته، در اختیار قرار می‌دهند. ترکیب CeIn_3 با متبلور شدن در ساختار AuCu_3 و داشتن ثابت شبکه $4.69 \text{ \AA}$ در فشار صفر یک دستگاه پاد فرومغناطیس ممان موضعی (LMAF) فرمیونی-سنگین (HF) مکعبی با دمای نیل 10.1 K و ممان مغناطیسی $0.4 \mu_B$ که مقاومت کندوی زیادی از خود نشان می‌دهد را تشکیل می‌دهد [۵]. ممانهای مغناطیسی سریم به طور پاد فرومغناطیس در همسایگی صفحات فرومغناطیسی (111) جهت گیری می‌کنند. این ترکیب چگال‌کنندو، CeIn_3 ، خواص فیزیکی غیرقابل پیش‌بینی و جالبی مانند ابررسانایی غیرمتعارف زیر دمای 200 mK در نزدیکی فشار بحرانی $P_C \approx 2.5 - 2.7 \text{ GPa}$ جایی که در آن دمای نیل به سمت صفر میل می‌کند $(\lim_{P \rightarrow P_C} T_N = 0)$ را از خود نشان می‌دهد [۶].

خواص گوناگون این ترکیب فرمیونی سنگین مشابه محدودیتهای موجود بشر در ارایه یک جدول جهانی برای شعاعهای اتمی (یونی) عناصر جدول تناوبی، مستقل از شرایط و محیط بلوری، از این واقعیت ناشی می‌شود که بشر همچنین نمی‌تواند یک جایگزیدگی معین به حالت‌های 4f، مستقل از شرایط اعمال شده به ترکیب، نسبت دهد. خواص گوناگون این ترکیب، که ملاحظات زیادی را به خود جلب کرده است، می‌تواند به میزان جایگزیدگی الکترونهای 4f آن، یعنی مکان چگالی حالات 4f (4f-DOS) نسبت به تراز فرمی که میزان هیبرید شدن بین نوارهای جایگزیده 4f و هدایت را نشان می‌دهد، مربوط شود. کمیت EFG بسیار حساس به عدم تقارن توزیع بار الکترونهای مغزه [۷] و همچنین به عدم تقارن توزیع بار الکترونهای ظرفیت [۸]، و در نتیجه به ساختار الکترونی الکترونهای ظرفیت، می‌باشد. بنابراین EFG می‌تواند به عنوان یک پیمانه توانا برای اندازه

گیری میزان جایگزیدگی یاد شده مورد استفاده قرار گیرد. ج. روز [۹] و همکارانش به تازگی در حد جایگزیدگی کامل با برداشتن اوربیتال 4f از ناحیه ظرفیت و سپس محبوس کردن الکترونهاى این اوربیتال به درون ناحیه مغزه با استفاده از روش پتانسیل کامل-امواج بهبود یافته خطی شده (FP-LAPW) سطوح فرمی را برای ترکیب CeIn_3 مستقل از نظم پاد فرومغناطیسی آن محاسبه کرده اند. ایشان از طریق مقایسه نتایج نظری با سطوح فرمی تجربی حاصل از اندازه گیریهای همبستگی زاویه ای دو-بعدی تابش نابودی پوزیترون (2D-ACAR) خود این واقعیت را گزارش کردند که نسبت دادن ویژگی جایگزیدگی کامل (اتم-گونه) به الکترونهاى f در ترکیب CeIn_3 بدون هر گونه قطبیدگی اسپینی، با در نظر گرفتن فاز غیر مغناطیسی ناشی از محدودیت القا شده از به کار بردن روش مغزه باز [۱۱-۱۰]، یک توصیف مناسب از دستگاه را به دست می دهد به طوری که سهم الکترونهاى f در سطح فرمی قابل صرف نظر کردن باشد. در حد غیر جایگزیدگی کامل دو گروه دیگر [۴-۳] به طور جداگانه EFG را در مکان In در این ترکیب محاسبه کردند. محاسبات گروه های اول و دوم به ترتیب در فازهای پاد فرومغناطیسی و غیر مغناطیسی با به کار بردن روش مشابه پتانسیل-کامل امواج تخت بهبود یافته خطی شده (FP-LAPW) انجام شده اند [۱۲].

در این پژوهش، ما تحقیق کرده ایم که آیا می توان، با استفاده از یک روش بینابین، نتایج قبلی حدهای جایگزیده و غیر جایگزیده را بهبود بخشید. برای این منظور، ما روش LDA+U [۱۵-۱۳] را به کار برده ایم و سپس EFG-ها را در هر دو مکان In و Ce محاسبه کرده ایم. روش پیشرفته تر امواج تخت بعلاوه اوربیتالهای موضعی (APW+lo) [۱۶-۱۷] برای خطی سازی انرژیها مورد استفاده قرار گرفته است. این اولین گزارش از محاسبات EFG با روش LDA+U با استفاده از روش APW+lo برای این ترکیب است. محاسبات قطبیده اسپینی ما یک EFG غیر صفر در مکان Ce در حضور جفت شدگی اسپین-مدار را نشان می دهد. EFG-ها قبلا در مکان Ce در این ترکیب محاسبه نشده اند. تقارن مکعبی مکان سریم توضیح می دهد که چرا EFG-ها کمتر اهمیت داشته اند تا قبلا گزارش شوند. با این وجود، ما یک نتیجه جدید به دست آورده ایم که بیان می کند EFG-ها در مکان Ce به طور عمده به وسیله حالتهاى 4f، و نه به طور معمول توسط حالتهاى p، متاثر می شوند. هدف این کار نشان دادن یک رابطه خطی بین مقادیر EFG و چگالی حالتها (DOS) در سطح فرمی (E_F) است، به اختصار $EFG \propto DOS(E_F)$. چنین رابطه ای تا کنون مشاهده نشده است. ما همچنین قصد داریم تا در مورد تمایل الکترونهاى 4f در حالت پایه ترکیب پادفرومغناطیس CeIn_3 برای نشان دادن درجه جایگزیدگی آنها قضاوت نماییم. ما همچنین دریافته ایم که همبستگی بین الکترونهاى 4f حالتهاى نیمه-مغزه 5p-Ce را تحت تاثیر قرار می دهد.

فصل دوم

روش انجام تحقیق

کلیه محاسبات در این پژوهش در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) [۱۸-۱۹] انجام شده اند. ما تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) [۲۰] را برای تابعی تبدلی-همبستگی اختیار کرده ایم. روش پتانسیل-کامل بعلاوه اوربیتالهای موضعی (APW+lo) [۱۶-۱۷] آن گونه که در کد WIEN2k [۲۱] مورد استفاده قرار گرفته است را به کار برده ایم. شعاعهای کرات موافق-تین (R_{MT}) برابر با ۲.۲ و ۲.۸ به ترتیب برای اتمهای In و Ce اختیار شده اند. اجازه داده شده است که اوربیتالهای 4s 4p 4f اتم Ce و اوربیتالهای 5d 6s اتم In در ناحیه ظرفیت حضور داشته باشند. بسط توابع موج درون کرات بر حسب هماهنگهای شبکه و در ناحیه خارج کرات بر حسب امواج تخت به ترتیب به وسیله ویژه مقدار بیشینه $l_{max}=10$ و $R_{MT}K_{max}=7$ قطع شده اند. انرژی قطع بسط فوریه چگالی بار و پتانسیل به وسیله $G_{max} = 16\sqrt{Ry}$ اختیار شده است. ما پارامتر ترکیب ۰,۰۰۱ را در روش برویدن اختیار کرده ایم تا بدین وسیله از احتمال بروز مشکل نوارهای شبه گونه (ghost bands) مزاحم جلوگیری شود. یک شبکه از ۱۶۵ نقطه k در ناحیه اول بریل یوئن متناظر با یک شبکه $18 \times 18 \times 18$ در روش مون خارست پک [۲۲] برای انجام محاسبات در نظر گرفته شده است. به منظور انجام دادن محاسبات تقریباً با دقتی مشابه برای حالت ابر سلول مغناطیسی در قیاس با سلول غیرمغناطیسی تعداد نقاط k را به ۱۲۱ متناظر با یک شبکه $9 \times 9 \times 9$ در روش مون خارست پک کاهش دادیم. هامیلتونی جفت شدگی اسپین-مدار (SOC) را در فضای ویژه حالت‌های نسبیتی نرده ای [۲۳] با استفاده از یک روند وردشی مرتبه دوم [۲۴] با اعمال کردن

جهت (111) بر ممانهای مغناطیسی سریم با انرژی قطع 3 Ry. قطری کردیم. به منظور لحاظ کردن همبستگیهای قوی حالتیهای 4f Ce، از روش LDA+U استفاده کرده ایم [۱۵-۱۳]. در اینجا مقدار 6.2 eV را برای پارامتر U مورد استفاده قرار داده ایم [۲۵]. پارامتر ورودی دیگر برای محاسبات LDA+U انتگرال تبدیلی J می باشد. در اینجا مقدار 0.7 eV را برای J به کار برده ایم. این پارامتر J را می توان با استفاده از مقادیر 8.34 eV, 5.57 eV, 4.12 eV به ترتیب [۲۶] برای انتگرالهای اسلیتر F^2, F^4, F^6 با استفاده از رابطه زیر که برای الکترونهای f صحت دارد به دست آورد:

$$J = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{15} F^2 + \frac{1}{11} F^4 + \frac{50}{429} F^6 \right) \approx 0.69 \text{ eV}. \quad (۱)$$

در پایان، چون عامل (U-J) به جای U و J به طور مجزا در انرژی کل روش LDA+U ظاهر می شود، ما پارامتر J را مساوی صفر قرار داده و U را نیز مساوی مقدار موثر $U_{\text{eff}} = U - J = 5.5 \text{ eV}$ قرار داده ایم [۲۷].

