

مطالعه‌ی ویژگی‌های مغناطیسی نانو سیم‌های فلزات واسط (Cr, Mn, Fe, Co, Ni)

بزی جوان، مسعود^۱ - تجرب، ناصر^۱ - سرگلزاری، مهدی^۲

^۱دانشگاه فردوسی مشهد - گروه فیزیک

^۲دانشگاه علم و صنعت - دانشکده‌ی فیزیک

چکیده

ویژگی‌های مغناطیسی زنجیره‌ی اتمی (نانو سیم) یک بعدی فلزات واسط (Cr, Mn, Fe, Co, Ni)^{۲d} در فاز فرومغناطیس (**FM**) به روش **FPLMTO** در تقریب کره‌های اتمی (**ASA**) و شبیه تعمیم یافته (**GGA**) بررسی شد. تغییرات گشتاور مغناطیسی به ازای هر اتم بر حسب فاصله پیوندی بدست آمد. اثر برهم کش اسپین مدار بررسی شد و نتایج حاصل نشان می‌دهد که تصحیح تعطیلگی اریتالی (**OPC**) بر گشتاور مغناطیسی نانو سیم‌های یک بعدی اتم‌های $3d$ بسیار ناچیز است.

مقدمه

با گسترش فناوری نانو، مینیاتوری کردن تجهیزات الکترونیکی و فوتونیکی مورد علاقه قرار گرفته است. نانو سیم‌ها می‌توانند به عنوان بلوک‌های ساختمانی این نانو ابزارها مورد استفاده قرار گیرند. به طور خاص، نانو سیم‌های مغناطیسی گزینه‌های امید بخشی جهت استفاده در ابزارهای ذخیره سازی، حافظه‌های فشرده، هستند. معمولاً نانو سیم‌ها شکل استوانه‌ای با قطرهایی در حدود 30 تا 500 نانومتر و طولی در حدود $10\text{ }\mu\text{m}$ دارند. بعضی از نانو سیم‌های عناصر واسط $3d$ به روش‌های مختلفی ساخته شده اند [۱-۳]. زنجیره‌های اتمی موازی با چگالی بالا به کمک رشد Co روی Pt بسیار خالص رشد داده شده و مغناطیس یک بعدی، در گستره دماهی باریک بین 10 تا 20 درجه کلوین دیده شده است. نانو سیم‌های پایدار می‌توانند درون ساختارهای لوله‌ای رشد داده شوند. به عنوان مثال می‌توان از نانو سیم‌های Ag رشد داده شده درون نانولوله‌ای آلی نام برد [۴]. نانو سیم‌هایی هم به کمک میکروسکوپ تونلی روبیشی با حرکت نوک میکروسکوپ به سمت فلز و انقباض بعدی آن تولید شده‌اند که کوتاه و معلق هستند [۵]. زنجیره‌های اتمی یک بعدی مینابی برای مطالعه‌ی نظری و مفاهیم گسترش یافته در سیستم‌های سه بعدی هستند. علاوه بر آن، نانو سیم‌های یک بعدی می‌توانند پدیده‌های جدیدی را نیز نشان دهند؛ بنابراین دانستن خصوصیات الکترونی و مغناطیسی و تغییرات آنها در مورد زنجیره‌های اتمی می‌تواند بسیار اساسی باشد. در این زمینه محاسبات نظری مختلفی صورت گرفته است. بنزت و فریمن [۶] به روش FLAPW زنجیره‌های خطی Fe و Ni را مورد بررسی قرار داده‌اند. یانگ [۷] سه نوع نانو سیم Fe به صورت یک بعدی و نیز در فازهای fcc و bcc را به روش LAPW محاسبه کرده است. همچنین زنجیره‌های خطی Co [۸]، Fe [۹] و Ti [۱۰] و Ni [۱۱] بطور جداگانه بررسی شده‌اند. محاسبات نشان می‌دهد که نانو سیم‌های فلزی و مغناطیسی در ابزارهای الکترونیکی، اپتوالکترونیکی، ابزارهای کوانتومی، حافظه‌های مغناطیسی، اسپین ترونیک و نانو کاوه‌ها می‌توانند مورد استفاده قرار گیرند [۱۲]. هدف از این کار

