



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

مریم الیاسی\* و علی مختاری

دانشکده فیزیک، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

پست الکترونیکی: eliasimaryam@yahoo.com

mokhtari@sku.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۳/۰۲/۱۹ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۳/۰۳/۲۱)

### 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 کرده‌است. 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 چینش‌های مختلف اتم‌ها در این ترکیبات مشخص شد که چینش خاصی از اتم‌ها در ساختار (نوع ۱)، پایدارترین پیکربندی است. خواص الکترونی این آلیاژها نشان می‌دهد که گشتاور مغناطیسی  $2 \mu_B$  و نیمه‌فلزات مغناطیسی با قطبش اسپین  $100\%$  در سطح فرمی دارند. خاصیت نیمه‌فلزی 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

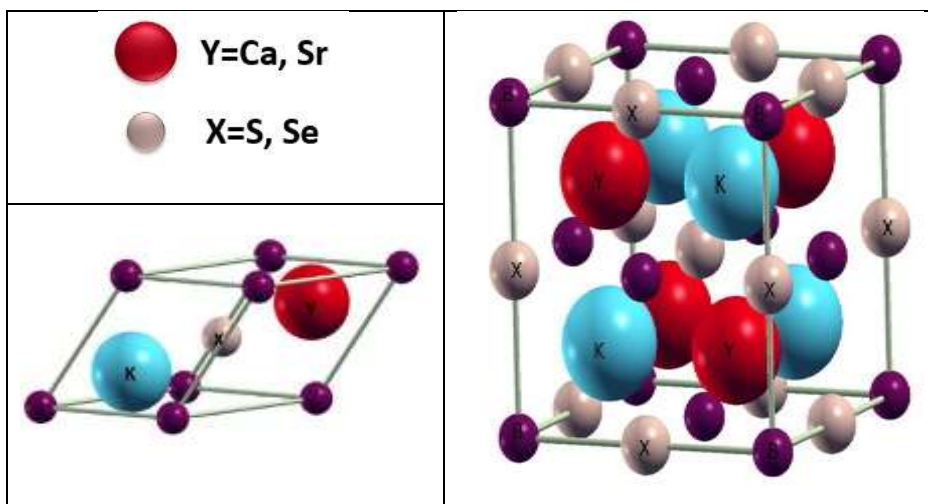
(اضافه کردن عناصر یا دگرگونی آنها) به طور قابل ملاحظه‌ای دگرگون کند [۲]. نکته قابل توجه در آلیاژهای هاسلر، این است که اگرچه عناصر تشکیل دهنده آنها ممکن است در دمای محیط مغناطیسی نباشند، ولی ترکیب آنها می‌تواند تبدیل به یک فرومغناطیس شود. ساختار الکترونی و خصوصیات فیزیکی آلیاژهای هاسلر به شدت به نظم ساختاری و توزیع اتم‌ها در شبکه وابسته است. این ترکیب‌ها بر اساس نوع ترکیب و تعداد عناصر موجود در ترکیب، در دو دسته 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

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]. تاریخچه آلیاژهای هاسلر و کشف اثر حافظه داری به سال ۱۹۰۳ میلادی برمی‌گردد که فردریش هاسلر آلمانی، برای نخستین بار با بررسی و مطالعه ترکیب  $Cu_2MnAl$  توانست خواص مغناطیسی این ترکیب را با تغییر دما و تغییر ترکیب