فصل سوم

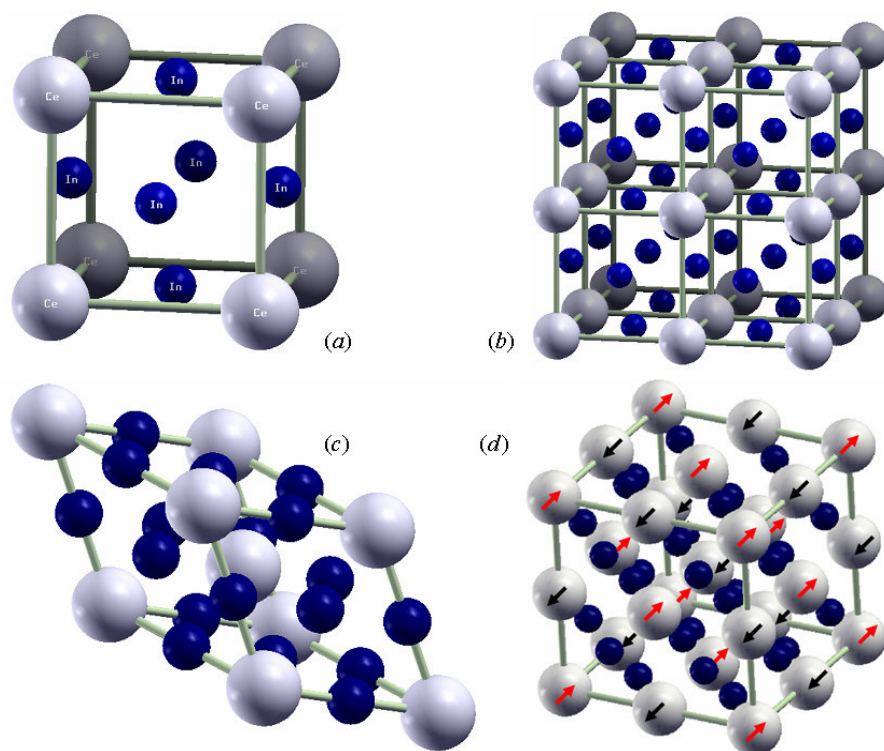
ساختارهای شیمیایی، مغناطیسی و الکترونی

۳-۱ ساختار شیمیایی

همان طور که در شکل 1(a) نشان داده شده است، بلور CeIn_3 در گروه فضایی $\text{Pm}\bar{3}m$ با ساختار AuCu_3 متبلور می شود. این یک سلول واحد است، که در آن اتمهای Ce در گوشه ها و اتمهای In در وسط وجوه واقع شده اند. گروه های نقطه ای اتمهای Ce و In به ترتیب عبارتند از گروه نقطه ای مکعبی $m\bar{3}m$ و گروه نقطه ای غیر مکعبی $4/mmm$. پارامتر شبکه بلور CeIn_3 به طور تجربی برابر با $4.69 \text{ \AA}$ به دست آمده است [۲۸]. ما از این ساختار شیمیایی برای شبیه سازی فازهای غیرمغناطیسی و فرومغناطیسی استفاده کرده ایم.

۳-۲ ساختار مغناطیسی

در این ترکیب به طور تجربی مشاهده شده است که گشتاورهای مغناطیسی سریم به طور پادفرو مغناطیسی در نزدیکی صفحات مغناطیسی (111) جهت گیری می کنند [۵]. بنابراین، به منظور شبیه سازی وضعیت پادفرومغناطیس، ابتدا اضلاع یاخته واحد غیرمغناطیسی همان طور که در شکل 1(b) نشان داده شده است در هر سه جهت xyz کارتری دو برابر شده اند. ما گروه فضایی $\text{Pm}\bar{3}m$ را برای ابرسلول مغناطیسی جدید حفظ کرده ایم. تقارن fcc حفظ شده ابرسلول مغناطیسی سبب می شود که تعداد اتمها در یاخته بسیط بنیادی، شکل 1(c) را ببینید، در قیاس با یاخته بسیط قراردادی نشان داده شده در شکل 1(b) کاهش یابد. سپس نظم پادفرومغناطیسی را بر گشتاورهای مغناطیسی مکانهای سزیم اعمال کرده ایم.

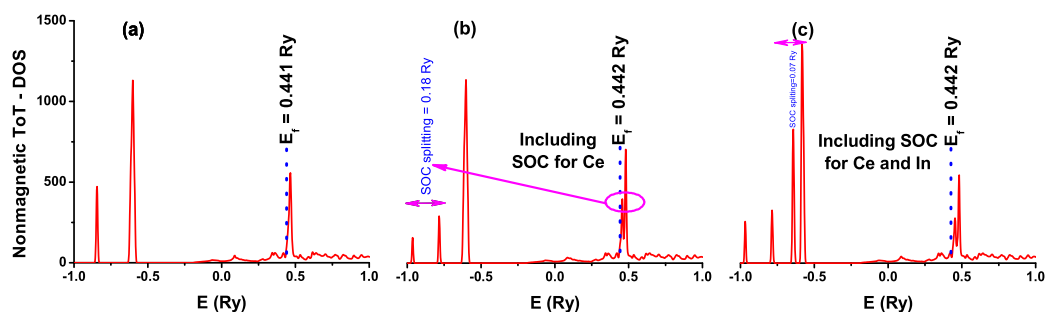


شکل ۱: (a) سلول واحد شیمیایی بلور CeIn_3 در ساختار AuCu_3 دارای ثابت شبکه $a=4.69$. (b) ابرسلول قراردادی ساخته شده با تقارن fcc (گروه فضایی $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$) از یاخته واحد شیمیایی با دوبرابر کردن تعداد سلولهای واحد شیمیایی در سه جهت محتصه های کارتزی xyz . (c) یاخته واحد بنیادی ابر سلول قراردادی ساخته شده. (d) ابر سلول مغناطیسی با اعمال کردن نظم اسپینی ($\uparrow\downarrow$) بر گشتاورهای مغناطیسی سریم در امتداد محور (111).

۳-۳ ساختار الکترونی

چگالی حالتها (DOS) در غیاب قبیذگی اسپینی (SP) و جفت شدگی اسپین-مدار محاسبه شده اند. این محاسبات با استفاده از ساختار شیمیایی نشان داده شده در شکل 1(a) انجام گرفته اند، که پس از این آن را فاز غیر مغناطیسی (NM) مینامیم. جفت شدگی اسپین-مدار سپس در دو مرحله مجزا اعمال شده است. محاسبات در مرحله اول با لحاظ کردن برهمکنشهای اسپین-مدار فقط بین الکترونهای Ce صورت پذیرفته اند. به نتایج این محاسبات با نام "NM+SOC(only Ce)" اشاره می کنیم. سپس جفت شدگی اسپین-مدار، به عنوان گام دوم،

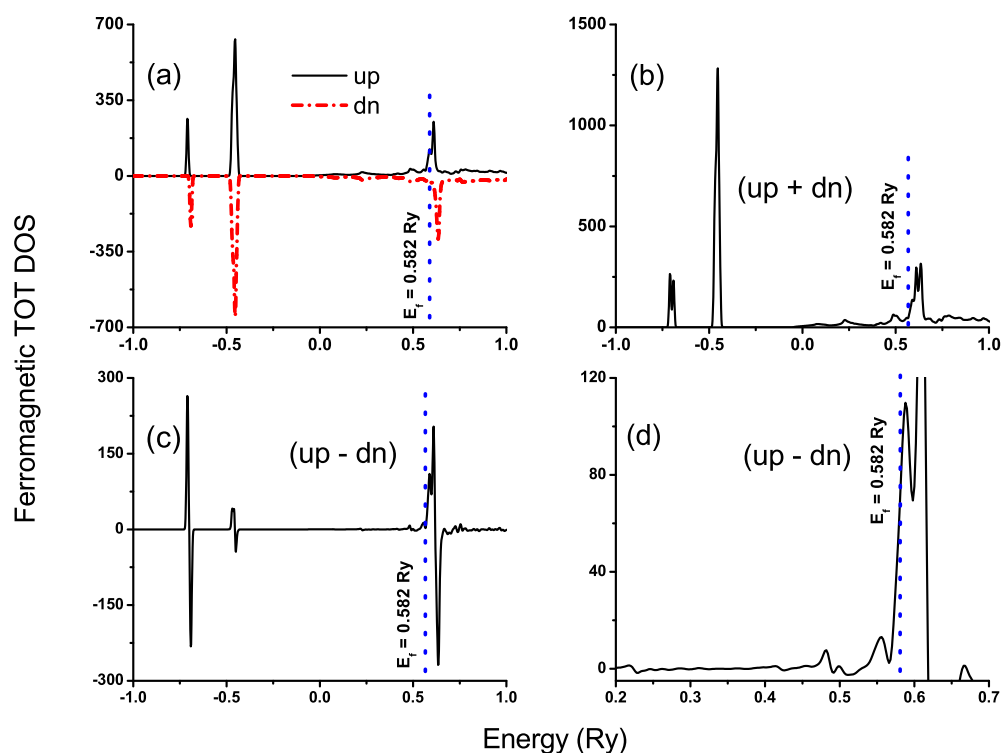
بر الکترونیهای اتم In نیز اعمال شده است. از این پس آن را فاز “NM+SOC” می نامیم. چگالی حالات محاسبه شده ما در توافق خوبی با محاسبات قبلی می باشند.



شکل ۲: چگالی حالت‌های کل در فازهای (a) NM، (b) NM+SOC(only Ce) و (c) NM+SOC. ترازهای فرمی برای هریک از حالتها با خطوط نقطه چین نمایش داده شده اند.

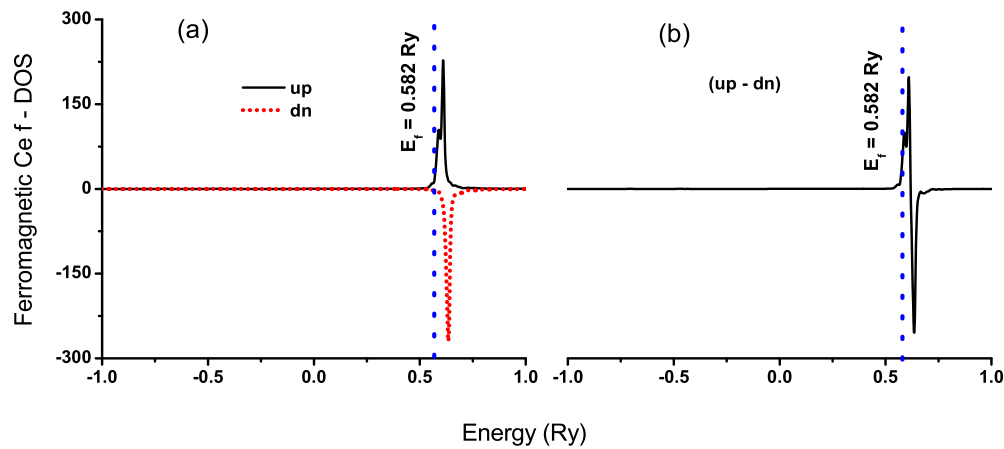
جفت شدگی اسپین-مدار نه تنها بر حالات نیمه-مغزه 5p Ce و 4d In اثر می گذارند، بلکه چگالی حالات در سطح فرمی $DOS(E_F)$ را نیز تغییر می دهند. شکافتگی ناشی از جفت شدگی اسپین-مدار در حالت‌های ظرفیت بسیار کوچکتر از شکافتگیهای ناشی از جفت شدگی اسپین-مدار در حالت‌های شبه-مغزه است. با این وجود اثرات SOC را نمی توان بر نتایج نادیده گرفت زیرا بسیاری از خواص فیزیکی، مانند EFG، بسیار حساس به مقدار $DOS(E_F)$ اند. نکته اخیر به نظر می رسد که برای ترکیبات با پایه سریم از اهمیت بیشتری برخوردار باشد. یک محاسبه نوعی LDA/GGA یک چگالی حالات تیز برای 4f Ce تولید می کند، و آن را در سطح فرمی قرار می دهد. از این رو هر تغییر کوچکی در منحنیهای تیز 4f Ce DOS واقع شده در سطح فرمی می تواند به طور عمده تری $DOS(E_F)$ را تغییر دهد.

