

## محاسبه خواص الکترونیکی و مغناطیسی ترکیبات $GdM_2$ با استفاده از نظریه تابع چگالی

عابدی، بهرام؛ اوسطی عراقی، رضا؛ یزدانی، احمد

بخش فیزیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

### چکیده

ساختار الکترونی ترکیبات بین فلزی  $(M=Fe, Co, Ni)GdM_2$  مورد مطالعه قرار گرفته است. با محاسبه انرژی کل فازهای فری مغناطیس این ترکیبات مشاهده می‌شود که فاز فری مغناطیس شان پایدارتر است. با محاسبه چگالی حالات وابسته به اسپین این ترکیبات دیده می‌شود که بسته به نوع فلز  $M$  مقداری از بار رسانشی ترکیب بر روی یون واسطه جایگزیده شده و به کاهش ممان مغناطیسی یون واسطه در مقایسه با حالتی که فلز واسطه خالص است، منجر می‌گردد که این امر با نتایج آزمایش مطابقت دارد.

## DFT Calculation on the Electronic Structure and Magnetic Properties of $GdM_2$

Abedi, Bahram; Osaty Eraghi, Reza; Yazdani, Ahmad

Physics Department, Tarbiat Modares University, Tehran

### Abstract

Electronic structure calculations are carried out for the  $GdM_2$  ( $M=Fe, Co, Ni$ ) compounds. The total energies for ferromagnetic and ferromagnetic phases of these compounds are calculated and being compared to each other. It is seen that the ferromagnetic phase is more stable than the ferromagnetic one. Using the calculated spin-dependent density of states it is shown that, depending on which type of transition metals is being used, a fraction of the conduction electrons of the compound gets localized on the transition metal ion, resulting in a reduction of the magnetic moment of the transition metal ion compared to its magnetic moment when it is pure; and this agrees with experiment.

PACS No. 75

منتقل شود. پاراگراف بندی رعایت شود و از گذاشتن عدد در

جلوی سرفصلها خودداری شود.

اینکه در اثر تبادل سیستم پایدارتر گردد انرژی تبادل  $E_x$  باید همواره منفی باشد؛ بنابراین علامت  $J_{ij}$  تعیین می‌کند که آیا ممانهای اسپینی  $\vec{S}_i$  و  $\vec{S}_j$  باید موازی (فرومغناطیس) هم باشند یا پاد موازی (پاد فرومغناطیس).

در فلز Gd به علت نیمه پر بودن اوربیتال 4f؛ اندازه موتمم زاویه‌ای مداری صفر شده و در نتیجه می‌توان در غیاب اثر میدان کریستالی (CFE) بر اندرکنش تبدالی بین اتمها تمرکز کرد و اثر این اندرکنش را بر میزان پایداری فازهای شبکه بررسی نمود. الکترونهاي 4f فلز Gd كاملا جایگزیده بوده و اندرکنش بین آنها از طریق الکترونهاي آزاد (اندرکنش تبدالی RKKY) صورت می‌گیرد.

### مقدمه

میدان کریستالی و اندرکنش تبدالی، دومورد از عوامل اصلی ذاتی هستند که در تعیین پایدارترین فاز ساختاری و مغناطیسی یک کریستال نقش دارند. میدان کریستالی نتیجه ناهمسانگردی کریستال بوده و در یک کریستال همسانگرد ( $L=0$ ) این میدان وجود نخواهد داشت. اندرکنش تبدالی به صورت یک پتانسیل اختلالی وارد هامیلتونی سیستم می‌گردد:

$$V_x = -\sum_{i,j} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1)$$

که در اینجا  $\vec{S}_i$  و  $\vec{S}_j$  ممانهای زاویه ای اسپینی یونهای در حال اندرکنش هستند.  $J_{ij}$  ضریب تبادل می‌باشد و تابع نوسانی میرایی از فاصله بین یونها و شعاع فرمی است.

جدول ۲. انرژی و ممان مغناطیسی کل برای دو حالت فری مغناطیس و فرومغناطیس

	محاسبات فرومغناطیس		محاسبات فری مغناطیس	
	انرژی کل (Ryd/f.u.)	ممان مغناطیسی کل ( $\mu_B / f.u.$ )	انرژی کل (Ryd/f.u.)	ممان مغناطیسی کل ( $\mu_B / f.u.$ )
GdFe <sub>2</sub>	-۲۷۶۵۲/۳۳۶۷۶	۱۰/۸۱	۳۵۷۲۶ -۲۷۶۵۲	۳/۳۹
GdCo <sub>2</sub>	-۲۸۱۳۵/۰۶۲۹۱	۸/۷۴	۰/۷۱۱۴ -۲۸۱۳۵	۵/۱۴
GdNi <sub>2</sub>	-۲۸۶۴۴/۵۴۵۵۶	۶/۹۱	۰/۵۴۵۵۸ -۲۸۶۴۴	۶/۹۴