است. همچنین بوابکا و همکاران [۱۰] خاصیت نیمه‌فلزی را با اسپین بالای فلزی و اسپین پایین نیمه‌هادی در ترکیبات  $\text{CsSrCZ}$  ( $Z = \text{P, Sb, As}$ ) پیش‌بینی کرده‌اند و گشتاور مغناطیسی کل  $2\mu_B$  را به دست آورده‌اند. ساختارهای الکترونی و خواص مغناطیسی آلیاژهای هاسلر چهارتایی  $\text{KCaCF}$  و  $\text{KCaCCl}$  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  $\text{C-2p}$  سرچشمه می‌گیرد، به دست آورده‌اند [۸]. همچنین خواص فیزیکی دو ترکیب  $\text{KCaBS}$  و  $\text{KCaBSe}$  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  $\text{B-p}$  ایجاد می‌شود و گشتاور مغناطیسی کل، با تغییر کرنش از  $6\%$  تا  $6\%$  ثابت می‌ماند [۹]. در کار حاضر، با توجه به کاربردهای فراوان ترکیبات هاسلر، چهار آلیاژ هاسلر چهارتایی بدون فلزات واسطه  $\text{KYBX}$  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 نیمه‌فلزهایی با مغناطش کل ۲ مگنتون بوهر هستند. آنها ماهیت فلزی در کانال اسپین بالا دارند، در حالی که در کانال اسپین پایین مانند یک نیمه‌هادی رفتار می‌کنند. همچنین، نتایج ما دلیل خوبی است که نشان می‌دهد آلیاژهای  $\text{KYBX}$  می‌توانند انتخاب‌های خوبی برای کاربرد در دستگاه‌های اسپینترونیک و اپتوالکترونیک باشند. تا حد اطلاع ما، تاکنون هیچ کار نظری و تجربی روی هاسلر چهارتایی  $\text{KSrBS}$ ،  $\text{KSrBSe}$  انجام نشده است و اگرچه برخی از ویژگی‌های  $\text{KCaBS}$  و  $\text{KCaBSe}$  پیش‌بینی شده است، ما آنها را با بسته محاسباتی دیگر و شبه‌پتانسیل‌های متفاوت‌تری شبیه‌سازی کردیم و سپس نتایج خود را با کارهای قبلی مقایسه کردیم. نتایج ما، مطابقت خوبی با نتایج قبلی دارند که نشان می‌دهد رویکرد ما برای این نوع ترکیبات قابل اعتماد است [۹]. روند کار در ادامه به شرح زیر است: در بخش ۲ جزئیات

فرمول شیمیایی  $\text{XX'YZ}$  آلیاژهای جدیدی هستند که با جایگزینی یکی از اتم‌های  $X$  در آلیاژهای تمام هاسلر  $\text{X}_2\text{YZ}$  با اتمی مثل  $X'$  می‌توان ایجاد کرد و در واقع راهی برای بررسی طیف گسترده‌ای از مواد جدید را به وجود آورده است. ترکیب‌های چهارتایی به دلیل پتانسیل‌های فراوان و کاربردهای عملی به صورت گسترده در زمینه نظری و تجربی مورد بررسی قرار گرفته‌اند [۲-۵]. 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 نیمه‌فلزی جدید هم چون:

$[\text{V}] \text{CsXNO}$  ( $X = \text{Mg, Ca, Sr}$ ) [۶]  $\text{KCaNX}$  ( $X = \text{O, S, Se}$ ),  $\text{KCaCF}$  و  $\text{KCaCCl}$  [۸] ( $X = \text{S, Se}$ ) [۹],  $\text{CSrCZ}$  ( $Z = \text{P, As, Sb}$ ) [۱۰] پیشنهاد شده است. رفتار نیمه‌فلزی ویژگی مشترکی است که برای بسیاری از آنها گزارش شده است. این نیم‌فلزها که از اتم‌هایی غیر از اتم‌های واسطه تشکیل شده‌اند تحت شرایط خاص کاری، فشار، دما و ولتاژ بالا، خاصیت نیم‌فلزی و مغناطیسی خود را از دست نمی‌دهند زیرا گاف نیم‌فلزی 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 و ۱۳]. 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  $\text{KCaNX}$  ( $X = \text{O, Se, S}$ ) تحقیق کرده‌اند و نشان داده‌اند که این ترکیبات نیمه‌فلزات فرومغناطیسی با گشتاور مغناطیسی عدد صحیح هستند که ناشی از هم‌پوشانی اوربیتال‌های  $p$  اتم‌های  $X$  و  $N$



شکل ۱. طرحواره‌ای از یاخته قراردادی و بسط ترکیبات KYBX.

$B(0.5, 0.5, 0.5)$ ,  $X(0.75, 0.75, 0.75)$   
 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 پیکربندی‌های متفاوت بالا، بر حسب ثابت شبکه بررسی کردیم، معین شد که چینی نوع ۱ که معادل  $KYBX(Y=Ca \text{ or } Sr, X=S \text{ or } Se)$  پایدارترین پیکربندی را دارد.