چگالی حالتها (DOS) همچنین برای فاز فرومغناطیسی در جفت شدگی اسپین-مدار محاسبه شده اند، که ما آن را فاز “FM” می نامیم. نتایج نشان می دهند که اعمال قطبیدگی اسپینی (SP) سبب می شود تا $DOS(E_F)$ از 141.82 states/(Ry) در فاز غیر مغناطیسی به 94.46 states/(spin.Ry) برای اسپین بالا و به 14.90 states/(spin.Ry) برای اسپین پایین در فاز FM کاهش یابد. چگالی حالت‌های بالا و پایین را با هم جمع کرده ایم. بنابراین یک کاهش کل 32.46 states/Ry در رفتن از فاز NM به FM روی می دهد. چنین کاهش بر خواص فیزیکی دستگاه اثر خواهد گذاشت که در فصلهای بعدی به آنها پرداخته خواهد شد.



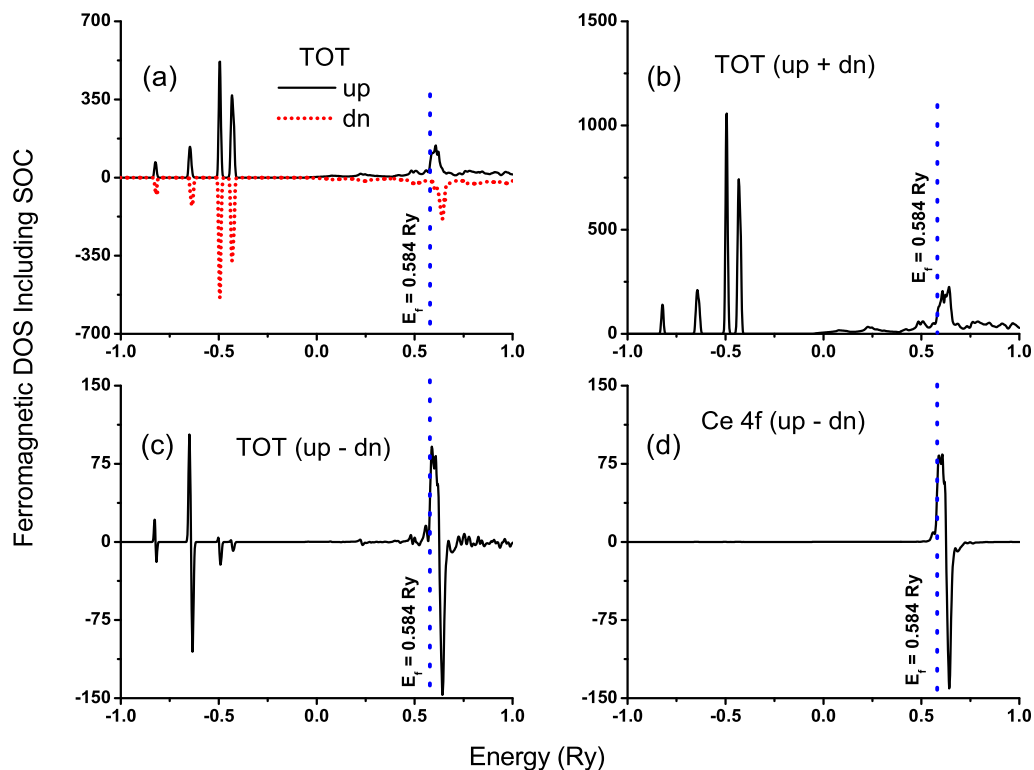
شکل ۳: چگالی حالت‌های کل در فاز FM، که در آن (a) اسپین‌های بالا (خطوط پر) و پایین (خطوط نقطه چین) به طور جداگانه رسم شده‌اند (b) اسپین‌های بالا و پایین باهم جمع شده‌اند (c) اسپین‌های بالا و پایین در بازه $[-1, 1 \text{ Ry}]$ از هم کم شده‌اند. (d) مشابه حالت (c) در بازه $(-0.2, 0.7 \text{ Ry})$. تراز فرمی برای هر یک از حالت‌ها با خطوط نقطه چین نمایش داده شده است.

مقدار $79.56 \text{ States}/(\text{Ry}.\text{spin})$ به طور عمده از حالت‌های $4f$ سریم این ترکیب در فاز فرومغناطیسی آن ناشی می‌شود. به منظور افزایش دقت، چگالی حالات در سطح فرمی برای اسپین‌های بالا برابر با $N_f^{\text{up}} = 74.58 \text{ states/Ry}$ و اسپین‌های پایین برابر با $N_f^{\text{dn}} = 4.25 \text{ states/Ry}$ محاسبه شده‌اند، که به مقدار $70.33 \text{ states}/(\text{Ry})$ برای اختلاف $N_f^{\text{up}} - N_f^{\text{dn}}$ منتج می‌شود.



شکل ۴: چگالی حالت‌های $Ce\ 4f$ در فاز FM، که در آن (a) اسپین‌های بالا (خطوط توپر) و پایین (خطوط نقطه چین) به طور جداگانه رسم شده‌اند (b) اسپین‌های بالا و پایین باهم جمع شده‌اند (c) اسپین‌های بالا و پایین از هم کم شده‌اند. تراز فرمی برای هریک از حالت‌ها با خطوط نقطه چین نمایش داده شده است.

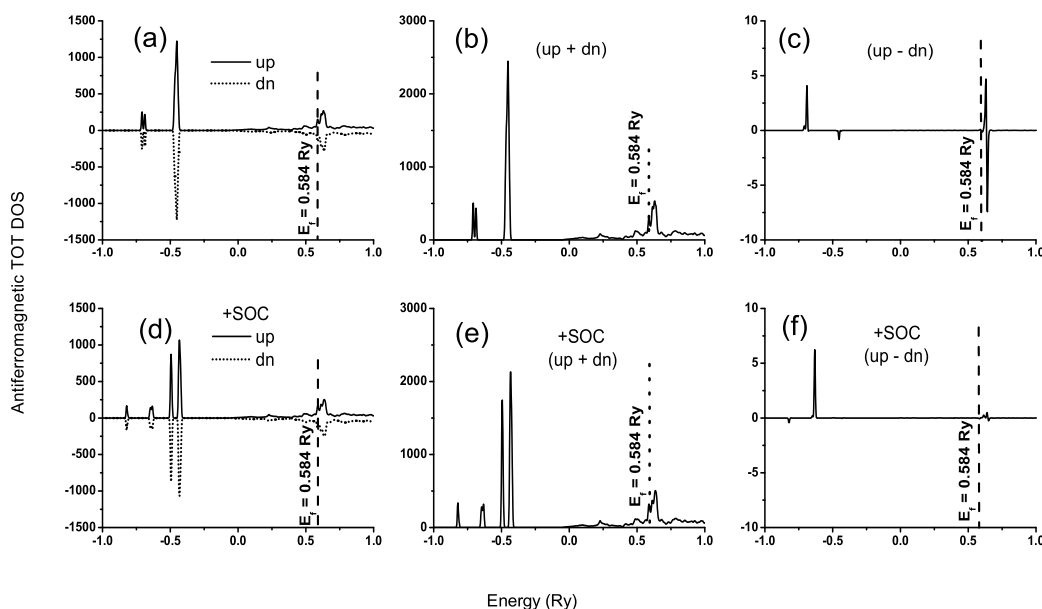
سپس SOC را بر فاز FM اعمال کردیم، که آن را فاز “FM+SOC” می‌نامیم. نتیجه نشان می‌دهد که وارد کردن SOC به کاهشی به اندازه $14.60\ \text{states/Ry}$ از فاز FM به فاز FM+SOC منجر می‌شود. پس $DOS(E_F)$ یک کاهش کلی به اندازه $47.06\ \text{states/Ry}$ در گذار از فاز NM به فاز FM+SOC از خود نشان می‌دهد. در نتیجه به نظر می‌رسد که SP و SOC می‌توانند خواص فیزیکی را در این ترکیب به طور هم ارز تحت تاثیر قرار دهند.



شکل ۵: چگالی حالت‌های کل در فاز FM+SOC، که در آن (a) اسپین‌های بالا (خطوط پر) و پایین (خطوط نقطه چین) به طور جداگانه رسم شده‌اند (b) اسپین‌های بالا و پایین باهم جمع شده‌اند (c) اسپین‌های بالا و پایین از هم کم شده‌اند. (d) چگالی حالت‌های Ce 4f در فاز FM+SOC، که در آن اسپین‌های بالا و پایین از هم کم شده‌اند. تراز فرمی برای هر یک از حالت‌ها با خطوط نقطه چین نمایش داده شده است.

چگالی حالات برای حالت AFM در غیاب SOC محاسبه شده‌اند. حالت اخیر فاز "AFM(001)" نامیده شده است. در غیاب SOC یک جهت خاص مرجح فضایی در مکان اتم سریم وجود ندارد. در چنین حالتی تمام صفحات از جمله (۱۱۱)، (۰۰۱) و غیره هم ارزاند. بنابراین به منظور ساده سازی نظم پادفرو مغناطیسی، ($\uparrow\downarrow$)، در راستای محور (۰۰۱) جهت گیری شد. سپس برهمکنش اسپین-مدار بر فاز AFM(001) اعمال شد. در چنین شرایطی امکان جهت گیری در راستای (۱۱۱) در حضور SOC وجود داشت. با این وجود، ما ترجیح دادیم که اعمال جهت گیری در راستای (۱۱۱) را اندکی به تعویق بیندازیم. بنابراین ممانهای مغناطیسی سریم هنوز در راستای (۰۰۱) نگاه داشته شدند، که ما آن را فاز AFM(001)+SOC می‌نامیم. ممانهای سریم را در این مرحله یعنی در فاز AFM(001)+SOC در راستای طبیعی تر (۱۱۱) قرار نداده ایم تا از اختلاط اثرهای SOC با

