بررسی خواص نیم فلزی آلیاژهای هویسلر Zr_2RuTl و Hf_2CoTl

احمدیان فرزاد؛ افتخاری اشکان؛ گرک یراق میلاد

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

چکیده

محاسبات بر اساس نظریه تابعی چگالی (DFT) برای ترکیبات Zr_2RuTl و Hf_2CoTl با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته با پتانسیل کامل (FPLAPW) انجام شد. ترکیبات Zr_2RuTl و Hf_2CoTl در ساختار $CuHg_2Ti$ جزء فرومغناطیس های نیم فلز بودند گشتاورهای مغناطیسی کل ترکیب Zr_2RuTl در ساختار $CuHg_2Ti$ برابر با مقدار μ_B ۱ و گشتاورهای مغناطیسی کل ترکیب Hf_2CoTl در ساختار $CuHg_2Ti$ برابر با مقدار μ_B ۲ بود که در تطابق با قانون اسلیتر – پائولینگ $M_{tot} = Z_{tot} - 18$ (μ_B) بودند.

The investigation of the Half-metallic properties of heusler alloys Zr_2RuTl and Hf_2CoTl

Ahmadian, Farzad; Eftekhari, Ashkan; garak yaragh, Milad

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

Abstract

The calculations based on density functional theory (DFT) for the Zr_2RuTl and Hf_2CoTl compounds were performed using the self-consistent full-potential linearized augmented plane wave (FPLAPW) method. The Zr_2RuTl and Hf_2CoTl compounds in the $CuHg_2Ti$-type structure were half-metallic (HM) ferrmagnets. The total magnetic moment of Zr_2RuTl compound was 1 μ_B and magnetic moment of Hf_2CoTl compound in $CuHg_2Ti$ structure was equal 2 μ_B which were in agreement to Slater-pauling rule ($M_{tot} = Z_{tot} - 18$) μ_B.

مقدمه

امروزه فرومغناطیس های نیم فلز به دلیل توانایی بالا در تولید جریان قطبیده اسپینی در صنعت اسپینترونیک مورد توجه بسیاری قرار گرفته است. نیم فلزات موادی هستند که برای یک نوع اسپین، رفتار فلزی و برای نوع دیگر رفتار نیم رسانایی از خود نشان می دهند. اول بار گروت و همکارانش [۱] خاصیت نیم فلزی را در ترکیبات هویسلر در سال ۱۹۸۳ پیش بینی کردند. ترکیباتی از آلیاژهای تمام هویسلر که شامل اتم های Mn و Co می‌باشند (همانند ترکیباتی مثل Co_2ZrSn , Mn_2CoB , Mn_2NiB Co_2TiSn) که توجه بسیاری از محققان را به خود معطوف کرده اند زیرا آن ها فرومغناطیس های خوب با دمای کوری بالا هستند.

علاوه بر آن این آلیاژها معمولا بی نظمی کمی از خود نشان می‌دهند [۲]. لذا در این مقاله تصمیم گرفتیم روی ترکیبات Zr_2RuTl و Hf_2CoTl که در آن ها Zr ، Ru ، Hf و Co عناصری از گروه فلزات واسطه هستند، مطالعاتی را انجام دهیم. با توجه به اطلاعات بدست آمده، هیچ گزارش تجربی و نظری بر روی خواص نیم فلزی، الکترونی و مغناطیسی در ترکیبات Zr_2RuTl و Hf_2CoTl ارائه نشده است.

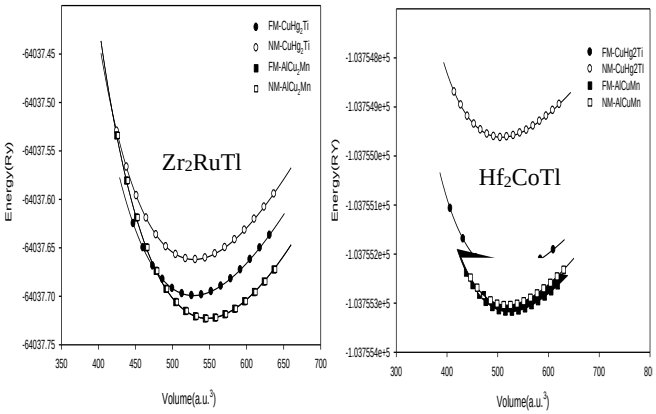
روش محاسبات

محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهساخته‌ی خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از نرم افزار wien2k [۳] انجام شده است.

