مطالعه خواص نیم فلزی ترکیب هویسلر Ti_2IrIn در دو ساختار $AlCu_2Mn$ و $CuHg_2Ti$

صادقی، خجسته؛ احمدیان، فرزاد

گروه فیزیک، واحد شهرضا، دانشگاه آزاد اسلامی، شهرضا، ایران

چکیده

محاسبات بر پایه اصول اولیه با استفاده از روش موج تخت بهبود یافته با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی(DFT) به منظور مطالعه ساختار الکترونی، خواص مغناطیسی و دمای کوری ترکیب هویسلر Ti_2IrIn انجام شد. این ترکیب در ساختار نوع $CuHg_2Ti$ یک فرومغناطیس نیم فلز بود. گشتاور مغناطیسی کل ترکیب Ti_2IrIn در ساختار $CuHg_2Ti$ برابر$2\mu B$به دست آمد، به گونه‌ای که در تطابق با قانون اسلیتر – پائولینگ ($M_{tot} = Z_{tot} - 18$) بود.

The study of Half-metallic properties of Ti_2IrIn in $AlCu_2Mn$ and $CuHg_2Ti$ structures

Sadeghi, Khojasteh; Ahmadian, Farzad

Department of Physics, Shahreza Branch, Islamic Azad university, Shahreza, Iran

Abstract

First principles calculations using the self-consistent full-potential linearized augmented plane wave (FPLAPW) method in the framework of density functional theory (DFT) were performed to study the electronic structures, magnetic properties and Curie temperature of new full-Heusler compound Ti_2IrIn. The Ti_2IrIn compound in the $CuHg_2Ti$ -type structure was a half-metallic ferromagnet. The total magnetic moment of Ti_2IrIn compound in the $CuHg_2Ti$ -type structure was 2μB per formula unit which was in agreement with Slater-Pauling rule($M_{tot}=Z_{tot}-18$).

71.10; 71.15; 71.20

مقدمه

اسپینترونیک یکی از زمینه‌های نو ظهور علم نانو است. هدف این علم مطالعه نقش اسپین الکترون در فیزیک ماده چگال می‌باشد. نانوساختارهای مختلط فرومغناطیسی و نیم رسانایی عناصر اصلی اسپینترونیک را تشکیل می‌دهند. نیم‌فلزات فرومغناطیس با داشتن قطبش اسپینی ۱۰۰٪ در تراز فرمی و توانایی بالا در تولید جریان قطبیده اسپینی مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته‌اند. در این میان آلیاژهای هویسلر نیمه‌فلز دارای اهمیت زیادی هستند اولین بار دی گروت و همکارانش[۱] خاصیت نیمه فلزی را در ترکیبات هویسلر در سال ۱۹۸۳ پیش بینی کردند. اخیرا مطالعه ترکیبات هویسلر بر پایه Ti_2 مورد توجه قرارگرفته است[۲]. با توجه به اطلاعات بدست آمده، هیچ گزارش تجربی و نظری بر روی خواص نیمه فلزی، الکترونی و مغناطیسی ترکیب Ti_2IrIn ارائه نشده است.

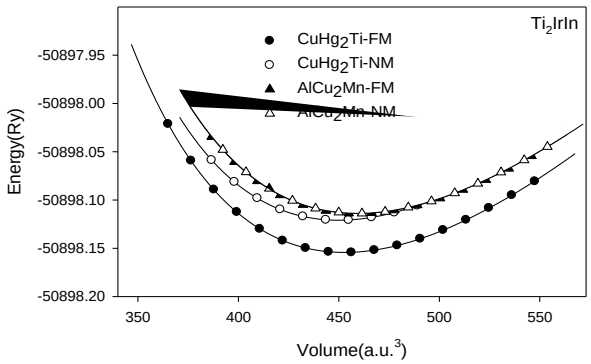
روش محاسبات

محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهساخته‌ی خطی با پتانسیل کامل(FP-LAPW) بر پایه نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از نرم افزارwien2k انجام شده است. پارامتر مهم $R_{MT}k_{max}$ برابر ۸ انتخاب شده است. شعاع کره موفین–تین اتم‌های مختلف برابر ۲a.u انتخاب گردیده است.