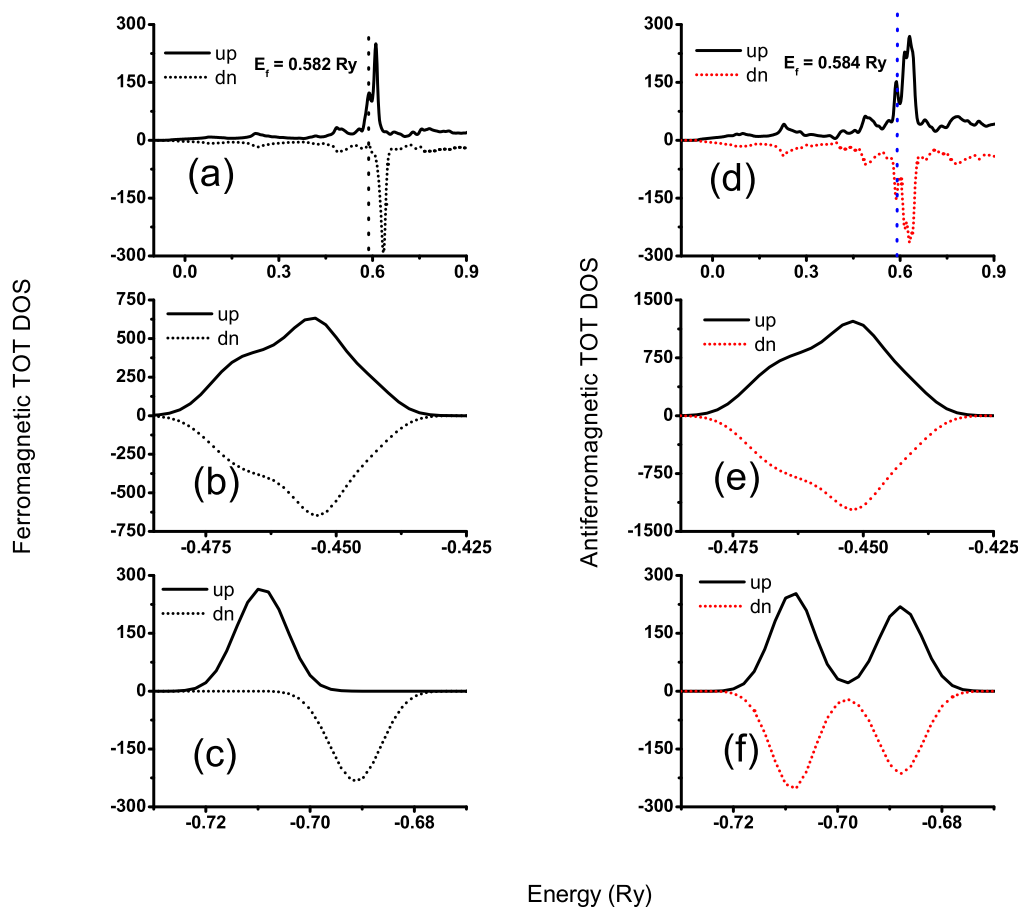
اثرهای ناشی از جهت گیریهای اسپینی در فاز AFM اجتناب کرده باشیم. نتایج فاز AFM(001) یا AFM(001)+SOC نشان می دهند که قله های چگالی حالات In 4d و Ce 4p تقریباً در فازهای AFM نسبت به فازهای FM و NM دو برابر شده اند. این دو برابر شدن چگالی حالات فازهای NM و FM نسبت به فازهای AFM با این واقعیت که تعداد الکترونها نیز در رفتن از سلول شیمیایی به ابرسلول مغناطیسی دوبرابر می شود سازگار است.



شکل ۶: چگالی حالت‌های کل در فازهای AFM(001) و AFM(001)+SOC.

چگالی حالات فازهای فرومغناطیسی و پادفرومغناطیسی را برای پنجره های مختلف انرژی باهم مقایسه کرده ایم. نتایج (تقارن) عدم تقارن چگالی حالات کل را در پنجره ظرفیت برای فاز (پاد) فرومغناطیسی نشان می دهند که منجر به ممان مغناطیسی کل (صفر) غیر صفر بر سلول واحد می شود. ناحیه شبه مغزه به دو پنجره متفاوت انرژی تفکیک شده است. در پنجره شبه مغزه اول که فقط حالت‌های In 4d در آنجا قرار دارند تفکیک فازهای فرومغناطیسی و پادفرومغناطیسی دشوار است، زیرا هردوی آنها متقارن هستند که تقارن در چگالی حالات فاز فرومغناطیسی گواه آن است که حالت In 4d قادر به مشارکت مغناطیسی به طور چشمگیر نمی تواند باشد. از سوی دیگر تقارن و عدم تقارن موجود در چگالی حالات 5p Ce در ناحیه شبه مغزه به ترتیب در فاز

پادفرومغناطیسی و فاز فرومغناطیسی نشان می دهد که اوربیتال 5p اتم سریم مشارکت بیشتری در اعمال ممان مغناطیسی نسبت به اوربیتال 4d In دارد.

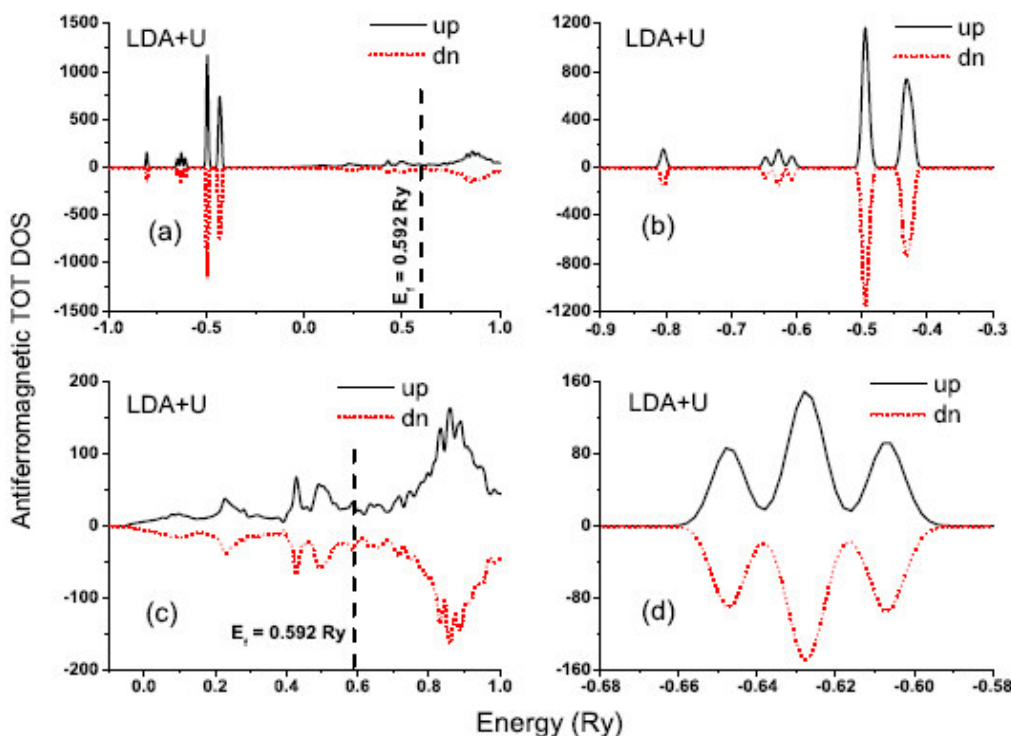


شکل ۷: چگالی حالت‌های کل در فازهای FM+SOC (شکل‌های سمت چپ) و AFM(001)+SOC (شکل‌های سمت راست)، در پنجره‌های انرژی متفاوت.

سپس اسپین‌های 4f اتم سریم را از (۰۰۱) به (۱۱۱) تغییر جهت دادیم و چگالی حالات را مجدداً در حضور برهمکنش اسپین-مدار به طور خودسازگار محاسبه کردیم. چگالی حالات به طور کیفی مشابه با چگالی حالات مرحله قبل که در آن ممان‌های مغناطیسی سریم در راستای (۰۰۱) جهت گیری کرده بودند به دست آمد. اما به طور کمی فقط تغییر جهت ممان‌های مغناطیسی سریم از (۰۰۱) به (۱۱۱) سبب می شود که مقادیر $DOS(E_F)$ از 167.47 states/(spin.Ry) به 127.98 states/(spin.Ry) برای اسپین‌های بالا و از 167.24 states/(spin.Ry) به

128.24 states/(spin.Ry) برای اسپینهای پایین تغییر یابند. چنین تغییراتی می توانند کمیت‌های حساس فیزیکی را تحت تاثیر قرار دهند.

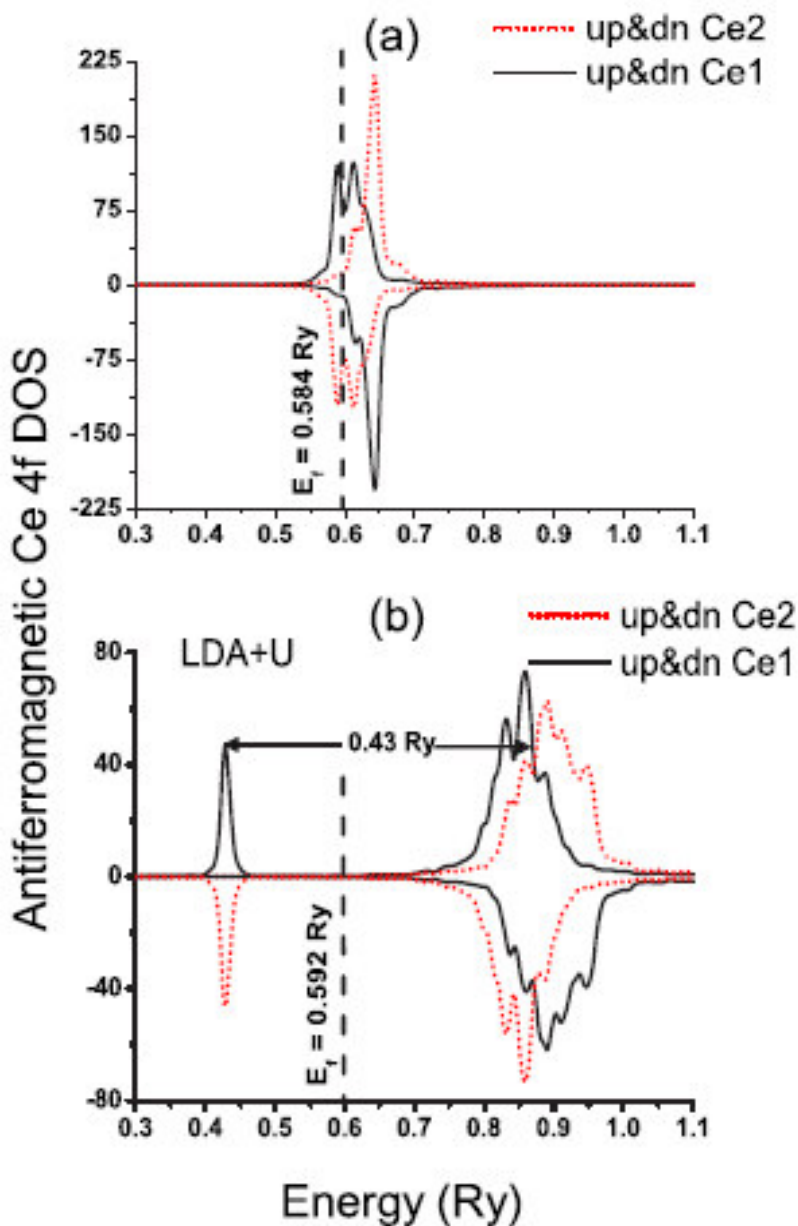
در این مرحله یک همبستگی مناسب را بین الکترونهای 4f اتم سریم با بکار بردن تقریب LDA+U وارد محاسبات کردیم. جهت گیریهای اسپینی 4f در مرحله قبلی یعنی فاز AFM(111)+SOC به طور پادفرومغناطیسی در راستای (111) حفظ، و برهمکنش اسپین-مدار نیز در محاسبات LDA+U در نظر گرفته شدند. محاسبه اخیر آخرین فاز "AFM(111)+SOC+LDA+U" ما را در این پژوهش تشکیل می دهد. چگالی حالات کل فاز در شکل زیر نشان داده شده اند. نتیجه حکایت از کاهش عمده چگالی حالات در سطح فرمی به اندازه 28.11 states/(spin Ry) برای اسپینهای بالا و پایین دارد. چگالی حالات به طور جداگانه در نواحی ظرفیت و نیمه مغزه نمایش داده شده اند. چگالی حالت‌های ناحیه نیمه مغزه یک شکافتگی اضافه تر در قیاس با فاز AFM(111)+SOC را در یکی از شاخه های 5p Ce DOS نشان می دهد. این شکافتگی اضافه تر در ناحیه نیمه مغزه گواه آن است که همبستگی میان الکترونهای 4f نه تنها حالت‌های 4f را به طور مستقیم بلکه حالت‌های نیمه مغزه 5p Ce را به طور غیر مستقیم تحت تاثیر قرار می دهد.



