

محاسبه میدان مغناطیسی فوق ریز در مکان هسته‌های Fe, Rh, Cd, Sn در بلور کروم

صدیقه سیروسی، ناهید قادری، سیدجواد هاشمی‌فر و هادی اکبرزاده

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان - اصفهان ۸۳۱۱-۸۴۱۵۶

(دریافت مقاله: ۸۳/۸/۵ ؛ پذیرش: ۸۳/۱۱/۱۲)

چکیده

میدان مغناطیسی فوق ریز در مکان ناخالصیهای آهن، رودیوم، کادمیوم و قلع در بلور زمینه کروم با روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل که بر پایه نظریه تابعی چگالی استوار است محاسبه شد. نتایج حاصل از به کارگیری دو ابرسلول با ابعاد مختلف نشان داد که برای محاسبه خواص موضعی نظیر میدان مغناطیسی فوق ریز می‌توان با دقت قابل قبولی از ابرسلولهای کوچک بهره گرفت. در ادامه ایده پیشنهادی کانتیر و دیگران مبنی بر نقش کلیدی دامنه موج چگالی اسپینی کروم در تنظیم رفتار آن در آلیاژهای مذکور مورد نقد و بررسی قرار گرفت و نشان داده شد این رهیافت معیاری وابسته به ناخالصی محسوب می‌شود و لذا چندان کارایی ندارد. ضمناً با مطالعه خواص ساختاری و مغناطیسی آلیاژهای مختلف نشان دادیم که در مورد آلیاژ آهن، دوفاز مختلف با خاصیت مغناطیسی ضعیف و قوی وجود دارد که حالت پایه، حالت با خاصیت مغناطیسی ضعیف است. در نهایت اثر فشار بر میدان مغناطیسی فوق ریز در مکان هسته ناخالصیها و همچنین تاثیر آن بر گشتاور مغناطیسی اتمهای کروم مورد بررسی قرار گرفتند.

واژه‌های کلیدی: آلیاژ کروم، میدان مغناطیسی فوق ریز، خواص مغناطیسی، محاسبات نظریه تابعی چگالی

۱. مقدمه

کارهای محاسباتی مؤید داده‌های تجربی است [۹ و ۱۰]؛ تاکنون هیچ کار محاسباتی در زمینه بررسی میدان مغناطیسی فوق ریز در بلور کروم صورت نگرفته است. ضمناً مطالعات نظری نظم خاصی را برای میدان فوق ریز ناخالصیها در بلورهای زمینه فرومغناطیس پیشگویی می‌کنند که با نتایج تجربی نیز سازگار است، حال آنکه امکان وجود چنین نظمی در بلورهای زمینه پادفرومغناطیس نظیر کروم هنوز بررسی نشده است. لذا با هدف شناخت عمیقتر رفتار کروم، میدان مغناطیسی فوق ریز را در حوالی هسته ناخالصیهای آهن، رودیوم، کادمیوم و قلع در این بلور با روشهای محاسباتی مبتنی بر اصول اولیه کوانتومی تعیین و تحلیل کردیم.

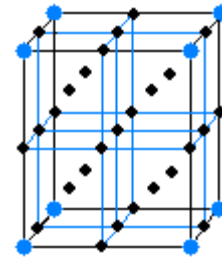
بلور کروم گرچه دارای ساختار کریستالی ساده مرکز حجمی است اما ساختار مغناطیسی آن در حالت پایه شامل یک موج چگالی اسپینی تقریباً سینوسی با دامنه $0.62 \mu_B$ و طول موج حدود ۲۱ برابر پارامتر شبکه است که از خاصیت لانه گزینی ناقص در سطح فرمی آن ناشی می‌شود [۱-۴]. وجود موج چگالی اسپینی در حالت پایه کروم گرچه با روشهای تجربی تأیید شده است لیکن تاکنون روشهای محاسباتی قادر به پیش بینی آن نشده‌اند [۵-۷]. در زمینه تعیین میدان مغناطیسی فوق ریز نیز تاکنون تنها مقادیر میدان در مکان تعداد محدودی از ناخالصیها به صورت تجربی گزارش شده است [۸] و در مقایسه با بلورهای فرومغناطیس نظیر آهن، کبالت و نیکل که برای گستره وسیعی از عناصر جدول تناوبی به عنوان ناخالصی،

ناخالصی به ترتیب ۲/۱ و ۲/۳۵ واحد اتمی انتخاب شد. انرژی قطع بسط امواج تخت برای پتانسیل و تابع موج در منطقه بین جایگاهی به ترتیب ۲۵۶/۰ و ۱۱/۱ ریدبرگ در نظر گرفته شد و انتگرال گیری فضای فاز با استفاده از ۱۰۰۰ نقطه k در لبه کاهش ناپذیر منطقه اول بریلونن، انجام شد. انرژی تبدلی - همبستگی با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA۹۶) محاسبه شد [۱۴]. در ضمن محاسبات برای الکترونهای والانس و مغزه به ترتیب نیمه نسبیتی و نسبیتی کامل انجام شده است و همچنین به علت مکعبی بودن ساختار شبکه، تنها سهم تماس فرمی در میدان مغناطیسی فوق ریز آن هم درون کره تامسون در نظر گرفته شد [۹].

۳. نتایج

۱.۳. یافتن معیار تنظیم مناسب

مطالعه کارهای محاسباتی میدان مغناطیسی فوق ریز در مکان ناخالصیهای $4d$ و $5sp$ در بلور زمینه فرومغناطیس آهن نشان می‌دهد که مقادیر محاسباتی میدان به ازای پارامتر تعادلی شبکه که از روی کمینه منحنی انرژی یاخته برحسب حجم به دست می‌آید، توافق خوبی با مقادیر تجربی دارند [۱۰]. لذا ما نیز در این مرحله به طور مشابه پارامتر شبکه تعادلی کروم را به کار گرفتیم. مقایسه نتایج به دست آمده با مقادیر تجربی در جدول (۱)، گواه آن است که این گزینش چندان مناسب نمی‌باشد. حال به منظور یافتن معیاری مناسب به یک مرحله قبل از تزریق ناخالصی به بلور کروم بر می‌گردیم. در سال ۲۰۰۲ کاتنیر و همکارانش در محاسباتی که با روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل و بر پایه نظریه تابعی چگالی انجام شد گرچه حالت پایه کروم خالص را یک پادفرومغناطیس عادی پیش بینی کردند لیکن نشان دادند که اکثر خواص مغناطیسی حالت پایه این بلور را می‌توان با تنظیم گشتاور مغناطیسی اتم کروم بر روی مقدار تجربی آن یعنی $0.62 \mu_B$ با دقت خوبی به دست آورد [۵]. پارامتر شبکه چنین سیستمی نه با تجربه سازگار است و نه با مقادیر حاصل از کمینه منحنی انرژی - حجم و به همین علت آن را کروم آزمایشی نام نهادند. ما نیز با



شکل ۱. ابرسلول ۱۶ اتمی که از کنار هم قرار دادن ۸ سلول مرکز حجمی ساخته شد. اتمهای گوشه $(0,0,0)$ با ناخالصی جایگزین شده‌اند.

