

PACS: 71.15.Mb, 71.20.-b

TiCrSSe HİPOTETİK BİRLƏŞMƏNİN YARI-METALLİK FERROMAQNİT XASSƏLƏRİ

B.H.MEHDİYEV

*Azərbaycan MEA-nın Fizika İnstitutu
AZ 1143, Bakı, H.Cavid pr., 131
bachschi@yahoo.de*

Daxil olub: 07.01.2019
Çapa verilib: 01.03.2019

REFERAT

TiCrSSe hipotetik birləşmənin yarı-metallik xassələri ilkin prinsiplərdən sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsinə əsaslanan xəttləşdirilmiş lokal orbitallarla birləşdirilmiş müstəvi dalğalar (FP-LAPW+lo) metodu vasitəsilə tədqiq edilmişdir. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, TiCrSSe spin aşağı elektronlar üçün qadağan zonanın enerjisi (E_g) 0.12 eV olan yarı-metaldır (half-metal). Enerji spektrində spin aşağı halı üçün qadağan zolağın əmələ gəlməsinin səbəbi xalkogen atomlarının p-orbitallarının Cr atomunun d-orbitalları ilə güclü hibridləşməsinin nəticəsidir. Hesablamalar göstərir ki, tam maqnit momenti həcmə kifayət qədər geniş intervalında dəyişməsilə (-10%,10%) sabit tam ədəd qiymətini saxlayır.

Açar sözlər: hipotetik birləşmə, sıxlıq funksional metodu, spintronika

GİRİŞ

Materialşünaslıq elminin aktual vəzifələrindən biri 100% spin polarizasiyasına malik olan yeni yarı-metallik (half-metallic) materialların axtarışdır. Yarı-metallik materiallar metallə və yarımetallərin hibrididir və tam spinpolarizasiya olunmuş cərəyan təmin edə bilər. Belə ki, spinin bir istiqaməti üçün maddə özünü metallə kimi, əks istiqaməti üçün yarımetallə kimi aparır. Bu materiallar elektronikaya alternativ olacaq spintronikanın əsasını təşkil edə bilər [1,2].

Eksperimental axtarışların çətinliyi müqabilində əksər hallarda belə axtarışlar, kompüter mühəndisliyi nəzəri hesablamaları vasitəsilə aparılır.

TiCrSSe hipotetik birləşmənin yarı-metallik xassələrinin olması aşağıdakı mülahizələrə əsaslanır. Tam ədəd maqnit momenti Kübler tərəfindən mükəmməlləşdirilmiş Slater-Pauling qaydası ilə hesablanabilir [3]. Eger TiCrSSe birləşməsində Cr əvəzinə qeyri-maqnit 3 valentli atom dursaydı, yarımetallərdə olduğu kimi, 18 valent elektron 9 valent zonanı tamamilə doldurardı. Elementar özyə (e.ö.) düşən elektronların ümumi sayı isə TiCrSSe birləşməsində 21-dir. Slater-Pauling qaydasından maqnit momentinin qiyməti (21-

18)= $3\mu_B/e.o.$ olmalıdır. Digər tərəfdən, elektron spininin seçilmiş istiqaməti üçün 3 artıq elektron metallik keçiriciliyə səbəb olur. Əlbəttə gətirdiyimiz mülahizələr ilkin prinsiplərə əsaslanan hesablamalarla təsdiq olunmalıdır və bizim iş bu məsələyə həsr olunub.