### ۳. بحث و نتیجه‌گیری

#### ۳.۱. خواص ساختاری

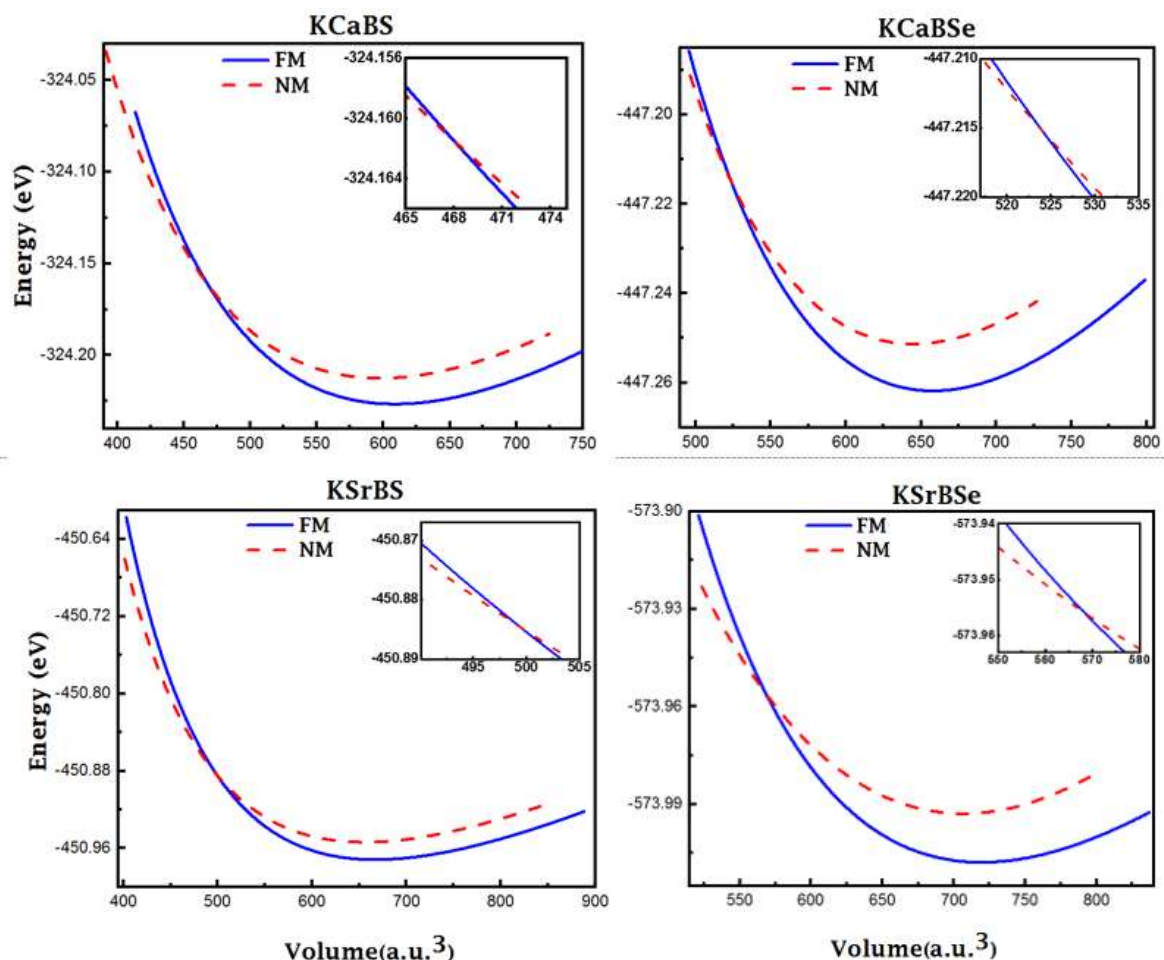
در کار حاضر، ابتدا با استفاده از محاسبات خودسازگار، ترکیب‌های هاسلر چهارتایی KYBX را در سه پیکربندی متفاوت از اتم‌ها، با گروه فضایی (F-43m) شبیه‌سازی کرده‌ایم. بعد از بهینه‌سازی پارامترهای داخلی از جمله انرژی قطع، بسط تابع موج و چگالی الکترونی، تعداد نقاط  $k$  و ثابت شبکه، یک ساختار پایدار برای هر کدام از این چینی‌ها به دست آمد. بررسی چینی‌های مختلف اتم‌ها 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 داده‌ایم. نمایی از یاخته قراردادی و بسط این ساختارها در حالت پایدار در شکل ۱، نمایش داده شده است.

