

# خواص مغناطیسی و نیم-فلزی آلیاژهای $(d^0)$ چهارتایی هاسلر در رهیافت ابتدا به ساکن KYBX ( $Y=Ca$ or $Sr$ , $X=S$ or $Se$ )

الیاسی، مریم\*؛ مختاری، علی

دانشکده فیزیک، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

پست الکترونیکی: [eliasimaryam@yahoo.com](mailto:eliasimaryam@yahoo.com)

## چکیده

آلیاژهای هاسلر به دلیل ساختار الکترونی منحصر به فردی که دارند مورد توجه زیادی قرار گرفته‌اند. بیشتر تحقیقات انجام شده بر روی آلیاژهای هاسلر تا به امروز شامل ساختارهایی است که حاوی عناصر واسطه هستند. اخیراً ترکیبات چهارتایی هاسلر بدون حضور فلزات واسطه توجه محققان را هم از دیدگاه تجربی و هم نظری به خود جلب کرده است. ما از روش ابتدا به ساکن، برای بررسی خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی ترکیبات هاسلر چهارتایی  $KYBX(Y=Ca$  or  $Sr$ ,  $X=S$  or  $Se)$  استفاده کرده‌ایم. نتایج محاسبات ما نشان داد که این ترکیبها فرومغناطیس هستند. بعد از بررسی چینه‌های مختلف اتم‌ها در این ترکیبات مشخص شد که چینه خاصی از اتم‌ها در ساختار (نوع ۱)، پایدارترین پیکربندی است. خواص الکترونی این آلیاژها نشان می‌دهد که دارای گشاور مغناطیسی  $2 \mu B$  و نیمه فلزات مغناطیسی با قطبش اسپین  $100\%$  در سطح فرمی هستند. خاصیت نیمه فلزی آنها عمدتاً از اوربیتال‌های  $p$  اتم‌های  $B$  ناشی می‌شود. نتایج کلی حاکی از آن است که این ترکیبات برای کاربردهای اسپینترونیک مناسب هستند.

**واژه‌های کلیدی:** ترکیبات هاسلر چهارتایی، نظریه تابعی چگالی، خواص ساختاری، خواص الکترونی،

## ۱. مقدمه

حافظه داری به سال ۱۹۰۳ میلادی برمی‌گردد که فردریش هاسلر آلمانی، برای نخستین بار با بررسی و مطالعه‌ی ترکیب  $Cu_2MnAl$  توانست خواص مغناطیسی این ترکیب را با تغییر دما و تغییر ترکیب (اضافه کردن عناصر یا تغییر آن‌ها) به طور قابل ملاحظه‌ای تغییر دهد [۲]. نکته قابل توجه در آلیاژهای هاسلر، این است که اگرچه عناصر تشکیل دهنده آنها ممکن است در دمای محیط مغناطیسی

ترکیبات هاسلر به دلیل ساختار الکترونی منحصر به فرد، خواص نوری، قطبش اسپینی بالا، دمای کوری بالا و همچنین کاربردهای متنوع و گسترده در دستگاه‌های اسپینترونیک و اپتوالکترونیک مورد توجه محققان قرار گرفته است [۱]. تاریخچه‌ی آلیاژهای هاسلر و کشف اثر

نباشند، ولی ترکیب آن‌ها می‌تواند تبدیل به یک فرومغناطیس شود. ساختار الکترونی و خصوصیات فیزیکی آلیاژهای هاسلر به شدت به نظم ساختاری و توزیع اتم‌ها در شبکه وابسته است. این ترکیب‌ها بر اساس نوع ترکیب و تعداد عناصر موجود در ترکیب، در دو دسته‌ی آلیاژهای تمام‌هاسلر ( $X_2YZ$ ) و نیم‌هاسلر ( $XYZ$ ) فرمول‌بندی می‌شوند که  $X$  و  $Y$  معمولاً اتم‌های فلزی کاتیونی هستند و  $Z$  از عناصر آنیونی گروه اصلی انتخاب می‌شود. ترکیب‌های چهارتایی با فرمول شیمیایی  $XX'YZ$  آلیاژهای جدیدی هستند که با جایگزینی یکی از اتم‌های  $X$  در آلیاژهای تمام‌هاسلر  $X_2YZ$  با اتمی مثل  $X'$  می‌توان ایجاد کرد و در واقع راهی برای بررسی طیف گسترده‌ای از مواد جدید را بوجود آورده است. ترکیب‌های چهارتایی به دلیل پتانسیل‌های فراوان و کاربردهای عملی به صورت گسترده در زمینه‌ی نظری و تجربی مورد بررسی قرار گرفته‌اند [۵-۲]. تاکنون بیش از هزار آلیاژ هاسلر کشف شده است که بیشتر آن‌ها ترکیب‌هایی هستند که در ساختار آنها، عناصر واسطه وجود دارد. اما اخیراً، پژوهشگران نیم‌فلزهای فرومغناطیس زیادی را در ترکیب‌های هاسلر چهارتایی بدون حضور عناصر واسطه هم در زمینه نظری و هم تجربی کشف کرده‌اند و چندین ماده نیمه فلزی جدید هم چون:

$[7] CsXNO$  ( $X = Mg, Ca, Sr$ )  $[6] KCaNX$  ( $X = O, S$ ),  
 $[9] KCaBX$  ( $X = S, Se$ ),  $[8] KCaCCl$  و  $[10] CSrCZ$  ( $Z = P, As, Sb$ )  
 پیشنهاد شده است. رفتار نیمه فلزی ویژگی مشترکی است که برای بسیاری از آنها گزارش شده است. این نیم فلزها که از اتم‌هایی غیر از اتم‌های واسطه تشکیل شده‌اند تحت شرایط خاص کاری، فشار، دما و ولتاژ بالا، خاصیت نیم فلزی و مغناطیسی خود را از دست نمی‌دهند زیرا گاف نیم فلزی بزرگ‌تری، نسبت به دیگر ترکیب‌ها دارند و همین عامل سبب شده تا این آلیاژها در صنعت اسپینترونیک نقش مهمی را ایفا