شکل ۸: چگالی حالت‌های کل فاز AFM(111)+SOC+LDA+U در (a) نواحی شبه مغزه و ظرفیت (b) ناحیه شبه مغزه، (c) ناحیه ظرفیت، (d) یک بازه کوچک از ناحیه شبه مغزه که در آن شکافتگی اضافی ناشی از LDA+U مشهود است.

دو اتم غیر یکسان سریم با جهت‌های اسپینی متضاد در ابر سلول مغناطیسی وجود دارند، که به صورت Ce1 و Ce2 برچسب زده شده‌اند. چگالی حالات اتمهای Ce1 و Ce2 در شکل زیر برای دو فاز AFM(111)+SOC و AFM(111)+SOC+LDA+U نمایش داده شده‌اند. چگالی حالات بالا و پایین 4f اتم Ce1 نسبت به یکدیگر متقارن نمی‌باشند، که این امر در مورد اتم Ce2 نیز به همین صورت صادق است. این در حالی است که روی هم رفته چگالی حالات Ce 4f بدون توجه به برچسبهای ۱ و ۲ کاملاً متقارن است. بنابراین علی‌رغم آن که Ce1 و Ce2 به طور جداگانه می‌توانند ممان مغناطیسی اعمال نمایند، هیچ‌گونه ممان مغناطیسی خالصی بر کل ابر سلول مغناطیسی اعمال نمی‌شود. چگالی حالات 4f فاز AFM(111)+SOC نیز در شکل نشان داده شده است تا بدین ترتیب مقایسه آن با فاز AFM(111)+SOC+LDA+U با سهولت بیشتری صورت پذیرد. نتیجه مقایسه اخیر نشان می‌دهد که کاهش فاحش چگالی حالات در سطح فرمی به طور عمده از شکافتگی بین نوارهای اشغال شده و اشغال نشده 4f سرچشمه می‌گیرد. چنین شکافتگی‌ای در محاسبات LDA+U ناشی از پارامتر U هابارد دافعه کولمبی می‌باشد. چگالی حالات Ce 4f در تقریب GGA در نزدیکی سطح فرمی قرار می‌گیرد. این در حالی است که تقریب LDA+U سبب می‌شود که چگالی حالات Ce 4f دور از سطح فرمی تشکیل شود. اعمال پتانسیل دافعه U سبب می‌شود که نوارهای اشغال شده به پایین سطح فرمی کشیده شوند و نوارهای اشغال نشده به بالای سطح فرمی سوق داده شوند. انرژی جدایی را برابر با 0.43 Ry بین نوارهای بالا و پایین محاسبه کرده ایم. بنابراین سهم مشارکت Ce 4f در مقدار $DOS(E_F)$ به شدت کاهش یافته است. عقب نشینی Ce 4f DOS از نزدیکی سطح فرمی خاطر نشان می‌کند که الکترونهای 4f در حال از دست دادن ویژگی سیار بودن و در نتیجه افزایش میزان جایگزیدگی خود می‌باشند. به منظور قضاوت در باره تمایل الکترونهای 4f جهت روشن کردن درجه جایگزیدگی آنها می‌توان نتایج به دست آمده را باهم مقایسه کرد. مقایسه نتایج نشان می‌دهد که حالت‌های Ce 4f نقش مهمی را ایفا می‌کنند که نباید نادیده انگاشته شود. نکته اخیر می‌تواند از دو واقعیت زیر استنتاج شود. ابتدا در فضای انرژی، حالت‌های 4f روی یک بازه انرژی توزیع شده‌اند که در آن نوارهای ظرفیت دیگر، مثلاً حالت‌های In، نیز توزیع شده‌اند. دیگر آن که در فضای حقیقی، هر اتم In توسط چهار اتم سریم محاصره شده‌اند. بنابراین حالت‌های 4f حتی پس از اعمال LDA+U با نوارهای دیگر ظرفیت به خوبی هیبرید شده‌اند. لذا غیرجایگزیدگی با LDA+U کاهش یافته، اما از بین نرفته است. بنابراین، نتیجه می‌گیریم که نه تنها نباید به طور نوارگونه، بلکه نباید به طور مغزه باز نیز با الکترونهای 4f در این ترکیب رفتار شود. رفتار نوار گونه به دلیل قراردادن الکترونهای 4f دقیقاً در سطح فرمی قابل اعتماد نیست. بنابراین رفتار نوارگونه میزان هیبرید شدن الکترونهای 4f را با سایر نوارهای ظرفیت بیشتر از مقدار واقعی به دست می‌دهد.

رفتار مغزه باز نیز به دلیل محبوس کردن الکترونهاي 4f در درون مغزه قابل اعتماد نیست. بنابراین رفتار نوارگونه میزان هیبرید شدن الکترونهاي 4f را با سایر نوارهای ظرفیت کمتر از مقدار واقعی به دست می دهد.



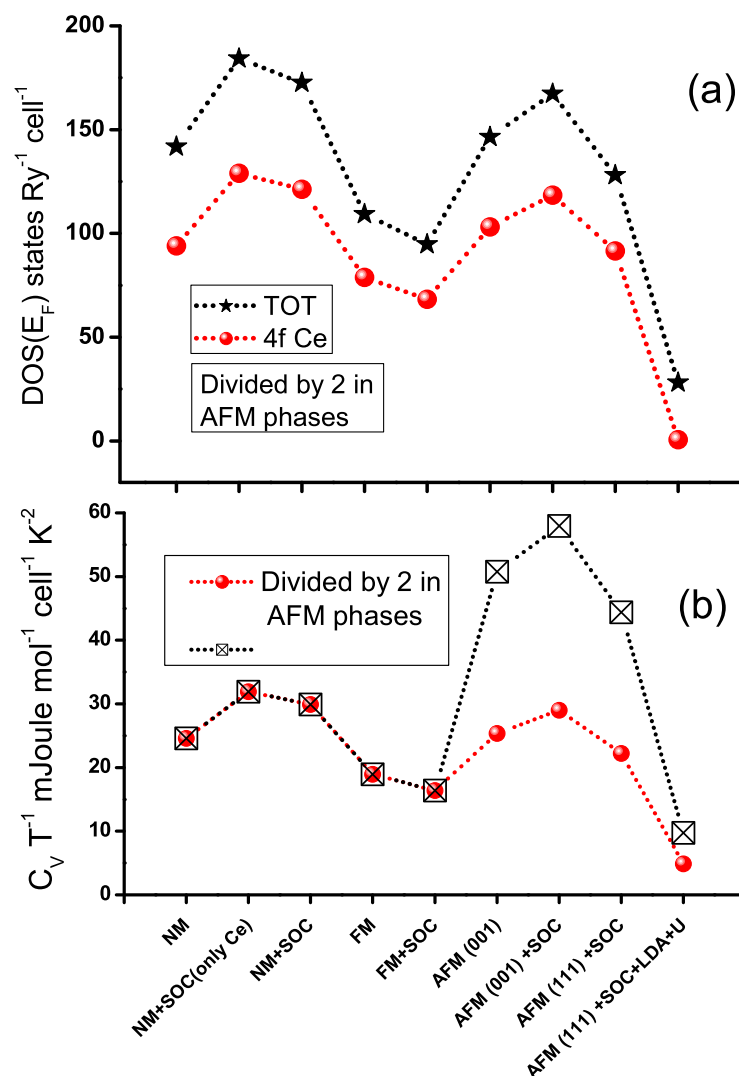
شکل ۹: چگالی حالتهاي 4f فاز (a) AFM(111)+SOC و فاز (b) AFM(111)+SOC+LDA+U. منحنیهای توپر (نقطه چین) چگالی حالات بالا و پایین Ce1 (Ce2) را نمایش می دهند، که در آن اندیس ۱ (۲) به نظم بالا (پایین) اشاره می کند. ترازهای فرمی با خطوط نقطه چین برای هر حالت نمایش داده شده اند.

فصل چهارم

ظرفیت گرمایی ویژه

در این فصل، به منظور تثبیت تفکر به کار رفته در این پژوهش مقایسه رفتار ظرفیت گرمایی ویژه با رفتار $DOS(E_F)$ برحسب فازهای معرفی شده در فصل قبل مفید به نظر می رسد. یافته های این مقایسه در فصل پنجم مرتبط با هدف اصلی این پژوهش خواهد شد تا به درک این که آیا چنین مقایسه ای را می توان به کمیت EFG نیز تعمیم داد یا خیر نایل شویم. بنابراین مقادیر محاسبه شده چگالی حالات کل و $4f\text{ Ce}$ در سطح فرمی را برحسب فازهای توصیف شده در فصل قبل رسم کرده ایم. تعداد اتمها در همه فازهای پادفرو مغناطیسی دو برابر تعداد فازهای دیگر است. نکته اخیر همچنین در مورد $DOS(E_F)$ نیز صادق است. پس مقادیر $DOS(E_F)$ بر دو برای همه فازهای AFM تقسیم شده اند. در این صورت می توان AFM- $DOS(E_F)$ را با $DOS(E_F)$ های فازهای دیگر مستقل از تعداد اتمها در سلولهای شیمیایی و مغناطیسی مقایسه کرد. با انجام چنین مقایسه ای امکان تمرکز فقط بر اثرات نظم مغناطیسی وجود دارد. رفتار منحنی $DOS(E_F)$ بر حسب فازهای مختلف استخوان بندی این تحقیق را برای نیل به اهداف آن تشکیل می دهد. ظرفیت گرمایی ویژه را در غیاب برهمکنشهای فونون-فونون و الکترون-فونون محاسبه کرده ایم، و ضریب خطی زامرفیلد، $\gamma = C_V/T$ ، را بر حسب تمام فازها رسم کرده ایم. رفتار $\gamma = C_V/T$ به زیبایی رفتار $DOS(E_F)$ بر حسب فازها را، مشروط بر آن که ظرفیتهای گرمایی محاسبه شده نیز بر دو به ازای فازهای AFM تقسیم شوند، تقلید می کند. مشاهده چنین سازگاری کاملی بین رفتار ظرفیت گرمایی از یک سو و رفتار $DOS(E_F)$ از سوی دیگر بر حسب فازهای معرفی شده جای تعجب ندارد. محاسبات ظرفیت گرمایی با در نظر گرفتن فقط برهمکنشهای الکترون-الکترون انجام شده اند. به طور تحلیلی می توان به آسانی با صرف نظر کردن از برهمکنشهای فونونی فرمول $C_V/T = 1/3\pi^2 K_B^2 DOS(E_F)$ را اثبات کرد [۲۹]. این فرمول یک رابطه خطی را بین γ و $DOS(E_F)$ نشان می دهد. خط و مشی تشریح شده در بالا به طور عددی موقعیتی را فراهم می آورد که توسط آن می توان در فصل بعد پی به رابطه خطی موجود بین EFG و $DOS(E_F)$ برد. این فصل را با گزارش مقدار 9.74 mJ/(mol cell K²) از محاسبات LDA+U به پایان می بریم. این مقدار محاسبه شده γ تقریباً به اندازه یک مرتبه بزرگی از مقدار به طور تجربی [۳۰] اندازه گیری شده (130 mJ/(mol cell K²)) کوچکتر است. ناهمخوانی

موجود بین مقادیر تجربی و نظری با تمام محاسبات ابتدا به ساکن دیگر در غیاب برهمکنشهای فونونی سازگار است [۳۱-۳۳].