خواص ساختاری

خواص فیزیکی یک سیستم به انرژی کل آن و تغییراتش با حجم وابسته است. در شکل(۱) نمودار انرژی برحسب حجم ترکیب Ti_2IrIn در ساختارهای $AlCu_2Mn$ و $CuHg_2Ti$ و در حالت‌های فرومغناطیسی(FM) و غیر مغناطیسی(NM) رسم شده‌اند.

شکل(۱): نمودارهای انرژی بر حسب حجم یاخته بسیط برای ترکیب Ti_2IrIn در دو ساختار $AlCu_2Mn$ و $CuHg_2Ti$



مطابق شکل(۱) ترکیب Ti_2IrIn در ساختار $CuHg_2Ti$ و در حالت(FM) به عنوان ساختار پایدار معرفی می‌شود. به دلیل انطباق نمودارهای انرژی – حجم برای حالت‌های فرومغناطیسی و غیرمغناطیسی ساختار شبه پایدار $AlCu_2Mn$ ، این ترکیب در این ساختار غیرمغناطیسی می‌باشد. پارامترهای ساختاری شامل ثابت شبکه a، مدول حجمی (B)، مشتق مدول حجمی(B′)، انرژی بستگی (E_c) و انرژی تشکیل (E_f) برای این ترکیب در هر دو ساختار در جدول(۱) گزارش شده است.

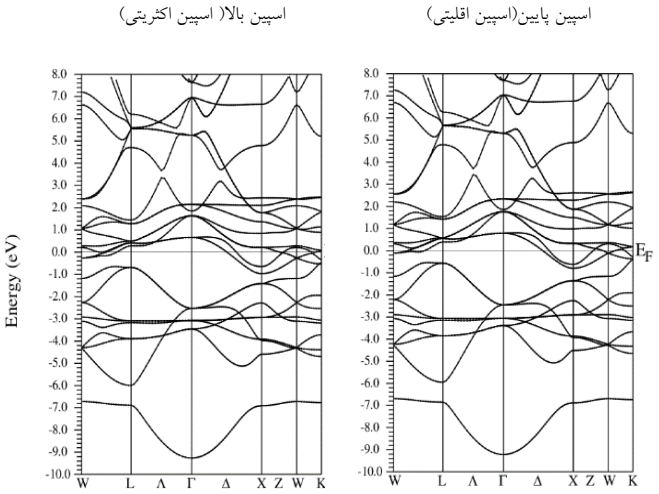
جدول(۱): پارامترهای ساختاری تعادلی شامل ثابت شبکه(a) ، مدول حجمی (B)، مشتق مدول حجمی (B′)، انرژی بستگی (E_c) و انرژی تشکیل (E_f)

ترکیب	ساختار		a(A°)	B(Gpa)	B′	E c(Ry)	E f(Ry)
Ti_2IrIn	$AlCu_2Mn$	FM	٦/٤٩	١٤٥/٩٥	٤/٥٤	−١/٦٠٢	−٠/٠٩٩
		NM	٦/٤٩	١٤٦/٠٥	٤/٥١	−١/٦٠٢	−٠/٠٩٩
	$CuHg_2Ti$	FM	٦/٤٦	١٥٢/٩٨	٤/٤٤	−١/٦٤٣	−٠/١٤٠
		NM	٦/٤٥	١٥٣/٧١	٤/٧٠	−١/٦٠٩	−٠/١٠٦

مدول حجمی نشان دهنده قدرت پیوندها در ترکیب می‌باشد. بیشترین مقدار مدول حجمی در ساختار $CuHg_2Ti$ و در حالت غیرمغناطیسی مشاهده می‌شود. بیشترین مقدار مشتق مدول حجمی در ساختار $CuHg_2Ti$ و حالت غیرمغناطیسی است. علامت منفی در انرژی بستگی نشان از تمایل بیشتر بلور برای ایجاد پیوند اتمی نسبت به جدایی اتم‌ها می‌باشد. هر چه عدد انرژی بستگی منفی‌تر باشد سیستم پایدارتر است. منفی بودن انرژی تشکیل ترکیب در هر دو ساختار و در هر دو حالت مغناطیسی و غیرمغناطیسی حکایت از تشکیل و سنتز این ترکیب در شرایط تعادلی دارد.