پارامتر مهم $R_{MT}R_{max}$ برابر ۸ انتخاب شده است. شعاع کره موفین- تین اتم های مختلف برابر $2a.u$ انتخاب گردیده است. برای محاسبه انرژی تبادلی همبستگی از تقریب GGA [٤] استفاده شده است و انرژی جداسازی حالت های مغزه و ظرفیت ۸- ریدبرگ در نظر گرفته شده است.

خواص ساختاری

خواص فیزیکی یک سیستم به انرژی کل آن و تغییراتش با حجم (یا فشار) وابسته است. از این رو برای محاسبه کمیت‌های مختلف بلور، انرژی کل بلور را بر حسب حجم یاخته‌ی بسیط محاسبه کرده و نمودار انرژی- حجم را رسم می‌کنیم. نمودارهای انرژی برحسب حجم ترکیبات Zr_2RuTl و Hf_2CoTl در دو ساختار $CuHg_2Ti$ و $AlCu_2Mn$ در حالت های فرومغناطیسی (FM) و غیر مغناطیسی(NM) در شکل (۱) نشان داده شده است.



شکل(۱): نمودار انرژی بر حسب حجم یاخته بسیط برای ترکیبات Zr_2RuTl و Hf_2CoTl در دو فاز $AlCu_2Mn$ و $CuHg_2Ti$ در دو حالت فرو مغناطیسی (FM) و غیر مغناطیسی (NM)

با مشاهده، نمودار نتیجه می‌گیریم که ترکیب Zr_2RuTl در ساختار $AlCu_2Mn$ در حالت فرومغناطیسی پایدار و Hf_2CoTl در ساختار $AlCu_2Mn$ در حالت غیر مغناطیسی پایدار است. ولی هر دو ترکیب در فاز $CuHg_2Ti$ حالت فرومغناطیسی پایدارتر است. لذا در ادامه نتایج روی فاز شبه پایدار$CuHg_2Ti$ متمرکز می‌گردد. پارامترهای ساختاری شامل ثابت شبکه a، مدول حجمی B_0، مشتق مدول حجمی B_0'، انرژی بستگی (E_c) و انرژی تشکیل (E_f) برای ترکیبات Zr_2RuTl و Hf_2CoTl در فازهای مختلف به همراه نتایج نظری موجود در جدول (۱) گزارش شده است.

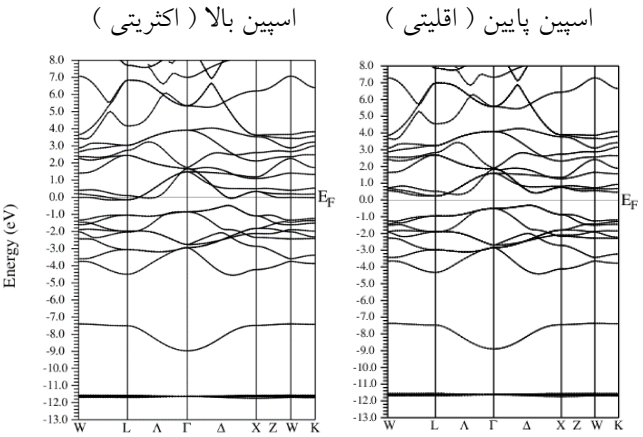
نام ترکیب	ساختار	a (A°)	B (Gpa)	B'	E_c(Ry)	E_f(Ry)
Zr_2RuTl	$AlCu_2Mn$	٦/٨٨	١٢٩/٧٢	٤/٠٦	-١/٦٢	-٠/٠٥
	$CuHg_2Ti$	٦/٨٠	١٢٦/٥٠	٤/٥٨	-١/٦٠	-٠/٠٣
Hf_2CoTl	$AlCu_2Mn$	٦/٧٨	١٢٢/١٠	٤/٥٣	-١/٠١	-٠/٠١
	$CuHg_2Ti$	٦/٧٤	١٠٦/٤٠	٤/٣١	-١/٥١	-٠/٠٩

