



دومین کنفرانس بین المللی و ششمین کنفرانس ملی

مهندسی مواد، متالورژی و معدن
26 بهمن ماه 1401 - دانشگاه شهید چمران اهواز
2nd International Conference & 6th National Conference on
Materials, Metallurgy, Mining
Feb 15, 2023



بررسی ویژگی ساختاری ترکیب ایتريم کرومیت در فاز مکعبی

حمداله صالحی، استاد و هیئت علمی، ¹salehi_h@scu.ac.ir
فاطمه خادمیان، دانشجوی کارشناسی ارشد، ²fatemehkhademian5775@gmail.com
مریم عزیزی، دانشجوی دکتری، ³Maryam.aziziphsics@gmail.com

چکیده

در این مقاله ویژگیهای ساختاری مانند ثابت شبکه، چگالی حالتها و ساختار نواری ایتريم کرومیت در فاز مکعبی مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی، توسط کد محاسباتی کوانتوم-اسپرسو با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) توسط شبه پتانسیل بار پایسته میباشد. با اعمال پارامتر هابارد و نتایج برگرفته از ساختار نواری در فاز مکعبی به نیم رسانا بودن این ترکیب پی برده شد و گاف نواری آن برابر با 43/1 الکترون ولت میباشد، که با نتایج موجود همخوانی دارد.

واژه‌های کلیدی: ایتريم کرومیت، کوانتوم اسپرسو، ساختار نواری

مقدمه-1

فروئیک، مادهای دارای نظم خود به خود، قابل تغییر قطبش الکتریکی یا مغناطیسی و یا کرنش کشسان میباشد. موادی که بیش از یکی از این مرتبهها را شامل شوند چندفروئی نامیده شده و اخیراً کانون تحقیقات بسیاری شده‌اند. بیشتر دوفروئی‌های مورد بررسی در سال‌های اخیر اکسیدهای ABO_3 با ساختار پرووسکیت هستند. مواد چندفروئی همزمان دارای نظم فروالکتریک و مغناطیسی بوده که به علت کاربردهای بالقوه مانند دستگاه‌های حافظه چند حالتی و حسگرها، توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند. اخیراً گزارش شده است که ارتوکرومیت‌های خاکی کمیاب نظیر $RCrO_3$ ($R = Y$) دارای خواص چندفروئی بوده و در این میان ایتريم کرومیت ($YCrO_3$) به‌صورت چندفروئی در طبیعت مشاهده میشود، دمای ذوب آن حدود 2290 ± 30 درجه سانتی گراد و از پایداری ساختاری بالایی برخوردار است. این ماده یک پادفرومغناطیس با فرومغناطیس ضعیف زیر 140 کلون و گذار فروالکتریک در 473 کلون را نشان میدهد. علاوه بر این، $YCrO_3$ دارای کاربرد هایی در سلولهای سوختی اکسید جامد، حسگرها و کاتالیزور نیز میباشد [1]. در سال 2005 سرانو و همکاران ساختار و انرژی ایتريم کرومیت با نظم فرومغناطیس و پادفرومغناطیس در چارچوب نظریه تابعی چگالی با روش شبه پتانسیل فوق نرم و بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو بررسی کردند و متوجه شدند که $YCrO_3$ در فاز مکعبی نیم رسانا بوده و به ترتیب دارای گاف 8/1 و 3/1 الکترون ولت در حالت نظم پادفرومغناطیس و فرومغناطیس است [2]. در

¹ دانشگاه شهید چمران اهواز

² دانشگاه شهید چمران اهواز

³ دانشگاه شهید چمران اهواز



دومین کنفرانس بین المللی و ششمین کنفرانس ملی

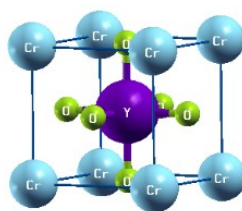
مهندسی مواد، متالورژی و معدن
26 بهمن ماه 1401 - دانشگاه شهید چمران اهواز
2nd International Conference & 6th National Conference on
Materials, Metallurgy, Mining
Feb 15, 2023



سال 2013 سرائو و همکاران چند فروئی در ایتیریم کرومیت با گذار دمای 450 کلوین و پادفرومغناطیس 140 کلوین مشاهده کردند [3]. در سال 2018 احمد و همکاران خاصیت های مغناطیسی ایتیریم کرومیت انبوهه با تقریب شیب تعمیم یافته در چارچوب نظریه تابعی چگالی و بسته محاسباتی Wien2k محاسبه کردند [4].