کنند [۱۱]. این ترکیب‌ها در نزدیکی تراز فرمی برای یک کانال اسپینی رفتار عایق‌گونه و برای کانال دیگر رفتار فلزی دارند و می‌توانند سبب بهبود کاربردهای مغناطیسی با افزایش جریان قطبیده در قطعات الکترونیکی شوند [۱۲]. در نتیجه مطالعه خواص این ساختارها نقش اساسی در بررسی این ترکیبات دارد و از نظر تجربی و نظری چالش برانگیز است. در همین راستا جیانگتائو و همکاران [۶] روی ترکیبات  $KCaNX$  ( $X = O, Se, S$ ) تحقیق کرده‌اند و نشان داده‌اند که این ترکیبات نیمه فلزات فرومغناطیسی با گشتاور مغناطیسی عدد صحیح هستند که ناشی از هم‌پوشانی اوربیتال‌های  $p$  اتم‌های  $N$  و  $X$  است. هم‌چنین یوباکا و همکاران [۱۰] خاصیت نیمه فلزی را با اسپین بالای فلزی و اسپین پایین نیمه‌هادی در ترکیبات  $CsSrCZ$  ( $Z = P, Sb, As$ ) پیش بینی کرده‌اند و گشتاور مغناطیسی کل  $2\mu_B$  را بدست آورده‌اند. ساختارهای الکترونی و خواص مغناطیسی آلیاژهای هاسلر چهارتایی  $KCaCF$  و  $KCaCCl$  نیز توسط جیانگتائو و همکاران به دست آمده است و با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن، گشتاور مغناطیسی کل  $2\mu_B$  را که عمدتاً از حالات  $C-2p$  سرچشمه می‌گیرد، بدست آورده‌اند [۸]. هم‌چنین خواص فیزیکی دو ترکیب  $KCaBS$  و  $KCaBSe$  با استفاده از بسته‌های محاسباتی مختلف و شبه‌پتانسیل‌های مختلف توسط هووات و همکاران به دست آمده است و نشان داده‌اند که مغناطش عمدتاً توسط قطبش اسپین حالت  $B-p$  ایجاد می‌شود و گشتاور مغناطیسی کل، با تغییر کرنش از ۶٪ - تا ۶٪ ثابت می‌ماند [۹]. در کار حاضر، با توجه به کاربردهای فراوان ترکیبات هاسلر، چهار آلیاژ هاسلر چهارتایی بدون فلزات واسطه  $KYBX$  معرفی شده‌اند و با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن، مطالعه بر روی خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آن‌ها انجام شده است. نتایج ما نشان می‌دهد که این مواد نیمه فلزهایی با مغناطش کل ۲ مگنتون بوهر هستند. آنها ماهیت فلزی در

کانال اسپین بالا دارند، درحالی که در کانال اسپین پایین مانند یک نیمه هادی رفتار می کنند. هم چنین، نتایج ما دلیل خوبی است که نشان می دهد آلیاژهای KYBX می تواند لنتخاب های خوبی برای کاربرد در دستگاه های اسپیترونیک و اپتوالکترونیک باشند. تا حد اطلاع ما، تاکنون هیچ کار نظری و تجربی روی هاسلر چهارتایی  $KSrBS$ ،  $KSrBSe$  انجام نشده است و اگرچه برخی از ویژگی های  $KCaBS$  و  $KCaBSe$  پیش بینی شده است، ما آن ها را با بسته محاسباتی دیگر و شبه پتانسیل های متفاوت تری شبیه سازی کردیم و سپس نتایج خود را با کارهای قبلی مقایسه کردیم. نتایج ما، مطابقت خوبی با نتایج قبلی دارند که نشان می دهد رویکرد ما برای این نوع ترکیبات قابل اعتماد است [۹].

روند کار در ادامه به شرح زیر است؛ در بخش ۲ جزئیات روش محاسباتی و برخی پارامترهای بهینه شده مهم ارائه شده است و خواص ساختاری، الکترونی، مغناطیسی در بخش ۳ مورد بحث قرار گرفته و در نهایت بخش ۴ حاوی نتیجه گیری است.

## ۲. روش محاسباتی

ما از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو (QE) [۱۳، ۱۴] مبتنی بر نظریه ی تابعی چگالی (DFT) استفاده کرده ایم [۱۵، ۱۶]. در این روش معادلات تک ذره ای کوهن شم با استفاده از روش شبه پتانسیل و بسط تابع موج الکترون های ظرفیت بر حسب امواج تخت حل می شود [۱۷]. برای کرده ایم. بعد از بهینه سازی پارامترهای داخلی از جمله انرژی قطع بسط تابع موج و چگالی الکترونی، تعداد نقاط  $k$  و ثابت شبکه، یک ساختار پایدار برای هر کدام از این چینش ها بدست آمد. بررسی چینش های مختلف اتم ها در ترکیب، و بررسی نتایج بهینه نشان داد که پیکربندی نوع ۱ کمترین انرژی کل را دارد. بدین ترتیب، در ادامه با این پیکربندی، محاسبات الکترونی و مغناطیسی را انجام

برآورد محاسبات، پتانسیل تبدالی همبستگی از تقریب گرادیان شیب تعمیم یافته استفاده شده است [۱۸]. مش بندی نقاط  $k$ ، در منطقه اول بریلونن  $12 \times 12 \times 12$  و با روش مونخورست-پک در نظر گرفته شده است [۱۹]. انرژی قطع بسط تابع موج بعد از بهینه شدن، ۶۵ ریدربرگ در نظر گرفته شد. موقعیت قرار گرفتن اتم ها در فاز مکعبی مرکز سطحی (FCC) است و هر یاخته واحد شامل چهار اتم است. برای یافتن پایدارترین پیکربندی، سه پیکربندی مختلف زیر در نظر گرفته شد.

