

Research Paper
----------------

# Investigation of Electronic and Structure Properties of $MgB_2$ Superconductor by Ab-initio Method<sup>1</sup>

Hamdollah Salehi<sup>\*2</sup> and Ali Ahmadi<sup>3</sup>

Received: 2020.03.08

Revised: 2020.09.10

Accepted: 2020.10.21

## Abstract

The structural of  $MgB_2$  such as lattice constant, volume modulus, volume modulus derivative and compressibility of different degrees have been calculated. The calculations have been performed using a Full Potential-Linearized Augmented Plane Wave (FP-LAPW) method in the framework of Density Functional Theory (DFT) with various Approximation. The results show that the linear compressibility in direction of  $c$  is about twice the compressibility in direction of  $a$ . In addition, the electronic properties of the compound, including the structure of the energy bands, the density of the states, and the types of bonds in the  $MgB_2$  Superconductivity have been studied. The results of a double degeneracy above the Fermi level show that it plays an important role in the superconducting property. According to energy bands, it has been determined that the lattice parameters have a large effect on the  $\sigma$  band of boron atoms. The results predict that the constant increase of the lattice along the  $c$ -axis has an increase in the density of states at the Fermi level. The results express this fact that the calculation using by GGA has the better agreements with the other theoretical and experimental approximations.

**Keywords:**  $MgB_2$ , FP-LAPW, Density Functional Theory, GGA, Bulk Module, Density of State, Band Gap.

---

<sup>1</sup> DOI: 10.22051/IJAP.2021.30623.1158

<sup>2</sup> Associate Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. (Corresponding Author). Email: salehi\_h@scu.ac.ir

<sup>3</sup> M. Sc. Graduated, Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. Email: salehihamid@yahoo.com

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران، دانشگاه الزهرا

سال یازدهم، پیاپی ۲۵، تابستان ۱۴۰۰

صص ۵۸-۶۹

مقاله پژوهشی

## بررسی ابتدابه ساکن ویژگی‌های الکترونی و ساختاری ابرسانای $MgB_2$ <sup>۱</sup>

حمدا له صالحی\*<sup>۲</sup> و علی احمدی<sup>۳</sup>

تاریخ دریافت: ۱۳۹۸/۱۲/۱۸

تاریخ بازنگری: ۱۳۹۹/۰۶/۲۰

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۹/۰۷/۳۰

### چکیده

در این مقاله ویژگی‌های ساختاری ترکیب از جمله ثابت شبکه، مدول حجمی، مشتق مدول حجمی و تراکم‌پذیری در جهت‌های مختلف محاسبه شده است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با تقریب‌های مختلف انجام گرفته است. نتایج بیانگر آن است که تراکم‌پذیری خطی در راستای  $c$  حدود دو برابر تراکم‌پذیری در راستای  $a$  است. علاوه بر این، ویژگی‌های الکترونی ترکیب از جمله ساختار نوارهای انرژی، چگالی حالت‌ها و نوع پیوندها در ابرسانای  $MgB_2$  مطالعه شده است. نتایج یک تبهگنی دوگانه در بالای تراز فرمی را نشان می‌دهد که نقش مهمی در خاصیت ابررسانایی بازی می‌کند. با توجه به نوارهای انرژی مشخص شده که پارامترهای شبکه اثر بزرگی در نوار  $\sigma$  اتم بور دارند. نتایج پیش‌بینی می‌کنند که افزایش ثابت شبکه در طول محور  $c$ ، افزایش چگالی حالت‌ها را در تراز فرمی در پی دارد. نتایج بیانگر آن است که

<sup>۱</sup> DOI: 10.22051/IJAP.2021.30623.1158

<sup>۲</sup> دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران. (نویسنده مسئول). Email: salehi\_h@scu.ac.ir

<sup>۳</sup> دانش آموخته کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.

Email: salehihamid@yahoo.com

محاسبات با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته نسبت به بقیه تقریب ها سازگاری بهتری با نتایج تجربی و نظری به دست آمده از روش های دیگر دارد.

**واژگان کلیدی:**  $FP-LAPW$ ،  $MgB_2$ ،  $GGA$ ، نظریه تابعی چگالی، مدول حجمی، گاف نواری، چگالی حالت ها.

## ۱. مقدمه

کشف خاصیت ابرسانایی در  $MgB_2$  با دمای گذار  $39\text{ K}$  سرآغاز پژوهش های تجربی و نظری در دی بوراید های دیگر شد و توجه بسیاری از پژوهشگران را به بررسی خواص الکترونی و گرمایی و اپتیکی آن جلب کرد [۱]. دمای گذار بالای  $MgB_2$  امیدواری های فراوانی برای یافتن ابرسانایی در دی بوراید های دیگر با دمای گذار بالا ایجاد کرد.  $MgB_2$  دارای ساختاری از نوع  $A1B_2$  با گروه فضایی  $P6/mmm$  است [۲]. در این مقاله، ساختار الکترونی و ساختار نوارهای انرژی و چگالی حالت های ابرسانای  $MgB_2$  محاسبه شده است. در ساختار  $MgB_2$  اتم های  $Mg$  عملاً یونیده اند [۳].  $MgB_2$  ساختار لایه ای شبیه گرافیت دارد. چندین سازوکار برای توجیه  $T_c$  بالا در ابرسانای  $MgB_2$  و مشابه آن وجود دارد که یکی از آن ها بر مبنای ساختار نوارهای انرژی است [۴]، که پیشنهاد می کند، حالت ابرسانایی، نتیجه ای از برهم کنش قوی الکترون-فونون و بسامدهای قوی فونون نسبت به اتم بور بدون بار است. همچنین می توان برای اطلاعات بیشتر در این باره به مراجع [۹۵] مراجعه کرد. لذا در این مقاله، ویژگی های الکترونی و ساختاری در ابرسانای  $MgB_2$  با استفاده از روش ابتدایه ساکن محاسبه می شود و برخی موارد محاسبات از جمله مدول حجمی، مشتق مدول حجمی، تراکم پذیری کلی و خطی، تجزیه بارها و اثر فشار برای اولین بار است که در این جا محاسبه شده است.

