

# مطالعه و بررسی خواص الاستیکی و مغناطیسی نیمه فلزات هویسلر کامل $Co_2FeSi$ و $Co_2MnSi$

حسین قنبری<sup>۱</sup>، امیر علی مسعودی<sup>۲</sup>

## چکیده

در این مقاله ساختار تعادلی، خواص الاستیکی و مغناطیسی دو آلیاژ  $Co_2FeSi$  و  $Co_2MnSi$  با استفاده از نظریه تابعیت چگالی و تقریب شیب تعمیم یافته و با استفاده از روش پتانسیل کامل از طریق نرم افزار Wien2k مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین برهمکنش کولنی درون جایگاهی در قالب روش GGA+U مورد استفاده قرار گرفته تا تأثیرات همبستگی ساختار الکترونی منظور گردد. تغییرات گاف نواری، یا در واقع همان گاف اسپینی با ثابت شبکه در ترکیب  $Co_2MnSi$  قوی تر است.

واژه‌های کلیدی: نظریه تابعی چگالی، خواص الاستیکی و مغناطیسی، برهمکنش کولنی

## ۱. مقدمه

می‌دهد. اگرچه این آلیاژ (همانند سایر آلیاژهای هویسلر) از بی‌نظمی پاد جایگاهی، به دلیل اندازه مشابه اتم‌های Co و Mn رنج می‌برد. بی‌نظمی پاد جایگاهی برای درجات بالای پلارش اسپینی مضر است و همان‌طور که گزارش شده است این بی‌نظمی در درصد بسیار کم موجب از دست رفتن خاصیت نیمه فلزی می‌شود.

سینگا و همکاران [۴] تحقیقی راجع به خواص ساختاری، مغناطیسی و ترابرد لایه‌های نازک آلیاژ  $Co_2MnSi$  رشد داده‌شده توسط مگنترون dc کندوپاش Co از عناصر هدف روی یک زیر لایه یا قوتی  $Al_2O_3$  در دماهای ۵۴۵ تا ۷۱۵ کلوین انجام دادند. لایه‌نازک  $Co_2MnSi$  بس بلوره‌ای است اما یک بافت قوی در صفحه ۱۱۰ دارد و ترتیب زیر شبکه‌های Mn و Si به‌وسیله حضور ابر شبکه‌های ۱۱۱ در پیک پراش نمایش داده می‌شود.

آلیاژ هویسلر کامل یک جایگاه ویژه در میان فرومغناطیس‌های نیمه فلز دارد که ناشی از دمای کوری بالای آن یعنی ۱۱۰۰ کلوین و مغناطیس اشباع ۶

یک آلیاژ هویسلر کامل با ساختار L21 (گروه فضایی  $Fm\bar{3}m$ ) است [۱]، که شامل چهار زیر شبکه مکعبی مرکز سطح تودرتو است. این ترکیب می‌تواند در کاربردهای اسپین ترونیک نقش بسیار مهمی ایفا کند زیرا دارای گاف انرژی بزرگ در حدود ۰/۴ الکترون‌ولت در نزدیکی سطح فرمی است [۲] که منجر به پلاریزه شدن الکترون‌های رسانش می‌شود که به تبع آن برای دستگاه‌های اسپینی ایده آل خواهد بود. این ماده همچنین دارای بالاترین دمای کوری در بین عایق‌های شناخته‌شده هویسلر است که دارای ممانی برابر ۵ مگنتون بور است [۳].

چگالی حالت‌های الکترونی کل تصویر شده برای این ترکیب نوید پلاریزه اسپینی ۱۰۰ درصد در سطحی فرمی

۱ - دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد

تهران شمال ghanbari.ho2015@gmail.com

۲ - استاد، گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران شمال، استاد،

گروه فیزیک، دانشگاه الزهرا masoudi@alzahra.ac.ir

بیشینه عدد کوانتومی مداری برای توابع موج در داخل کرات اتمی  $l_{max}$  را برابر ۱۰ قرار داده ایم. چگالی بار و پتانسیل در ناحیه بین جایگاهی تا  $G_{max}=12$  بسط داده شده اند. پارامتر  $R_{MTK_{max}}$  را در محاسبات مربوط به این ترکیب ها را برابر با ۷ با استفاده از روش همگرایی انرژی به دست آورده ایم. همچنین با استفاده از روش همگرایی انرژی تعداد نقاط در فضای بریلوئن و معادل کاهش ناپذیر آن را محاسبه کرده ایم.