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 نتیجه‌گیری است.

#### ۲. روش محاسباتی

ما از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو (QE) [۱۴ و ۱۵] مبتنی بر نظریه تابعی چگالی (DFT) استفاده کرده‌ایم [۱۶ و ۱۷]. در این روش معادلات تک‌ذره‌ای کوهن-شم با استفاده از روش شبه‌پتانسیل و بسط تابع موج الکترون‌های ظرفیت بر حسب امواج تخت حل می‌شود [۱۸]. برای برآورد محاسبات، پتانسیل تبادل همبستگی از تقریب شیب تعمیم یافته استفاده شده است [۱۹]. مش‌بندی نقاط  $k$ ، در منطقه اول بریلوئن  $12 \times 12 \times 12$  و با روش مونخورست-پک در نظر گرفته شده است [۲۰]. انرژی قطع بسط تابع موج بعد از بهینه شدن، ۶۵ ریذبرگ در نظر گرفته شد. موقعیت قرار گرفتن اتم‌ها 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:  $K(0.0, 0.0, 0.0)$ ,  $Y(0.25, 0.25, 0.25)$ ,



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

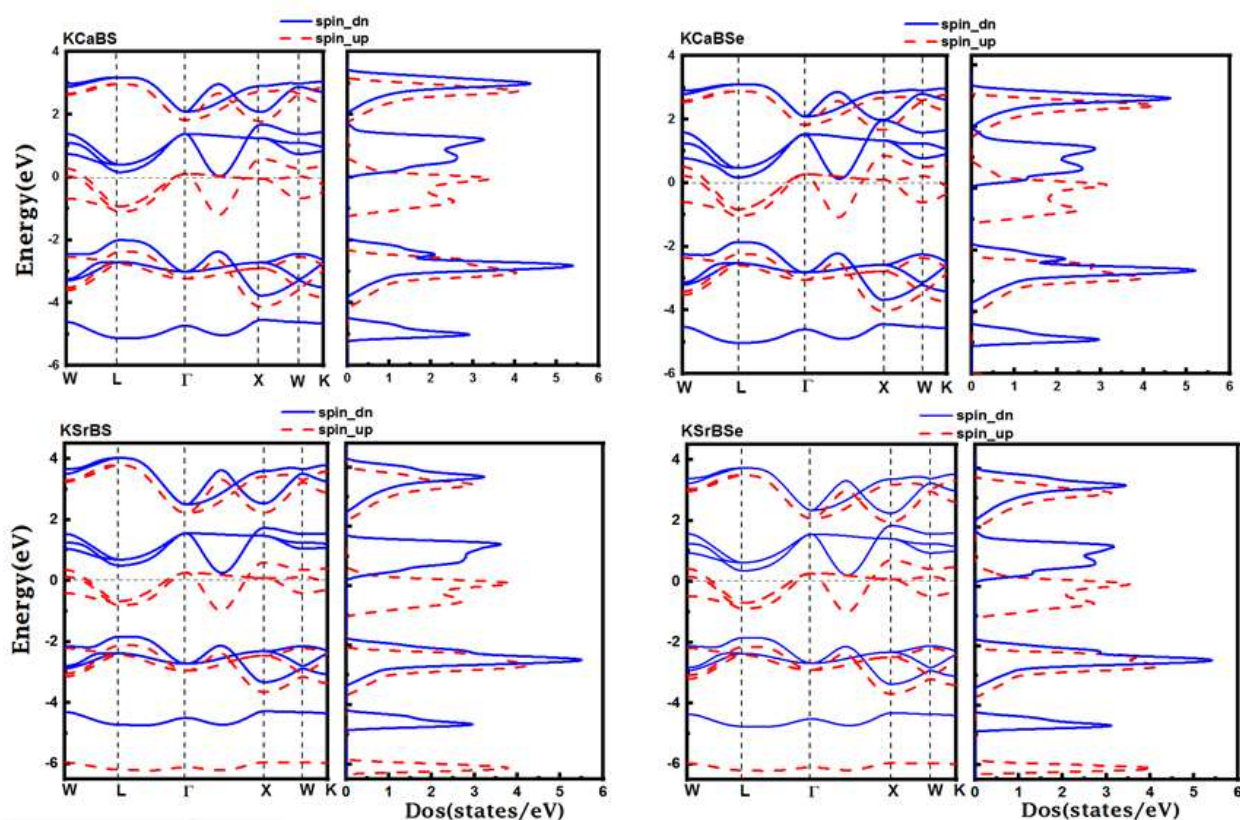
محاسبه کردیم که در آن این گذار رخ می‌دهد. در دمای صفر، فشار تنها به عنوان تابعی از یک حجم به صورت  $P(V) = \frac{dE(V)}{dV}$  به دست می‌آید [۲۱]. فشار گذار میانگین از فاز فرومغناطیسی به غیرمغناطیسی برای ترکیب‌های KCaBS، KCaBSe، KSrBS و KSrBSe را به ترتیب ۱۶/۴۱، ۱۱/۶۱، ۲۰/۳۹ و ۱۰/۸۱ گیگاپاسکال به دست آوردیم. در ادامه، برای شبیه‌سازی خواص ساختاری ترکیبات به ازای حالت پایدار فرومغناطیسی نوع ۱، انرژی کل هر کدام را در حجم‌های مختلف محاسبه کرده و ویژگی‌های ساختاری مانند، پارامتر تعادلی شبکه (a)، مدول حجمی ( $B_0$ ) و مشتق مدول حجمی نسبت به فشار ( $B_0'$ ) به دست آمده است که مقادیر آنها در جدول ۱ گزارش شده است. انرژی همدوسی به عنوان انرژی مورد نیاز برای