نوع ۱:  $K(0.25, 0.25, 0.25)$ ,  $Y(0.75, 0.75, 0.75)$ ,  $B(0.0, 0.0, 0.0)$ ,  $X(0.5, 0.5, 0.5)$

نوع ۲:  $K(0.0, 0.0, 0.0)$ ,  $Y(0.25, 0.25, 0.25)$ ,  $B(0.5, 0.5, 0.5)$ ,  $X(0.75, 0.75, 0.75)$

نوع ۳:  $K(0.25, 0.25, 0.25)$ ,  $Y(0.0, 0.0, 0.0)$ ,  $B(0.5, 0.5, 0.5)$ ,  $X(0.75, 0.75, 0.75)$

انرژی را در پیکربندی های متفاوت بالا، بر حسب ثابت شبکه بررسی کردیم، معین شد که چینش نوع ۱ که معادل  $KYBX(Y=Ca \text{ or } Sr, X=S \text{ or } Se)$  پایدارترین پیکربندی را دارد.

## ۳. بحث و نتیجه گیری

### خواص ساختاری

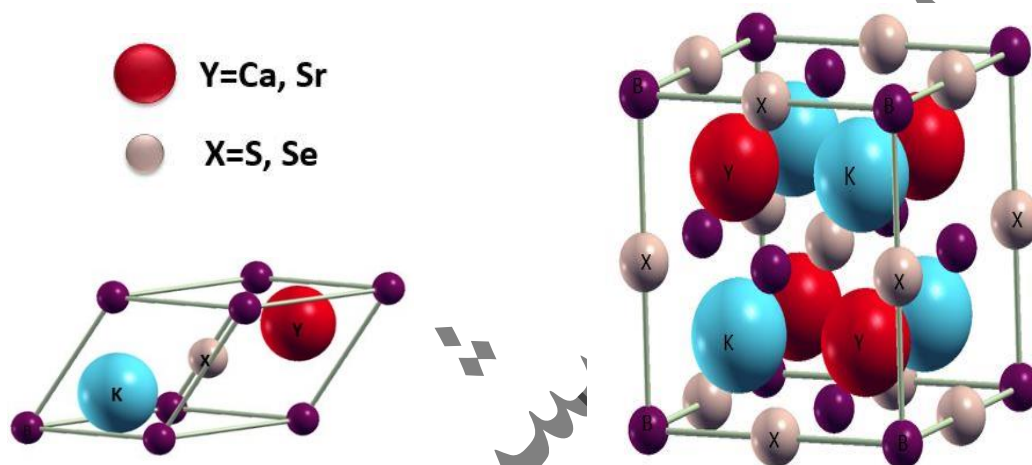
درکار حاضر ابتدا با استفاده از محاسبات خودسازگار، ترکیب های هاسلر چهارتایی KYBX را در سه پیکربندی متفاوت از اتم ها، با گروه فضایی ( $F-43m$ ) شبیه سازی

داده ایم. نمایی از یاخته قراردادی و بسط این ساختارها درحالت پایدار در شکل ۱، نمایش داده شده است.

به منظور تأیید حالت پایه مغناطیسی پیکربندی نوع ۱، انرژی حالت های کل غیر مغناطیسی (NM)، فرومغناطیسی (FM) به عنوان تابعی از حجم برای این آلیاژها را بررسی کرده ایم که در شکل ۲ نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می شود، می توان دریافت که ترکیبات ما در فاز فرومغناطیس،

در پایین‌ترین سطح انرژی قرار گرفته است. بنابراین حالت فرومغناطیس پایدارترین فاز مغناطیسی این آلیاژها است. بدین ترتیب برای محاسبات بعدی بر روی خواص این ترکیبات با ساختار نوع ۱ و حالت فرومغناطیسی تمرکز خواهیم کرد. هم‌چنین همان‌طور که در شکل ۲ می‌بینیم با افزایش فشار، تغییر فاز از فرومغناطیسی به غیرمغناطیسی مشاهده می‌شود که ما برای هر ساختار فشاری که در آن این گذار رخ می‌دهد را بررسی و محاسبه کردیم. در دمای

ساختاری مانند، پارامتر تعادلی شبکه (a)، مدول حجمی ( $B_0$ ) و مشتق مدول حجمی نسبت به فشار ( $B_0'$ ) بدست آمده است که مقادیر آن‌ها در جدول ۱ گزارش شده است. انرژی هم‌دوسی به عنوان انرژی مورد نیاز برای جداسازی ترکیب مورد نظر به اتم‌های تشکیل دهنده سامانه تعریف می‌شود [۲۱]. انرژی هم‌دوسی بر واحد اتم ( $E_{coh}$ ) برحسب ریدبرگ بر اتم برای ترکیبات مد نظر ما نیز در جدول ۱ آمده است. از مقایسه مقادیر انرژی هم‌دوسی



