محاسبه خواص مغناطیسی و طیف مگنونی CaN در دو ساختار نیمه‌فلز

محمد ربانی، سید جواد هاشمی‌فر ، هادی اکبرزاده

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان ۸۳۱۱۱-۸٤۱٥٦

چکیده

ترکیبات فرومغناطیس نیم‌فلز، پتانسیل کاربردی زیادی در فناوری اسپینترونیک دارند. در این مقاله، با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن به بررسی خواص مغناطیسی و طیف مگنونی CaN در ساختارهای بلندروی و نمک‌سنگی پرداخته‌ایم. ساختار الکترونی به دست آمده نشان می‌دهد که هر دو ساختار بررسی شده، خاصیت نیمه‌فلزی با مغناطیدگی $1\ \mu_B/cell$ از خود نشان می‌دهند که از اوربیتال p نیتروژن نشات گرفته است. با توجه به طیف مگنونی محاسبه شده برای این دو سیستم، ثابت‌های تبادلی و دمای کوری CaN در ساختار نمک‌سنگی کمتر از ساختار بلندروی پیش‌بینی می‌شود.

مقدمه

در دیدگاه سنتی، مغناطش، تنها در ترکیباتی که شامل عناصر واسطه با اوربیتال‌های غیر پر d یا f هستند، قابل مشاهده است. پس از کشف خاصیت فرومغناطیس نیمه‌فلزی در ساختار بلندروی (zinc-blende) ترکیب CrAs، علاقه زیادی برای مطالعه روی مواد مشابه، به علت پتانسیل کاربردی آنها در صنعت اسپینترونیک و رشد منسجم آن‌ها در نیمه‌هادی‌های دوتایی با ساختار مشابه، به وجود آمد [1]. اگر چه بیشتر توجه به سمت ترکیبات فلزات واسطه بوده است، برای اولین بار در سال ۲۰۰٤، با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن پیش‌بینی شد که ترکیباتی فاقد عناصر واسطه نظیر CaAs نیز در ساختار بلندروی خاصیت فرومغناطیس نیمه‌فلزی دارند [2]. بررسی‌های جدید نشان می‌دهد که علاوه بر ساختار بلندروی، ساختار نمک سنگی این گونه ترکیبات نیز قابلیت بروز رفتار نیمه‌فلزی دارد [3].

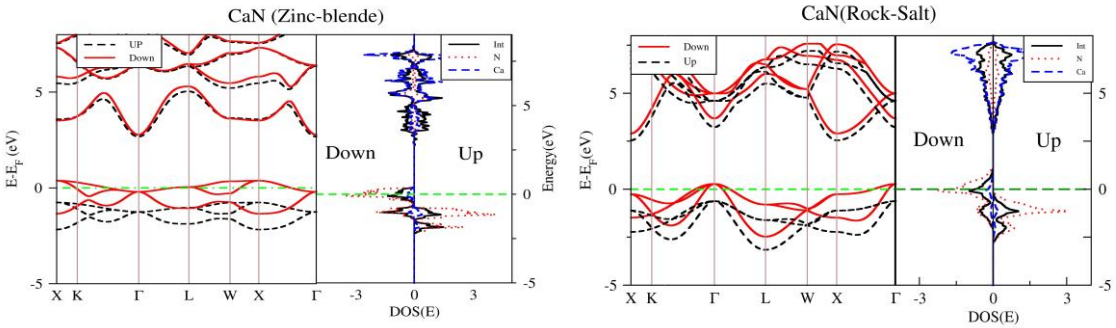
در این کار تحقیقاتی، ما از محاسبات مبتنی بر نظریه تابعی چگالی و روش پتانسیل کامل که در بسته محاسباتی فلور به کار گرفته شده است [4][5]، برای محاسبه و بررسی خواص مغناطیسی و طیف مگنونی[1] بلور CaN در ساختارهای بلندروی و نمک‌سنگی استفاده کرده‌ایم. در روش محاسباتی مورد استفاده، که روش امواج خطی بهبود یافته با پتانسیل کامل (FPLAPW) نام دارد، فضای یاخته واحد به کره‌های اتمی و ناحیه بین جایگاهی تقسیم می‌شود. در کره‌های اتمی، الکترون‌ها پتانسیل قوی‌تری احساس می‌کنند و لذا از اربیتال‌های اتمی برای بسط تابع موج استفاده می‌شود در حالی که در مناطق بین جایگاهی که پتانسیل اکتروستاتیک ضعیف‌تری دارند، از امواج تخت به عنوان توابع پایه استفاده می‌شود [5]. در این مقاله از تقریب تبادلی همبستگی PBE [6] و مش بهینه شده‌ی ۸×۸×۸ از نقاط k در منطقه اول بریلوئن برای انجام محاسبات با دقت مطلوب استفاده شد.