به منظور تأیید حالت پایه مغناطیسی پیکربندی نوع ۱، انرژی حالت‌های کل غیر مغناطیسی (NM)، فرومغناطیسی (FM) به عنوان تابعی از حجم برای این آلیاژها را بررسی کرده‌ایم که در شکل ۲ نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، می‌توان 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 را بررسی و

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 (a.u.)
۳۸٫۸، ۴۱٫۳ <sup>a</sup>	۳۳٫۴، ۳۷٫۵ <sup>a</sup>	۳۳٫۵	۳۰٫۴	مدول حجمی B <sub>0</sub> (GPa)
۳٫۱۱	۴٫۱۸	۴٫۷۸	۴٫۲۰	مشق مدول حجمی B' <sub>0</sub>
-۰٫۲۱۱، -۰٫۲۲۶ <sup>a</sup>	-۰٫۲۰۲، -۰٫۲۱۹ <sup>a</sup>	-۰٫۲۰۸	-۰٫۱۹۹	انرژی هم‌دوسی بر واحد اتم E <sub>coh</sub> (Ry/atom)



شکل ۳. نمودار ساختار نواری و چگالی حالت کل برای آلیاژهای KYBX.

اتم‌های تشکیل دهنده آن نسبت به دیگر ساختارهای مورد بررسی شعاع اتمی بزرگ‌تری دارد، بزرگ‌ترین مقدار را، و مدول حجمی آن کمترین مقدار را دارد.

### ۲.۳. 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 برحسب انرژی (PDOS) را محاسبه کردیم.

جداسازی ترکیب مورد نظر به اتم‌های تشکیل دهنده سامانه تعریف می‌شود [۲۲]. انرژی هم‌دوسی بر واحد اتم (E<sub>coh</sub>) برحسب ریدبرگ بر اتم برای ترکیبات مد نظر ما نیز در جدول ۱ آمده است. از مقایسه مقادیر انرژی هم‌دوسی 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

الکترونی از حل معادلات کوهن-شم و محاسبه ویژه مقادیر انرژی در نقاط منطقه اول بریلون به دست 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.