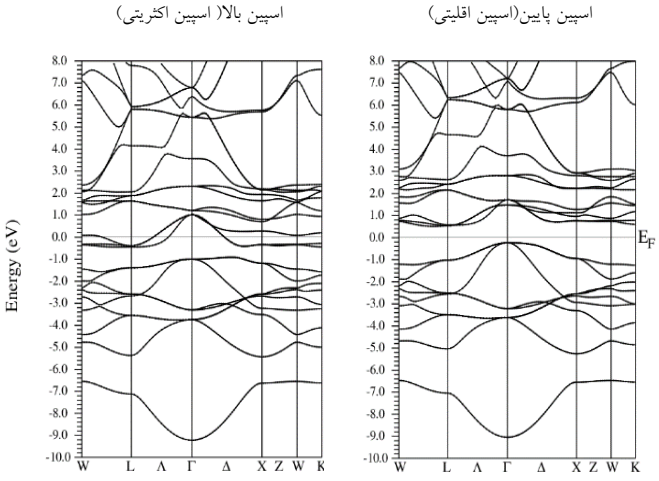
خواص الکترونی

برای بررسی خواص الکترونی، ساختار نوار انرژی و چگالی حالت‌های الکترونی کلی وجزئی برای این ترکیب محاسبه و رسم شد. در شکل‌های(۲) و (۳) ساختار نواری ترکیب Ti_2IrIn در هر دو ساختار $AlCu_2Mn$ و $CuHg_2Ti$ قابل مشاهده هستند. با توجه به شکل(۲) نوارهای انرژی تراز فرمی را برای هر دو حالت اسپین اکثریتی و اقلیتی در ساختار نوع $AlCu_2Mn$ قطع می‌کنند. بنابراین فلز بودن این ترکیب در این ساختار تایید می‌شود. تشابه کامل ساختار نواری در هر دو حالت اسپینی بیانگر غیرمغناطیسی بودن این ترکیب در ساختار $AlCu_2Mn$ است.



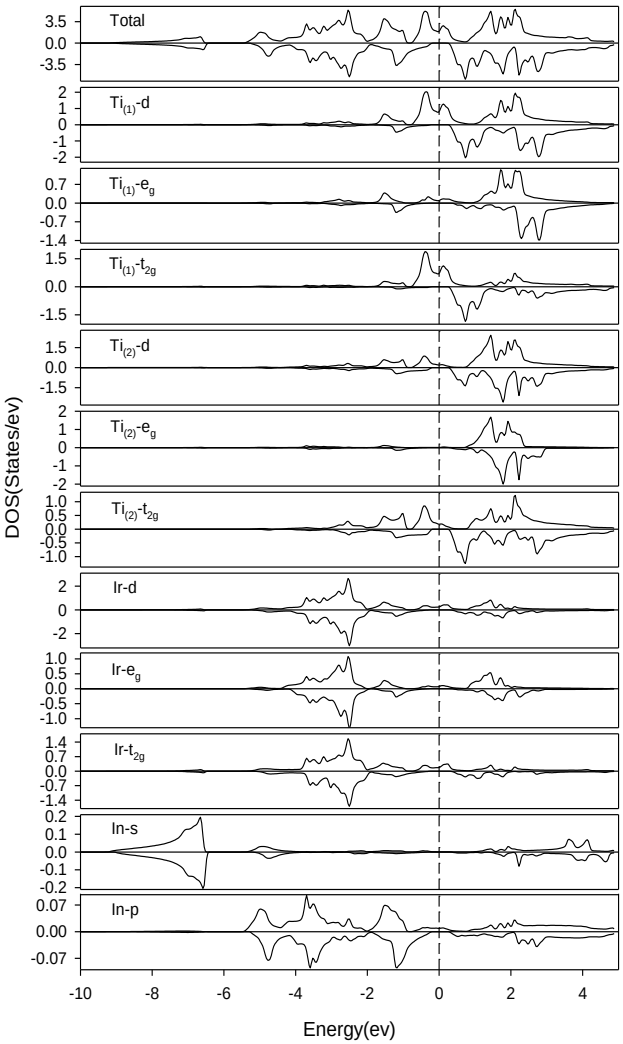
شکل(۲): ساختار نوار انرژی ترکیب Ti_2IrIn در ساختار $AlCu_2Mn$