2- روش محاسبات

محاسبات انجام شده در این کار با بسته محاسباتی کوانتوم-اسپرسو و تقریب شیب تعمیم یافته با شبه پتانسیل بار پایسته میباشد. همگرایی بر حسب انرژی و دقت مورد استفاده 10^{-7} ریدبرگ میباشد. نقاط K به صورت مش بندی $10 \times 10 \times 10$ و ثابت شبکه پس از بهینه سازی پارامتر ساختاری برابر با $98/3a =$ آنگستروم به دست آمد که با مقدار تجربی آن، $79/3$ [6]، سازگاری خوبی دارد. با اعمال پارامتر هابارد و با توجه به ساختار نواری به نیم رسانا بودن ترکیب در هر دو اسپین بالا و پایین پی بردیم. طرح واره ترکیب مد نظر در شکل (1) نشان داده شده است.



شکل 1- ساختار بلوری ایتیریم کرومیت در فاز مکعبی.

3- نتایج

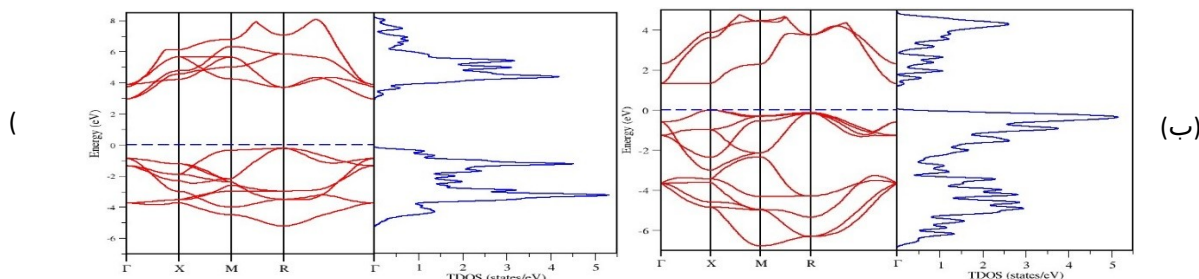
3-1- ویژگی ساختاری

در اتمهای آزاد ترازهای انرژی به صورت مجزا وجود دارند ولی در جامدات به علت نزدیک بودن حالت های انرژی به یکدیگر تشکیل نوار می دهند. اختلاف بین بالاترین نوار اشغال شده (نوار ظرفیت) و پایین ترین نوار اشغال شده (نوار رسانش) گاف انرژی نامیده میشود و گاف نواری به دلیل مشخص کردن نوع ماده دارای اهمیت به سزایی است [7]. شکل (2الف) نمودار مربوط به ساختار نواری در اسپین بالا که گاف نواری آن غیرمستقیم و در دو نقطه X (نوار ظرفیت) و نقطه گاما در نوار رسانش و شکل (2ب) بیانگر نمودار ساختاری نواری در اسپین پایین که گاف نواری آن غیرمستقیم و در دو نقطه R (نوار ظرفیت) و نقطه Γ در نوار رسانش میباشد و از بررسی چگالی حالتها در اسپین بالا و پایین (Up و Dw) مشاهده شد که در نوار ظرفیت برای اسپین بالا منطبق بر X و اسپین پایین منطبق بر R، در نتیجه منطبق با نمودار ساختار نواری است. در لایه رسانش نیز برای اسپین بالا و پایین بر نقطه Γ منطبق بوده و برای هر دو اسپین گاف غیرمستقیم و به ترتیب در اسپین بالا و پایین مقدار گاف نواری برابر با $3179/1$ و $1701/3$ الکترون ولت است. چگالی حالتها در واقع معیاری جهت سنجش ساختار نواری و چگونگی مشارکت اربیتالهای مختلف را در تشکیل پیوندها نشان میدهد. همچنین در شکل (3) نمودار چگالی حالتها در بازه 8- تا 8 الکترون ولت نشان داده شده است. همانطور که در این شکل مشاهده میشود یک گاف نواری وجود دارد که تأیید کننده ساختار نواری این ترکیب میباشد. برداشت از شکل این است که ایتیریم کرومیت در فاز مکعبی نیم رسانا بوده زیرا در کانال اسپینی بالا و پایین خط فرمی نمودار چگالی حالتها را قطع نکرده و در اطراف سطح فرمی گاف انرژی مشاهده میشود [8].