## ۲. روش محاسبات

محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی با تقریب شیب تعمیم یافته و نرم افزار  $Wien2k$  انجام شد [۱۰، ۱۱]. ثابت های شبکه که به صورت تجربی اندازه گیری شده است، برابر است با  $a=3.084\text{ \AA}$  و  $c=3.522\text{ \AA}$  که در محاسبات از آن ها استفاده کرده ایم [۲]. دیگر پارامترها به صورت  $R_{MT}(B)=1.5a.u$  و  $R_{MT}(Mg)=1.8a.u$  است، شعاع کره های مافین-تین با توجه به طول پیوند آن ها انتخاب شده است. پارامتر همگرایی  $RK_{max}=7$  در نظر گرفته شده است، این پارامتر اندازه اتم های پایه را در محاسبات تنظیم می کند. این محاسبات بر

اساس محاسبات ساختار الکترونی به دست آمده از نظریه تابعی چگالی است. برای جداسازی الکترون‌های ظرفیت از مغزه، انرژی جدایی بین الکترون‌های ظرفیت و مغزه ۶- ریدبرگ در نظر گرفته شده است. رفتار الکترون در حالت مغزه کاملاً نسبیستی و در حالت ظرفیت و شبه مغزه غیرنسبیستی فرض شده است، که در این حالت از برهمکنش اسپین مدار صرف نظر می‌شود. برای محاسبه ویژگی‌های ساختاری ترکیب از تقریب‌های مختلف برای محاسبه پتانسیل تبادلی همبستگی استفاده شده است. نتایج نشان می‌دهد که روش *GGA96* نسبت به سایر روش‌ها به نتایج تجربی و نظری دیگران نزدیک‌تر است. رفتار الکترون در حالت‌های مغزه کاملاً نسبیستی و در حالت‌های ظرفیت و شبه مغزه غیر نسبیستی فرض شده است که در این حالت از برهمکنش اسپین مدار صرف نظر می‌شود.

### ۳. نتایج

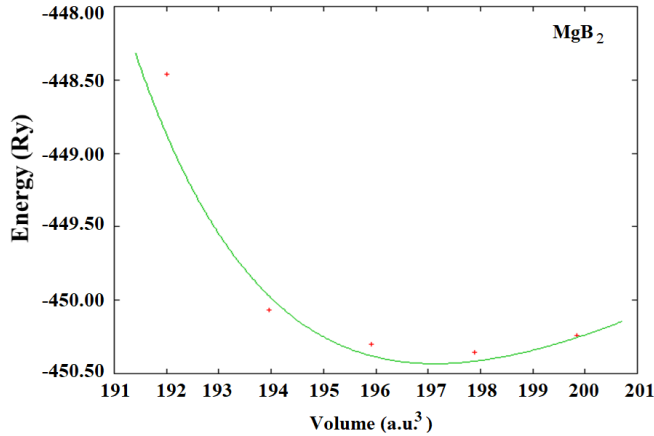
#### الف. ساختار الکترونی $MgB_2$

برای محاسبه خواص ساختاری ترکیب، پس از انجام محاسبات خودسازگار انرژی، یاخته واحد ترکیب را به ازای حجم‌های مختلف حول حجم تعادلی اش وردش و محاسبات را انجام داده‌ایم. پس از انجام محاسبات نمودار انرژی بر حسب حجم رسم شده است، که یکی از این نمودار در شکل (۱) آمده است. تغییرات انرژی بر حسب حجم از طریق معادله حالت مورناگون به دست می‌آید. این معادله به صورت زیر است [۵، ۷، ۱۲]:

$$E(V) = E_0 + \frac{BV_0}{B'} \left[ \frac{V}{V_0} + \frac{(V/V_0)^{1-B'} - B'}{B' - 1} \right] \quad (1)$$

در این معادله  $B$  مدول حجمی،  $V_0$  حجم یاخته اولیه و  $E_0$  انرژی حالت پایه در دمای صفر و فشار صفر است. در این محاسبات، ابتدا وابستگی انرژی به حجم محاسبه و سپس با استفاده از معادله حالت مورناگون برای ساختار هگزاگونال، ثابت‌های شبکه، مدول حجمی، مشتق مدول حجمی نسبت به فشار و تراکم‌پذیری محاسبه شده است. محاسبات با استفاده از سه نوع تقریب برای پتانسیل تبادلی همبستگی انجام شده است و آن‌ها را با یکدیگر و با نتایج تجربی و نظری دیگران مقایسه کرده‌ایم. نتایج در جدول (۱) آورده شده است. همانطور که در جدول (۱) مشاهده می‌شود، نتایج محاسبات انجام شده به کمک تقریب *GGA96* برای پتانسیل تبادلی همبستگی، به نتایج تجربی و نظری نزدیک‌تر است. از این رو در ادامه، محاسبات با تقریب *GGA96* را بررسی

می‌کنیم. حجم تعادلی و انرژی تعادلی و پارامترهای شبکه از طریق کمینه کردن منحنی انرژی بر حسب حجم به دست آمده است.