۲. روش محاسبات

برای شبیه سازی اثر ناخالصی در بلور بایستی از رهیافت ابرسلول بهره گرفت. لذا یک ابرسلول ۱۶ اتمی انتخاب و یک اتم کروم آن با ناخالصی جایگزین شد (شکل ۱). شواهد تجربی نشان می‌دهد که تشکیل موج چگالی اسپینی غیرمتعارف به وجود ناخالصی حساس است و پاره‌ای شواهد مبین آن است که حضور ناخالصی باعث ناپدید شدن موج چگالی اسپینی و گذار سیستم به پادفرومغناطیس عادی می‌شود [۱۱]. بر این اساس و نیز به دلیل محدودیتهای محاسباتی حالت پایه را یک پادفرومغناطیس عادی در نظر گرفتیم.

از آنجا که غلظت ناخالصیها در نتایج تجربی موجود در مقالات بسیار کم در نظر گرفته شده است و برای دسترسی به چنین درصد پایینی از ناخالصی بایستی ابعاد ابرسلول بسیار بزرگ انتخاب شوند که آن نیز حجم محاسباتی بسیاری را می‌طلبد، لذا به منظور تعیین اثر غلظت ناخالصی بر خواص مغناطیسی بلور، محاسبات را برای ابرسلول ۵۴ اتمی، البته به ازای یک پارامتر شبکه، نیز تکرار کردیم.

محاسبات با برنامه Wien2k [۱۲] و بر پایه نظریه تابعی چگالی و روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل انجام شد [۱۳]. در این روش با انتخاب کره‌های فرضی (کره موافین - تین) در اطراف هسته‌ها فضا به دو ناحیه تقسیم می‌شود. درون کره‌ها جوابهای شعاعی معادله شرودینگر و در فواصل بین آنها (نواحی بین جایگاهی) امواج تخت به عنوان توابع پایه انتخاب می‌شوند. شعاع کره موافین تین برای کروم

جدول ۱. میدان فوق ریز محاسبه شده به ازای پارامتر شبکه تعادلی و مقایسه با نتایج تجربی.

ناخالصی	پارامتر شبکه تعادلی محاسباتی $a (\text{Å})$	میدان فوق ریز مغناطیسی محاسباتی HFF (KG)	میدان فوق ریز مغناطیسی تجربی HFF (KOe)
آهن	۲/۸۶۰	۱۸/۳	۳۶
رودیوم	۲/۸۸۷	۸۸/۷	۶۵
کادمیوم	۲/۹۲۴	۱۶۱/۲	۶۰/۳
قلع	۲/۹۲۰	۲۶۹/۴	۹۳

جدول ۲. میدان فوق ریز محاسبه شده در پارامتر شبکه‌ای که گشتاور مغناطیسی دورترین کروم را نزدیک به مقدار تجربی می‌دهد.

ناخالصی	$a (\text{Å})$	گشتاور مغناطیسی دورترین کروم (μ_B)	میدان فوق ریز مغناطیسی محاسباتی HFF (KG)	میدان فوق ریز مغناطیسی تجربی HFF (KOe)
رودیوم	۲/۸۴۰	۰/۶۲۰	۷۶/۱	۶۵
کادمیوم	۲/۸۵۵	۰/۶۱۸	۱۰۹/۸	۶۰/۳
قلع	۲/۸۶۰	۰/۶۲۳	۲۰۵/۰	۹۳

که گشتاور مغناطیسی اتمهای کروم در هیچ یک از دو ابرسلول یکسان نمی‌باشند و به فاصله اتمها از ناخالصی بستگی دارد. این غیریکسانی در ابرسلول کوچکتر، چشمگیرتر است و کوچک بودن ابعاد ابرسلول باعث می‌شود که گشتاور مغناطیسی دورترین اتم کروم از ناخالصی به دلیل تأثیر پذیری از ناخالصیهای ابرسلولهای مجاور بیشتر تغییر کند. با افزایش ابعاد ابرسلول این تأثیر پذیری کمتر شده و لذا گشتاور مغناطیسی کروم به مقدار متناظرش در بلور خالص نزدیکتر می‌شود و متقابلاً از آنجایی که گشتاور مغناطیسی نزدیکترین اتم کروم به ناخالصی در هر دو ابرسلول فقط تحت تأثیر یک اتم ناخالصی قرار گرفته است لذا انتظار داریم مقدار آن در هر دو یاخته یکسان باشد که چنین نیز هست. بنابراین از این شکل می‌توان نتیجه گرفت که برخلاف تصور اولیه، گشتاور مغناطیسی نزدیکترین اتم کروم کمتر به ابعاد ابرسلول وابسته است و لذا معیار تنظیم مناسبتری برای استخراج خواص مغناطیسی بلور می‌باشد.

۱.۱.۳. اثر ابعاد ابرسلول بر میدان مغناطیسی فوق ریز

میدان مغناطیسی فوق ریز برای ابرسلول ۵۴ اتمی در مکان ناخالصی کادمیوم ۱۱۶ کیلوگوس به دست آمد که در مقایسه با مقدار ۱۰۹/۸ کیلوگوس حاصل از ابرسلول ۱۶ اتمی تغییر قابل