جدول ۲ مقادیر تعداد نقاط بهینه شده برای ترکیب  $Co_2FeSi$  و  $Co_2MnSi$

$Co_2MnSi$	$Co_2FeSi$	
۵۰۰۰	۵۰۰۰	نقاط k
۱۶۵	۱۶۵	نقاط k تولید شده
$17 \times 17 \times 17$	$17 \times 17 \times 17$	مش بندی

همچنین واهلش اتمها را برای تمام ترکیبها با استفاده از تقریب GGA انجام داده و نیروهای وارد بر اتمها را تا  $1 \text{ mRy/bohr}$ ، کمینه کردیم.

### ۳. نتایج

نمودارهای انرژی بر حسب حجم یاخته بسط با استفاده از معادله حالت مورناگان به دست می آید. کمینه نمودارها، حجم یاخته بسط را ارائه می دهد. با استفاده از این نمودارها ثابت های شبکه، مدول حجمی و مشتق مدول حجمی  $B'$  محاسبه شده است. تمامی محاسبات با در نظر گرفتن قطبش اسپینی صورت گرفته است. نتایج به دست آمده به صورت زیر است:

مگنتون بور در واحد فرمولی و همچنین یک پلاریزش اسپینی بسیار بالا در سطح فرمی است.

نتایج XRD پیک های ابر شبکه ای خوبی از صفحات ۱۱۱ و ۳۱۱ نشان می دهد که ساختار L21 را نوید می دهد. این ساختار را می توان به عنوان ۴ شبکه مرکز سطحی تو در تو در نظر گرفت. ساختار L21 یک ابر ساختار از ساختار B2 است که یک شبکه bcc است که اتم های آلیاژ به صورت تصادفی در جایگاه های شبکه توزیع شده اند.

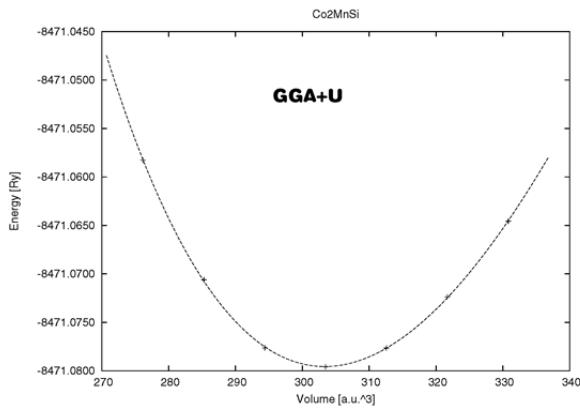
باز آرایش ریتولد یک مقدار کمی از ترکیب Co و Fe را پیش بینی می کند و نه ترکیب Co و Si را. همچنین یک ترکیب قابل توجه بین اتم های Fe و Si وجود دارد و نمونه هایی با کمبود آهن گزارش شده است. آنالیز XPS نشان می دهد که در نمونه های نا منظم ۱۵ درصد کمبود آهن و سیلیکون اضافه وجود دارد.

### ۲. روش محاسبات

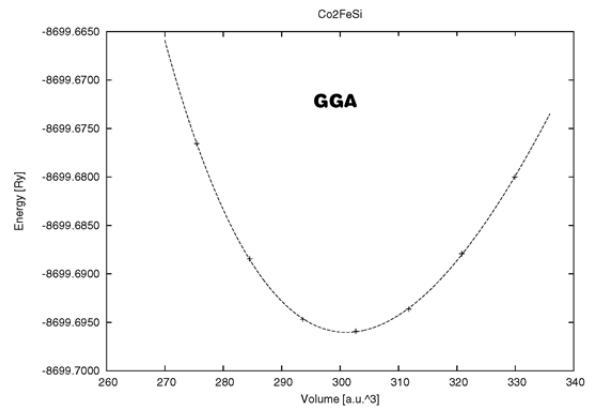
روش پتانسیل کامل با استفاده از امواج تخت تقویت شده خطی در چار چوب نظریه تابعی چگالی با تقریب های شیب گرادینان تعمیم یافته، چگالی موضعی و نرم افزار Wien2k از ابزارهای مورد استفاده در این مقاله هستند. ثابت های شبکه برای یاخته واحد و در نظر گرفته شد. شعاع کرات مافین-تین چنان انتخاب شده اند که علاوه بر رعایت شرط عدم همپوشانی کرات، کمترین نشت بار از کرات مافین-تین را داشته باشیم. بر این اساس شعاع کرات در جدول زیر لیست شده اند.