شکل ۱ نمودار تغییرات انرژی بر حسب حجم یاخته اولیه  $MgB_2$ .

همچنین، در این محاسبات معلوم شد که نزدیک‌ترین فاصله بین اتم‌ها به نوع تقریب اعمالی برای پتانسیل تبادلی همبستگی وابسته نیست و تنها به ثابت‌های شبکه وابستگی دارد. پارامتر دیگری که در میزان محاسبات نقش بسیار مهمی دارد شعاع کره مافین-تین است که در انتخاب آن باید دقت کرد. همچنین، مقدار بار الکتریکی درون کره‌های مافین-تین برای اتم‌های تشکیل‌دهنده  $MgB_2$  مؤید انتخاب بهینه این شعاع است که در جدول‌های (۲) و (۳) آمده است.

جدول ۱ پارامترهای ساختاری محاسبه‌شده و مقایسه آن با نتایج دیگران برای ترکیب  $MgB_2$ .

	FP-LAPW, GGA96	FP-LAPW GGA91	FP-LAPW LDA	تجربی [۱۳, ۱۴]	نظری [۵:۱۵]
a (au)	۵/۸۲۴	۵/۸۰۴	۵/۷۶۵	۵/۸۳۴	۵/۸۲۲
c (au)	۶/۶۴۶	۶/۶۲۳	۶/۵۸۵	۶/۶۵۷	۶/۶۷۷
B(Gpa)	۱۵۰/۴۰۵۰	۱۴۹/۴۳۲۵	۱۳۱/۳۱۶۸	۱۵۰	۱۴۷
$B\phi$	۳/۲۳۱۵	۱/۴۳۲۵	۳	۴	۳/۵
$K(m^2/N)$	$۶/۶۵ \times 10^{-1۴}$	$۶/۷ \times 10^{-1۴}$	$۷/۶۲ \times 10^{-1۴}$	$۶/۷ \times 10^{-1۴}$	$۶/۸۱ \times 10^{-1۴}$
$K_a(m^2/N)$	$۳/۵ \times 10^{-1۴}$	$۳/۵۳ \times 10^{-1۴}$	$۴ \times 10^{-1۴}$	$۳/۴ \times 10^{-1۴}$	-
$K_c(m^2/N)$	$۶/۹ \times 10^{-1۴}$	$۶/۹۵ \times 10^{-1۴}$	$۷/۹ \times 10^{-1۴}$	$۶/۷ \times 10^{-1۴}$	-
$\frac{c}{a}$	۱/۴۱۱۴	۱/۱۴۱۱۱	۱/۴۲۲۳۸	۱/۱۴۱۰۷	۱/۱۴۶۸۵۷
$E_c(Ry)$	-۴۵۰/۳۲۴۰۸۱	-۴۴۹/۱۶۹۸۰۸	-۴۴۷/۶۶۰۷۱	-	-

**جدول ۲ تجزیه بار اتم Mg در تقریب‌های مختلف برای ترکیب  $MgB_2$ .**

Mg	FP-LAPW GGA96 با ثابت نظری	FP-LAPW GGA96 با ثابت تجربی	FP-LAPW GGA9I با ثابت نظری	FP-LAPW GGA9I با ثابت تجربی	FP-LAPW LDA با ثابت نظری	FP-LAPW LDA با ثابت تجربی
بار کل	۱۲	۱۲	۱۲	۱۲	۱۲	۱۲
بار داخل کره مافین-تین	۹/۹۰۲۹۱	۹/۸۵۳۳۹	۹/۷۰۴۸۵	۹/۶۰۷۸۰	۹/۶۰۵۸۳	۹/۷۰۱۸۷
بار مغزه	۸/۷۳۴۳۹	۸/۷۶۹۵۲	۸/۶۳۷۳۲	۸/۵۹۸۹۸	۸/۵۹۷۲۲	۸/۶۸۳۱۷۴
بار ظرفیت	۱/۱۶۸۵۲	۱/۰۸۳۸۷	۱/۰۶۷۵۳	۱/۰۰۰۸۸۲	۱/۰۰۸۶۱۲	۱/۰۱۸۶۹۶۰
بار خارج از کره مافین-تین	۲/۰۹۷۱۴	۲/۱۴۶۶۱۵	۲/۲۹۵۱۵۵	۲/۳۹۲۲۰۵	۲/۳۹۴۱۷۵	۲/۲۹۸۱۳۵
مجموع بار داخل و خارج کره مافین-تین	۱۲/۰۰۰۰۰۵	۱۲/۰۰۰۰۰۵	۱۲/۰۰۰۰۰۵	۱۲/۰۰۰۰۰۵	۱۲/۰۰۰۰۰۵	۱۲/۰۰۰۰۰۵
$LM_{max}$	۷	۷	۷	۷	۷	۷