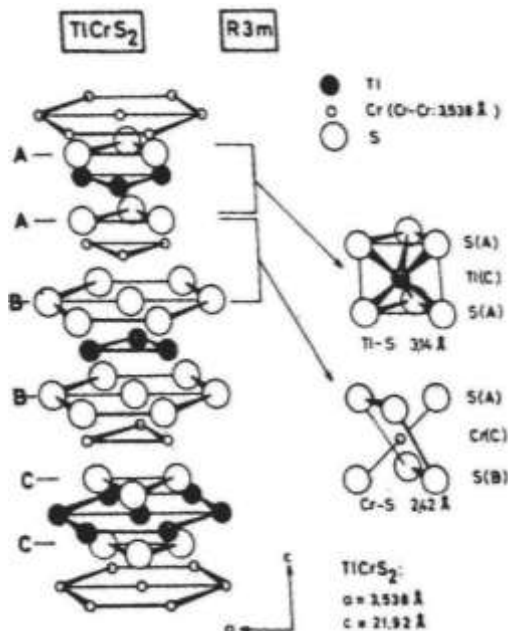
TiCrSSe KRİSTALIN QURULUŞU

Ədəbiyyatda TiCrSSe birləşməsi barəsində məlumat yoxdur. Biz bu maddəni $TiCrS_2$ [4,5] məlum birləşmədə S atomlarının yarısını Se ilə əvəzləməklə nəzəri olaraq təklif etmişik. $TiCrS_2$ birləşməsində Ti və Cr atomları S atomları ilə triqonal prizmatik əhatədə yerləşib [4] (Şəkil 1). $TiCrS_2$ romboedrik simmetriyaya malikdir, fəza qrupu $R\bar{3}m$, fəza qrupunun nömrəsi 160-dır. Qəfəs parametrləri: $a=3.538\text{Å}$, $c=21.92\text{Å}$ -dir. Atomların elementar özkədə tutduqları vəziyyətlər (Vitskof vəziyyətləri) 3(a): (0,0,z), (2/3,1/3,1/3+z), (1/3,2/3,2/3+z), burada $z(Ti)=1/6$, $z(Cr)=0$, $z(S)=\pm 0.39$.

HESABLAMA METODU

Qəfəs parametrlərinin və atomların elementar özkədə tutduqları vəziyyətlərin (Vitskof vəziyyətləri) optimizasiyası sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsinə [6,7] əsaslanan xəttləşdirilmiş lokal orbital-

lara birləşdirilmiş müstəvi dalğalar metodu vasitəsilə Wien2k proqramında [8] aparılmışdır. Həmin proqram vasitəsilə kristalın spinpolarizə olunmuş elektron quruluşu da hesablanmış.



Şəkil 1

TiCrS₂ kristalın quruluşu.

Elektron spinin hər iki istiqaməti üçün Kon-Şem bielektronlu tənliyi həll edilmişdir. Mübadilə-korrelyasiya potensialı ümumi qradient yaxınlaşmasında (GGA) [9] işində təklif edilmiş metodla hesablanmış. Relyativistik effektlər skalyar yaxınlaşmada spin-orbital qarşılıqlı təsiri nəzərə almadan hesablanmış. Kristalın quruluş parametrlərinin optimizasiyası Feynman-Hellmann qüvələrinin qiyməti 0.001Ry/Bohr azalana qədər aparılmışdır. Minimizasiya $c/a = \text{const}$ əlavə şərt daxilində aparılmışdır. Yığılma parametri $R_{mt} \cdot K_{max} = 7$ qəbul etmişik, burada R_{mt} atomları əhatə edən sferaların radiusunun ən kiçiyi, K_{max} müstəvi dalğaların ən böyük dalğa vektorudur, Atomları əhatə edən sferalar daxilində dalğa funksiyasının sıraya ayrılmasında $l_{max} = 10$ qəbul edilmişdir. Brilluyen zonası daxilində inteqrallama tetraedr metodu [10] ilə 1000 nöqtədə aparılmışdır. Atomları əhatə edən sferaların radiusları uyğun olaraq Ti, Cr, S, və Se üçün $R_{mt} = 2.5, 2.4, 2.06$ və 2.37 Bohr seçilmişdir. Valent elektronların hallarını atomların dərin təbəqələrindən ayıran enerjini $6.0Ry$ götürmüşük. Cr atomunun düyünlərində lokallaşmış 3d-elektronlar

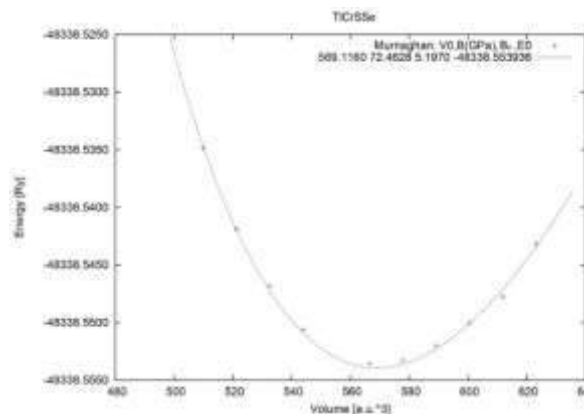
üçün Habbard potensialının [11] qiymətini $U = 2.7eV$ qəbul etmişik. TiCrS₂ kristalının, nəzəri hesablamalardan alınmış, qəfəs parametrləri və atomların Vitskof vəziyyətləri belədir: $a = 3.6623\text{Å}$, $c = 2.4448\text{Å}$, $z(\text{Ti}) = 0.1547$, $z(\text{S}) = 0.3813$, $z(\text{Se}) = 0.6036$.

NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

Şəkil 2-də TiCrS₂ birləşməsinin tam enerjisinin elementar özəyin həcmindən asılılığı verilmişdir. Qırıq xəttlə, hesablanmış nəticələrə uyğun, Murnaqaan hal tənliyindən [12]

$$E_{\text{tot}}(V) = E_{\text{tot}}(V_0) + \left(\frac{BV}{B_P(B_P-1)} \right) \times \left(B_P(1 - V_0/V) + \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B_P} - 1 \right) \quad (1)$$

alınan əyri göstərilmişdir. Əyrinin minimumu sıfır təzyiq və temperaturda tarazlıq halı üçün həcmi və həcm elastiklik modulunun qiymətlərini təyin edir. Burada V_0 tarazlıq halda həcm, $E_{\text{tot}}(V_0)$ - tarazlıq enerjisi, B - həcm elastiklik modulu, B_P - həcm elastiklik modulunun təzyiqə görə biribci tərtib törəməsidir.

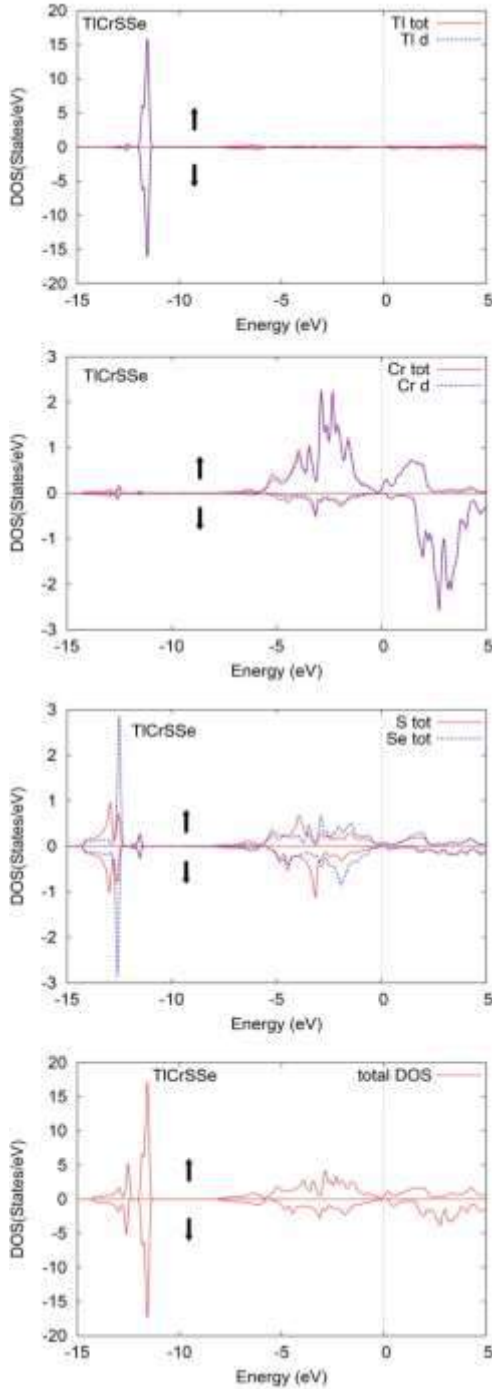


Şəkil 2

TiCrS₂ birləşməsinin tam enerjisinin elementar özəyin həcmindən asılılığı.

Şəkil 3-də TiCrS₂-nin tam və ayrılıqda atom orbitalları üçün spinpolarizə olunmuş hal sıxlığı göstərilmişdir. Spin yuxarı istiqaməti üçün hal sıxlığı Fermi sərhəddə yaxınlığında sıfırdan fərqlidir, deməli spinin bu istiqaməti üçün kristal metallik xassəyə malikdir. Spin aşağı istiqaməti üçün isə Hol sıxlığından göründüyü kimi Fermi

sərhəddi yaxınlığında eni təxminən 0.12eV olan qadağan zolaq var.



Şəkil 3

TiCrSse-nin tam və ayrılıqda atom orbitalları üçün spinpolarizə olunmuş hal sıxlığı.