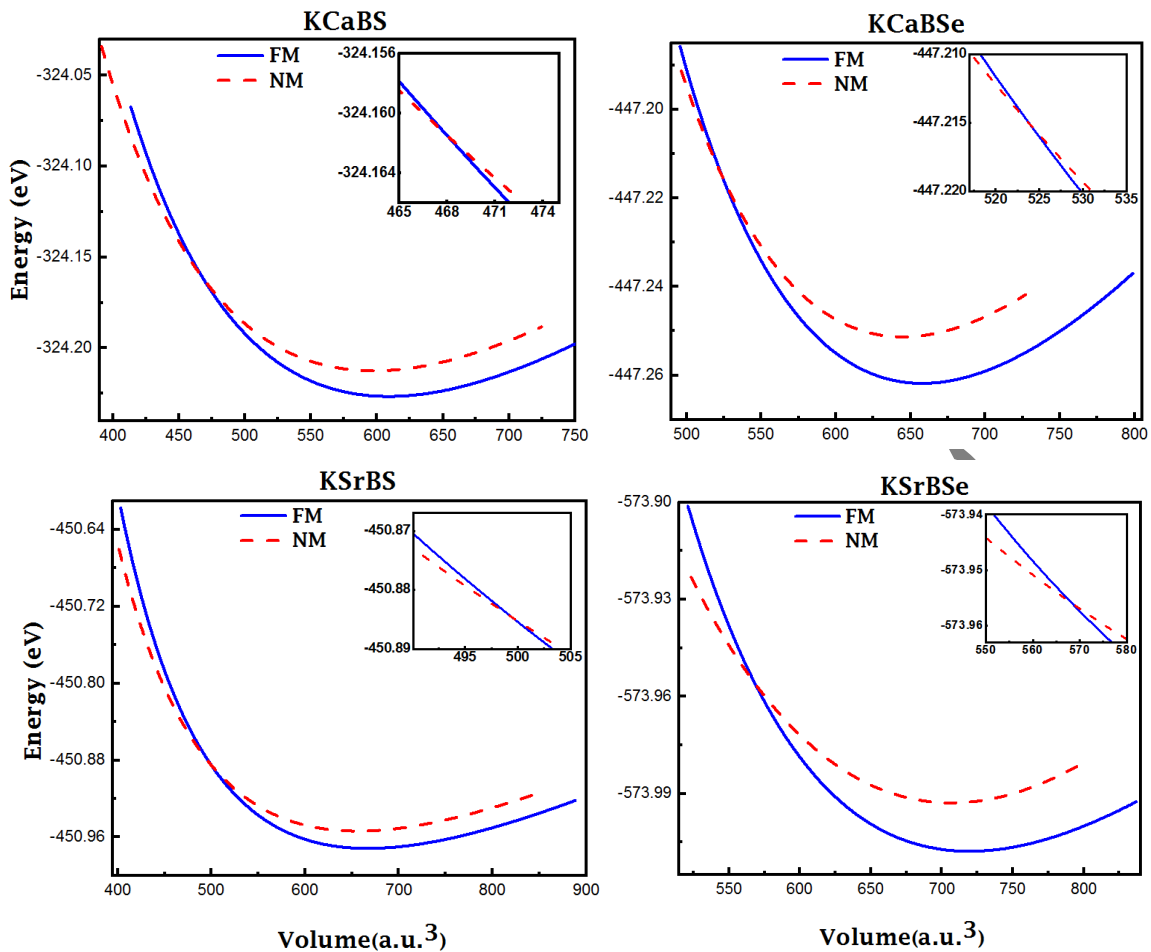
شکل ۱: طرح‌واره‌ای از یاخته قراردادی و بسیط ترکیبات KYBX

صفر، فشار تنها به عنوان تابعی از یک حجم بصورت  $P(V) = \frac{dE(V)}{dV}$  بدست می‌آید [۲۰]. فشار گذار میانگین از فاز فرومغناطیسی به غیرمغناطیسی برای ترکیب‌های KCaBS، KCaBSe، KSrBS، KSrBSe به ترتیب ۱۶/۴۱، ۱۱/۶۱، ۲۰/۳۹ و ۱۰/۸۱ گیگاپاسکال بدست آوردیم. در ادامه برای شبیه‌سازی خواص ساختاری ترکیبات به ازای حالت پایدار فرومغناطیسی نوع ۱، انرژی کل هر کدام را در حجم‌های مختلف محاسبه نموده و ویژگی‌های

می‌توان فهمید که ترکیب KCaBS از بقیه ترکیب‌ها پایدارتر است. با توجه به شکل ۲ و همان‌گونه که در جدول ۱ نیز واضح است با بزرگتر شدن شعاع اتم‌ها، ثابت شبکه نیز افزایش یافته است. بدین ترتیب، ثابت شبکه محاسبه شده برای ترکیب KSrBSe که اتم‌های تشکیل دهنده آن نسبت به دیگر ساختارهای مورد بررسی شعاع اتمی بزرگتری دارد، بزرگترین مقدار را دارا است و مدول حجمی آن کمترین مقدار را دارد.

جدول ۱: برخی از ویژگی‌های ساختاری ترکیبات هاسلر KYBX

KCaBS	KCaBSe	KSrBS	KSrBSe	
۱۳٫۴۵، ۱۳٫۲۱ <sup>a</sup>	۱۳٫۸۵، ۱۳٫۵۵ <sup>a</sup>	۱۳٫۸۷	۱۴٫۲۲	ثابت شبکه (a.u.)
۳۸٫۸، ۴۱٫۳ <sup>a</sup>	۳۳٫۴، ۳۷٫۵ <sup>a</sup>	۳۳٫۵	۳۰٫۴	مدول حجمی ( $B_0$ (GPa)
۳٫۱۱	۴٫۱۸	۴٫۷۸	۴٫۲۰	مشتق مدول حجمی $B_0'$
-۰٫۲۱۱، -۰٫۲۲۶ <sup>a</sup>	-۰٫۲۰۲، -۰٫۲۱۹ <sup>a</sup>	-۰٫۲۰۸	-۰٫۱۹۹	انرژی هم‌دوسی بر واحد اتم $E_{coh}(Ry/atom)$



شکل ۲: انرژی کل بر حسب حجم در فازهای غیر مغناطیسی (NM) و فرومغناطیسی (FM)