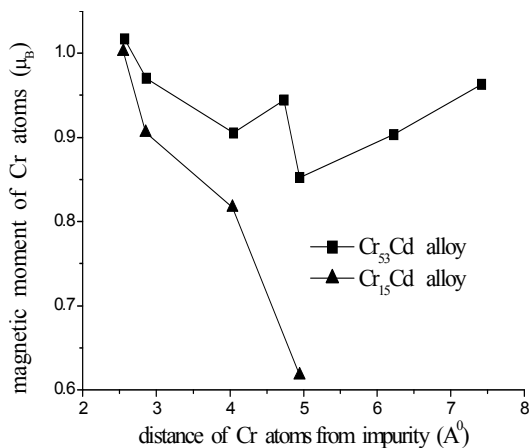
بهره‌گیری از این ایده و با این ذهنیت که دورترین کروم از ناخالصی، محیطی شبیه‌تر به کروم خالص را تجربه می‌کند و لذا مقدار گشتاور مغناطیسی آن باید نسبت به بقیه کرومها به $۰/۶۲ \mu_B$ (مقدار تجربی گشتاور مغناطیسی کروم خالص) نزدیکتر باشد، میدان مغناطیسی فوق ریز را به ازای پارامتر شبکه‌ای که گشتاور مغناطیسی دورترین کروم را $۰/۶۲ \mu_B$ بدهد محاسبه کردیم. نتایج محاسبات حاصل از سه آلیاژ $Cr_{15}Rh$ و $Cr_{15}Cd$ و $Cr_{15}Sn$ را در جدول ۲ آورده‌ایم. همان گونه که دیده می‌شود، برخلاف انتظار اولیه، مقادیر به دست آمده برای میدان فوق ریز گرچه نسبت به نتایج محاسباتی مندرج در جدول ۱ به نتایج تجربی نزدیکترند لیکن هنوز هم عدم همخوانی چشمگیر است. بنابراین تنظیم محاسبات روی گشتاور مغناطیسی دورترین کروم لااقل برای ابرسلول ۱۶ اتمی مناسب نمی‌باشد. حال با توجه به این احتمال که ممکن است نارسایی موجود ناشی از ابعاد ابرسلول باشد محاسبات را برای ابرسلول بزرگتر حاوی ۵۴ اتم، البته تنها برای ناخالصی کادمیوم و به ازای پارامتر شبکه ۲/۸۵۵ آنگستروم که گشتاور مغناطیسی دورترین کروم برای آن در ابرسلول ۱۶ اتمی، $۰/۶۲ \mu_B$ به دست آمده، تکرار کردیم. نتایج محاسبات دو ابرسلول در شکل ۲ با یکدیگر مقایسه شده‌اند. مشاهده می‌شود

جدول ۳. مقادیر میدان فوق ریز محاسباتی به ازای پارامتر شبکه‌ای که گشتاور مغناطیسی نزدیکترین کروم را نزدیک به مقدار تجربی می‌دهد.

میدان فوق ریز مغناطیسی تجربی (KG)	میدان فوق ریز مغناطیسی محاسباتی (KG)	a (Å)	ناخالصی
۳۶	۵۸/۱	۲/۸۲۴	آهن
۶۵	۵۶/۸	۲/۸۰۴	رودیوم
۶۰/۳	۸۰/۶	۲/۷۹۸	کادمیم
۹۳	۱۴۷/۳	۲/۸۲۷	قلع

جدول ۴. گشتاور مغناطیسی نزدیکترین کروم به ازای پارامتر شبکه‌ای که میدان مغناطیسی فوق ریز در مکان ناخالصی را نزدیک به مقدار تجربی می‌دهد.

میدان فوق ریز مغناطیسی تجربی (KG)	میدان مغناطیسی فوق ریز محاسباتی (KG)	گشتاور مغناطیسی نزدیکترین کروم (μ_B)	a (Å)	ناخالصی
۳۶	۳۸/۱	۰/۳۰	۲/۷۷	آهن
۶۵	۶۵/۱	۰/۶۹	۲/۸۱۵	رودیوم
۶۰/۳	۶۱/۲	۰/۴۶	۲/۷۹۴	کادمیم
۹۳	۸۹/۸	۰/۴۵	۲/۸۲۳	قلع



شکل ۲. نمودار تغییرات گشتاور مغناطیسی اتمهای کروم برحسب فاصله از ناخالصی در دو ابرسلول ۱۶ و ۵۴ اتمی حاوی ناخالصی کادمیم و به ازای پارامتر شبکه ۲/۸۵۵ آنگستروم.

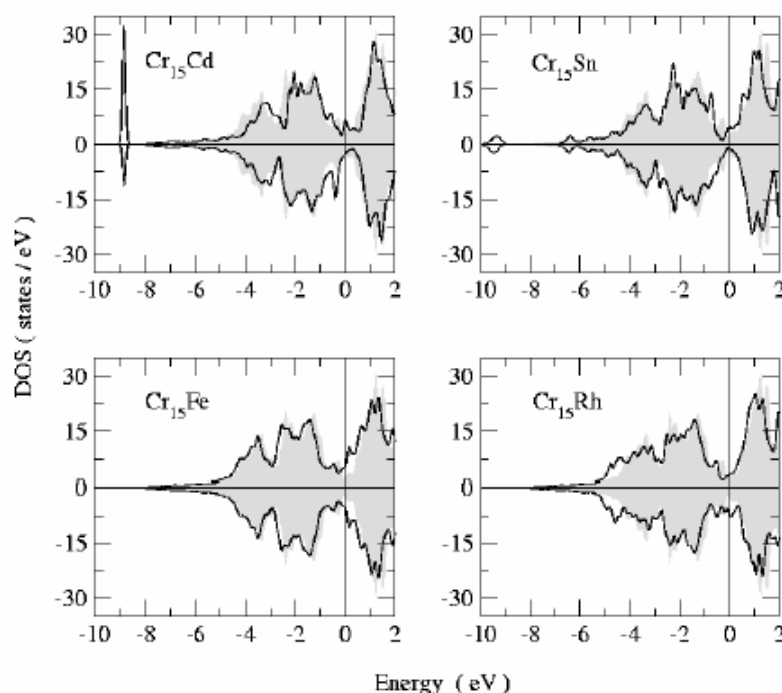
نزدیک به مقادیر تجربی است. حال برای اینکه این معیار مورد ارزیابی دقیقتر قرار گیرد گشتاور مغناطیسی نزدیکترین کروم را به ازای مقادیری از پارامتر شبکه که میدان فوق ریز حاصل از آن به مقادیر تجربی نزدیک است، را محاسبه و در جدول ۴ قرار دادیم. به وضوح مشاهده می‌شود که این گشتاور مغناطیسی نیز به ازای ناخالصیهای مختلف تک مقدار نیست، در ناخالصی رودیوم این گشتاور مغناطیسی به $0/62 \mu_B$ نزدیکتر است حال

توجهی نیست. از این رو به نظر می‌رسد میدان مغناطیسی فوق ریز در مکان هسته ناخالصی برخلاف گشتاور مغناطیسی اتمهای کروم چندان تحت تأثیر ابعاد ابرسلول قرار نمی‌گیرد. محاسبات مشابهی که اخیراً در زمینه فرومغناطیس آهن انجام شده است نیز نشان می‌دهد که برای محاسبه خواص موضعی نظیر میدان مغناطیسی فوق ریز نیاز به ابرسلول بزرگتر ضروری به نظر نمی‌رسد [۱۰]. لذا اگر معیار مناسبی که سازگار با خواص موضعی نظیر میدان فوق ریز در بلور زمینه کروم باشد، شناسایی و به کار گرفته شود، در آن صورت نتایج ابرسلول ۱۶ اتمی نیز قابل مقایسه با مقادیر اندازه گیری شده در ناخالصیهای رقیقتر تجربی خواهند بود.