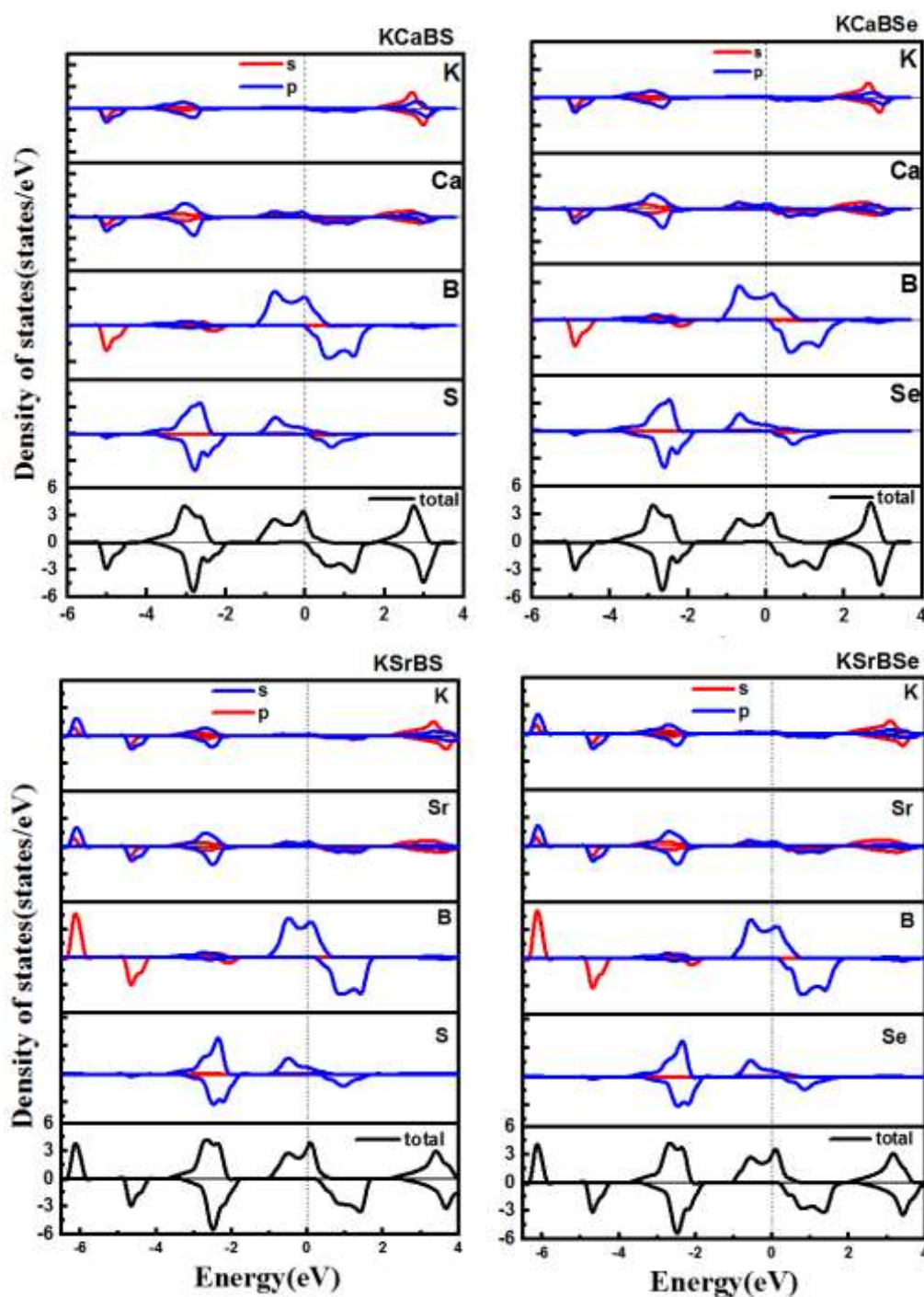
این درحالی است که در اسپین پایین، یک گاف غیر مستقیم وجود دارد و رفتار نیمه‌رسانایی مشاهده می‌شود. بنابراین ترکیب‌ها در کل خاصیت نیمه‌فلزی دارند. از طرف دیگر، در انرژی‌های گوناگون، به‌ویژه در نزدیکی تراز فرمی، رفتار نمودار چگالی حالت‌های الکترونی و ساختار نواری برای الکترون‌های اسپین بالا و اسپین پایین متقارن 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، 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 دقیق‌تر 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 نیمه‌فلزی این آلیاژها هستند. این الکترون‌ها بخش اصلی را در رسانش الکتریکی بر عهده دارند. این در حالی است که اتم Y در توزیع الکترونی در سطح فرمی سهم کوچکی دارد و اتم‌های K، سهم چندانی در رسانندگی ندارند.