Beləliklə, TiCrSse birləşməsi əsl yarı-metallik ferromagnetikdir. Bunu Fermi səviyyə yaxınlığında spin polyarizasiyanın hesablanması da təsdiq

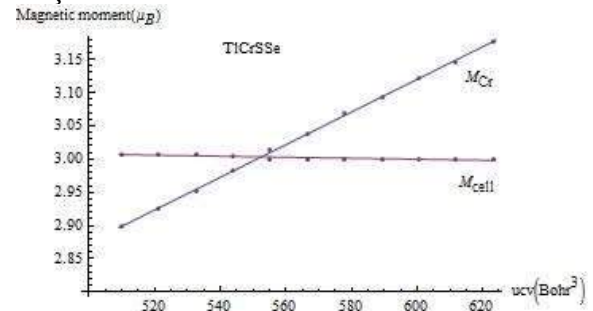
edir. Ferromagnet maddə üçün spin polyarizasiyası aşağıdakı düstür vasitəsilə hesablanır

$$P = \frac{N\uparrow(E_F) - N\downarrow(E_F)}{N\uparrow(E_F) + N\downarrow(E_F)}, \quad (2)$$

burada, $N\uparrow(E_F)$ və $N\downarrow(E_F)$, uyğun olaraq spin yuxarı və spin aşağı halları üçün elektronların Fermi səviyyəsində hal sıxlığıdır. Polyarizasiyanın hesablanmış qiyməti 100%-dir (Cədvəl 1).

Həmin cədvəldə elementar özəyin tam maqnit momenti, atomların maqnit momentləri və atomlararası boşluqlara düşən maqnit momenti göstərilib. Tam momentə ən çox Cr atomu əlavə verir. Bunun səbəbi mübadilə enerjisinin qiymətinin Cr atomu üçün böyük olmasıdır. Ti və xalkogen atomları isə tam momentə kiçik əlavə verir. Tam momentin qiymətinin tam ədəd ($3\mu_B/e.o.$) və spin polyarizasiyanın 100% olması TiCrSse kristalının yarı-metallik ferromagnet olmasını birmənalı təsdiqləyir. Enerji spektrində spin aşağı istiqaməti halı üçün qadağan zolağın əmələ gəlməsinin səbəbi xalkogen atomlarının p-orbitallarının Cr atomunun d-orbitalları ilə güclü hibridləşməsinin nəticəsidir [13,14].

Quruluş parametrlərinin dəyişməsi kristalların elektron xassələrinə güclü təsir edir. Buna görə TiCrSse kristalının yarı-metallik xassəsinə təzyiq altında elementar özəyin həcmindən dəyişməsinin necə təsir edəcəyini öyrənmək vacibdir. Şəkil 4-də elementar özəyin və Cr atomunun maqnit momentinin elementar özəyin həcmindən asılılığı göstərilmişdir.



Şəkil 4

Elementar özəyin və Cr atomunun maqnit momentinin elementar özəyin həcmindən asılılığı.

Şəkil 4-dən görünür ki, elementar özəyin momenti özünün tam ədədi qiyməti həcm (-10%, +10%) intervalında dəyişməsilə sabit qalır. Cr atomunun maqnit momenti isə həcm artması

ilə artır. Buna səbəb, atomlararası məsafələrin artması ilə hibridləşmənin azalması və d-halların sər-

bəst atomlardakinə yaxınlaşmasıdır.

Cədvəl 1

Spin maqnit momentləri

Birləşmə	M_{int}	M_{T1}	M_{Cr}	M_{S1}	M_{S2}	M_{cell}	P
TiCrSSe	0.1351	-0.0002	3.0881	-0.0867	-0.1360	3.0001	100%

XÜLASƏ

İlkin prinsiplərdən TiCrSSe hipotetik birləşmənin maqnit və elektron xassələri nəzəri olaraq öyrənilib. Hesablamalar göstərib ki, TiCrSSe birləşməsi spin-aşağı istiqaməti üçün qadagan zolağı 0.12eV olan yarı-metaldır. Qadağan zolağın yaranmasında xalkogen atomunun p-orbitallarının Cr

atomunun d-orbitalları ilə spin-aşağı istiqaməti üçün güclü hibridləşməsi mühüm rol oynayır. Tam maqnit momenti həcmə kifayət qədər geniş intervalda dəyişməsilə sabit tam ədəd ($3\mu_B/e.\ddot{o}.$) olaraq qalır. Hesab edirik ki, TiCrSSe birləşməsi spintronika üçün əhəmiyyət kəsb edə bilər.