از آنچه تا کنون گفته شد به نظر می‌رسد که رفتار میدان مغناطیسی فوق ریز با گشتاور مغناطیسی نزدیکترین کروم همخوانی بیشتری داشته باشد. بنابراین در این مرحله پارامتر شبکه را مقادیری انتخاب کردیم که گشتاور مغناطیسی نزدیکترین کروم در حوالی $0/62 \mu_B$ باشد. نتایج این محاسبات در جدول ۳ آورده شده است. مقایسه نتایج دو جدول ۲ و ۳ گواه آن است که تنظیم بر روی گشتاور مغناطیسی نزدیکترین کروم معیار مناسبتری در استخراج میدان مغناطیسی فوق ریز

جدول ۵. خواص ساختاری آلیاژهای $Cr_{15}X$ ($X=Fe, Rh, Cd, Sn$). برای مقایسه صحیح‌تر خواص ساختاری کروم خالص، در ابرسلول مشابه آلیاژهای محاسبه شده است.

شعاع کوالانس	مدول حجمی (Gpa)	طول پیوند (\AA)	پارامتر داخلی	پارامتر تعادلی (\AA)
۱/۱۸	۱۸۹	۲/۴۷۹۴	۰/۲۵۰۰	۲/۸۶۳
۱/۱۶	۱۹۴	۲/۴۸۲۵	۰/۲۵۰۴	۲/۸۶۲
۱/۲۵	۱۸۶	۲/۵۴۳۳	۰/۲۵۴۱	۲/۸۸۷
۱/۴۱	۱۴۰	۲/۶۱۶۳	۰/۲۵۸۳	۲/۹۲۴
۱/۴۰	۱۶۸	۲/۶۱۴۳	۰/۲۵۸۵	۲/۹۲۰



شکل ۳. منحنی چگالی حالت کل آلیاژهای $Cr_{15}X$ ($X = Fe, Rh, Cd, Sn$) که با چگالی حالت کروم خالص (زمینه تیره) مقایسه شده‌اند.

کروم روی مقدار $0.62 \mu_B$ ، تفاوت میدان مغناطیسی فوق ریز محاسبه شده با مقادیر تجربی چندان چشمگیر نباشد. در ادامه به محاسبه خواص ساختاری و مغناطیسی آلیاژهای فوق می‌پردازیم. ابتدا خواص ساختاری و سپس خواص مغناطیسی توضیح داده می‌شوند.

۲.۳. خواص ساختاری

محاسبات نشان می‌دهد که جایگزین کردن ناخالصی در ابرسلول موجب ایجاد تنش در سیستم می‌شود، لذا برخی از اتمها در مکان کمینه پتانسیل خود قرار نگرفته و به آنها نیرو

آن که در ناخالصی آهن بیشترین فاصله را از مقدار تجربی دارد. بنابراین علیرغم رفتار نسبتاً مشابه گشتاور مغناطیسی نزدیکترین کروم به ناخالصی با میدان مغناطیسی فوق ریز (جدول ۳) به دلیل آنکه مقدار این گشتاور در آلیاژهای مختلف یکسان نیست، نمی‌توان آن را به عنوان معیار دقیقی برای محاسبه میدان مغناطیسی فوق ریز در مکان ناخالصیهایی که مقادیر تجربی شان در دسترس نیست، به کار برد. چرا که تنظیم مناسب زمانی حاصل می‌شود که تمام ناخالصیها تأثیر یکسانی بر مقدار گشتاور مغناطیسی نزدیکترین کروم داشته باشند. با این وجود می‌توان امیدوار بود که با تنظیم گشتاور مغناطیسی نزدیکترین

کادمیوم نرمترین آلیاژ در بین آلیاژهای بررسی شده است. مقدار تغییر طول نزدیکترین پیوند در اثر تزریق ناخالصی می‌تواند تخمینی از تأثیر ناخالصی بر رفتار الکترونی بلور زمینه نیز باشد. برای ارزیابی این موضوع منحنی چگالی حالت آلیاژها به ازای پارامتر شبکه تعادلی هر دستگاه محاسبه و در شکل ۳ با منحنی نظیر در کروم خالص مقایسه شدند. همان گونه که انتظار داریم آهن که در جدول تناوبی نیز نزدیک کروم است در مقایسه با دیگر ناخالصیها کمترین تغییر را در منحنی چگالی حالت زیر انرژی فرمی ایجاد می‌کند. پیدایش تغییرات ناگهانی در حوالی حدود ۹ eV- در منحنی چگالی حالت در اثر تزریق کادمیوم (شکل ۵) ممکن است عامل بروز رفتار غیر عادی نظیر افزایش طول پیوند و نیز پارامتر تعادلی در این آلیاژ باشد.

۳.۳. خواص مغناطیسی

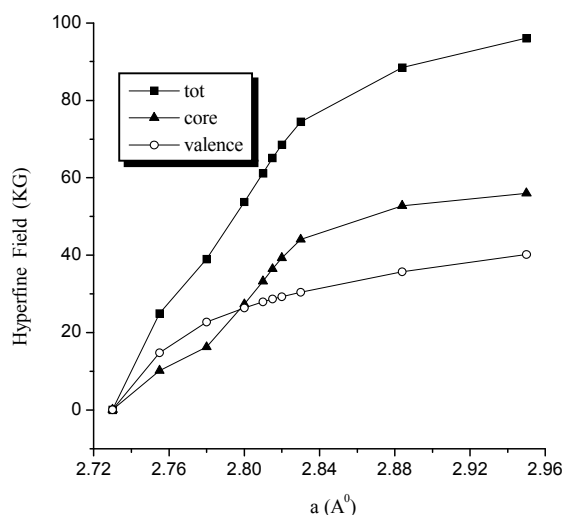
۳.۳.۱. میدان مغناطیسی فوق ریز

می‌دانیم که در بلورهای مکعبی نظیر کروم، تنها سهم تماس فرمی در میدان مغناطیسی فوق ریز غیرصفر است و سهم اربیتال و دو قطبی اسپینی صفر هستند. با توجه به اینکه تماس فرمی از الکترونها اربیتال S، اعم از مغزه و والانس ناشی می‌شود لذا می‌توان سهم هر یک از این نوع الکترونها را به تفکیک محاسبه کرد. ما این محاسبات را در مکان هسته ناخالصیهای آهن، رودیوم، کادمیوم و قلع به ازای پارامتر شبکه تعادلی منبعث از منحنی E-V انجام دادیم و نتایج در جدول ۶ درج شده است. مقایسه سهمهای مختلف میدان مغناطیسی فوق ریز در این جدول حاکی از آن است که در دو ناخالصی غیرمغناطیسی قلع و کادمیوم سهم عمده ناشی از الکترونها S والانسی است که تابع موجشان تا درون مغزه گسترش دارد و سهم الکترونها S مغزه ناچیز می‌باشد در حالی که در مورد آهن و رودیوم که خود مغناطیسی هستند، سهم الکترونها S مغزه چشمگیر است. به نظر می‌رسد که سهم چشمگیر الکترونها S مغزه در ناخالصیهای مغناطیسی ناشی از برهمکنش تبدیلی پوسته d ناخالصی با اربیتال S مغزه آن است که باعث افزایش قطبیدگی و در نتیجه سهم بیشتر الکترونها S مغزه شده است [۹].