جدول(۱): پارامترهای برای ترکیبات Zr_2RuTl و Hf_2CoTl در فازهای مختلف در حالت فرومغناطیسی

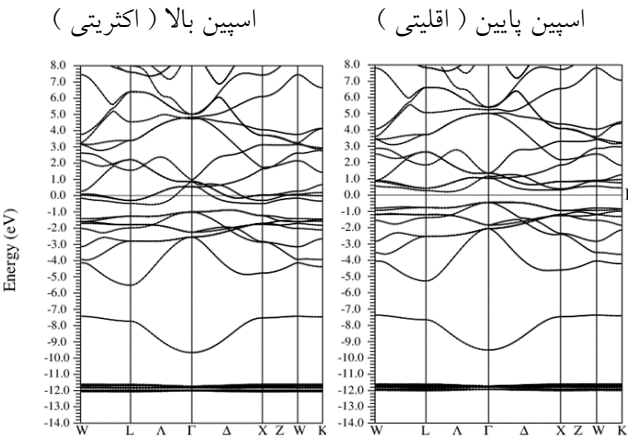
مقایسه پارامتر شبکه در هر دو ترکیب نشان می‌دهد که پارامتر شبکه در ساختار $AlCu_2Mn$ نسبت به ساختار $CuHg_2Ti$ بیشتر است. علامت منفی در انرژی بستگی نمایش دهنده این است که اتم های بلور تمایل بیشتری برای ایجاد پیوند اتمی نسبت به جدایی اتم ها دارد. هم چنین، انرژی بستگی معیاری از پایداری سیستم می باشد و می‌دانیم که هرچه عدد انرژی بستگی منفی تر باشد سیستم پایدارتر است. منفی بودن انرژی تشکیل ترکیبات Zr_2RuTl و Hf_2CoTl به معنای آن است که این ترکیبات در شرایط تعادلی قابل سنتز هستند.

خواص الکترونی

برای بررسی خواص الکترونی، ساختار نوار انرژی و چگالی حالت‌های الکترونی (DOS) کلی و جزئی اتم‌های تمامی ترکیبها را در فاز فرومغناطیس محاسبه نموده‌ایم؛ که در شکل‌های٤،٣ و٥ نمودارهای حاصل به صورت نمونه برای ترکیبات Zr_2RuTl و Hf_2CoTl در ساختار $CuHg_2Ti$ آورده شده است.



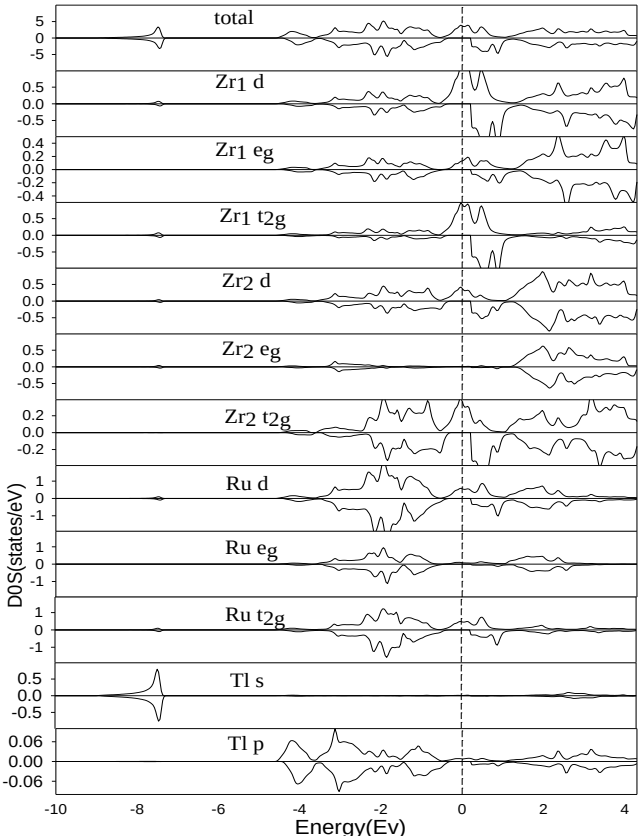
شکل (۳): ساختارنوار انرژی ترکیب Zr_2RuTl در فاز $CuHg_2Ti$