**جدول ۳ تجزیه بار اتم B در تقریب‌های مختلف برای  $MgB_2$ .**

B	FP-LAPW GGA96 با ثابت نظری	FP-LAPW GGA96 با ثابت تجربی	FP-LAPW GGA9I با ثابت نظری	FP-LAPW GGA9I با ثابت تجربی	FP-LAPW LDA با ثابت نظری	FP-LAPW LDA با ثابت تجربی
بار کل	۵	۵	۵	۵	۵	۵
بار داخل کره مافین-تین	۲/۱۳۸۶۵	۲/۱۲۷۹۶	۲/۰۹۵۸۸	۲/۰۷۴۹۲	۲/۰۷۴۴۹	۲/۰۹۵۲۳
بار مغزه	۱/۸۸۶۲۹	۱/۸۷۶۸۶	۱/۸۴۸۵۷	۱/۸۳۰۰۸	۱/۸۲۹۷۰۰	۱/۸۴۷۹۹۳
بار ظرفیت	۰/۲۵۲۳۶	۰/۲۵۱۰۹۹	۰/۲۴۷۳۱۴	۰/۲۴۴۸۴۱	۰/۲۴۴۷۹۰	۰/۲۴۷۲۳۷
بار خارج از کره مافین-تین	۲/۸۶۱۳۳	۲/۸۷۲۰۲	۲/۹۰۴۱	۲/۹۲۵۰۶	۲/۹۲۵۴۹	۲/۹۰۴۷۵
مجموع بار داخل و خارج کره مافین-تین	۴/۹۹۹۹۸	۴/۹۹۹۹۸	۴/۹۹۹۹۸	۴/۹۹۹۹۸	۴/۹۹۹۹۸	۴/۹۹۹۹۸

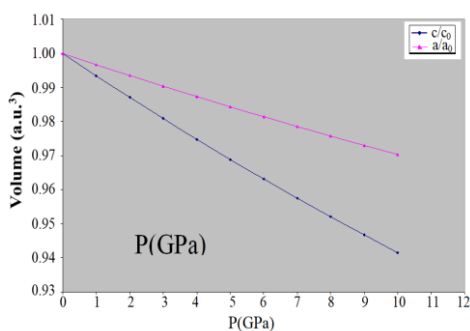
### ب. بررسی تأثیر فشار در ساختار $MgB_2$

برای بررسی اثر تغییرات فشار در ساختار  $MgB_2$  وابستگی حجم به فشار را از طریق رابطه زیر

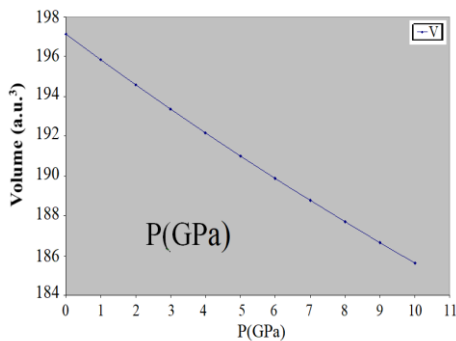
حساب کردیم [۷، ۱۲]:

$$V(P) = V_0 [(B'/B)P + 1]^{-1/B'} \quad (2)$$

با توجه به این رابطه تغییرات حجم بر حسب فشار به دست می‌آید، که در این رابطه حجم اولیه  $V_0$  و  $B$  و  $B'$  را با توجه به جدول (۱) در رابطه قرار می‌دهیم. نمودار وابستگی حجم به فشار در بازه صفر تا 10GPa برای ترکیب  $MgB_2$  در شکل (۲الف) نشان داده شده است. با توجه به نمودار مشخص می‌شود که حجم یاخته‌بسیط با افزایش فشار کاهش می‌یابد. همچنین نمودار تغییرات پارامتر شبکه  $a$  و  $c$  بر حسب فشار در شکل (۲ب) نشان داده شده است. برای مقایسه بهتر هر دو منحنی تغییرات  $c/c_0$  و  $a/a_0$  در یک نمودار رسم شده است ( $c_0$  و  $a_0$  پارامترهای شبکه در فشار صفراند). با توجه به شکل (۲ب) مشاهده می‌شود که با افزایش فشار، پارامترهای شبکه کاهش می‌یابند. کاهش پارامتر شبکه  $c$  در حدود  $1/8$  تندتر از پارامتر شبکه  $a$  است. این مقدار در اندازه‌گیری‌های تجربی که انجام شده است برابر  $1/4$  به دست آمده است. این اختلاف به خاطر ناهمسانگردی ساختار  $MgB_2$  است و این به دلیل متفاوت بودن نوع پیوندها در جهت‌های  $a$  و  $c$  است. در راستای محور  $a$  پیوندهای قوی کووالانسی بین اتم‌های بور وجود دارد و در راستای محور  $c$  پیوندهای ضعیف‌تری بین اتم‌های منیزیم و بور وجود دارد.