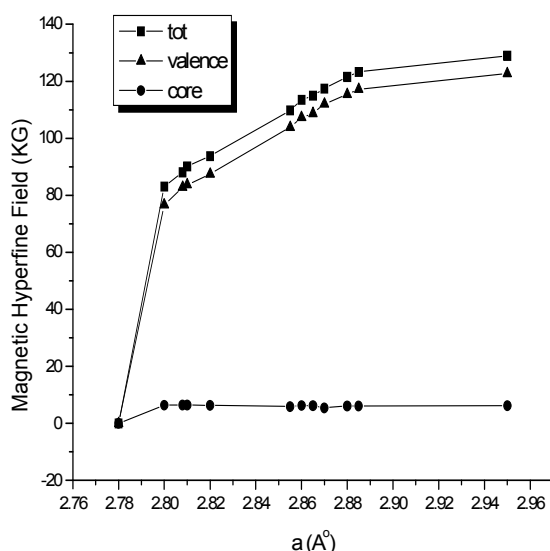
وارد می‌شود. برای کمینه شدن انرژی، این اتمها باید به مکان تعادلی خود منتقل شوند. مکان تعادلی جدید این اتمها با پارامتر داخلی، u ، مشخص می‌شود. ما برای تمام ناخالصیها با رسم منحنی انرژی - حجم، پارامتر تعادلی شبکه و سپس پارامتر داخلی و نیز طول نزدیکترین پیوند را در شبکه تعادلی برای ابرسلول ۱۶ اتمی محاسبه و در جدول ۵ درج کردیم. مشاهده شد که در این ابرسلول تنها بر نزدیکترین کرومها به ناخالصی نیرو وارد می‌شود و اضافه بر آن مولفه‌های X, Y, Z نیرو نیز یکسانند لذا پارامتر داخلی چنین سیستمی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$u = u_x = u_y = u_z$$

البته محاسبات نشان داد که در ابرسلول بزرگتر ۵۴ اتمی نیروی غیرصفر تنها محدود به نزدیکترین همسایگان نمی‌باشد و اضافه بر آن مولفه‌های نیروها نیز غیریکسان هستند که این رفتار ناشی از کاهش تقارن در ابرسلول بزرگتر است. از مقایسه طول پیوند در آلیاژهای $Cr_{15}X$ برای $X = Fe, Rh, Cd, Sn$ نتیجه می‌شود که هر چه عدد اتمی ناخالصی بزرگتر باشد میزان جابه‌جایی نزدیکترین همسایه نیز بیشتر خواهد بود یعنی به آن نیروی بیشتری وارد می‌شود. لذا طول پیوند در مورد ناخالصی آهن کوچکترین است و به تدریج با افزایش عدد اتمی ناخالصی افزایش می‌یابد به استثنای طول پیوند قلع که نسبت به کادمیم مقدار بسیار کمی کاهش یافته است. تزریق ناخالصی موجب تغییر پارامتر تعادلی نیز می‌شود که این تغییر برای ناخالصیهای مختلف، متفاوت است و مشاهده می‌شود که با افزایش عدد اتمی ناخالصی پارامتر تعادلی آلیاژها غالباً افزایش می‌یابد، به جز در مورد قلع که پارامتر تعادلی آن اندکی از پارامتر تعادلی کادمیم کوچکتر است. ما برای مقایسه، شعاع کووالانسی این عناصر را نیز در جدول ۵ درج نمودیم. به وضوح دیده می‌شود که شعاع کووالانسی نیز رفتاری مشابه پارامتر شبکه و نیز طول پیوند دارد. مقایسه مقادیر مدول حجمی چهار آلیاژ با بلور کروم خالص نیز حاکی از آن است که تزریق ناخالصی آهن و رودیوم تأثیر چندانی بر سختی بلور خالص کروم ندارد در حالی که تزریق ناخالصی کادمیوم تأثیر قابل توجهی بر سختی بلور کروم دارد بگونه‌ای که آلیاژ کروم-



شکل ۴. میدان فوق ریز در مکان هسته اتم رودیوم.



شکل ۵. میدان فوق ریز در مکان هسته اتم کادمیوم.

صفر میل می‌کند و این به دلیل علامت منفی و نقش قابل توجه این سهم مغزه در کل میدان مغناطیسی فوق ریز است. علامت منفی سهم مغزه میدان مغناطیسی فوق ریز آهن در فشارهای بالا به علت بر همکنش تبدلی بین اربیتالهای d و s و آن است که اکثریت (اقلیت) الکترونهای s و d را به داخل (خارج) کره موفین تین هدایت می‌کند و از طرفی چون در این بازه پارامتری اکثریت الکترونهای s و d دارای مشخصه $s \downarrow$ می‌باشند، لذا تجمع الکترونهای اسپین پایین در کره تامسون بیشتر شده و میدان مغناطیسی فوق ریز و s را منفی می‌شود [۹].

جدول ۶. میدان مغناطیسی فوق ریز در مکان هسته ناخالصیها (KG) و سهمهای مختلف آن به ازای پارامتر شبکه تعادلی در هر آلیاژ.

