سخنرانی عمومی ٤

مطالعه سطوح در نظریه تابعی چگالی

اکبرزاده، هادی؛ هاشمی فر، سیدجواد؛ اعلایی مجتبی

آزمایشگاه تحقیقاتی شبیه سازی کامپیوتری ، دانشگاه فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

چکیده

در این سمینار به بررسی کاربردهای نظریه تابعی چگالی، که امروز از تواناترین ابزارهای فیزیک ماده چگال برای مطالعه گستره وسیعی از مواد و ساختارها به شمار می رود، می پردازیم. سمینار از دو بخش کلی ۱. معرفی نظریه مذکور و ۲. ارائه مثال هایی از کاربرد آن در مطالعه سطوح و لایه های نازک، تشکیل شده است. در بخش اول مفاهیم اصلی و ضروری نظریه تابعی چگالی برای استخراج معادلات تک ذره کوهن – شم ، ارایه و انرژی تبادلی – همبستگی و دو روش مهم تقریب زدن آن توضیح داده می‌شوند. در ادامه به بحث مهم سیستم های مغناطیسی پرداخته و هامیلتونی کوه – شم مناسب برای مطالعه این مواد را استخراج می کنیم و سپس با استفاده از معادله دیراک، نحوه اعمال تصحیحات اسپینی به این هامیلتونی مطالعه می شوند. در انتهای بخش اول و قبل از ورود به بحث کاربردها به شرح برخی تکنیک‌های محاسباتی سطوح و لایه های نازک می پردازیم. در این مرحله مفاهیمی نظیر ابرسلول سطح، نحوه بهینه سازی ، واهلش و استخراج نتایج از آن بررسی خواهند شد.

بخش دوم به ارایه بحثی از نتایج دو پروژه محاسباتی لایه نازک در چارچوب نظریه تابعی چگالی، که دو گروه ما در حال اجام است، اختصاص دارد. موضوع اول مطالعه جذب مولکول CO روی سطح Pt(111) است. باتوجه به اثرات کاتالیزوری این سطح برای واکنش های اکسیداسیون CO، جذب این مولکول روی سطح Pt(111) مورد مطالعات تجربی و محاسباتی زیادی قرار گرفته است. پیش بینی های نظری انجام شده بر پایه محاسبات نظریه تابعی چگالی در مورد مکان پایدار جذب مولکول CO روی سطح Pt(111) با مشاهدات تجربی توافق ندارد. ما نشان داده ایم که این عدم توافق ناشی از تقریب های به کار رفته برای پتانسیل تبادلی – همبستگی است و با به کارگیری تقریب BLYP این عدم توافق از بین می‌رود.

موضوع دوم مطالعه خواص مغناطیسی سطوح آزادCo_2 MnSi(001) است. نتایج محاسباتی نشان می دهد که این آلیاژ در حالت توده ای ، نیم – فلز است یعنی منحنی چگالی حالت های آن در حالت اسپین – بالا رفتار فلزی و در حالت اسپین – پایین رفتار نیم رسانایی دارد. بنابراین قطبیدگی اسپینی آن در سطح فرمی ۱۰۰٪ است و از این دیدگاه ماده بسیار مناسبی برای کاربرد در حوزه جدید و در حال گسترش اسپینترونیک محسوب می شود. ما نشان داده ایم که خاصیت نیم – فلزی در سطوح آزاد این ماده در راستای (001) پایدار نمی ماند و ظاهر شدن حالت های سطحی در گاف انرژی ساختار نواری اسپین – پایین باعث افت شدید قطبیدگی اسپینی از مقدار ایده آل ۱۰۰٪ می‌شود. با این نتایج به دست آمده نشان می‌دهد اضافه کردن یک لایه Mn روی یکی از سطح آزادCo_2 MnSi(001) از شکل‌گیری حالت‌های مخرب سطحی جلوگیری کرده و به خوبی از خاصیت نیم – فلزی سطح محافظت می‌کند.

Archive of SID

www.SID.ir