1. J.de Boeck, W. van Roy, J.Das, V.Motsnyi, Z.Liu, L.Lagae, H.Boeve, K.Dessein, G.Borghs. *Technology and materials issues in semiconductor-based magnetoelectronics, Semiconductor Science and Technology*, **17** (2002) 342-354.
2. M.I.Katsnelson, V.Yu.Irkhin, L.Chioncel, A.I.Lichtenstein, R.A.deGroot. Half-metallic ferromagnets: *From band structure to many-body effects, Reviews of Modern Physics*, **80** (2008) 315-378.
3. J. Kübler. *First principle theory of metallic magnetism, Physica B*, **127** (1984) 257-263.
4. M.Rosenberg, A.Knulle, H.Sabrowsky, Chr.Platte. *Magnetic properties and structure of some ternary chromium chalcogenides with thallium and silver, J.Phys.Chem.Solids*, **43** (1982) 87-95.
5. R.G.Veliev, R.Z.Sadykhov, E.M.Kerimova, Yu.G.Asadov, A.I.Dzhabbarov. *Electrical and magnetic properties of layered semiconductor Ferromagnets TiCrS₂ and TiCrSe₂, Inorganic Materials*, **45** (2009) 474-479.
6. P.Hohenberg, W.Kohn. *Inhomogeneous Electron Gas, Phys. Rev.*, **136** (1964) B864.
7. W.Kohn, L.J.Sham. *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, Phys. Rev.*, **140** (1965) A1133-A1138.
8. P.Blaho, K.Schwarz, G.K.H.Madsen, D.Kvasnicka, J.Luitz. *WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Karlheinz Schwarz Techn. Universitaet Wien, Wien, Austria*, (2001) ISBN 3-9501031-1-2.
9. J.P.Perdew, K.Burke, M.Ernzerhof. *Generalized Gradient Approximation Made Simple, Phys. Rev. Lett.*, **77** (1996) 3865-3868.
10. P.E.Blöchl, O.Jepsen, O.K.Andersen. *Improved tetrahedron method for Brillouin-zone integrations, Phys. Rev., B* **49** (1994) 16223-16233.
11. V.I.Anisimov, F.Aryasetiawan, A.I.Lichtenstein. *First-principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: the LDA+U method, J. Phys. Condens. Matter.*, **9** (1997) 767-808.
12. F.D.Murnaghan, *The compressibility of media under extreme pressures, Proc.Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **30** (1944) 244-247.
13. H.C.Kandpal, G.H.Fecher, C.Felser. *Calculated electronic and magnetic properties of the half-metallic, transition metal based Heusler compounds, J. Phys. D: Appl. Phys.*, **40** (2007) 15071523.
14. F.Ahmadian, A.Boochani. *Half-metallic properties of the Co₂Ti_{1-x}Fe_xGa Heusler alloys and Co₂Ti_{0.5}Fe_{0.5}Ga (0 0 1) surface, Physica B*, **406** (2011) 2865-2870.

HALF-METALLIC PROPERTIES IN TiCrSSe HYPOTHETIC COMPOUNDS

B.H. MEHDİYEV

Half-metallic properties of hypothetical TiCrSSe have been investigated by first principles all-electron full-potential linearized augmented plane wave plus local orbital (FP-LAPW+lo) method based on density functional theory (DFT). The results of calculations show that TiCrSSe is half-metal with energy gap (E_g) 0.12 eV for spin-down channel. Strong hybridization of p-state of chalcogen and d-state of Cr leads to bonding and antibonding states and subsequently to the appearance of a gap in spin-down channel of TiCrSSe. The present calculations have revealed that total magnetic moment keeps its integer value on a relatively wide range of changes in volume (-10%,10%).

ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГИПОТЕТИЧЕСКОГО КРИСТАЛЛА TiCrSSe

Б.Г.МЕХТИЕВ

Полуметаллические ферромагнитные свойства гипотетического кристалла TiCrSSe были исследованы из первых принципов полнопотенциальным линейризованным методом присоединенных плоских волн плюс локальные орбитали (FP-LAPW+lo), основанным на теории функционала плотности. Результаты расчетов показывают, что TiCrSSe является полуметаллическим ферромагнитом с энергетической щелью (E_g) 0,12эВ для электронов со спином вниз. Сильная гибридизация p-состояния халькогена и d-состояния Cr приводит к связывающим и антисвязывающим состояниям, а затем к появлению щели в спин-вниз канале TiCrSSe. Расчеты показали, что полный магнитный момент сохраняет свое целочисленное значение в относительно широком диапазоне изменений объема (-10%, 10%).