شکل (٤): ساختار نوار انرژی ترکیب Hf_2CoTl در فاز $CuHg_2Ti$

مطابق شکل‌های ۳و٤ در حالت اکثریتی سطح فرمی نوارهای انرژی را قطع کرده است و در حالت های اقلیتی سطح فرمی درون یک گاف قرار گرفته است. بنابراین خاصیت نیمه فلزی Zr_2RuTl و Hf_2CoTl در فاز$CuHg_2Ti$ تایید می‌شود. منحنی چگالی حالت های الکترونی می تواند ما را در بررسی منشا خاصیت نیم فلزی ترکیبات نیمه فلز یاری رساند. به دلیل نتایج مشابه، به عنوان نمونه نمودار چگالی حالت ها ی الکترونی کلی و جزئی ترکیب Zr_2RuTl در فاز $CuHg_2Ti$ در شکل (۵) نشان داده شده است.

مطابق شکل ۵ یک هیبرید شدگی قوی بین حالت های الکترونی t_{2g} و e_g اتم های Zr(۱) ، Zr(۲) و Ru در محدوده ۲/۵- تا ٤/۵ الکترون ولت وجود دارد که حالات پیوندی و ضد پیوندی را خلق می‌کند و تراز فرمی را در گاف بین حالت های پیوندی (زیر سطح فرمی) و حالت های ضدپیوندی (بالای سطح فرمی) قرار می‌دهد. در واقع هیبرید شدگی بین اوربیتال های d اتم های واسطه مسئول ایجاد گاف نیم فلزی است. از سوی دیگر مطابق با نمودارهای چگالی حالت ها، حالت های پیوندی اشغال شده اساسا به اتم واسطه Ru (با الکترون های ظرفیت بیشتر) تعلق دارند، در صورتی که حالت های ضدپیوندی اشغال نشده عمدتا مربوط به اتم های واسطه Zr(۱) و Zr(۲) (اتم هایی با الکترون های ظرفیت کمتر) هستند. این نشان می‌دهد که یک هیبریداسیون کووالانسی بین اتم های واسطه با ظرفیت بالا و ظرفیت پایین رخ می دهد و گاف انرژی بین حالات پیوندی و غیر پیوندی را ایجاد می‌کند.



شکل(۵): نمودار چگالی حالت های الکترونی کلی و جزئی ترکیب Zr_2RuTl در فاز $CuHg_2Ti$

خواص مغناطیسی

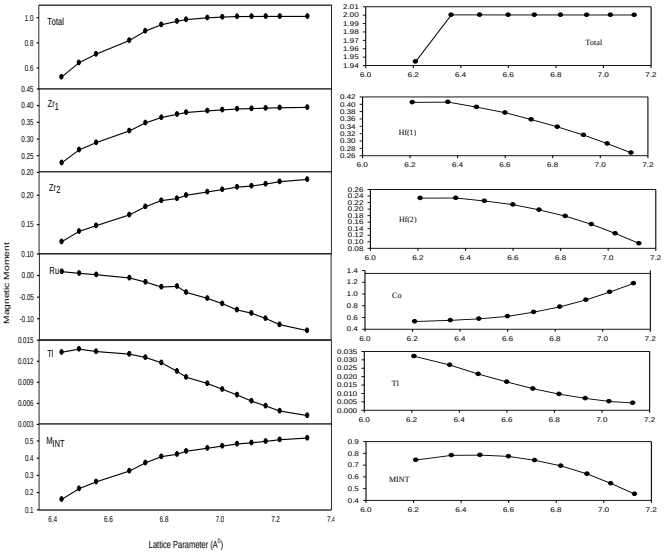
مقادیر گشتاورهای مغناطیسی جزئی و کلی برای ترکیبات Zr_2RuTl و Hf_2CoTl در فاز $CuHg_2Ti$ در جدول (۲) آمده است.