شکل ۱۰: (a) چگالی حالت‌های کل و 4f DOS بر حسب فازهای مختلف تعریف شده در متن ثر ترازهای فرمی متناظر آنها. این مقادیر در فازهای پادرومغناطیسی بر دو تقسیم شده اند. (b) ضریب خطی سامرفیلد ظرفیت گرمایی الکترونی نمایش داده شده با مربعهای ضربدردار بر حسب تمام فازها. جهت انجام مقایسه این ضرایب، نمایش داده شده با دایر تو پر، بر دو در فازهای پادرومغناطیسی تقسیم شده اند.

فصل پنجم

گرادیان میدان الکتریکی

گرادیان میدان الکتریکی (EFG) یک تانسور مرتبه دو است. تانسور EFG فقط دو مولفه مستقل در دستگاه محاورهای اصلی (PAS) دارد. محورهای دستگاه به گونه ای انتخاب شده اند که رابطه $|V_{zz}| \geq |V_{yy}| \geq |V_{xx}|$ برقرار باشد. پس می توان فقط مولفه اصلی گرادیان میدان الکتریکی، V_{zz} ، و پارامتر عدم تقارن $\eta = \frac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}}$ را برای تعیین دو مولفه مستقل EFG در PAS ارزیابی کرد. در این پژوهش ما فقط بر V_{zz} به عنوان گرادیانهای میدان الکتریکی متمرکز می شویم، چون پارامترهای عدم تقارن بلور مورد نظر ما صفر می باشند. مولفه اصلی تانسور گرادیان میدان الکتریکی را از رابطه زیر محاسبه کرده ایم [۳۴]:

$$V_{zz} = \lim_{r \rightarrow 0} \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{V_{20}}{r^2},$$

که در آن ضریب پتانسیل شعاعی، V_{20} ، در روش LAPW به صورت زیر محاسبه شده است [۳۴ و ۸]:

$$V_{20}(r=0) = \frac{1}{5} \int_0^{R_{MT}} \frac{\rho_{20}}{r^3} \left\{ 1 - \left(\frac{r}{R_{MT}} \right)^5 \right\} d^3r + 4\pi \sum_{\vec{K}} V(\vec{K}) j_2(KR_{MT}) Y_{20}(\vec{K}).$$

جمله اول، انتگرال، سهم گرادیان میدان الکتریکی الکترونها درون و روی یک کره موافق-تین به شعاع R_{MT} را به دست می دهد. جمله دوم، مجموع، سهم گرادیان میدان الکتریکی الکترونها کاملاً خارج از کرات موافق-تین را به دست می دهد. سهم الکترونها درون کره EFG-ی ظرفیت نامیده می شود، که در اینجا ما آن را با V_{zz}^{val} نمایش می دهیم. سهم الکترونها روی سطح و خارج آن EFG-ی شبکه نامیده می شود، که در اینجا ما آن را با V_{zz}^{lat} نمایش می دهیم.

گرادیان میدان الکتریکی، V_{zz} ، و مولفه های متناظر ظرفیت، V_{zz}^{val} ، و شبکه، V_{zz}^{lat} ، آن به ازای تمام فازهای معرفی شده در بخش ساختار الکترونی محاسبه شده اند. نتایج ما با نتایج تجربی و محاسبات انجام شده توسط دیگران در جدول ۱ مقایسه شده اند. توابع عدم تقارن $\Delta p(E_F)$ و $\Delta d(E_F)$ نیز محاسبه شده و در جدول ۲ برای تمام فازها آورده شده اند. نتایج موجود در جدول ۱ نشان می دهند که EFG محاسبه شده فاز AFM(111)+SOC+LDA+U در توافق بهتری با تجربه نسبت به محاسبات قبلی است [۳ و ۱]. سازگاری بیشتر

با تجربه موید این امر است که همبستگی الکترونیهای 4f به طور مناسبتری در روش LDA+U در نظر گرفته شده است. از نتایج موجود در جدول ۲ مشاهده می شود که در مکان In قدر مطلق $\Delta p(E_F)$ به اندازه یک مرتبه بزرگی بیشتر از قدر مطلق مقدار $\Delta d(E_F)$ می باشد، که البته این نکته در مکان Ce صادق نیست. در مکان سریم، قدر مطلق $\Delta p(E_F)$ به اندازه یک مرتبه بزرگی کوچکتر از قدر مطلق مقدار $\Delta d(E_F)$ است، یعنی $|\Delta p(E_F)| < |\Delta d(E_F)|$. به نکته اخیر به زودی خواهیم گشت.

جدول ۱: مولفه اصلی گرادیانهای میدان الکتریکی، V_{zz} ، و مولفه های ظرفیت، V_{zz}^{val} ، و شبکه، V_{zz}^{lat} ، آن بر حسب واحد در مکانهای In و Ce به ازای تمام فازهای تعریف شده در متن به انضمام نتایج محاسبات دیگران و همچنین EFG تجربی در مکان In. در مکان Ce مقدار تجربی برای گرادیانهای میدان الکتریکی تا کنون گزارش نشده است.

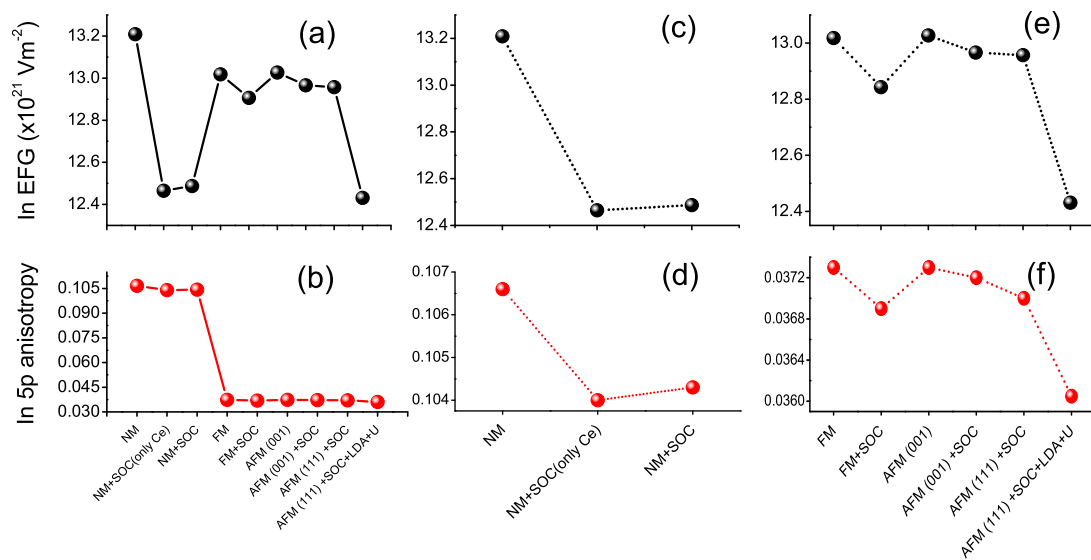
Phase	Inte.		$\vec{M}^{ }$	V_{zz}		V_{zz}^{val}		V_{zz}^{lat}	
	SOC	LDA+U		In	Ce	In	Ce	In	Ce
NM	No	No		13.209	0	13.263	0	-0.054	0
NM	Only Ce	No		12.466	0	12.515	0	-0.049	0
NM	Yes	No		12.847	0	12.538	0	-0.051	0
FM	No	No		13.018	0	13.024	0	-0.006	0
FM	Yes	No	(001)	12.843	0.082	12.867	0.105	-0.024	-0.023
AFM	No	No	(001)	13.027	0.089	13.032	0.086	-0.005	-0.003
AFM	Yes	No	(001)	12.966	0.086	12.968	0.066	-0.002	-0.002
AFM	Yes	No	(111)	12.857	0.029	12.961	0.040	-0.004	-0.011
AFM	Yes	Yes	(111)	12.431	-2.863	12.442	-2.889	-0.011	0.026
$\otimes AFM$	Yes	No	(111)	12.490	-	12.540	-	-0.050	-
$\otimes AFM^{exp}$			unknown	11.6	-	-	-	-	-

$\left\{ \begin{array}{l} \otimes Ref. 3 \\ \otimes Ref. 1 \end{array} \right.$

جدول ۲: توابع عدم تقارن p و d ظرفیت، $\Delta p(E_F)$ ، و $\Delta d(E_F)$ ، ارزیابی شده در مکانهای In و Ce بر حسب فازهای توصیف شده در متن.

Phase	Inte.		$\vec{M}^{ }$	Δp		Δd	
	SOC	LDA+U		In	Ce	In	Ce
NM	No	No		0.1066	0	-0.0060	0
NM	Only Ce	No		0.1040	0	-0.0061	0
NM	Yes	No		0.1043	0	-0.0061	0
FM	No	No		0.0373	0	-0.0050	0
FM	Yes	No	(001)	0.0369	0	-0.0052	0
AFM	No	No	(001)	0.0373	0.00015	0.0025	0.00130
AFM	Yes	No	(001)	0.0372	0.00005	0.0024	0.00130
AFM	Yes	No	(111)	0.0370	-0.00010	0.0024	-0.00085
AFM	Yes	Yes	(111)	0.0361	0.00715	0.0026	0.01880

آنچه که در اینجا برای ما اهمیت دارد، مطالعه تغییرات EFG و توابع عدم تقارن مناسب بر حسب فازهای توصیف شده برای به دست آوردن یک رابطه خطی بین EFG و $DOS(E_F)$ است. بنابراین به انجام مقایسه های بیشتر بین داده های موجود در جدولهای ۱ و ۲ به طور نمایشی در شکل زیر پرداخته شده است.