جدول ۳. مقایسه ممان مغناطیسی اتم M در ترکیب GdM<sub>2</sub> و فلز خالص

	ممان مغناطیسی اتم M در فلز خالص ( $\mu_B$ )	ممان مغناطیسی اتم M در ترکیب GdM <sub>2</sub>
Fe	۲/۲۹	۲/۱۳
Co	۱/۶۱	۱/۱۵
Ni	۰/۶۲	۰/۰۳

پس نتیجه می گیریم فازهای مغناطیسی هر سه ترکیب GdM<sub>2</sub> از نوع فری مغناطیس هستند، یعنی در شبکه کریستالی آنها ممانهای مغناطیسی یونهای فلز M پادموازی ممانهای مغناطیسی یونهای Gd قرار می گیرند. چیزی که در این جدول بیش از همه توجه ما را به خود جلب می کند کاهش شدید دمای کوری ( $T_c$ ) از GdFe<sub>2</sub> تا GdNi<sub>2</sub> است. این کاهش به حدی است که گزارش شده در ترکیب GdCu<sub>2</sub> فاز ماده از فری مغناطیس به پاد فرومغناطیس انتقال می یابد. پس  $T_c$  یکی از نشانه های تغییر فاز است و اگر بتوانیم علت تغییرات آنرا پیدا کنیم، احتمالاً علت تغییر فاز را پیدا کرده ایم.

اندرکنش تبدالی در ترکیبات GdM<sub>2</sub> از نوع RKKY بوده و

$T_c$  بصورت زیر به ضریب تبدالی  $J(0)$  مربوط می شود:

$$T_c \propto J(0) \quad (3)$$

پس هرچه در یک ترکیب اندرکنش تبدالی بین الکترونهای  $f$  و هدایت قوی تر باشد، دمای کوری آن ترکیب بالاتر خواهد بود.

بنابراین می توان استنباط کرد:

$$V_x = -J(0) \vec{S}_0 \cdot \sum \vec{S}_j \quad (2)$$

در اینجا  $J(0)$  معرف ضریب تبادل بین الکترونهای  $f$  و هدایت است و  $\vec{S}_0$  بیانگر اسپین الکترونهای هدایت می باشد. در شکل ۱ میزان پایداری فازهای hcp-afm II و hcp-fm، fcc-fm، bcc-fm با هم مقایسه شده اند. محاسبات در چارچوب نظریه تابع چگالی و با استفاده از روش موج تخت خطی شده تمام پتانسیل (FLAPW) انجام گرفته است [۱]. برای تخمین انرژی تبدالی  $E_x$  تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) [۲] استفاده شده که در نرم افزار Wien2k موجود شده است [۳].

مشاهده می شود که حجم اختصاص یافته به هر اتم در حالت پایه همه ساختارها حدود  $۲۲۴(a.u.)^3$  بدست آمده است و فاز hcp فرومغناطیس از بقیه فازها پایدارتر است. نتایج محاسبه با نتایج آزمایش مطابقت خوبی دارند.

جدول ۱. نتایج تجربی مربوط به ترکیبات GdM<sub>2</sub> (M=Fe,Co,Ni)

	نتایج آزمایش			ممان مغناطیسی کل ( $\mu_B / f.u.$ )
	ساختار	a (Å)	$T_c(K)$	
GdFe <sub>2</sub>	C15	۷/۴۰۵	۷۹۰	۳/۵
GdCo <sub>2</sub>	C15	۷/۲۷۲	۴۰۴	۵/۵
GdNi <sub>2</sub>	C15	۷/۲۰۵	۷۹/۳	۷/۱

## نتیجه گیری

اثر اندرکنش تبدالی در ترکیبات بین فلزی GdM<sub>2</sub> (M=Fe, Co, Ni) بخوبی مشاهده می شود. برخی از مشخصه های سه ترکیب GdCo<sub>2</sub>, GdFe<sub>2</sub> و GdNi<sub>2</sub> مورد اندازه گیری قرار گرفته و در جدول ۱ نشان داده شده است. همچنین در جدول ۲ نتایج محاسبات مربوط به فازهای فرومغناطیس و فری مغناطیس ترکیبات فوق آورده شده اند. مشاهده می شود که:

۱. انرژیهای محاسبه شده فاز فری مغناطیس همه ترکیبات کمتر از فاز فرومغناطیس آنها هستند.

۲. ممانهای مغناطیسی محاسبه شده در فاز فری مغناطیس با نتایج آزمایش هم خوانی خوبی دارند.

از Co و Co<sub>2</sub> بیشتر از Fe باشد. برای اینکه ببینیم آیا این استدلال درست هست یا خیر، چگالی حالات (DOS) وابسته به اسپین فلزات M را هنگامی که در ترکیب GdM<sub>2</sub> قرار دارند محاسبه نمودیم. سپس این چگالی حالات را در کنار DOS فلزات M هنگامی که آنها خالص هستند قرار دادیم تا ببینیم وقتی فلزات M در ترکیبات GdM<sub>2</sub> قرار می گیرند در طیف DOS آنها چه تغییری ایجاد می گردد. برای نمونه طیف DOS وابسته به اسپین اوربیتال ۳d ترکیب GdNi<sub>2</sub> در شکل ۲ رسم شده و با طیف ۳d فلز Ni خالص مقایسه شده است.