جدول (۲): گشتاورهای مغناطیسی کلی و جزئی ترکیباتZr_2RuTl و Hf_2CoTl برای فاز $CuHg_2Ti$ برحسب مگنتون بوهر (μ_B)

ترکیب	ساختار	M_{tot}	$M_{Zr(1)}$ / $M_{Hf(1)}$	$M_{Zr(2)}$ / $M_{Hf(2)}$	M_{Ru} / M_{Co}	M_{Tl}	M_{int}
Zr_2RuTl	$CuHg_2Ti$	۱/۰۰	۰/۳۷۳	۰/۱۹۲	-۰/۰۵۰	۰/۰۰۸	۰/٤٥
Hf_2CoTl	$CuHg_2Ti$	۲/۰۰	۰/۳۵۰	۰/۱۹۱	۰/۷۲۰	۰/۰۱۰	۰/۷۲۰

همانطور که دیده می‌شود گشتاور مغناطیسی کل ترکیبات Zr_2RuTl و Hf_2CoTl در فاز $CuHg_2Ti$ عددی صحیح است. مقدار صحیح گشتاور مغناطیسی کل نشانه خاصیت نیم فلزی ترکیب است. گشتاور مغناطیسی کل این ترکیبات از قانون اسلیتر–پائولینگ ($M_{tot} = Z_{tot} - 18$) که Z_{tot} تعداد کل الکترونهای ظرفیتی در یاخته بسیط است، تبعیت می‌کند. نمودارهای گشتاورهای مغناطیسی کلی و جزئی ترکیبات Zr_2RuTl و Hf_2CoTl در ساختار $CuHg_2Ti$ برحسب پارامتر شبکه در شکل(۵) رسم شده است.

مطابق شکل گشتاور مغناطیسی کل در ترکیب Zr_2RuTl با افزایش پارامتر شبکه با شیب ملایم افزایش می یابد تا به مقدار ثابتی میل می‌کند. در محدوده وسیعی پارامتر شبکه μ_B ۱ است که حکایت از خاصیت نیم فلزی ترکیب در این محدوده دارد. گشتاور مغناطیسی جزئی اتم های Zr_1 ، Zr_2 و M_{INT} (ناحیه بین جایگاهی) با افزایش پارامتر شبکه افزایش می‌یابد زیرا با افزایش پارامتر شبکه هیبرید شدگی بین اتم های واسطه کم شده و ممان های آن ها افزایش می‌یابد. سهم اتم های دیگر نیز ناچیز است. همچنین برای ترکیب Hf_2CoTl در فشارهای بالا گشتاور مغناطیسی کل به زیر مقدار μ_B۲ افت می کند. علت آنست که با افزایش فشار هیبریدشدگی افزایش یافته و باعث کاهش گشتاور مغناطیسی کل می شود. با افزایش پارامتر شبکه مقادیر گشتاور مغناطیسی جزئی اتم های Hf و Tl نیز افزایش می یابد.



شکل(۵): نمودارهای گشتاور جزیی و کلی ترکیب Zr_2RuTl و Hf_2CoTl در ساختار $CuHg_2Ti$ **بر حسب پارامتر شبکه**

نتیجه گیری

فاز حالت پایه هر دو ترکیب ساختار $AlCu_2Mn$ می‌باشد و فاز $CuHg_2Ti$ به عنوان فاز شبه پایدار می‌باشد. ترکیبات Zr_2RuTl و Hf_2CoTl در ساختار $CuHg_2Ti$ از خاصیت نیم فلزی برخوردارند. گشتاور مغناطیسی کل ترکیب Zr_2RuTl در ساختار $CuHg_2Ti$ برابر با مقدار μ_B۱ است و گشتاور مغناطیسی کل ترکیب Hf_2CoTl در ساختار $CuHg_2Ti$ برابر با مقدار μ_B ۲ است که در تطابق با قانون کلاسیکی اسلیتر – پائولینگ (μ_B) $M_{tot} = Z_{tot} - 18$ می‌باشد.

مرجع ها

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

[2] P. Webster and K. Ziebeck, 1988, Part 2, 75.

[3] 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.Universitat, Wien, Austria, ISBN 3-951031, 2001,1-2.

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