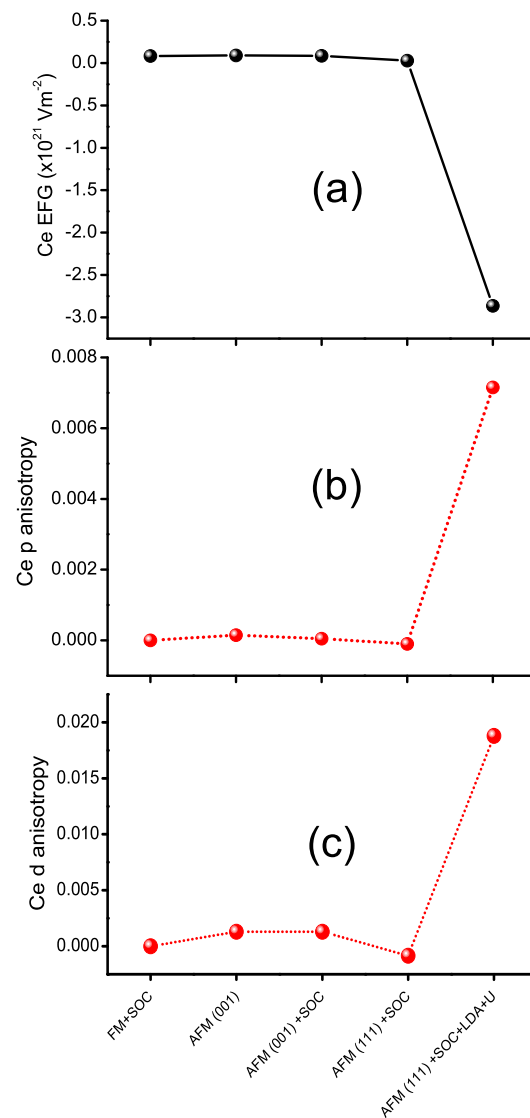
شکل ۱۱: (a) EFG محاسبه شده در مکان In و (b) تابع عدم تقارن In 5p به ازای تمام فازهای غیر مغناطیسی و مغناطیسی تعریف شده در متن. نتایج مشابه همچنین در (c) و (d) برای فقط فازهای غیرمغناطیسی و در (e) و (f) برای فقط فازهای مغناطیسی نمایش داده شده اند.

در شکل فوق V_{zz} و Δp ، که هر دو در مکان In ارزیابی شده اند، را بر حسب تمام فازها رسم کرده ایم. به طور کلی باور عمومی بر این است که سهم عمده EFG از حالت های p نشات می گیرد [۳۴]. بنابراین می توان انتظار داشت که بین EFG و Δp یک رابطه خطی وجود داشته باشد، یعنی $EFG \propto \Delta p(E_F)$. این آن نکته ای است که توقع می رود از مقایسه شکلهای a و b فوق حاصل شود. اما درک رابطه خطی $EFG \propto \Delta p(E_F)$ از طریق مقایسه این دو شکل دشوار می نماید. بنابراین به منظور آشکار ساختن چبین رابطه خطی ای، سه فاز مغناطیسی را از شش فاز غیر مغناطیسی دیگر جدا کرده ایم. V_{zz} و Δp ، به ترتیب، در شکلهای c و d فوق بر حسب فازهای غیر مغناطیسی نمایش داده شده اند. نتایج مشابه، V_{zz} و Δp ، به طور جداگانه در شکلهای e و f نمایش داده شده اند. حال به وضوح می توان رابطه خطی بین EFG و Δp را بین فازهای غیر مغناطیسی با مقایسه

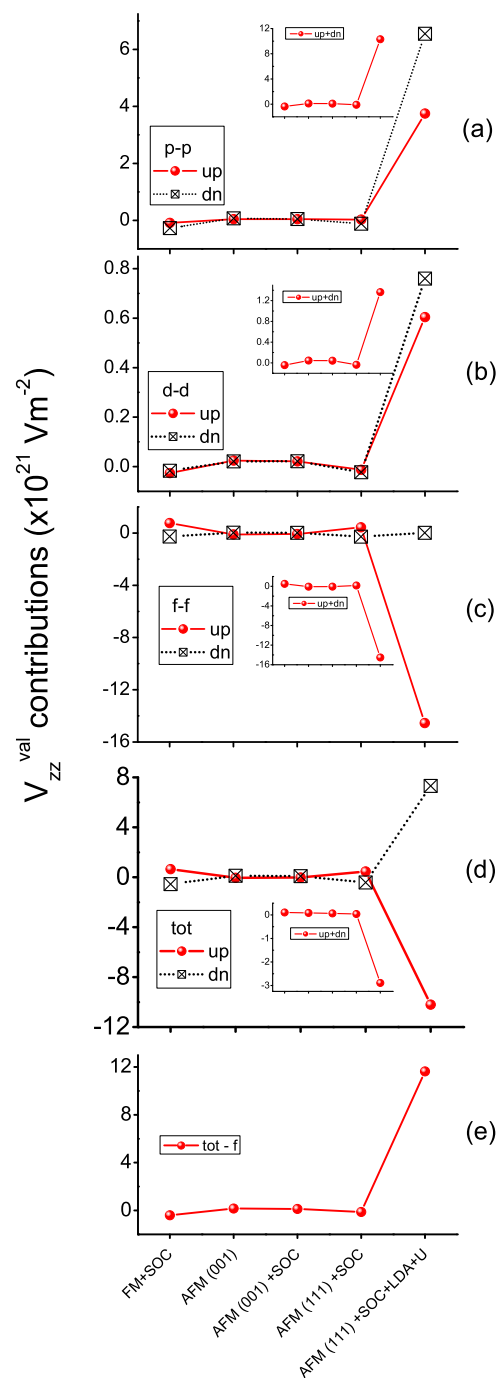
رفتار V_{zz} ، شکل (c) 11، و رفتار Δp ، نشان داده شده در شکل (d) ۱۱، به وضوح مشاهده نمود. آنها مشابه یکدیگر در بین فازهای غیر مغناطیسی رفتار می کنند. این امر همچنین در مورد فازهای مغناطیسی نیز صادق است، زیرا V_{zz} نمایش داده شده در شکل (e) ۱۱ مشابه با Δp نمایش داده شده در شکل (f) ۱۱ برحسب فازهای مغناطیسی رفتار می کند. حال زمان برای استنباط وجود یک رابطه تقریباً خطی بین EFG و $DOS(E_F)$ مناسب به نظر می رسد، یعنی $EFG \propto DOS(E_F)$. این رابطه خطی را می توان درک نمود، اگر رفتار $DOS(E_F)$ نشان داده شده در شکل (a) 4 با رفتار V_{zz} نشان داده شده در شکل‌های (c) ۱۱ و (e) ۱۱ مقایسه کنیم. مقایسه اخیر این نتیجه را به دست می دهد که EFG تقریباً به طور خطی متناسب با $DOS(E_F)$ می باشد. این نتیجه به این دلیل به دست آمده است که V_{zz} و $DOS(E_F)$ برحسب تمام فازها رفتار مشابهی را از خود نشان می دهند. این نوع استنتاج شبیه به شگرد ما در استنباط رابطه $C_V/T = 1/3\pi^2 K_B^2 DOS(E_F)$ در فصل چهار می باشد. نتایج نشان می دهند که ضریب تناسب برای فازهای غیر مغناطیسی منفی است، در حالی که این ضریب برای فازهای مغناطیسی مثبت می باشد. در حالت اول این ضریب منفی است زیرا V_{zz} و $DOS(E_F)$ به طور معکوس متناسب با یکدیگر برحسب فازهای غیرمغناطیسی تغییر می کنند. اما آنها به طور مستقیم متناسب با یکدیگر برحسب فازهای مغناطیسی تغییر می کنند، که این امر منجر به ضریب تناسب مثبت بین آنها می شود. بعلاوه، همچنین می توان نتیجه گرفت که مقدار $4f-DOS(E_F)$ قادر است به طور عمده بر EFG تاثیر بگذارد. این نتیجه اخیر را می توان به دلیل شباهت بین رفتار $DOS(E_F)$ و $4f-DOS(E_F)$ که در شکل (a) 4 نشان داده شده اند مورد تایید قرار داد. نتیجه قبلی $EFG \propto DOS(E_F)$ اطمینان می دهد که EFG همچنین می تواند متناسب با $4f DOS(E_F)$ باشد، یعنی $EFG \propto DOS^{4f}(E_F)$. تناسب آخر بین EFG و $4f DOS(E_F)$ روش رفتار با الکترونها $4f$ را تعیین کننده تر می سازد. نکته اخیر توصیف می کند که چرا مقدار EFG در مکان In در محاسبات LDA+U کمتر از مقادیر به دست آمده در کلیه محاسبات انجام شده در غیاب LDA+U می باشد. این توصیف را می توان بادر نظر گرفتن شکافتگی 0.43 ریدبرگی نشان داده شده در شکل (b) 9 بین نوارهای اشغال شده و اشغال نشده ناشی از برهمکنش LDA+U ارایه نمود. این شکافتگی سبب می شود که حالت‌های $4f$ از نزدیکی سطح فرمی به عقب انتقال داده شوند، که این عقب نشینی خود سبب $4f DOS(E_F)$ کاهش می گردد. کاهش چگالی حالت‌های $4f$ به انضمام رابطه شرح داده شده $EFG \propto DOS^{4f}(E_F)$ توصیف رضایتبخشی را ارایه می کند که چرا EFG در اثر برهمکنش LDA+U کاهش می یابد. تمام این نتایج دست آورد قبلی ما را در بخش ۳،۳ در ارتباط با اهمیت نقش الکترونها $4f$ در این ترکیب مورد حمایت قرار می دهد. در مکان سریم به دلیل تقارن مکعبی آن EFG-ها در تمام فازهای غیر مغناطیسی و همچنین فاز FM مطابق نتایج ارایه شده در