### خواص الکترونی

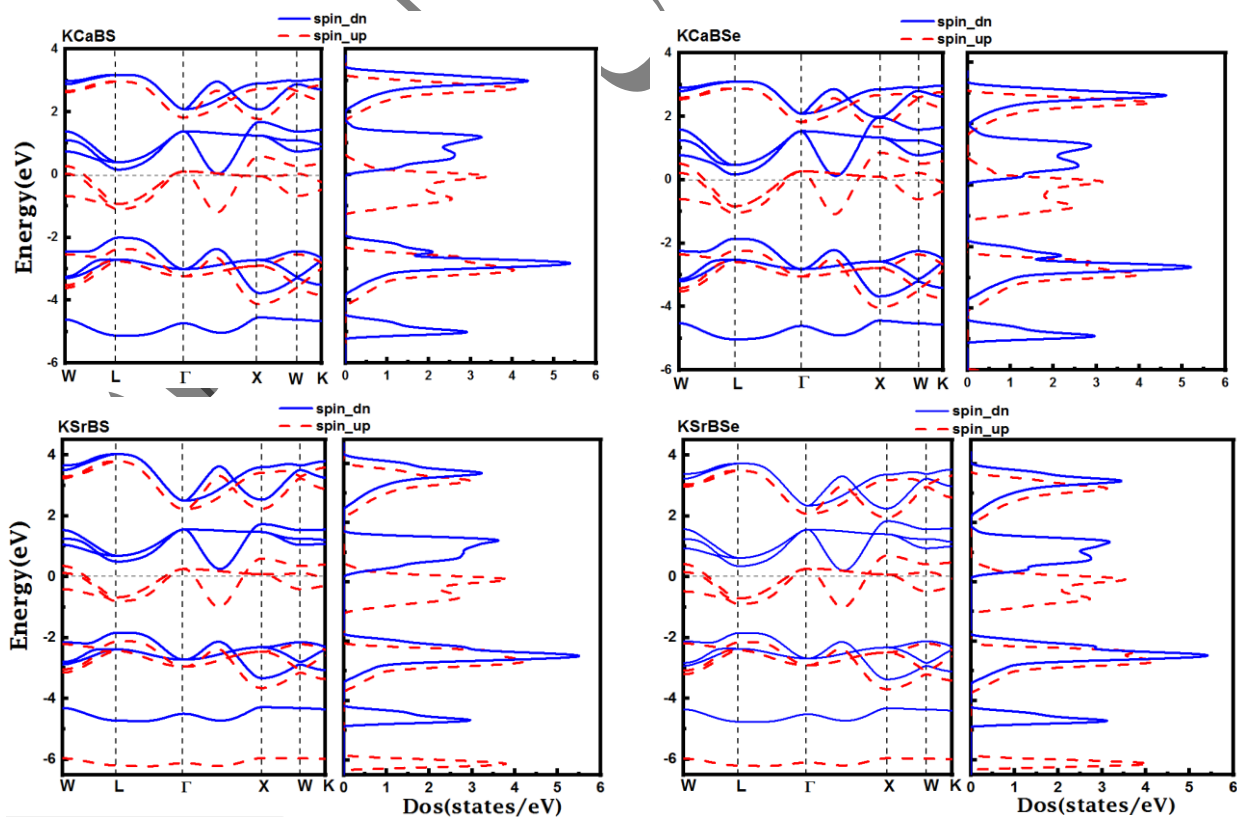
به منظور بررسی خواص الکترونی ترکیبات KYBX ساختارهای نواری وابسته به اسپین، چگالی حالت‌ها (DOS) و چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اتم‌های مختلف بر حسب انرژی (PDOS) را محاسبه کردیم. ساختار نواری با در نظر گرفتن قطبش اسپینی ترکیبات مورد بررسی برای حالت پایدار در رهیافت میدان خودسازگار برای مسیرهای تقارنی مرسوم در منطقه اول بریلوئن شبیه‌سازی شده و در شکل ۳ نمایش داده شده است. لازم به ذکر است که مبدأ انرژی صفر منطبق با بیشینه نوار ظرفیت انتخاب شده است و مقیاس انرژی بر حسب الکترون ولت است. بررسی اولیه نمودارها نشان می‌دهد که این آلیاژهای هاسلر ترکیبات فرومغناطیس و نیمه فلز هستند. در همه آنها،