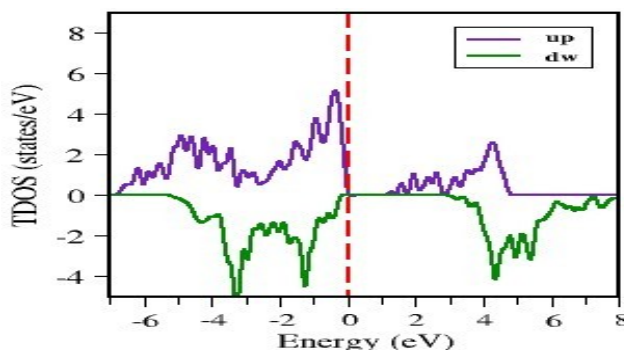


دومین کنفرانس بین المللی و ششمین کنفرانس ملی

مهندسی مواد، متالورژی و معدن
26 بهمن ماه 1401 - دانشگاه شهید چمران اهواز
2nd International Conference & 6th National Conference on
Materials, Metallurgy, Mining
Feb 15, 2023



شکل 2- ساختار نواری و جگالی حالت‌های ایتريم کروميت مربوط به (الف) جگالی حالتها و کانال اسپيني بالا و (ب) جگالی حالتها و کانال اسپيني پايين



شکل 3- نمودار جگالی حالت کلی ایتريم کروميت

4- نتیجه گیری

در این مقاله ویژگی ساختاری ترکیب ایتريم کروميت در فاز مکعبی با روش شبیه‌تانسيل بار پایسته و تقریب شیب تعمیم یافته توسط کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو مورد بررسی قرار گرفتند. نتایج برگرفته از ساختار نواری نشان دهنده نیم رسانا بودن ترکیب در کانال اسپيني بالا و پايين میباشد و مقدار گاف در کانال اسپيني بالا و پايين به ترتیب برابر با 1/3 و 1701/3 الکترون ولت است. نتایج بهدست آمده با دیگر داده های موجود سازگاری خوبی دارد.

مراجع

- [1] Su, Yuling; Guo, Jinjin; Cheng, Xuerui; Feng, Shiquan; Yang, Yang; "Intrinsic anharmonicity effect in YCrO_3 : Pressure and temperature dependent Raman spectra studies", *Journal of Alloys and Compounds*, 805, 489-495, 2019.
- [2] Serrao, C. R.; Kundu, A. K.; Krupanidhi, S. B.; Waghmare, U. V. and Rao, C. N. R.; "Biferroic YCrO_3 "; *Phys. Rev. B*, 72, 220101, 2005.
- [3] Seo, J.-D.; Son, J. Y.; "Room temperature ferroelectricity of YCrO_3



دومین کنفرانس بین المللی و ششمین کنفرانس ملی

مهندسی مواد، متالورژی و معدن
26 بهمن ماه 1401 - دانشگاه شهید چمران اهواز
2nd International Conference & 6th National Conference on
Materials, Metallurgy, Mining
Feb 15, 2023



- thin films on Rh single crystals”, *Journal of crystal growth*, 375, 53-56, 2013.
- [4] Ahmed, S. S; Ngantso, G. D; Boujnah, M; Boujnah, Benyoussef, A; Kenz, A. EL; “Ab initio and Monte Carlo studies of phase transitions and magnetic properties of YcrO3: Heisenberg model”; *Physics Letters A* 383, No. 2-3, 121-126, 2019.
- [5] Giannozzi, P; Baroni, S; Bonini, N; Calandra, M; Car, R et al; “QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials”; *Journal of physics: Condensed Matter* 21, 395502, 2009.
- [6] Ray Nirat and Waghmare Umesh V; “Coupling between magnetic ordering and structural instabilities in perovskite biferroics: A first-principles study”; *Physical Review B* 77, no. 13, 134112, 2008.

[7] اسدی، فاطمه، "بررسی و مقایسه ویژگیهای ساختاری، الکترونی و اپتیکی در ترکیبات (Ge, UY_2 (Y=Ga با استفاده از نظریه تابعی چگالی"، پایان نامه کارشناسی ارشد، شهید چمران اهواز، دانشکده علوم، 37-73، 1396.

[8] امیری، پیمان؛ صالحی، حمداله و کاظمی، مرجان؛ "مطالعه ابتدا به ساکن ویژگی نیم فلزی ترکیب kp در انبوهه و سطح (001) ساختار نمک سنگی"، مجله پژوهش فیزیک ایران، جلد 19، شماره 2، 332-339، تابستان 1398.