جدول ۱ مقادیر شعاع کره مافین تین برای ترکیبات  $Co_2FeSi$  و  $Co_2MnSi$  در حالت انبوهه

	$Co_2MnSi$	$Co_2FeSi$
$R_{MT}^{Co}(\text{bohr})$	۲/۳	۲/۲۹
$R_{MT}^{Mn}(\text{bohr})$	۲/۳	-
$R_{MT}^{Fe}(\text{bohr})$	-	۲/۲۹
$R_{MT}^{Si}(\text{bohr})$	۱/۹۵	۱/۹۵



شکل ۴ نمودار انرژی بر حسب حجم یاخته بسیط برای  $Co_2MnSi$  با در نظر گرفتن تصحیح هابارد



شکل ۱ نمودار انرژی بر حسب حجم یاخته بسیط برای  $Co_2FeSi$

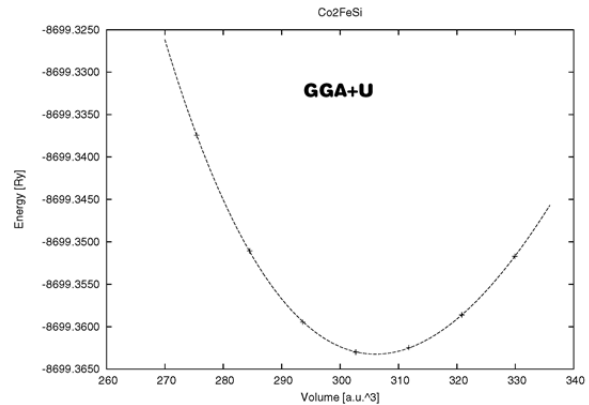
جدول ۳ مدول حجمی و مشتق آن محاسبه شده با روش مرنانگان با تقریب GGA

	مدول حجمی	مشتق مدول حجمی
Co2MnSi (GGA)	۲۲۳/۲۱۵۸	۵/۱۰۰۵
Co2MnSi (GGA+U)	۲۱۱/۵۸۰۰	۵/۰۸۸۶
Co2FeSi (GGA)	۲۱۱/۰۷۰۳	۶/۰۶۷۶
Co2FeSi (GGA+U)	۲۰۶/۸۳۷۳	۴/۰۱۰۸

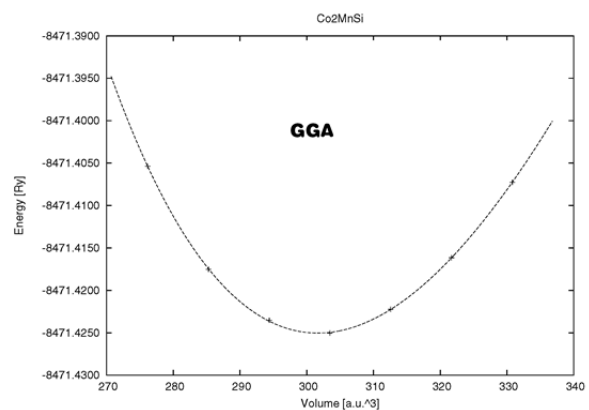
بررسی جدول فوق نشان می دهد که ترکیب در حالت فرومغناطیس دارای بیشترین مدول حجمی است و در نتیجه در برابر استرس، مقاومت بیشتری از خود نشان می دهد. نکته جالب این است که با اعمال پارامتر هابارد، مدول حجمی و مشتق آن مقدار کمتری از خود نشان می دهد و این می تواند ناشی از این حقیقت باشد که انرژی درون جایگاهی هابارد در این قضیه نقش دارد.