با توجه به شکل(۳) سطح فرمی در نوار اقلیتی درون گاف نواری واقع شده که حکایت از رفتار نیمه رسانایی این ترکیب در ساختار $CuHg_2Ti$ دارد. از طرفی نوارهای انرژی سطح فرمی را در حالت اکثریتی قطع می‌کنند و از خود خاصیت فلزی نشان می دهد. بنابراین خاصیت نیمه فلزی ترکیب Ti_2IrIn در ساختار $CuHg_2Ti$ تایید و این ترکیب به عنوان فرومغناطیس نیم فلز معرفی می‌شود.



شکل(۳): ساختار نوار انرژی ترکیب Ti_2IrIn در ساختار $CuHg_2Ti$

برای بررسی منشا خاصیت نیمه فلزی، نمودار چگالی حالت‌های الکترونی کلی و جزئی ترکیب Ti_2IrIn در ساختار $CuHg_2Ti$ را بررسی می‌کنیم. در نمودار چگالی حالت‌ها، خط چین عمودی مکان تراز فرمی است. با توجه به شکل(٤) حضور سطح فرمی در گافی به اندازه ۰/۷۳ الکترون ولت در حالت‌های اقلیتی و حضور حالت های الکترونی در سطح فرمی در حالت اکثریتی خاصیت نیمه فلزی ترکیب را تائید می‌کند. این ترکیب در سطح فرمی از قطبش اسپینی صددرصد برخوردار است. مقدار گاف نیم فلزی ۰/۲۳الکترون ولت است. دو عامل در ایجاد گاف نیم فلزی نقش دارد. اول هیبریداسیون بین اوربیتال‌های d اتم‌های واسطه علت ایجاد گاف نیم فلزی است که به گاف نیم فلزی d-d معروف است. دیگری هیبریداسیون کووالانسی است. همانطور که دیده می‌شود حالت‌های اشغال شده زیر سطح فرمی اساسا به فلز واسطه Ir با ظرفیت بیشتر و حالت‌های اشغال نشده بالای سطح فرمی عمدتا مربوط به فلز واسطه Ti با ظرفیت کمتر هستند، که نشان از وقوع یک هیبریداسیون کووالانسی در ترکیب Ti_2IrIn دارد[۳].



شکل(٤): چگالی حالت‌های کلی و جزئی ترکیب Ti_2IrIn

در ساختار $CuHg_2Ti$

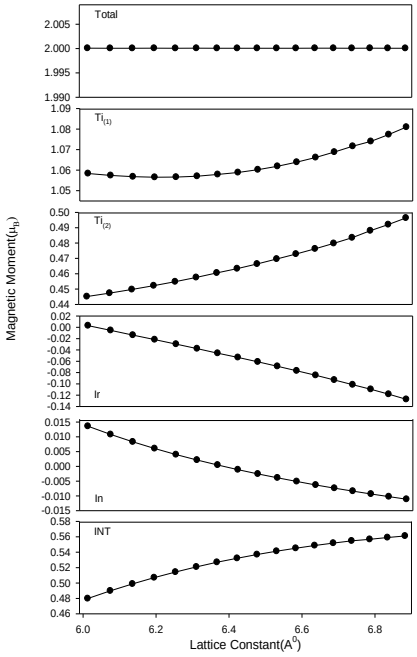
خواص مغناطیسی

مقادیر گشتاورهای مغناطیسی کلی و جزئی ترکیب Ti_2IrIn در ساختار $CuHg_2Ti$ در جدول(۲) گزارش شده است. مقدار صحیح گشتاور مغناطیسی کل ترکیب در ساختار $CuHg_2Ti$ حکایت از خاصیت نیمه فلزی ترکیب دارد. مقدار M_{tot} ترکیب Ti_2IrIn برابرμB ۲ محاسبه شد. گشتاور مغناطیسی کل با رابطه اسلیتر – پائولینگ $M_{tot} = Z_{tot} - 18$ در توافق است[٤].