سهم مغزه	سهم والانس	کل میدان مغناطیسی	ناخالصی
-۲۱۲/۷	۱۵۱/۷	-۶۱/۱	آهن
۵۲/۷	۳۵/۷	۸۸/۵	رودیوم
۱/۲	۱۲۲/۷	۱۲۸/۹	کادمیوم
۱/۶	۲۶۷/۷	۲۶۹/۴	قلع

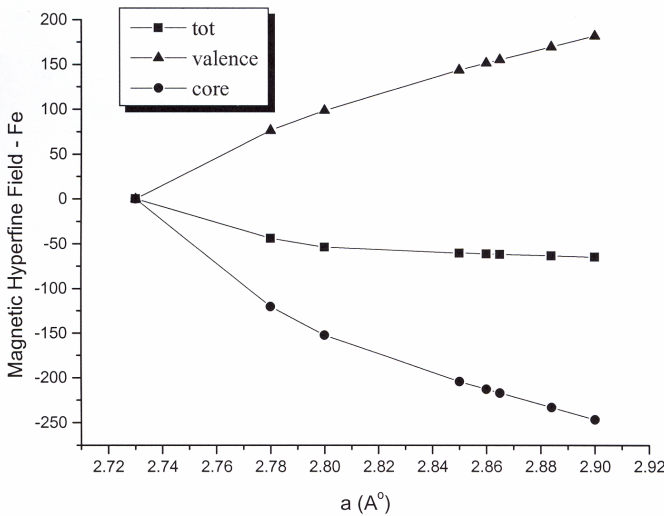
جدول ۷. پارامتر شبکه و فشاری که در آن آلیاژهای کروم به فاز غیر مغناطیسی گذار می‌کنند.

فشار غیر مغناطیسی	پارامتر غیر مغناطیسی
(GPa)	(\AA)
۵۳	۲/۷۰
۵۱	۲/۷۳
۳۳	۲/۷۸
۳۴	۲/۷۹

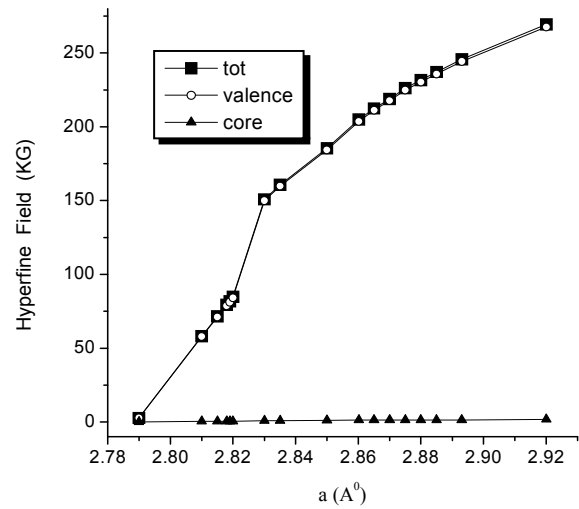
۳.۲.۳. اثر فشار بر میدان مغناطیسی فوق ریز

به منظور بررسی اثر فشار بر خواص مغناطیسی آلیاژها، میدان مغناطیسی فوق ریز و سهم الکترونهای مغزه و والانس به ازای پارامترهای شبکه مختلف محاسبه و نتایج در شکل‌های ۴ تا ۷ آورده شده‌اند. به وضوح دیده می‌شود که خواص مغناطیسی آلیاژها در اثر اعمال فشار کاهش یافته و نهایتاً محو می‌شوند. پارامتر شبکه و فشاری که دستگاه به ازای آن خاصیت مغناطیسی خود را عملاً از دست می‌دهد برای این آلیاژها محاسبه و در جدول ۷ درج شده است.

از مقایسه فشار غیر مغناطیسی آلیاژهای $Cr_{15}X$ با مقدار نظیر در کروم پادفرومغناطیس خالص، ۳۳ GPa، می‌توان نتیجه گرفت که هر چه ناخالصی تزریقی، خاصیت مغناطیسی قویتری داشته باشد، خاصیت مغناطیسی آلیاژ مربوطه، در برابر فشار پایدارتر است. در شکل ۷ دیده می‌شود که با کاهش پارامتر شبکه میدان مغناطیسی فوق ریز آهن، از مقادیر منفی و کوچک به سمت



شکل ۷. میدان فوق ریز در مکان هسته اتم آهن.



شکل ۶. میدان فوق ریز در مکان هسته اتم قلع.

۴. اثر نقطه شروع بر نتایج محاسبات

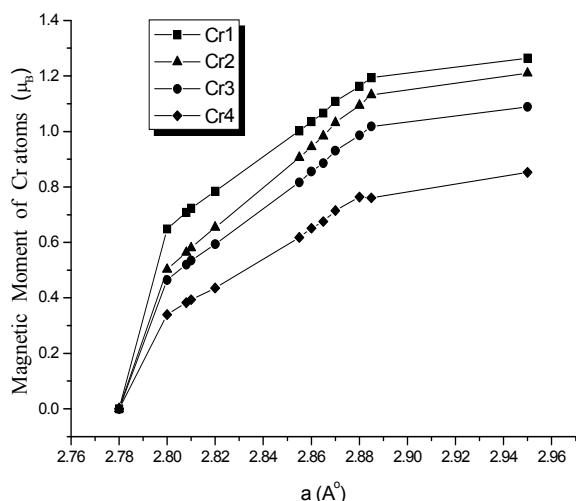
در محاسباتی که با فرض حضور ناخالصی در درون بلورها انجام می‌گیرد مرسوم است که برای تولید چگالی اولیه مورد نیاز برای آغاز فرآیند حل خودسازگار معادلات کوهن-شم ناخالصی را غیر مغناطیسی فرض می‌کنند، بدان معنا که گشتاور مغناطیسی اولیه را برای ناخالصی صفر در نظر می‌گیرند [۱۰]. این پیش فرض از آن رو برگزیده می‌شود که از ابتدا محدودیت خاص بر سیستم تحمیل نشده باشد و انتظار بر آن است که حالت نهایی سیستم پس از حصول خودسازگاری مستقل از نقطه شروع محاسبات باشد. ما در این پژوهش به این نکته دست یافتیم که چنین انتظاری همواره تحقق نمی‌یابد و در مورد آهن که خاصیت مغناطیسی قوی دارد، شروع مغناطیسی و غیرمغناطیسی به دو جواب متفاوت منجر خواهند شد. ما بررسی را به دو عنصر مغناطیسی رودیوم (مغناطیس ضعیف) و آهن (مغناطیس قوی) محدود می‌کنیم چراکه در مورد ناخالصیهای غیر مغناطیسی کادمیوم و قلع چنین پدیده‌ای بروز نمی‌کند. ابتدا تغییرات انرژی-حجم را برای دو ابرسلول حاوی ناخالصیهای رودیوم و آهن با فرض گشتاور مغناطیسی اولیه صفر و غیر صفر محاسبه و نتایج در