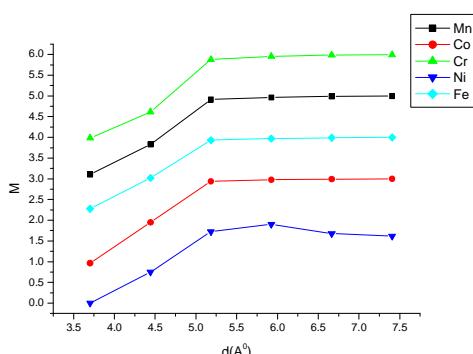
مطالعه‌ی ویژگی‌های الکترونیکی و مغناطیسی نانو سیم‌های فلزات واسط $3d$ است که هنوز بطور کامل کلیه‌ی خصوصیات آنها بررسی نشده است. فلزات واسط به این خاطر که اربیتال d آنها بطور جزئی پر شده است، نقش سازنده‌ای در مغناطیس دارند. علاوه بر خصوصیات مغناطیسی کپه‌ای، زنجیره‌های اتمی یک بعدی آنها نیز ویژگی‌های مغناطیسی از خود نشان می‌دهند. در بخش II بطور مختصری روش محاسبه را توصیف کردہ‌ایم. نتایج و بحث‌ها، در بخش III ارائه شده و برداشت نتایج در بخش IV داده شده است.

روش محاسبه

محاسبات چگالی حالت‌های اسپین قطبیده‌ی نانو سیم‌های یک بعدی (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) به روش FPLMTO-ASA [۱۴-۱۵] با تقریب شب تعمیم یافته (GGA) [۱۵] مورد بررسی قرار گرفت. ساختار نانو سیم‌ها در گروه فضایی P4 $\bar{3}m$ با ثابت‌های شبکه $a = b = 14$ Å و $c/a = 0.9, 0.8, 0.7, 0.6, 0.5$ در واحد شعاع اتمی $a.u$ و در فاز فرومغناطیس مدل سازی شد. λ_{max} برای توابع موج و پتانسیل شبکه ۶ تعیین گردید و تعداد نقاط k در راستای [001] برای کلیه محاسبات بین ۸ تا ۲۵ متغیر و در راستاهای [100] و [010] ثابت و برابر ۴ انتخاب شد. محاسبات نسبیتی جهت بررسی اثر جفت شدگی اسپین مدار و تعیین مغناطیدگی اربیتالی در حل خودسازگار معادلات موردنظر قرار گرفت.