(ب)



(الف)

**شکل ۲.** الف: نمودار تغییرات حجم سلول واحد  $MgB_2$  بر حسب فشار، ب: تغییرات پارامترهای شبکه  $MgB_2$  بر حسب فشار.

### ج. تراکم‌پذیری بلور $MgB_2$

تراکم‌پذیری به صورت عکس مدول حجمی تعریف می‌شود و مدول حجمی نمایانگر استحکام بلور است؛ هرچه مدول حجمی بیشتر باشد، استحکام بلور نیز بیشتر است. تراکم‌پذیری حجمی از رابطه زیر به دست می‌آید [۵، ۱۶]:

$$K_V = -\frac{1}{V_0} \frac{dV}{dP} \quad (۳)$$

در این جا،  $V_0$  حجم تعادلی در فشار صفر است و مقدار آن را با توجه به جدول (۱) داریم. با توجه به شیب منحنی (۲)،  $\frac{dV}{dP}$  را محاسبه و در رابطه (۳) قرار می‌دهیم و از آن جا تراکم‌پذیری حجمی را حساب می‌کنیم. مقدار تراکم‌پذیری حجمی  $10^{-10} \times 6/65 \text{ Gpa}^{-1}$  به دست آمد که در توافق خوبی با مقدار تجربی محاسبه شده  $10^{-10} \times 6/7 \text{ Gpa}^{-1}$  است [۱۱]. با توجه به مقدار تراکم‌پذیری حجمی و همچنین زیاد بودن مقدار مدول حجمی، می‌توان نتیجه گرفت که  $MgB_2$  یک جسم سخت است و به راحتی تغییر شکل نمی‌دهد و برای ایجاد تغییر شکل در بلور آن انرژی زیادی لازم است. اکنون، تراکم‌پذیری خطی در راستای محورهای  $a$  و  $c$  را حساب می‌کنیم. تراکم‌پذیری خطی بارابطة زیر داده می‌شود [۷، ۱۳]،

$$K_r = \frac{V_0}{B} \frac{d \ln(r)}{dV} \quad (۴)$$

در این رابطه،  $r$  نمایانگر پارامترهای شبکه است. مقدار تراکم‌پذیری خطی در راستای محورهای  $a$  و  $c$  محاسبه شده است. تراکم‌پذیری خطی در راستای محور  $a$ ،  $10^{-10} \times 3/5 \text{ Gpa}^{-1}$  و در راستای محور  $c$ ،  $10^{-10} \times 6/9 \text{ Gpa}^{-1}$  به دست آمده است. با توجه به نتایج می‌بینیم که تراکم‌پذیری خطی در راستای محور  $c$  حدود دو برابر تراکم‌پذیری خطی در راستای محور  $a$  است. این نتایج نشان می‌دهد که بلور  $MgB_2$  ناهمسانگرد است و در واقع می‌توان گفت که در ترکیب  $MgB_2$  طول پیوندهای  $B-B$  درون صفحات بور از طول پیوندهای  $Mg-B$  و  $B-B$  بین لایه‌ها کمتر است. این به علت آن است که  $MgB_2$  همانند گرافیت دارای ساختار لایه‌ای است و اتم‌های  $Mg$  و  $B$  در لایه‌های متفاوت و متناوب قرار دارند. در صفحه اتم‌های  $B$ ، پیوندهای قوی کووالانسی  $B-B$  برقرار است و بین لایه‌های  $Mg$  و  $B$  پیوندهای ضعیف تریونی برقرار است. طول پیوندهای  $B-B$  از  $Mg-B$  کوتاه‌تر است، بنابراین تراکم‌پذیری درون لایه‌های بور در راستای محور  $a$  کمتر از تراکم‌پذیری بین لایه‌های  $Mg$  و  $B$  در راستای محور  $c$  است. با توجه به اینکه، تراکم‌پذیری نمادی از استحکام بلور است، می‌توان گفت که برای ایجاد تغییر شکل در صفحات بلور در راستای محور  $a$  نسبت به محور  $c$  انرژی بیشتری نیاز است. نتایج محاسبات تراکم‌پذیری حجمی و تراکم‌پذیری خطی در جدول (۱) آورده شده است.