### ۳.۳. خواص مغناطیسی

هنگامی که حالت فرومغناطیسی تأیید 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 به دست آمده است. سهم اتم‌های تشکیل دهنده

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 بریلون 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 نیمه‌فلز هستند. در همه آنها، هم‌پوشانی بین نوارهای انرژی در نزدیک سطح فرمی برای اسپین بالا وجود دارد و گاف نواری مشاهده نمی‌شود؛ درحالی‌که 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 نیمه‌فلزی این ترکیبات است. مقادیر گاف نواری غیرمستقیم کانال اسپین پایین برای KCaBX به ترتیب ۲/۰۵۹، ۲/۰۳، الکترون ولت و برای KSrBX به ترتیب ۳/۸۶، ۴/۳۳ الکترون ولت به دست آمده است.

هم‌پوشانی بین نوارهای انرژی در نزدیک سطح فرمی برای اسپین بالا وجود دارد و گاف نواری مشاهده نمی‌شود؛ درحالی‌که برای اسپین پایین، حداکثر مقدارگاف نواری محاسبه شده برای KCaBX توافق خوبی با نتایج موجود از کارهای دیگران دارد و نشان می‌دهد رفتار نیمه‌فلزی آنها پایدار است و نمی‌توان با فشار جزئی روی شبکه به راحتی این خصالت را از بین برد. همچنین توافق خوبی در رفتارهای ساختارهای نواری محاسبه شده ما برای ترکیبات KCaBSe و KCaBS 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 (PDOS) را برای کانال‌های اسپین بالا و پایین برای تمام ترکیبات مورد بررسی در حالت فرومغناطیس نشان می‌دهد. در واقع چگالی حالت‌های



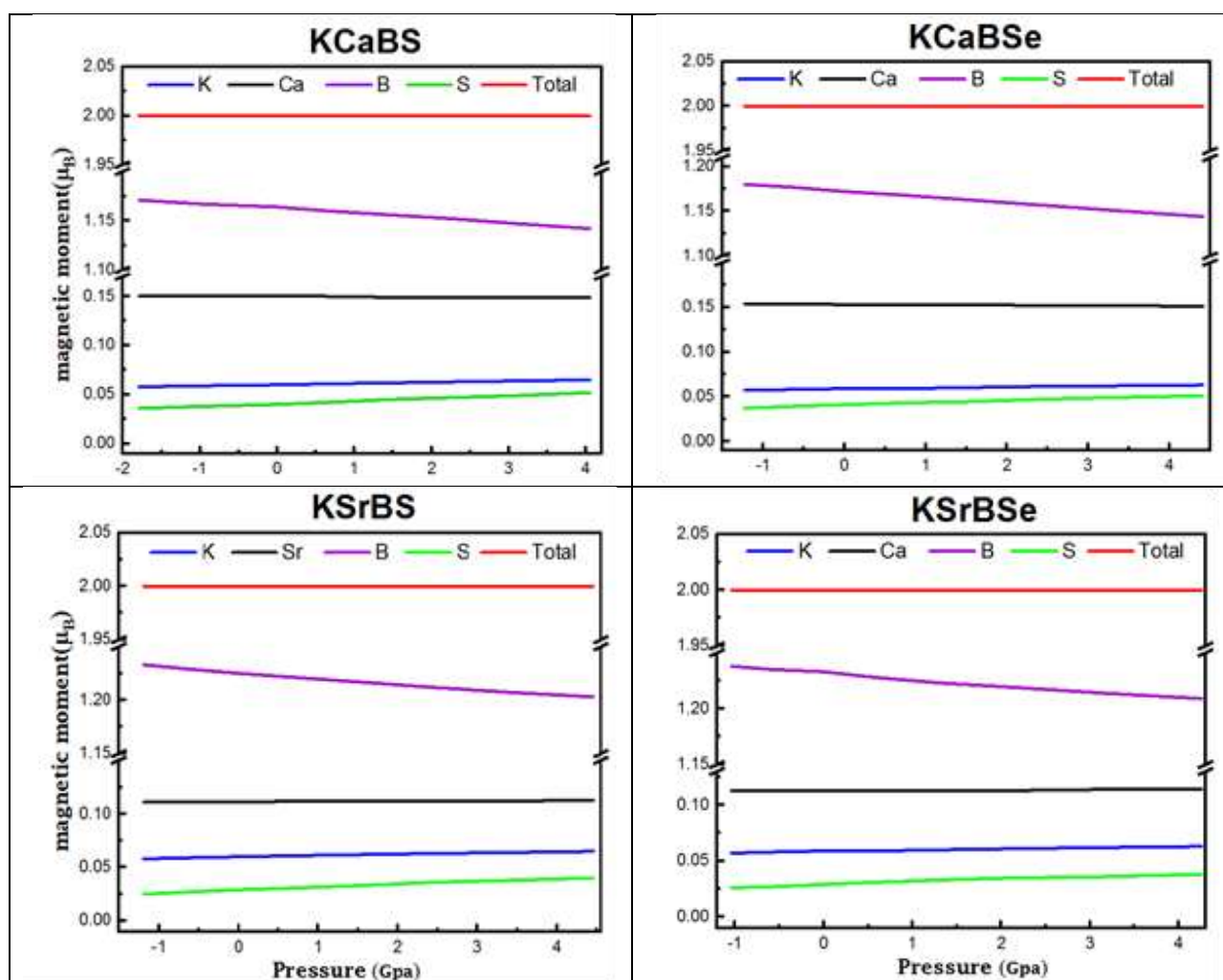
شکل ۴. نمودار چگالی حالت‌های کل و جزئی محاسبه شده برای آلیاژهای KYBX.