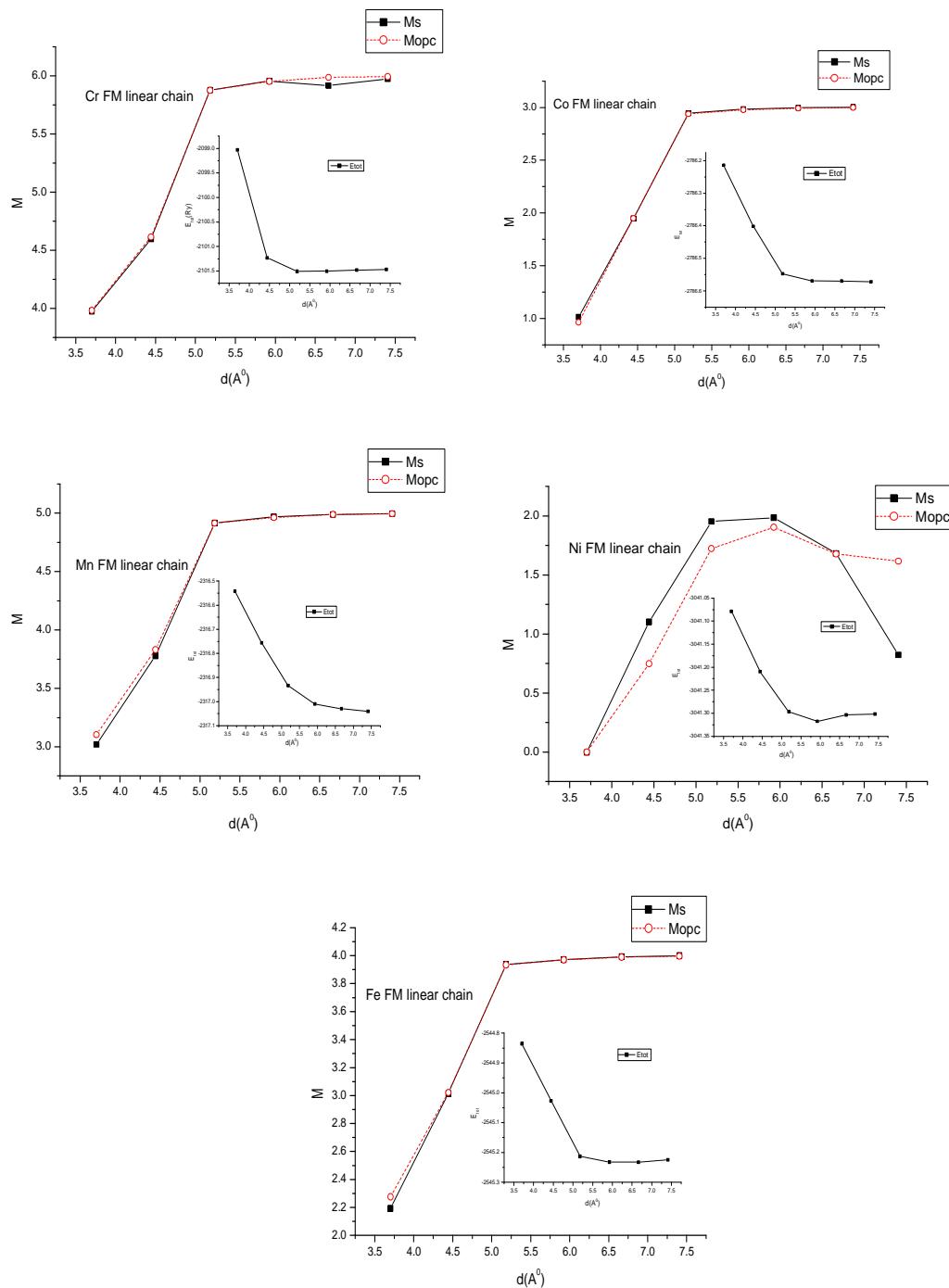
نتایج و بحث

تغییرات گشتاور مغناطیسی نانو سیم‌های یک بعدی (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) بر حسب تغییرات فاصله‌ی پیوندی در نمودار ۱ نشان داده شده است. دیده می‌شود که اندازه‌ی گشتاور مغناطیسی بازی هر اتم در کمترین فاصله‌ی پیوندی انتخاب شده (۳.۷ Å) برای نانو سیم‌های Cr, Mn, Ni, Co, Fe به ترتیب ۰.۹۶، ۰.۲۷، ۰.۰۰، ۰.۹۶ و ۰.۳۸ و در بیشترین فاصله‌ی پیوندی انتخاب شده (۷.۴ Å) به ترتیب ۰.۹۹، ۰.۹۹، ۰.۶۱، ۰.۹۹ و ۰.۹۹ بدست آمد.