#### ۴. محاسبه ضرایب الاستیکی

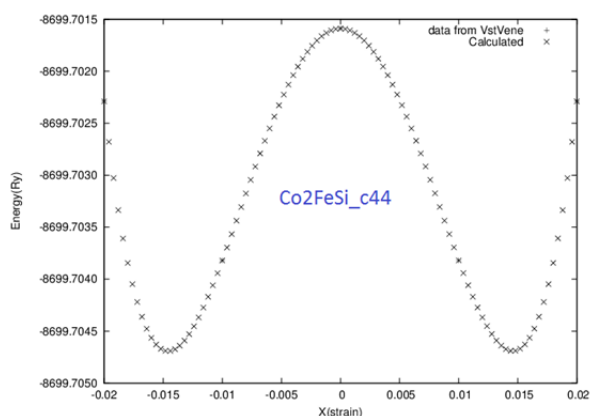
انرژی تعادلی یک ساختار بلوری در حالتی به دست می آید که فشار ماکروسکوپی که به دلیل کرنش خارجی به وجود می آید و همچنین نیروی وارد بر یون های تشکیل دهنده ساختار بلوری صفر باشد. فشار ماکروسکوپی زمانی



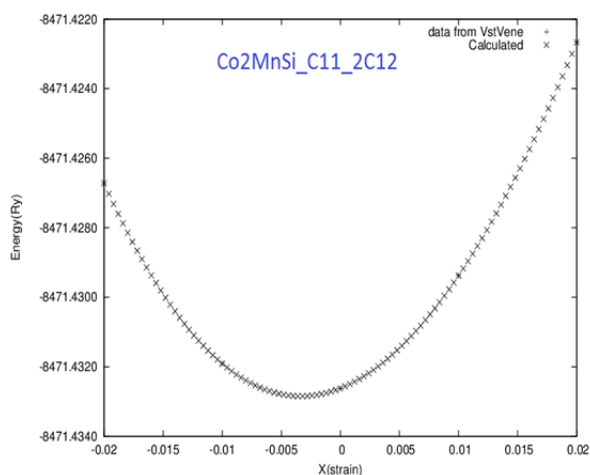
شکل ۲ نمودار انرژی بر حسب حجم یاخته بسیط برای  $Co_2FeSi$  با در نظر گرفتن تصحیح هابارد



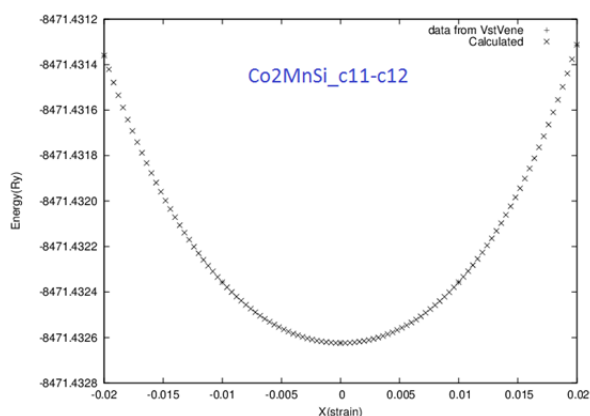
شکل ۳ نمودار انرژی بر حسب حجم یاخته بسیط برای  $Co_2MnSi$



شکل ۷ انرژی بر حسب تنش ثابت  $C_{44}$  برای  $Co_2FeSi$



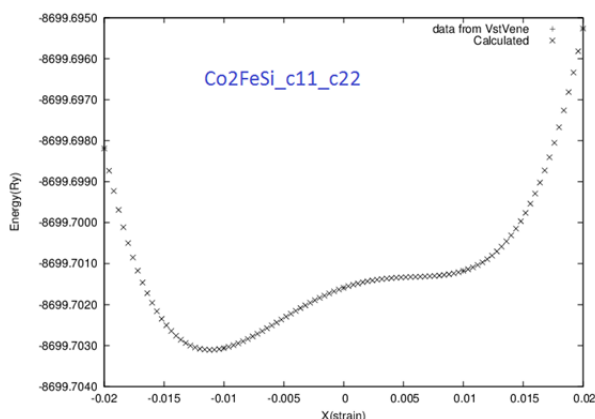
شکل ۸ انرژی بر حسب تنش ثابت  $C_{11}-C_{22}$  برای  $Co_2MnSi$