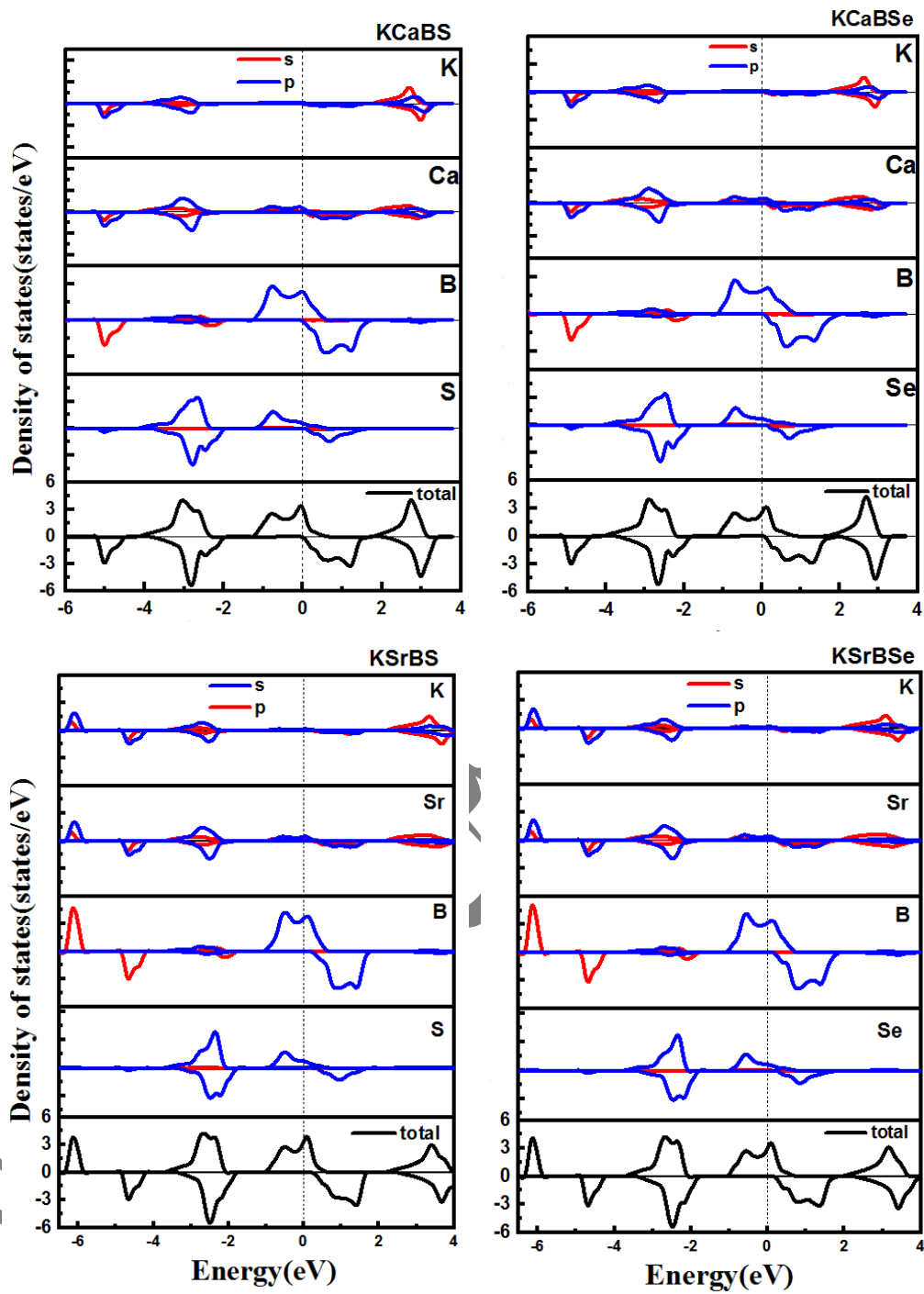
هم‌پوشانی بین نوارهای انرژی در نزدیک سطح فرمی برای اسپین بالا وجود دارد و گاف نواری مشاهده نمی‌شود؛ در حالی که برای اسپین پایین حداکثر نوار ظرفیت (VBM) و حداقل نوار رسانش (CBM) توسط یک گاف غیرمستقیم انرژی از هم جدا می‌شوند که حاکی از رفتار نیمه فلزی این ترکیبات است. مقادیر گاف نواری غیرمستقیم کانال اسپین پایین برای KCaBX به ترتیب ۲/۰۵۹ eV، ۲/۰۳ eV الکترون ولت و برای KSrBX به ترتیب ۳/۸۶ eV، ۴/۳۳ eV الکترون ولت به دست آمده است. هم‌پوشانی بین نوارهای انرژی در نزدیک سطح فرمی برای اسپین بالا وجود دارد و گاف نواری مشاهده نمی‌شود؛ در حالی که برای اسپین پایین حداکثر مقدار گاف نواری محاسبه شده برای KCaBX توافق خوبی با نتایج موجود

(PDOS) را برای کانال‌های اسپین بالا و پایین برای تمام ترکیبات مورد بررسی در حالت فرومغناطیس نشان می‌دهد. در واقع چگالی حالت‌های الکترونی از حل معادلات کوهن-شم و محاسبه‌ی ویژه مقادیر انرژی در نقاط منطقه اول بریلوئن بدست آمده‌اند. همان‌طور که در نمودارها مشخص است برای هر چهار ترکیب در اسپین بالا، حالت‌های الکترونی و ساختار نواری، سطح فرمی را قطع کرده‌اند و خاصیت فلزی دارند.

از کارهای دیگران دارد و نشان می‌دهد رفتار نیمه فلزی آنها پایدار است و نمی‌توان با فشار جزئی روی شبکه به راحتی این خصلت را از بین برد. هم‌چنین توافق خوبی در رفتارهای ساختارهای نواری محاسبه شده‌ی ما برای ترکیبات KCaBS و KCaBSe با کارهای قبل، وجود دارد. نتایج نشان می‌دهد که مقادیر گاف انرژی این ترکیبات به طور قابل توجهی بزرگتر از سایر ترکیبات هاسلر چهارتایی است که حاوی فلزات واسطه هستند. شکل ۴، چگالی حالت‌ها (DOS) و چگالی حالت‌های جزئی

شکل ۳: نمودار ساختار نواری و چگالی حالت کل برای الیزهای KYBX





شکل ۴: نمودار چگالی حالت‌های کل و جزئی محاسبه شده برای آلیاژهای KYBX

دیگر، در انرژی‌های گوناگون، به‌ویژه در نزدیکی تراز فرمی، رفتار نمودار چگالی حالت‌های الکترونی و ساختار نواری برای الکترون‌های اسپین بالا و اسپین پایین متقارن

. این درحالیست که در اسپین پایین یک گاف غیر مستقیم وجود دارد و رفتار نیمه‌رسانایی مشاهده می‌شود. بنابراین ترکیب‌ها در کل دارای خاصیت نیمه فلزی هستند. از طرف

نیست که بیانگر مغناطیسی بودن این آلیاژهای هاسلر است. این ترکیب‌ها در سطح فرمی از قطبش اسپینی ۱۰۰٪ برخوردار هستند. در کنار نمودار ساختارهای نواری نمودار منحنی چگالی حالت‌های کل ترکیبات مدنظر برای مقایسه صریح بین نوارهای انرژی و مناطق ممنوعه رسم شده است. همان‌طور که می‌بینیم سازگاری بین آن‌ها کاملاً مشهود است. لازم به ذکر است که در بررسی خواص الکترونی نیمه‌فلزها، یکی از مهم‌ترین نکات پیدا کردن منشأ خاصیت نیمه‌فلزی است. با بررسی دقیق تر شکل ۴، سهم هر یک از عناصر در چگالی حالت‌های الکترونی کل، برای هر چهار آلیاژ مشخص می‌شود. تجزیه و تحلیل ویژگی‌های اوربیتال‌ها نشان می‌دهد که برای آلیاژهای هاسلر KYBX اوربیتال p اتم‌های B و X بیشترین سهم را در اطراف تراز فرمی چگالی حالت الکترونی کل دارد و منشأ خاصیت نیم‌فلزی این آلیاژها هستند. این الکترون‌ها بخش اصلی را در رسانش الکتریکی بر عهده دارند. این در حالیست که اتم Y در توزیع الکترونی در سطح فرمی سهم کوچکی دارد و اتم K، سهم چندانی در رسانندگی ندارند.