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

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 به دست آمده عمدتاً توسط اتم‌های B و Ca (یا Sr) تولید می‌شود و گشتاورهای مغناطیسی

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.

داده‌ایم. همان‌طور که در شکل ۵ مشخص شده است با توجه به پایداری نیمه‌فلزی، گشتاور مغناطیسی کل، در محدوده تغییرات فشار از ۱۰٪- تا ۴٪ حجم تعادلی، ثابت و برابر ۲ مگنتون بوهراست. این درحالی است که، تغییرات کوچک ثابت شبکه ممکن است منجر به تغییر گشتاورهای مغناطیسی اتمی

غیرمغناطیسی) 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 بررسی کردیم و در شکل ۵ مورد مقایسه قرار



#### ۴. نتیجه گیری کلی

با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن دریافتیم که پیکربندی نوع 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. منشأ 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.

شود. اتم B نقش تعیین کننده ای در مغناطش دارد و بعد آن اتمهای کلسیم و استرانسیم قرار گرفته اند. گشتاورهای مغناطیسی اتمهای B، Ca و Sr با افزایش فشار، یک روند کاهشی جزئی را نشان می دهند. مقادیر گشتاورهای مغناطیسی کل و اتمی در جدول ۲ آمده است. نتایج نشان می دهد که با اعمال فشار، رفتار نیمه فلزی این ترکیبات حفظ می شود و خواص مغناطیسی آنها به طور قابل توجهی تحت تأثیر فشار خارجی قرار نمی گیرد. در کل، به دلیل هم پوشانی اوربیتالهای p اتمهای B با Y می توان 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 می آید و اتمهای K و X سهم بسیار کمی در گشتاور مغناطیسی کل دارند.

#### مراجع

1. K Seema and R Kuma, *J. Magn. Magn. Mater.* **377** (2015) 70.
2. V Alijani, et al., *Phys. Rev. B* **83** (2011) 184428.
3. L Bainsla, and K G Suresh, *Appl. Phys. Rev.* **3** (2016) 031101.
4. N P Butch, et al., *J. Paglione Phys. Rev. B* **84** (2011) 220504.
5. O Heusler, *Ann. Phys.* **411** (1934) 15.
6. J Du, et al., *Superlattices Microstruct* **105** (2017) 39.
7. M Rostami, et al., *Mater Chem. Phys.* **248** (2020) 122923.
8. J Du, et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **428** (2017) 250.
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.
11. M Moradi, M Rostami, and M. Afshari, *Comput. Mater. Sci.* **69** (2013) 278.
12. N Karimian and F Ahmadian, *Solid State Comm.* **223** (2015) 60.
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.
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.
21. A Mokhtari, *J. Phys. Condens. Matter.* **20** (2008) 135224.