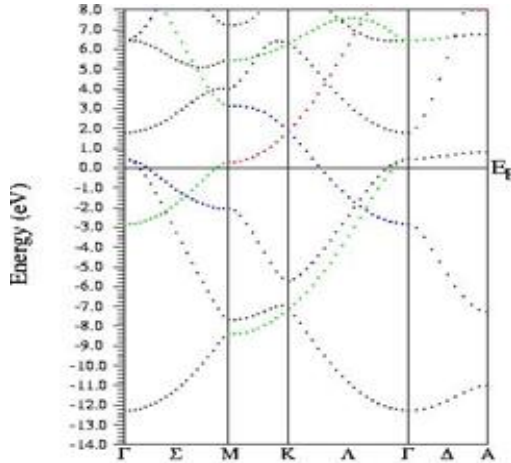
## د. محاسبه ساختار الکترونی

### ۱. ساختار نوارهای انرژی

با محاسبه ساختار نوارهای انرژی هر ماده می‌توان به خواص آن ماده پی برد. ساختار نوارهای انرژی  $MgB_2$  در شکل (۳) آورده شده است. در این نمودار، مبدأ انرژی در بیشینه نوار ظرفیت است و مقیاس آن بر حسب الکترون‌ولت است. تعداد ۴۰۰ نقطه جهت محاسبات استفاده شده است که با روش خودسازگار به همگرایی رسیده است و همگرایی را بر مبنای انرژی قراردادیم، که با ۸ چرخه و با اختلاف انرژی از مرتبه  $10^{-6}$  به همگرایی رسیده است. پارامتر همگرایی،  $RK_{max}$ ، برابر با ۷ در نظر گرفته شده است. این پارامتر اندازه اتم‌های پایه را در محاسبات تنظیم می‌کند. برای جداسازی الکترون‌های ظرفیت و مغزه از مبنای انرژی کمک گرفته‌ایم و انرژی جدایی بین الکترون‌های ظرفیت و مغزه را برابر ۶- ریدبرگ گرفتیم و حالت‌های ظرفیت برای اتم منیزیم  $3s^2$  و حالت ظرفیت برای اتم بور  $2p^1$  به دست آمد.

با توجه به شکل (۳) مشاهده می‌شود که شامل الکترون‌های ظرفیتی هستند که در محدوده  $5/8$ - تا  $2$  الکترون‌ولت گسترده شده‌اند، این نوارهای انرژی در تعیین خاصیت  $MgB_2$  نقش اساسی ایفا می‌کند. از طرف دیگر با توجه به این که حالت ظرفیت برای اتم منیزیم اربیتال  $3s^2$  است و این در بالای سطح فرمی قرار می‌گیرد، نشان‌دهنده نبود الکترون در ترازهای لایه آخر اتم منیزیم است و نشان می‌دهد که اتم منیزیم در ترکیب  $MgB_2$  کاملاً یونیده است و الکترون‌های خود را به لایه‌های اتم بور می‌دهد. چنانچه ساختار نوارهای انرژی این ترکیب را بدون اتم منیزیم رسم کنیم تغییر اساسی در ساختار رخ نمی‌دهد و نشان می‌دهد که الکترون‌های اتم منیزیم فقط یک جابه‌جایی در  $E_F$  ایجاد می‌کنند، که می‌توان آن را از چگالی حالت‌های جزئی هم به دست آورد. اما اتم بور با توجه به این که اربیتال  $p$  آن در حالت ظرفیت نقش مهمی در خواص  $MgB_2$  بازی می‌کند مشاهده می‌شود که پیوندهای  $\sigma$  اتم‌های بور نقش اساسی در ابرسانایی ترکیب  $MgB_2$  دارد و خاصیت فلزی ترکیب را می‌توان به پیوندهای  $\pi$  اتم بور نسبت داد و سهم انرژی بالا از نوار ظرفیت مربوط به حالت‌های  $2p$  اتم بور است. ساختار نوارهای انرژی دارای یک تبهگنی دوگانه است. نوارهای تقریباً پهن، بالای  $E_F$  قرار دارند و به نظر می‌رسد که ماهیت نوارهای پهن نقش مهمی را در ابرسانایی  $MgB_2$  بازی می‌کنند. قله این نوارهای پهن در حدود  $1/3 eV$  بالای  $E_F$  قرار دارد. می‌توان مشاهده کرد که دو نوع نوار وجود دارد که عبارتند از نوارهای  $\sigma$  و  $\pi$  که هر دوی آن‌ها دارای مشارکتی از اتم بور هستند. همانگونه که شکل (۳) نشان می‌دهد سطح انرژی فرمی، نوارهای انرژی متفاوتی را قطع می‌کند که این دلالت بر خاصیت فلزی ماده دارد. محاسبات

ساختار نواری نشان می‌دهد که این ترکیب کاملاً یونی نیست، بلکه دارای پیوند کووالانسی قوی B-B بین اتم‌های بور نیز می‌شود.

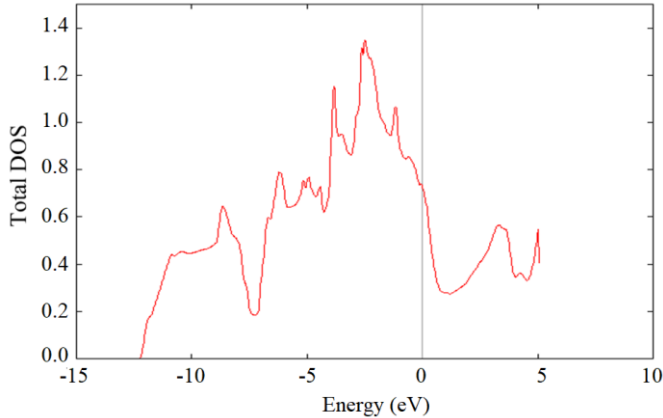


شکل ۳ نوارهای انرژی ترکیب  $MgB_2$ .