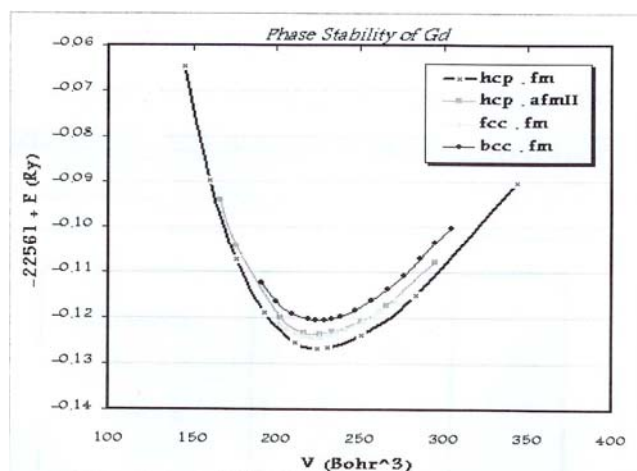
مشاهده می شود که اگرچه در حالت کلی طیف ۳d یون Ni در ترکیب GdNi<sub>2</sub> در مقایسه با فلز خالص Ni خالص جایگزیده تر شده است (به سمت انرژیهای منفی تر سوق پیدا کرده اند). ولی در شکل ظاهری طیف Ni-up به علت پر بودن حالات اسپین بالای اوربیتال ۳d یون Ni چندان تغییری حاصل نشده است، در حالی که اثر جایگزیدگی در طیف Ni-down کاملاً نمایان است.

همچنین امر جایگزیده شدن الکترونهاى هدایت روی اوربیتال ۳d فلز واسطه خود را در ممان مغناطیسی فلز واسطه نشان می دهد. بطوریکه در نتیجه جایگزیدگی فوق تعداد الکترونهاى جفت نشده فلز واسطه کاهش یافته و بنابراین ممان مغناطیسی آن نیز کاهش می یابد. جدول ۳ ممان مغناطیسی محاسبه شده یون M را در فلز خالص M و در ترکیب GdM<sub>2</sub> نشان می دهد.

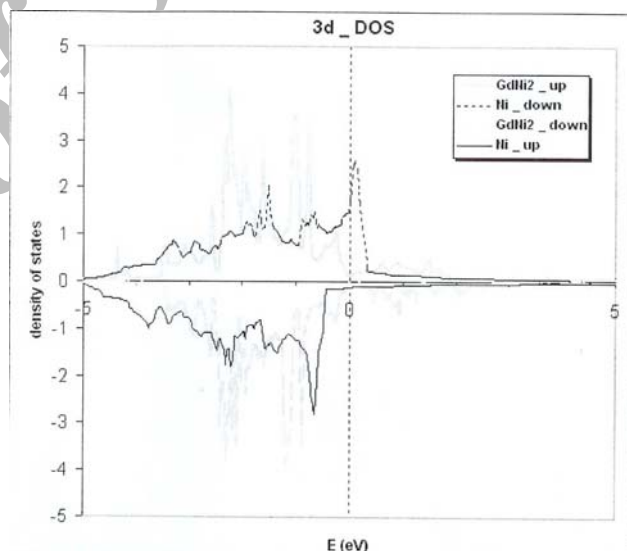
## مراجع

- [1] P. Blaha, K. Schwarz and P. Sorantin, Computer Physics Communications, 59 (1990) 399-415.
- [2] Anna Delin, Lars Fast, Borje Johansson, J. M. Wills and Olle Eridsson, Phys. Rev. B, Vol. 79, No. 23 (1997).
- [3] P. Blaha, K. Schwarz, and J. Luitz, Wien97, Vienna University of Technology 1997 (Improved and updated Unix version of the Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin).

$$J_{GdFe_2}(0) > J_{GdCo_2}(0) > J_{GdNi_2}(0) \quad (4)$$



شکل ۱. انرژی کل فازهای مختلف فلز Gd بر حسب حجم اتمی.



شکل ۲. مقایسه طیف چگالی حالات وابسته به اسپین اوربیتال 3d یون Ni در فلز خالص و در ترکیب GdNi<sub>2</sub>.

اما تعداد الکترونهاى ۴f در همه ترکیبات فوق تقریباً یکسان است. پس منطقی است که بگوییم قدرت اندرکنشهای تبادل فوق توسط تعداد الکترونهاى هدایت (n) تعیین می شود:

$$n_{GdFe_2} > n_{GdCo_2} > n_{GdNi_2} \quad (5)$$

ما استدلال می کنیم حالت فوق فقط در صورتی می تواند رخ دهد که بخشی از بار رسانش ۵d فلز Gd روی اوربیتالهای ۳d فلزات واسطه M جایگزیده گردد و قدرت جایگزیده کنندگی Ni بیشتر