نتایج و بحث:

ابتدا با بررسی انرژی سیستم در حجم‌های مختلف، پارامتر شبکه بهینه ساختار نمک‌سنگی CaN برابر با ۹/٤ بوهر و ساختار بلندروی برابر با ۱۰/۳٤ بوهر به دست آمد. کوچک‌تر بودن پارامتر شبکه ساختار نمک‌سنگی به دلیل پکیدگی بیشتر آن است. سپس خواص الکترونی و مغناطیسی در پارامتر شبکه‌های بهینه محاسبه گردید.

---

[1] Magnon spectrum



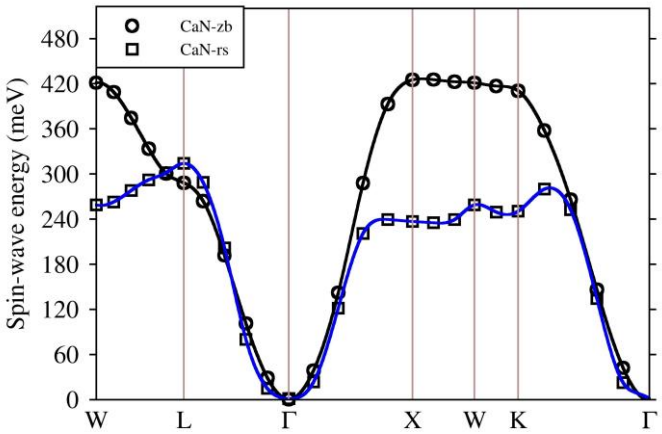
شکل ۱ : چگالی حالات اتمی و بین جایگاهی و ساختار نواری CaN در دو ساختار نمک سنگی و بلندروی

ساختار الکترونی به دست آمده برای CaN در دو ساختار بررسی شده در شکل ۱ ارایه شده و دلالت بر رفتار نیمه‌فلزی این سیستم‌ها دارد. همانطور که در منحنی چگالی حالات مشاهده می‌شود، چگالی حالات اقلیت (اسپین پایین) در هر دو ساختار رفتار فلزی دارند، در حالی که در کانال اسپینی اکثریت، یک گاف نواری (گاف نیمه فلزی) مشاهده می‌شود. به دلیل خاصیت فرومغناطیس نیمه‌فلزی، این مواد گزینه‌های مناسبی برای استفاده در صنعت اسپینترونیک هستند. همانطور که در شکل مشاهده می‌شود، مغناطش CaN ناشی از اتم نیتروژن است که فاقد اوربیتال d است و لایه ظرفیت آن از اربیتال p تشکیل شده است. بنابراین مغناطش این ترکیب ناشی از اوربیتال p است. مغناطش بدست آمده برای CaN در هر دو ساختار $1\mu_B$ است که با سایر نتایج در توافق است. اتم‌های کلسیم مغناطیدگی اندکی دارند و حدود ۹۶ درصد مغناطیدگی سیستم از اتم نیتروژن حاصل می‌شود. هیبریدشدگی اندکی بین اوربیتال p و d در سطح فرمی وجود دارد که در تسهیل بروز رفتار فرومغناطیسی در این سیستم موثر است. به عبارت دیگر این هیبریدشدگی به تیز شدن حالات p در سطح فرمی کمک می‌کند و لذا برهم‌کنش تبادلی استونر را تقویت می‌کند. در ترکیبات مشابهی که این هیبریدشدگی وجود ندارد، رفتار فرومغناطیسی در ثابت‌های شبکه بزرگ‌تری رخ می‌دهد [7]. اخیرا نشان داده شده است که مواد دارای مغناطش p به علت یونیدگی زیاد، تمایل دارند در ترکیب‌هایی با تعداد همسایه‌های بیشتر، نظیر ساختار نمک‌سنگی، تشکیل بلور دهند تا انرژی الکترواستاتیکی آنها کاهش پیدا کند و لذا ساختار بلندروی در حجم‌های بزرگتر پایدار می‌شود [3].