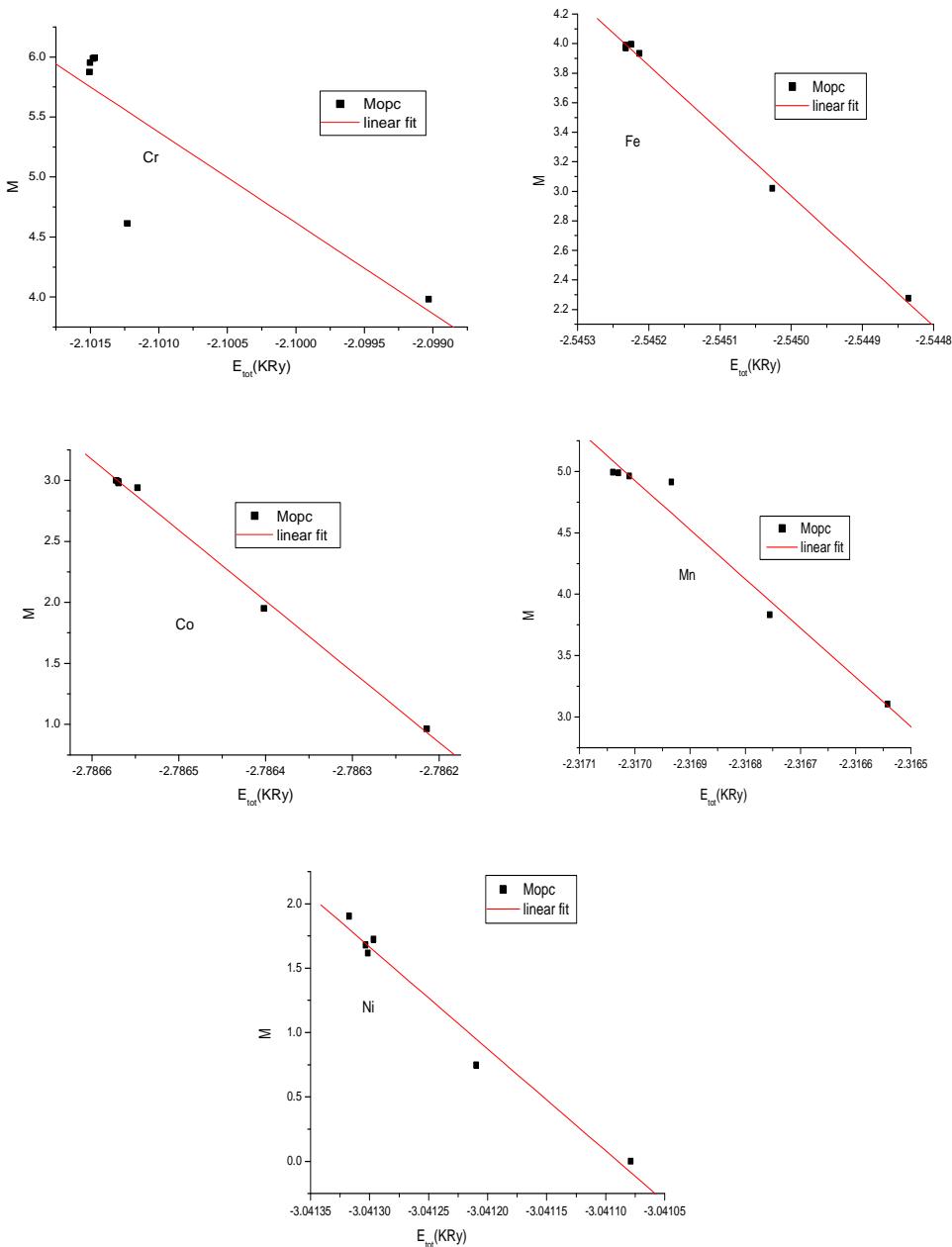
نمودار ۱. تغییر گشتاور مغناطیسی بازی هر اتم در زنجیره‌های اتمی Cr, Mn, Fe, Co, Ni

رفتار گشتاور مغناطیسی نانو سیم‌های (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) با ملاحظه‌ی جفت شدگی اسپین مدار بر حسب فاصله‌ی پیوندی در نمودار ۲ و رفتار گشتاور مغناطیسی به بازی هر اتم بر حسب انرژی کل سیستم در حالت‌های مختلف از فاصله‌ی پیوند در نمودار ۳ رسم شده است.



نمودار ۲. تغییر گشتاور مغناطیسی M بهازای هراتم بر حسب فاصله‌ی پیوندی d برای نانوسمیم‌های Cr, Mn, Fe, Co, Ni همچنین نمودار انرژی کل نانوسمیم‌ها بر حسب فواصل مختلف پیوندی نشان داده شده است.

چنان که در نمودار ۲ دیده می‌شود، تصحیح قطبیدگی اربیتالی بر گشتاور مغناطیسی نانوسيم‌های آهن، کبالت، منگنز و کروم بسیار ناچیز و تنها در مورد نیکل محسوس‌تر است. در جدول ۱ تصحیح اثر جفت شدگی اسپن-مدار بر گشتاور مغناطیسی هر اتم در زنجیره‌ی فرمغناطیس نیکل آورده شده است. با افزایش فاصله‌ی پیوندی بین اتمها در نانوسيم‌های یک بعدی، مقدار گشتاور مغناطیسی به مقدار اتمی نزدیک می‌شود.

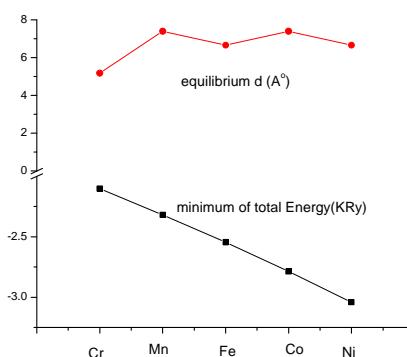


نمودار ۳. تغییر گشتاور مغناطیسی بر حسب انرژی کل سیستم. نقاط سیاه رنگ به روش FPLMTO-ASA بدست آمده است.