۳.۳.۳. اثر فشار بر گشتاور مغناطیسی اتمها

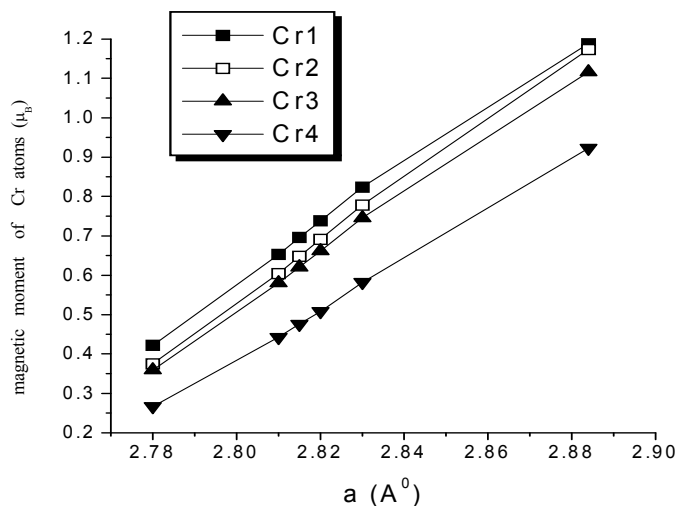
گشتاور مغناطیسی اتمی در مغناطش نواری طبق فرمول زیر تعریف می‌شود:

$$m = \rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}$$

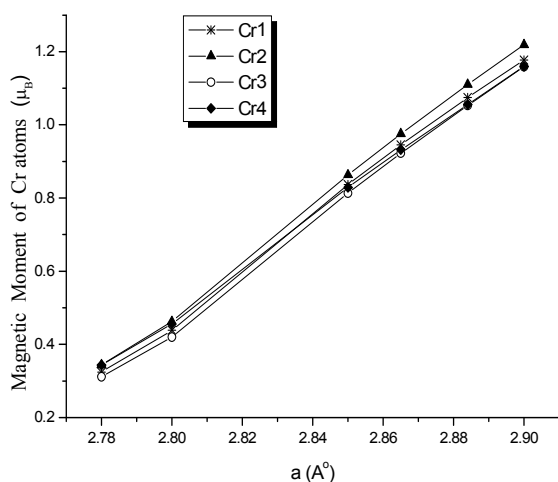
که در آن ρ_{\uparrow} و ρ_{\downarrow} به ترتیب بارهای الکترونی موجود در درون کره موافق تین با اسپینهای رو به بالا و پایین است. بدیهی است که چنین گشتاوری در حالت کلی مستقل از شعاع کره موافق تین نخواهد بود. لذا تنها می‌توان بر نتایج کیفی (و نه کمی) اینگونه محاسبات تکیه کرد. ما گشتاور مغناطیسی اتمهای کروم که در همسایگیهای اول ($Cr1$) و چهارم ($Cr4$) ناخالصیها قرار دارند را برحسب پارامتر شبکه برای آلیاژهای مختلف محاسبه و در شکلهای ۸ تا ۱۱ ارائه نمودیم. همان گونه که از این نمودارها پیداست، گشتاور مغناطیسی اتمهای کروم با افزایش پارامتر شبکه، به علت ضعیف شدن پیوندها، به مقدارشان در حالت اتم منزوی نزدیکتر می‌شوند. این بدان معناست که با افزایش پارامتر شبکه دستگاه از حالت بلوری خارج و به دستگاهی متشکل از اتمهای منزوی نزدیک می‌شود لذا گشتاور مغناطیسی اتمها نیز به مقدار اتمی $2 \mu_B$ نزدیک می‌شود.



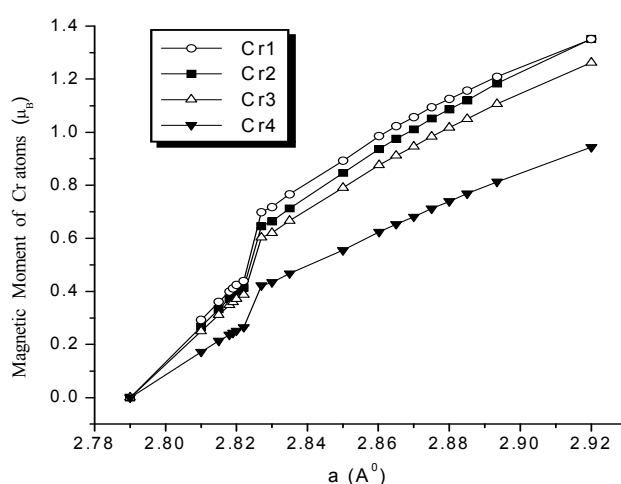
شکل ۹. گشتاور مغناطیسی کرومهای مختلف با ناخالصی کادمیوم.



شکل ۸. گشتاور مغناطیسی کرومهای مختلف با ناخالصی رودیوم.



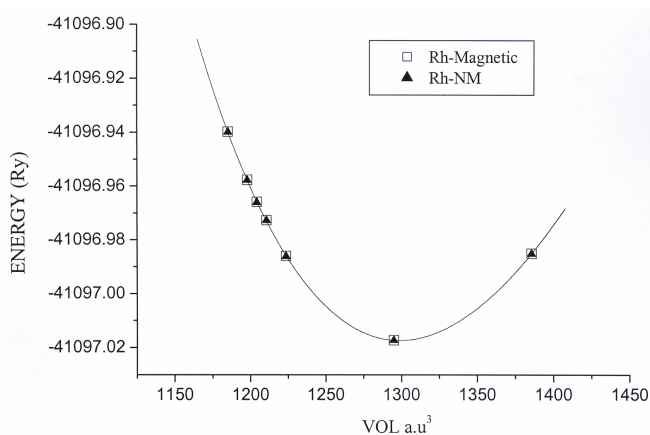
شکل ۱۱. گشتاور مغناطیسی کرومهای مختلف با ناخالصی کادمیوم.



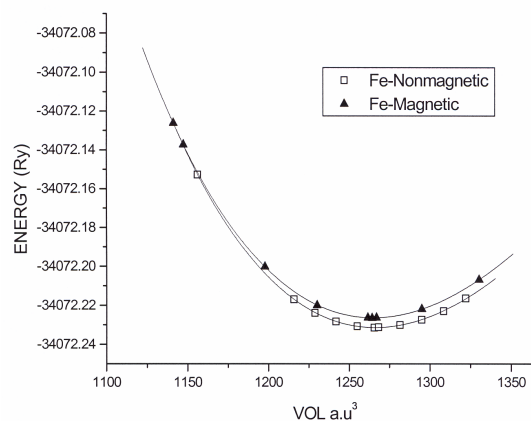
شکل ۱۰. گشتاور مغناطیسی کرومهای مختلف با ناخالصی قلع.