جدول ۱ برابر با صفرند. اما نتایج ما در فاز FM+SOC و در تمام فازهای پادفرومغناطیسی مقادیر غیر صفری را برای EFG در این مکان نشان می دهند. مقادیر غیر صفر محاسبه شده برای EFG-ها از این واقعیت ناشی می شوند که SOC یا نظم مغناطیسی می تواند سبب انحراف کوچکی از تقارن مکعبی شود. این انحراف کوچک توقع یک EFG کوچک را ایجاد می کند. نتایج ما غیر از نتیجه به دست آمده برای آخرین فاز، AFM(111)+SOC+LDA+U، در جدول ۱ نکته اخیر را تایید می کند. برای فاز آخر AFM(111)+SOC+LDA+U نیز در عمل EFG در مکان Ce مقدار کوچکی است اما به اندازه دو مرتبه بزرگی از سایر مقادیر غیر صفر فازهای دیگر در این مکان بزرگتر است. به منظور یافتن علت چنین تفاوتی روش قبلی خود را یعنی نگاه کردن به رفتار EFG و توابع عدم تقارن بر حسب فازهای معرفی شده دنبال می کنیم. مقادیر EFG-های محاسبه شده می توانند با مقادیر Δp برای فازهای مغناطیسی (غیر از فاز FM که برای آن EFG دقیقاً برابر صفر است) با استفاده از شکل‌های 12(a) و 12(b) مقایسه شوند. این مقایسه رفتار یکسانی را برای EFG و Δp در امتداد فازهای مغناطیسی پیشینی نمی کند. به منظور یافتن علت آنکه چرا آنها رفتار یکسانی را از خود نشان نمی دهند اکنون به نکته ای باز می گردیم که در آن ذکر شده بود که $|\Delta d(E_F)| > |\Delta p(E_F)|$ در مکان Ce، جدول ۲ را ببینید. ابتدا به دلیل بزرگ بودن مقدار $|\Delta d(E_F)|$ نسبت به مقدار $|\Delta p(E_F)|$ ممکن است گمان کنیم که رفتار EFG شبیه به رفتار $|\Delta d(E_F)|$ باشد. رفتارهای EFG و $\Delta d(E_F)$ در شکل‌های 12(a) و 12(c) با هم مقایسه شده اند. اما آنها هم یک رفتار مشابه را نشان نمی دهند. بنابراین قادر به باز تولید رفتار EFG با استفاده از $\Delta p(E_F)$ و $\Delta d(E_F)$ نیستیم. به منظور درک عمیقتر، EFG را به سهم‌های ظرفیتش تجزیه کرده ایم. نتایج، مجموع اسپین‌های بالا و پایین، در شکل 13 نمایش داده شده اند. مقایسه شکل‌های 13(a) و 13(b) نشان می دهد که سهم حالت‌های d یک مرتبه بزرگی از سهم حالت‌های p در تولید گرادیان میدان الکتریکی کمتر است. این در حالی است که، همان طور که قبلاً بیان شده بود، $|\Delta d(E_F)|$ یک مرتبه بزرگی از $\Delta p(E_F)$ بزرگتر است. بنابراین حتی برای حالت $|\Delta d(E_F)| > |\Delta p(E_F)|$ سهم اوربیتال‌های p در تولید گرادیان میدان الکتریکی بیشتر از سهم اوربیتال‌های d است. این نتیجه در توافق کامل با نتیجه به دست آمده در مرجع ۳۴ برای عناصر واسطه است. با این وجود، یک نتیجه مهم و متفاوت می تواند از مقایسه شکل 13(c) با شکل 12(a) به دست آید. نتیجه آن است که EFG به طور عمده از الکترون‌های f در مکان Ce سرچشمه می گیرد. کلیه سهم‌های ظرفیت در تولید EFG در شکل 13(d) را با یکدیگر جمع کرده ایم. نتایج نشان می دهند که رفتار EFG نشان داده شده در شکل 12(a) مشابه با سهم EFG کل نشان داده شده در شکل 13(d) است. سهم‌های شبکه در تولید EFG نیز نمی تواند این شباهت را برهم زند، زیرا آنها همان طور که در جدول 1 آورده شده اند قابل صرف

نظر کردن می باشند. بنابراین سهم حالت های f در تولید گرادیان میدان الکتریکی در مکان Ce تعیین کننده می باشد.



شکل ۱۲: (a) EFG محاسبه شده در مکان Ce و (b) تابع عدم تقارن Ce p و (c) تابع عدم تقارن Ce d به ازای فازهای تعریف شده در متن که در آنها EFG محاسبه شده در مکان Ce مقدار غیر صفر به دست داده است.



شکل ۱۳: (a) سهمهای ظرفیت بالا و پایین EFG ارزیابی شده در مکان Ce برای فازهای مغناطیسی تعریف شده در متن از فاز FM+SOC تا فاز FM(111)+SOC+LDA+U. (در مکان Ce سهم EFG در فاز FM در غیاب برهمکنش SOC به دلیل تقارن مکعبی برابر صفر است).

نتیجه گیری

در این فعالیت پژوهشی تغییرات گرادیانهای میدان الکتریکی، سهمهای ظرفیت و همچنین توابع عدم تقارن آنها در مکانهای سریم و ایندیم در ترکیب CeIn_3 در حالتی گوناگونی مورد ارزیابی قرار گرفته است. برای هریک از این حالتها چگالی حالتها در سطح فرمی، $\text{DOS}(E_F)$ ، محاسبه شده اند. ما دریافتیم که مقایسه کردن رفتار EFG با رفتار $\text{DOS}(E_F)$ برحسب شرایط اعمال شده می تواند خط و مشی مفیدی برای به دست آوردن خواص فیزیکی باشد. ما با استفاده از این خط و مشی دریافتیم که مولفه اصلی گرادیان میدان الکتریکی تقریباً متناسب با مقدار چگالی حالتی کل در سطح فرمی $\text{DOS}(E_F)$ و همچنین $4f\text{-DOS}(E_F)$ است. علی رغم آنکه تابع عدم تقارن حالتی d بزرگتر از تابع عدم تقارن حالتی p در مکان سریم است، سهمهای مشارکتی در EFG نشأت گرفته از حالتی p در مکان Ce تعیین کننده تر نسبت به سهمهای مشارکتی در EFG نشأت گرفته از حالتی d است. با این وجود این درحالی است گرادیانهای میدان الکتریکی در مکان Ce توسط حالتی 4f به طور عمده تعیین می شوند، در حالی که آنها مطابق با معمول توسط حالتی p در مکان In به طور تعیین عمده می شوند. نتیجه نشان می دهد که حالتی 4f با نوارهای ظرفیت هیبرید می شوند، و نقش مهمی را ایفا می کنند که نباید نادیده انگاشته شود. بنابراین با استفاده از محاسبات ساختار نواری خود پیش بینی می کنیم که رفتار نوارگونه و رفتار مغزه باز هیچیک نمی تواند به ارایه نتایج رضایت بخش در مورد این ترکیب منجر شود. نتایج محاسبات LDA+U ما با تجربه در توافق بهتری است که این واقعیت را خاطرنشان می کند که همبستگی بین الکترونهای 4f به طور مناسبتری در نظر گرفته شده است. همبستگی بین الکترونهای 4f نه تنها به طور مستقیم بر حالتی 4f Ce بلکه به طور غیر مستقیم بر حالتی شبه مغزه 5p Ce در این ترکیب اثر می گذارد.

*Electronic address: sjalali@phys.ui.ac.ir

- [1] Y. Kohori, Y. Inoue, T. Kohara, G. Tomka, and P. C. Riedi, *Physica B* **259-261**, 103 (1999).
- [2] Y. Kohori, T. Kohara, Y. Yamato, G. Tomka, and P. C. Riedi, *Physica B* **281-282**, 12 (2000).
- [3] M. V. Lalić, J. Mestnik-Filho, A. W. Carbonari, R. N. Saxena, and H. Haas, *Phys. Rev. B* **65**, 054405 (2001).
- [4] K. Betsuyaku and H. Harima, *J. Magn. Magn. Mater.* **272-276**, 187 (2004).
- [5] J. M. Lawrence and S. M. Shapiro, *Phys. Rev. B* **22**, 4379 (1980); J. P. Morin, C. Vettier, J. Flouquet, M. Konczykowski, Y. Lassailly, J. M. Mignot, and U. Welp, *J. Low Temp. Phys.* **70**, 377 (1988); B. Benoit, J. X. Boucherle, P. Convert, J. Flouquet, J. Palleau, and J. Schweizer, *Solid State Commun.* **34**, 293 (1980).
- [6] N. D. Mathur, F. M. Grosche, S. R. Julian, I. R. Walker, D. M. Freye, R. K. W. Haselwimmer, and G. G. Lonzarich, *Nature (London)* **394**, 39 (1998).
- [7] J. Yu, A. J. Freeman, R. Podloucky, P. Herzig, and P. Weinberger, *Phys. Rev. B* **43**, 532 (1991).
- [8] K. Schwarz, C. Ambrosch-Draxl, and P. Blaha, *Phys. Rev. B* **42**, 2051 (1990).
- [9] J. Rusz and M. Biasini, *Phys. Rev. B* **71**, 233103 (2005).
- [10] S. J. Asadabadi, S. Cottenier, H. Akbarzadeh, R. Saki, and M. Rots, *Phys. Rev. B* **66**, 195103 (2002).
- [11] S. Jalali Asadabadi and H. Akbarzadeh, *Physica B* **349**, 76 (2004).
- [12] D. J. Singh and L. Nordström, *Planewaves, Pseudopotentials, and the LAPW Method*, 2nd ed. (Springer, New York, 2006), Vol. XIII, p. 134.
- [13] V. I. Anisimov and O. Gunnarsson, *Phys. Rev. B* **43**, 7570 (1991).
- [14] V. I. Anisimov, I. V. Solovyev, M. A. Korotin, M. T. Czyżyk, and G. A. Sawatzky, *Phys. Rev. B* **48**, 16929 (1993).
- [15] M. T. Czyżyk and G. A. Sawatzky, *Phys. Rev. B* **49**, 14211 (1994).
- [16] E. Sjörstedt, L. Nordström, and D. J. Singh, *Solid State Commun.* **114**, 15 (2000).
- [17] G. K. H. Madsen, P. Blaha, K. Schwarz, E. Sjörstedt, and L. Nordström, *Phys. Rev. B* **64**, 195134 (2001).
- [18] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, A864 (1964).
- [19] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).
- [20] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
- [21] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, *WIEN2k, An Augmented Plane Wave+Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties* (Karlheinz Schwarz, Techn. Universitat Wien, Austria, 1999).
- [22] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
- [23] D. D. Koelling and B. N. Harmon, *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 3107 (1997).
- [24] A. H. MacDonald, W. E. Pickett, and D. D. Koelling, *J. Phys. C* **13**, 2675 (1980); Lecture note of Pavel Novak (1997) on Spin-Orbit Coupling available from: http://www.wien2k.at/reg_user/textbooks/novak_lecture_on_spinorbit.ps; see also Ref. 12.
- [25] N. Kioussis, J. Thevenot, B. R. Cooper, and Q. G. Sheng, *J. Appl. Phys.* **79**, 6420 (1996).

- [26] A. B. Shick, W. E. Pickett, and A. I. Liechtenstein, cond-mat/0001255v1 (to be published).
- [27] H. Sawada, Y. Morikawa, K. Terakura, and N. Hamada, Phys. Rev. B **56**, 12154 (1997); S. L. Dudarev, G. A. Botton, S. Y. Savrasov, C. J. Humphreys, and A. P. Sutton, *ibid.* **57**, 1505 (1998).
- [28] I. R. Harris and G. V. Raynor, J. Less-Common Met. **9**, 7 (1965).
- [29] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed. (Wiley, Hoboken, NJ, 2005), Chap. 6, p. 144.
- [30] S. Nasu, A. M. van Diepen, H. H. Neumann, and R. S. Craig, J. Phys. Chem. Solids **32**, 2772 (1971); M. Nicklas, R. Borth, E. Lengyel, P. G. Pagliuso, J. L. Sarrao, V. A. Sidorov, G. Sparn, F. Steglich, and J. D. Thomson, J. Phys.: Condens. Matter **13**, L905 (2001).
- [31] L. Petit, A. Svane, W. M. Temmerman, Z. Szotek, and R. Tyer, Europhys. Lett. **62**, 391 (2003).
- [32] R. C. Albers, A. M. Boring, and N. E. Christensen, Phys. Rev. B **33**, 8116 (1986).
- [33] M. M. Steiner, R. C. Albers, and L. J. Sham, Phys. Rev. Lett. **72**, 2923 (1994).
- [34] P. Blaha, K. Schwarz, and P. H. Dederichs, Phys. Rev. B **37**, 2792 (1988).

مُحَمَّدٌ رَسُوْلُ اللهِ
اللَّهُمَّ صَلِّ وَسَلِّمْ عَلَى مُحَمَّدٍ وَآلِ مُحَمَّدٍ