برانگیختگی‌های مگنونی در یک سیستم، امواج مارپیچی ناشی از چرخش اسپین اتم‌ها هستند که در آن اندازه ممان اسپینی اتم‌ها تغییر نمی‌کند و فقط جهت‌گیری آنها از اتمی به اتم دیگر با یک زاویه مشخص در جهت بردار q که بردار مارپیچ اسپینی گفته می‌شود، تغییر می‌کند. اندازه ممان مغناطیسی در این حالت از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$M^{n} = M\,(\cos(q.R^{n}+\varphi)\sin\theta, \sin(q.R^{n}+\varphi)\sin\theta, \cos\theta) \qquad (۱)$$

که در این رابطه M^n ممان مغناطیسی اتم مستقر در مکان بلوری R^n، q بردار موج در منطقه اول بریلوئن و φ فاز اولیه جهت ممان اسپینی است. در شکل ۲ طیف مگنونی محاسبه شده برای هردو ساختار CaN ارایه شده است. مشاهده می‌شود که انرژی برانگیختگی‌های مگنونی در ساختار بلندروی به ازای بیشتر بردارهای موج‌های داخل منطقه اول بریلوئن بیشتر از ساختار نمک‌سنگی است و این نشان از قدرت بیشتر برهم‌کنش تبادلی در ساختار مغناطیسی نمک‌سنگی دارد. طیف مگنونی به دست آمده برای ساختار بلندروی با سایر مقالات[7] توافق کامل دارد، در حالی که



شکل ۲ : طیف مگنونی محاسبه شده برای CaN در دو ساختار بلندروی و نمک‌سنگی

منحنی بدست آمده برای ساختار نمک‌سنگی، جدید است و تاکنون گزارش نشده است. برطبق رهیافت RPA[۲] برای بدست آوردن دمای کوری مشاهده می‌شود که دمای کوری رابطه مستقیمی با انرژی طیف مگنونی دارد[7] بنابراین دمای کوری ساختار نمک‌سنگی کمتر از ساختار بلند روی پیش‌بینی می‌شود.

مرجع‌ها

[1] H. Akinaga, T. Manago, and M. Shirai, “Material Design of Half-Metallic Zinc-Blende CrAs and the Synthesis by Molecular-Beam Epitaxy,” *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 39. pp. L1118–L1120, 2000.

[2] M. Geshi, K. Kusakabe, H. Tsukamoto, and N. Suzuki, “Zinc-blende CaP, CaAs and CaSb as half-metals: A new route to magnetism in calcium compounds,” Feb. 2004.

[3] O. Volnianska and P. Bogusławski, “Magnetic and structural properties of IIA-V nitrides,” *Phys. Rev. B*, vol. 75, no. 22, p. 224418, Jun. 2007.

[4] “The Juelich FLEUR project.” [Online]. Available: http://www.flapw.de/pm/index.php. [Accessed: 18-Apr-2014].

[5] S. Blнugel and G. Bihlmayer, “Full-Potential linearized augmented planewave method,” vol. 31, 2006.

[6] J. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, “Generalized Gradient Approximation Made Simple.,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, no. 18, pp. 3865–3868, Oct. 1996.

[7] a Laref, E. Saşioglu, and I. Galanakis, “Exchange interactions, spin waves, and Curie temperature in zincblende half-metallic sp-electron ferromagnets: the case of CaZ (Z = N, P, As, Sb).,” *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 23, no. 29, p. 296001, Jul. 2011.

[۲] Random phase approximation