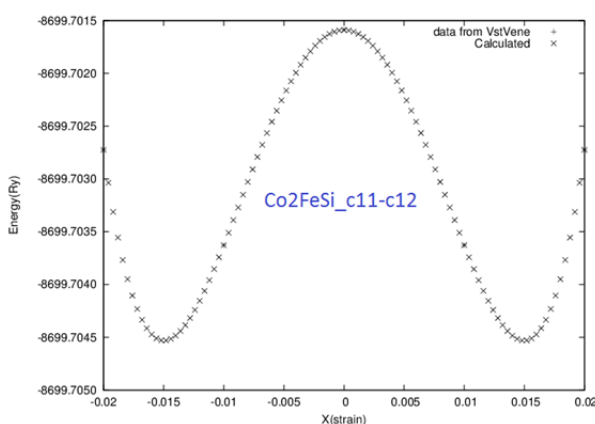
شکل ۹ انرژی بر حسب تنش ثابت  $C_{11}-C_{12}$  برای  $Co_2MnSi$

صفر می شود که ابعاد سلول واحد در حالت بهینه باشد زیرا در این صورت است که تحت هیچ کرنشی قرار ندارد و نیروی وارد بر یون ها نیز زمانی صفر می شود که هر یون در موقعیت تعادلی خود در سلول واحد باشد.

خواص کشسانی جامدات با نیروهای بین اتمی که اتم ها هنگام جابجایی از حالت تعادل بر یکدیگر وارد می کنند، تعیین می شود. اگر جابجایی از حالت تعادل کوچک باشد قانون هوک برقرار خواهد بود و می توان انرژی را نیز تا مرتبه دوم بر حسب جابجایی بسط داد.



شکل ۵ انرژی بر حسب تنش ثابت  $C_{11}-C_{22}$  برای  $Co_2FeSi$

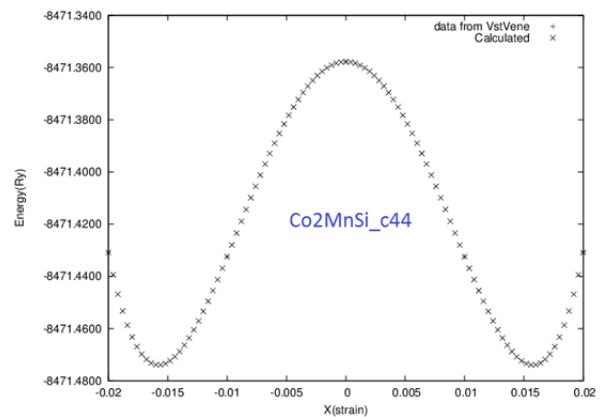


شکل ۶ انرژی بر حسب تنش ثابت  $C_{11}-C_{12}$  برای  $Co_2FeSi$

در این محاسبات مقدار کرنش از  $-0.02$  تا  $0.02$  با گام های  $0.01$  تغییر داده می شود. نمودارهای تغییرات انرژی بر حسب کرنش در وضعیت های مختلف اعمال تنش های طولی، برشی و عرضی را می توان با یک تابع درجه دو برازش کرد.

### مراجع

- [1] Bradley A. J. and Rodgers J. W., *The Crystal Structure of the Heusler Alloys*, *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.*, vol. 144, no. 852, 1934 pp. 340–359..
- [2] A. A. Knowlton and O. C. Clifford, “The Heusler alloys,” *Trans. Faraday Soc.*, vol. 8, no. October, p. 195, 1912.
- [3] C. C. M. Campbell, “Magnetic moments in heusler alloys,” *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 3, no. 4, pp. 354–360, Nov. 1976.
- [4] L. J. Singh *et al.*, “Interface effects in highly oriented films of the Heusler alloy  $Co_2MnSi$  on  $GaAs(001)$ ,” *J. Appl. Phys.*, vol. 99, no. 1, p. 13904, Jan. 2006.



شکل 1 انرژی بر حسب تنش ثابت  $C_{44}$  برای  $Co_2MnSi$

### ۵. نتیجه گیری

. به نظر می رسد ترکیب  $Co_2MnSi$  پایداری بیشتری از خود نشان می دهد و دارای بیشترین مدول حجمی است و در نتیجه در برابر استرس مقاومت بیشتری از خود نشان می دهد. از طرف دیگر با محاسبه این انرژی بر حسب مقدار جابجایی در راستای محور  $a$  تغییر فاز مرتبه اول بین فازهایش به وضوح دیده شد .