## ۲. چگالی حالت‌ها

توزیع الکترون در طیف انرژی با چگالی حالت‌ها توصیف می‌شود. طیف چگالی حالت‌های کل در  $MgB_2$  در بازه  $-15 eV$  تا  $10 eV$  در شکل (۴) رسم شده است. در نمودار چگالی حالت‌ها، مقیاس انرژی صفر نشان‌دهنده مکان تراز فرمی است که با خط چین عمودی نشان داده شده است. مشارکت عمده در بالای نوار ظرفیت مربوط به اربیتال‌های p اتم بور و در ته نوار ظرفیت مشارکت عمده مربوط به اربیتال‌های s اتم بور است. در حالی که در ته نوار رسانش مشارکت عمده مربوط به اربیتال‌های s اتم Mg است. حالت‌های s اتم B با حالت‌های p اتم B در نوار ظرفیت هیبرید می‌شود، که نشان می‌دهد که  $sp^2$  در صفحات ab به طور قوی هیبرید می‌شوند. مشارکت اربیتال‌های s اتم Mg در نوار ظرفیت ناچیز است و عمدتاً در حالت‌های غیر اشغال منعکس می‌شوند. این الکترون‌های Mg به لایه‌های بور داده می‌شود. الکترون‌های s اتم بور به خوبی جایگزیده‌اند و مشارکت آن‌ها در  $E_F$  خیلی ناچیز است و به نظر می‌رسد که پیوندهای p-p و  $\sigma$  اثر مهمی در ابررسانایی دارند و بیشینه چگالی حالت‌های انرژی از  $-5$  تا صفر الکترون‌ولت گسترده شده‌اند. چگالی حالت‌ها در سطح فرمی،  $N(E_F)$ ، در حدود  $0.7 \text{ State/eV}$  است و با

توجه به مشارکت عمده اتم بور می توان به نقش اساسی اتم های بور در تعیین خواص الکترونی  $MgB_2$  پی برد.

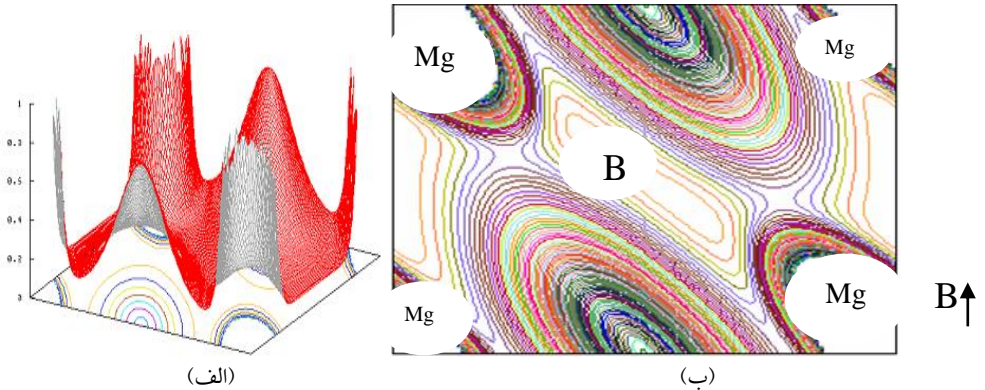


شکل ۴ منحنی چگالی حالت های انرژی کل  $MgB_2$ .

### ۳. چگالی ابر الکترونی

چگالی ابر الکترونی در واقع نحوه توزیع بار در اطراف اتم ها را نشان می دهند. با توجه به میزان توزیع بار در اطراف اتم ها می توان نوع پیوند بین آن ها را تشخیص داد. تراکم زیاد الکترون بین دو اتم نشان دهنده قوی بودن پیوند بین آن ها است و تراکم کمتر الکترون بین دو اتم پیوند ضعیف تری را بین آن ها نشان می دهد. نمودار چگالی ابر الکترونی نشان دهنده تراکم الکترون ها در مکان های مختلف است و از روی آن می توان فهمید که در چه نقاطی تراکم الکترون بیشتر و در چه نقاطی کمتر است. چگالی ابر الکترونی برای ترکیب  $MgB_2$  در صفحه (۱۱۰) در شکل (۵) نشان داده است. از روی شکل مشخص است که تراکم الکترون کمی بین اتم های منیزیم و بور وجود دارد. علاوه بر این، در اطراف اتم منیزیم نیز توزیع بار کمی وجود دارد. توزیع بار در اطراف اتم های منیزیم در ترکیب  $MgB_2$  خیلی کمتر از توزیع بار حالت طبیعی اتم منیزیم است و این می تواند به دلیل آن باشد که اتم های منیزیم در این ترکیب الکترون های لایه ظرفیت خود را به اتم های بور می دهند، ولیکن چگالی الکترونی در اطراف اتم های بور بیشتر است و این به همان دلیل است که اتم منیزیم، الکترون های خود را به اتم بور می دهد. علاوه بر این، انباشتگی الکترون بین اتم های بور زیاد است ولی بین اتم های منیزیم و بور خیلی کمتر است و می توان فهمید که بین اتم های بور پیوند قوی کووالانسی  $B-B$  برقرار است و بین اتم های منیزیم و بور پیوند یونی ضعیف تر برقرار است که نشان دهنده ناهمسانگردی شدید ترکیب  $MgB_2$  است و تأیید کننده نتایجی است که از

بررسی چگالی حالت‌های جزئی ترکیب  $MgB_2$  به دست آمده است. علاوه بر این، توزیع همگن بار در اطراف اتم‌های منیزیم نشان‌دهنده آن است که بین اتم‌های منیزیم پیوند فلزی  $Mg-Mg$  وجود دارد. بنابراین، می‌توان نتیجه گرفت که این ترکیب نمونه‌ای از جامد با پیوندهای مختلف است.