### خواص مغناطیسی

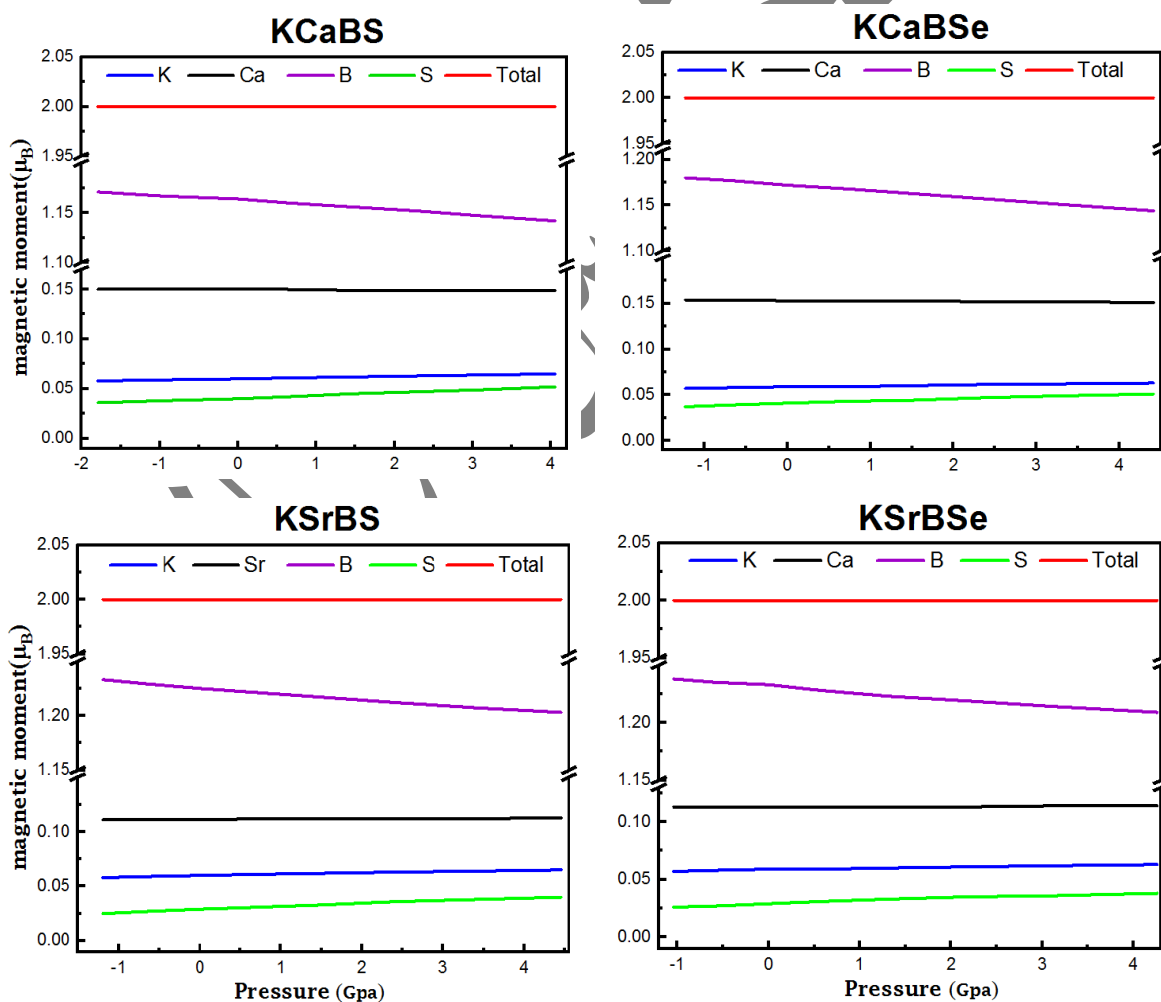
هنگامی که حالت فرومغناطیسی تایید شد، لازم است منشأ و همچنین سهم اتم‌ها در مغناطیس آلیاژهای مورد بررسی، تعیین شود. در حالت تعادل، گشتاور مغناطیسی کل هر چهار ترکیب ۲ مگنتون بوهر بدست آمده است. سهم اتم‌های تشکیل دهنده محاسبه شد و در جدول ۲ گزارش شده است. ذکر این نکته ضروری است که گشتاور مغناطیسی اتم Se یا S ناچیز است، این در حالی است که مغناطش بدست آمده عمدتاً توسط اتم‌های B و Ca (یا Sr) تولید می‌شود و گشتاورهای مغناطیسی مثبت آن‌ها نیز نظم فرومغناطیسی را در مواد موجود تأیید می‌کند. گشتاور مغناطیسی قابل توجه اتم B عمدتاً به دلیل عدم تقارن قوی