جدول ۱. نتایج حاصل از محاسبات **FPLMTO-ASA** و تصحیح اثر جفت شدگی اسپین-مدار (**Orbital Polarization**) بر گشتاور مغناطیسی به ازای هر اتم در زنجیره‌ی اتمی نیکل (**Correction**).

$d(\text{\AA})$	M_s	M_{s+opc}
۳/۷	۰/۰۰۰	۰/۰۰۱
۴/۴	۱/۱۰۲	۰/۷۴۸
۵/۱	۱/۹۵۲	۱/۷۲۳
۵/۹	۱/۹۸۵	۱/۹۰۳
۶/۶	۱/۶۸۲	۱/۶۷۸
۷/۴	۰/۸۲۲	۱/۶۱۷

در نمودار ۴ فاصله‌ی تعادلی نانوسيم‌ها و مينيمم انرژي کل سيسitem بر حسب كيلو ريدبرگ برای عناصر رسم شده است.



نمودار ۴. فاصله‌ی تعادلی نانوسيم‌ها و مينيمم انرژي کل سيسitem بر حسب كيلو ريدبرگ.

برداشت

در اين بررسى با استفاده از روش **FPLMTO-ASA** و تقریب **GGA** تغییرات گشتاور مغناطیسی زنجیره‌های خطی (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) مورد بررسی قرار گرفت. با افزایش فاصله‌ی پیوندی بین اتم‌ها مغناطیدگی اتم‌ها به سمت حالت تک اتم منزوی پیش می‌رود و در یک مقدار ثابت همگرا می‌شود. تصحیح اثر جفت شدگی اسپین-مدار بجز در مورد نیکل در سایر موارد بسیار ناچیز است. فاصله‌ی تعادلی که در آن انرژی کل سيسitem در مينيمم قرار می‌گيرد در همه‌ی موارد و در بازه‌ی مورد بررسی بین $7/4 \text{ \AA}$ تا $5/17 \text{ \AA}$ بدست آمد چنان که با افزایش عدد اتمی نمودار مينيمم انرژي نانوسيم‌ها نزولی است.

مرجع ها

- [1] Jen Bin Shi,Yu Jheng Chen,Ya Tin Lin, Chein Wu, Chih Jung Chen, Jer Yan Lin, Jpn.J.Appl.Phys. 45 9075 (2006)
- [2] M.zheng, L.Menon, H.Zeng,Y.Liu, S.Bandy Pathway, R.D.Kirby,D.J.sellmyer,Phys.Rev.B 62, 12 282 (2000)
- [3] S.M.York, F.M.Leibsk, Phys.Rev. B 64, 033411 (2001)

- [4] S.B.Suh, B H.Hong, P.Tarakeshwar, S.J.Youn,S.Jeong, K.S.Kim, Phys.Rev B 67,24 1402 (2003)
- [5] G.Rubio, N.Agraria, S.Vieria, Phys.Rev.Lett. 76, 2302 (1996)
- [6] M.Wimmer,H.Krakauer, M.Weinert ,A.J.Freeman,Phys.Rev. B 24, 864 (1981)
- [7] T.J.Yang, Y.J.Zhao, A.J.Freeman, Physica status solidi (b),vol. 241,1431 (2004)
- [8] J.Hong, R.Q.Wu, Phys.Rev B 67 ,20406 (2003)
- [9] Ying Jiu Jin, Zn Gee Kim, Jae Li Lee, J.Korean Phys.Soc.Vol. 43 No.6 (2003)
- [10] D.Spisak, J.Hafner,Phys.Rev.B 67 ,214416 (2003)
- [11] A.Y.Li, R.Q.Li, Z.Z.Zhu, Y.H.Wen, Physica E 30,138 (2005)
- [12] J.C.Tung, G.Y.Guo, Phys.Rev B 76, 094413 (2007)
- [13] O.K.Andersen, Phys.Rev.B 12, 3060 (1975)
- [14] S.Y.U.savrasov, D.Yu.Savrasov, Phys.Rev.B 46, 1218 (1992)
- [15]J.P.Perdew,K.Burke, Ernzerhof,Phys.Rev.Lett 77 ,3865 (1996)