شکل ۵ الف) چگالی حالت‌های الکترونی ترکیب  $MgB_2$  در صفحه (۱۱۰)، ب) در سه بعد.

#### ۴. نتیجه‌گیری

محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی انجام شده است. نتایج محاسبات ساختار الکترونی بیانگر یک تبهگنی دوگانه در بالای تراز فرمی است که نقش مهمی در خاصیت ابررسانایی بازی می‌کند. همچنین، تراکم‌پذیری خطی در راستای  $c$  حدود دو برابر تراکم‌پذیری در راستای  $a$  است، که نشان‌دهنده ناهمسانگردی ترکیب  $MgB_2$  است. علاوه بر این، چگالی حالت‌های الکترونی بیانگر وجود پیوند قوی کووالانسی بین  $B-B$  و یونی ضعیف بین اتم‌های منیزیم و بور است که نشان‌دهنده ناهمسانگردی شدید ترکیب  $MgB_2$  است. نتایج پیش‌بینی می‌کند که افزایش ثابت شبکه در طول محور  $c$ ، افزایش چگالی حالت‌ها را در تراز فرمی در پی دارد. با توجه به مقدار تراکم‌پذیری حجمی و همچنین زیاد بودن مقدار مدول حجمی، می‌توان نتیجه گرفت که  $MgB_2$  یک جسم سخت است و به راحتی تغییر شکل نمی‌دهد و برای ایجاد تغییر شکل در بلور آن انرژی زیادی لازم دارد. علاوه بر این، توزیع همگن بار در اطراف اتم‌های منیزیم نشان‌دهنده آن است که بین اتم‌های منیزیم پیوند فلزی وجود دارد. بنابراین، می‌توان نتیجه گرفت که این ترکیب نمونه‌ای از جامد با پیوندهای مختلف است. نتایج سازگاری خوبی با نتایج تجربی و نظری به دست آمده از روش‌های دیگر دارد.

## ۵. تقدیر و تشکر

این تحقیق توسط دانشگاه شهید چمران اهواز ایران [SCU.SP98.490] پشتیبانی شد.

## منابع

- [1] Buzea D. and Yamashita T, "Review of superconducting properties of  $MgB_2$ " *Supercond. Sci. Technol.* 14, R115 (2001).
- [2] Jones M E and Marsh R E, "The Preparation and Structure of Magnesium Boride,  $MgB_2$ " *J. Am. Chem. Soc.* 76, 1434-1436 (1954).
- [3] Kortus J, Mazin I I *et al.*, "Superconductivity of Metallic Boron in  $MgB_2$ ", *Phys. Rev. Lett* 8, 4656-4659 (2001).
- [4] Kong Y, Dolgov O V *et al.*, "Electron-phonon interaction in the normal and superconducting states of  $MgB_2$ " *Phys. Rev. B* 64, 020501 (R) (2001).
- [5] Demeter T and Aristides M, "Ab Initio Investigation of the Electronic and Geometric Structure of Magnesium Diboride,  $MgB_2$ ", *J. Phys. Chem.* A109, 47:10663-10674 (2005).
- [6] Alexander S S and Boris I L, "Structure and properties of  $(AlB_2)_n$  and  $(MgB_2)_n$  ( $n = 1, \dots, 10$ ) clusters", *The European Physical Journal D* 73, 14 (2019).
- [7] Islam A K M A, Islam F N and Kabir S, "Ab initio investigation of mechanical behaviour of  $MgB_2$  superconductor under pressure", *J. Phys: Cond. Mat* 13, L641 (2001).
- [8] Vinod K, Varghese N and Syamaprasad U, "Superconductivity of  $MgB_2$  in the BCS framework with emphasis on extrinsic effects on critical temperature", *Superconductor Science and Technology* 20, R31, (2007).
- [9] Boeri L, "Understanding Novel Superconductors with Ab Initio Calculations", arXiv: 1903.05708 (2019).
- [10] Blaha P, and Schwarz K, *Wien2k*, Vienna university of Technology Austria (2009).
- [11] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M, "Generalized Gradient Approximation Made Simple", *Phys. Rev. Lett* 77, 3865-3868 (1996).
- [12] Loa I, Kunc K, and Syassen K, "Crystal structure and lattice dynamics of  $AlB_2$  under pressure and implications for  $MgB_2$ ", *Phys. Rev. B* 66, 134101 (2002).
- [13] Prassides K, Iwasa Y, Ito T *et al.*, "Compressibility of the  $MgB_2$  superconductor", *Phys. Rev. B* 64, 012509 (2001).
- [14] Singh P, "Role of Boron  $p$ -Electrons and Holes in Superconducting  $MgB_2$ , and Other Diborides: A Fully Relaxed, Full-Potential Electronic Structure Study", *Phys. Rev. Lett* 87, 087004-087008 (2001).
- [15] Voigt T, Schneider G *et al.*, "Compressibility and electronic structure of  $MgB_2$  up to 8GPa", *Phys. Rev. B* 63, 220505 (2001).
- [16] Jie T, Lu-chang Qin *et al.*, "Lattice parameter and  $T_c$  dependence of sintered  $MgB_2$  superconductor on hydrostatic pressure", *Phys. Rev. B* 64, 132509-4 (2001).