بین اسپین بالا و اسپین پایین اوربیتال‌های s و p آن ایجاد می‌شود. انرژی مغناطیسی (اختلاف انرژی فاز مغناطیسی و فاز غیر مغناطیسی) برای هر چهار ترکیب محاسبه شده است و در جدول ۲ گزارش شده است که منفی بودن آن نشان دهنده پایداری حالت مغناطیسی این مواد است. در ادامه محاسبات، اثر فشار بر روی گشتاور مغناطیسی کل و اتمی آلیاژهای KYBX را مورد بررسی قرار دادیم و در شکل ۵ مورد مقایسه قرار داده‌ایم. همان‌طور که در شکل ۵ مشخص شده است با توجه به پایداری نیمه فلزی، گشتاور مغناطیسی کل، در محدوده تغییرات فشار از ۱۰٪- تا ۴٪ حجم تعادلی، ثابت و برابر ۲ مگنتون بوهر است. درحالی که، تغییرات کوچک ثابت شبکه ممکن است منجر به تغییر گشتاورهای مغناطیسی اتمی شود. اتم B نقش تعیین‌کننده‌ای در مغناطش دارد و بعد آن اتم‌های کلسیم و استرانسیم قرار گرفته‌اند. گشتاورهای مغناطیسی اتم‌های B، Ca و Sr با افزایش فشار، یک روند کاهشی جزئی را نشان می‌دهند. مقادیر گشتاورهای مغناطیسی کل و اتمی در جدول ۲ آمده است. نتایج نشان می‌دهد که با اعمال فشار، رفتار نیمه فلزی این ترکیبات حفظ می‌شود و خواص مغناطیسی آنها به طور قابل توجهی تحت تأثیر فشار خارجی قرار نمی‌گیرد. در کل، به دلیل هم‌پوشانی اوربیتال‌های p اتم‌های B با Y می‌توان دریافت که آلیاژهای مورد بررسی نیمه فلزات فرومغناطیسی با گشتاور مغناطیسی عدد صحیح ۲ هستند، گشتاور مغناطیسی کل عمدتاً از اوربیتال‌های p اتم‌های B و Y می‌آید و اتم‌های K و X سهم بسیار کمی در گشتاور مغناطیسی کل دارند.



جدول ۲: گشتاور مغناطیسی کل، سهم جزئی اتم‌های تشکیل‌دهنده بر حسب  $\mu_B$  و انرژی مغناطیسی (ریدبرگ)

KYBX	$\mu_{tot}$	$\mu_K$	$\mu_Y$	$\mu_B$	$\mu_X$	$E_M$
KSrBS	۲,۰۰	۰,۰۶	۰,۱۱	۱,۲۲	۰,۰۳	-۰,۰۱۸
KSrBSe	۲,۰۰	۰,۰۵	۰,۱۱	۱,۲۲	۰,۰۳	-۰,۰۱۵
KCaBS	۲,۰۰	۰,۰۶	۰,۱۵	۱,۱۶	۰,۰۴	-۰,۰۱۴
KCaBSe	۲,۰۰	۰,۰۶	۰,۱۵	۱,۱۷	۰,۰۴	-۰,۰۱۰



شکل ۵: رفتار مغناطش کل و جزئی بر حسب فشار برای ترکیب‌های KYBX

#### ۴. نتیجه گیری کلی

با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن دریافتیم که پیکربندی نوع ۱ پایدارترین پیکربندی این ساختارها است. با بررسی خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی، ترکیبات به عنوان یک نیم فلز فرومغناطیس شناخته شدند. این ترکیبها در سطح فرمی از قطبش اسپینی ۱۰۰٪ برخوردار هستند. منشاء خاصیت نیم فلزی این آلیاژها

اوربیتال p اتم B و اوربیتال p اتم X است. در حالت تعادل، گشتاور مغناطیسی کل آنها ۲ مگنتون بوهر است و سهم عمده مغناطش توسط اتمهای Y و B تولید می شود. خواص مغناطیسی این آلیاژها، به طور قابل توجهی تحت تأثیر فشار خارجی قرار نمی گیرد. ویژگی نیم فلزی، خاصیت مغناطیسی، اثر حافظه شکلی، مغناطوگرمایی، مغناطو مقاومت بزرگ، پدیده های ترموالکتریک و غیره، پتانسیل کاربرد این آلیاژها را در صنعت بالا برده است.

#### ۵. منابع

1. K Seema and R Kuma, *J. Magn. Magn. Mater.* **377** (2015) 70-76.
2. V Alijani, et al., *Phys. Rev. B* **83** (2011) 184428
3. L Bainsla, and K G Suresh, *Appl. Phys. Rev.* **3** (2016).
4. N P Butch, et al., *J. Paglione Phys. Rev. B* **84** (2011) 220504.
5. O Heusler, *Ann. Phys.* **411** (1934) 15-201.
6. J Du, et al., *Superlattices Microstruct* **105** (2017) 39-47.
7. M Rostami, et al., *Mater Chem. Phys.* **248** (2020) 122923.
8. J Du, et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **428** (2017) 250-254.
9. D M Hoat, et al., *J. Mol. Graph. Model.* **100** (2020) 107642.
10. A Bouabça, et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **419** (2016) 210-217.
11. M Moradi, M Rostami, and M. Afshari, *Comput. Mater. Sci.* **69** (2013) 278-83.
12. N Karimian and F Ahmadian, *Solid State Comm.* **223** (2015) 60-66.
13. P Giannozzi, et al., *J. Phys. Condens. Matter.* **29** (2017) 465901.
14. P Giannozzi, et al., *J. Chem. Phys.* **152** (2020) 154105.
15. P Hohenberg, and W. Kohn, *J. Phys. Rev.* **136** (1964) 864.
16. W Kohn, and L Sham, *J. Phys. Rev.* **140** (1965) 1133.
17. B Walker and R Gebauer, *J. Chem. Phys.* **127** (2007) 164106.
18. J P Perdew K Burke, and M Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865-3868.
19. H J Monkhorst, and J D Pack, *Phys. Rev. B* **13** (1976) 5188.
20. F D Murnaghan, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **30** (1944) 244-247.
21. A Mokhtari, *J. Phys. Condens. Matter.* **20** (2008) 135224.