۱۵). مشاهده می‌شود که در اینجا نیز نتایج مربوط به ناخالصی رودیوم مستقل از شرایط اولیه است حال آنکه در مورد آهن، با فرض گشتاور مغناطیسی اولیه غیر صفر، با افزایش پارامتر شبکه، مغناطش اتم آهن افزایش یافته به مقدار نظیرش در اتم منزوی نزدیک می‌شود ولی در جواب به دست آمده با فرض گشتاور مغناطیسی اولیه صفر، با افزایش پارامتر شبکه مقدار گشتاور مغناطیسی ناخالصی آهن کاهش یافته و به مقدار فرض اولیه یعنی صفر نزدیک می‌شود. ما اضافه بر گشتاور مغناطیسی ناخالصی چند خاصیت مغناطیسی دیگر سیستم نظیر میدان فوق ریز مغناطیسی در مکان هسته ناخالصی، سهم الکترونیهای مغزه و والانس از این میدان، و حتی گشتاور مغناطیسی اتمهای کروم

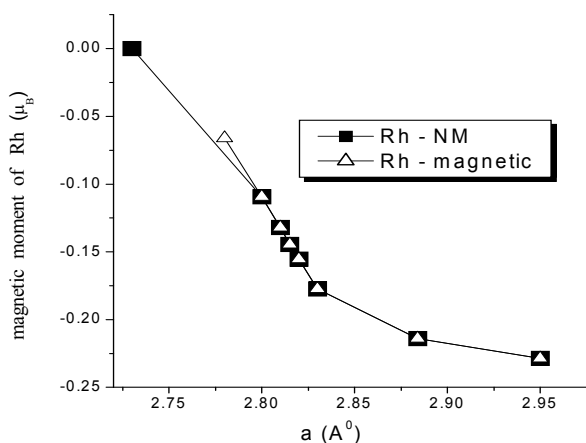
شکل‌های ۱۲ و ۱۳ آورده شد. این نتایج نشان می‌دهند که برای ناخالصی رودیوم (با خاصیت مغناطیسی ضعیف) نتایج نهایی مستقل از نقطه شروع محاسبات است حال آنکه در مورد آهن فرض اولیه غیر مغناطیسی بودن ناخالصی به انرژی تعادلی کمتری منجر می‌شود. اضافه بر آن، اجرای حل خود سازگار با فرض اولیه آهن غیرمغناطیسی، زمان محاسبات را برای حصول همگرایی بمقدار چشمگیری افزایش می‌دهد. ما این مقایسه را به دیگر خواص مغناطیسی بلور نیز تعمیم دادیم. برای این منظور نحوه تغییرات گشتاور مغناطیسی اتمهای آهن و رودیوم را بر حسب پارامتر شبکه با فرض شروع مغناطیسی و غیر مغناطیسی محاسبه و با یکدیگر مقایسه کردیم (شکل‌های ۱۴ و



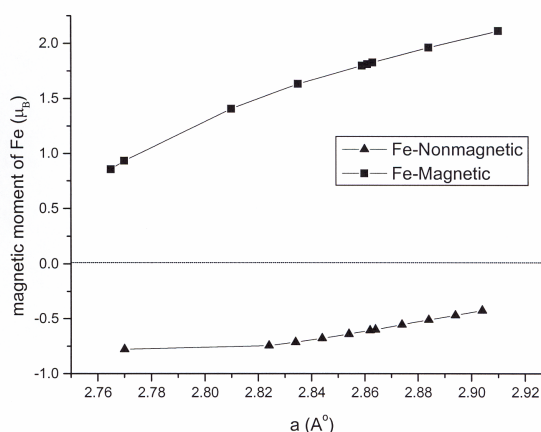
شکل ۱۳. تغییر انرژی بر حسب حجم یاخته در آلیاژ $Cr_{10}Rh$ با دو شروع مغناطیسی و غیر مغناطیسی برای رودیوم.



شکل ۱۴. تغییر انرژی بر حسب حجم یاخته در آلیاژ $Cr_{10}Rh$ با دو شروع مغناطیسی و غیر مغناطیسی برای آهن.



شکل ۱۵. نحوه تغییرات گشتاور مغناطیسی رودیوم در آلیاژ با دو شروع مغناطیسی و غیر مغناطیسی ناخالصی رودیوم.



شکل ۱۶. نحوه تغییرات گشتاور مغناطیسی آهن در آلیاژ با دو شروع مغناطیسی و غیر مغناطیسی ناخالصی آهن.

قدراتانی

این مقاله حاصل یک کار پژوهشی است که هزینه‌های آن توسط دانشگاه صنعتی اصفهان تأمین شده است. ضمناً از دکتر استفن کوتنیر (K.U. Leuven-Belgium) نیز به دلیل تبادل نظرهای سودمند علمی تشکر می‌شود. مساعدت مرکز بین المللی فیزیک نظری عبدالسلام (ICTP) نیز در خور اذعان است.

مراجع

1. E Fawcett, *Rev. Mod. Phys*, **60**, **1** (1988) 209-283.
2. E Fawcett, H L Alberts, V Y Galkin, D R Noakes and J V Yakhmi, *Rev. Mod. Phys*, **66**, **1** (1994) 25-127.
3. A W Overhauser, *Phys. Rev*, **128**, **3** (1962) 1437-1451.
4. W M Lomer, *Proc. Phys. Soc*, **80** (1962) 489-496.
5. S Cottenier, B Deveries, J Meersschat and M Rots, *J. Phys. Condens. Matter*, **14** (2002) 3275-3283.
6. R Hafner, D Spisak, R Lorenz and J Hafner, *J. Phys. Condens. Matter*, **13** (2001) L 239-L 247.
7. R Hafner, D Spisak, R Lorenz and J Hafner, *Phys. Rev. B* **65** (2002) 18443 2-184432 9.
8. R Venegas, P Petetto, G N Rao and L Trabu, *Phys. Rev. B* **21**, **9** (1980) 3851-3859.

را نیز مورد بررسی قرار دادیم و همین روند تأیید شد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که در مورد ناخالصی آهن (و احتمالاً هر ناخالصی مغناطیسی قوی دیگر) برای به دست آوردن حالت پایه صحیح، هر دو امکان نقطه شروع مغناطیسی و غیر مغناطیسی برای ناخالصی، باید بررسی شوند.

- properties*”, Vienna University of Technology, Austria (2001).
13. P Blaha, K Schwarz, P Sorentin and S B Trickey, *Computer Phys. Commun.* **59** (1990).
 14. J P Perdew, K Burke and M Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996).
 9. S Blugel, H Akai, R Zeller and H Dederiches, *Phys. Rev. B* **35**, **7** (1986) 3271-3283.
 10. S Cottenier, H Hass, *Phys. Rev. B* **62** 1 (2000) 1-7.
 11. W J Venema, R Griessen and W Ruesink, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **10**, **12** (1980) 2841-56.
 12. P Blaha, et al., “ *wien2k An Augmented plane wave plus Local orbital programs for calculating crystal*