جدول(۲): گشتاورهای مغناطیسی کلی، جزئی و سهم بین جایگاهی ترکیب Ti_2IrIn در ساختار $CuHg_2Ti$ بر حسب مگنتون بوهر (μB)

ترکیب	گشتاورمغناطیسی کل	سهم بین جایگاهی	گشتاورمغناطیسی جزیی	
Ti_2IrIn	۲	۰/٦٧	$Ti_{(1)}$	۰/۹٦
			$Ti_{(2)}$	۰/٤۱
			Ir	−۰/۰۵
			In	۰/۰

برای بررسی رفتار گشتاورهای مغناطیسی کلی و جزئی ترکیب Ti_2IrIn بر حسب فشار، گشتاورهای مغناطیسی کلی، جزئی و سهم بین جایگاهی این ترکیب نیمه فلز در ساختار $CuHg_2Ti$، به صورت تابعی از ثابت شبکه در شکل(۵) رسم شده است. گشتاور مغناطیسی کل در ترکیب Ti_2IrIn در محدوده وسیعی از ثابت شبکه مقدار $2\mu B$ باقی مانده و به تغییرات ثابت شبکه حساس نیست. بنابراین خاصیت نیم فلزی ترکیب در این محدوده تایید می‌شود. سهم عمده گشتاور مغناطیسی به اتم‌های Ti(1) و Ti(2) تعلق دارد که با افزایش پارامتر شبکه این مقادیر افزایش داشته اند. مقدار مطلق گشتاور مغناطیسی اتم Ir نیز در حجم‌های بالا افزایش نشان می‌دهد که حکایت از کاهش هیبریدشدگی d-d بین اتم‌های واسطه دارد[۵]. هرچه دمای کوری بالاتر باشد خاصیت مغناطیسی ماده در برابر دما مقاوم‌تر است[٦]. دمای کوری ترکیب Ti_2IrIn در ساختار $CuHg_2Ti$ با استفاده از رابطه $T_C = \frac{\Delta E}{3K_B}$ و مقادیر جدول(۱) مقدار۱۷۵٤/۹ کلوین محاسبه شد،K_B ثابت بولتزمن و ΔE اختلاف انرژی بین حالت‌های فرومغناطیسی و غیرمغناطیسی است.



شکل(۵): گشتاورهای مغناطیسی کلی و جزئی و سهم بین جایگاهی ترکیب Ti_2IrIn بر حسب پارامتر شبکه در ساختار $CuHg_2Ti$

نتیجه گیری

ترکیب Ti_2IrIn در ساختار$CuHg_2Ti$ یک فرو مغناطیس نیم فلز محسوب می‌شود. هیبریداسیون بین اوربیتال‌های d اتم‌های واسطه و هیبریداسیون کووالانسی باعث ایجاد گاف نیمه فلزی در این ترکیب شده است. گشتاور مغناطیسی کل ترکیب μB ۲ است و از رابطه اسلیتر–پائولینگ $M_{tot} = Z_{tot} - 18$ پیروی می‌کند.

مراجع

[1] R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen, K. H. J. Buschow, Phys. Rev. Lett. 50(1983) 2024.

[2] F.Ahmadian,S.Galehgirian,Solid State Communications202(2015)52-57 .

[3] C.M. Fang, G.A. de Wijs, R.A. de Groot, J. Appl. Phys. 91 (2002) 8340

[4] S. Skaftouros, K. Özdoğan, E. Şasıoğlu, I. Galanakis, Phy. Rev. B 87 (2013)024420.

[5]A.Birsan,P.Palade,2013, Intermetallics.36,p.86-89.

[6] E. Clifford, M. Venkatesan, R. Gunnning, and J. Coey, 2004, Solid state.