اثر جانشانی هالوژن ها بر روی خواص الکترونی و مغناطیسی تک لایه دی یدید کروم

فراهانی،زینب ؛رضایی رکن آبادی، محمود؛ مدرسی،محسن

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد

مقدمه

مغناطیس در ابعاد پایین در توسعه پژوهش های فیزیکی از دو دیدگاه کوانتومی و کاربردهای اسپینترونیکی نقش مهمی ایفا می کند. از لحاظ نظری، براساس نظریه مرمین–واگنر ایجاد مغناطش خود به خود در مدل هایزنبرگ همسانگرد در مواد با ابعاد پایین (d≤2) و در دمای محدود امکان ندارد.[1]

تک لایه دی یدید کروم با ساختار شبکه هگزاگونال، به دلیل شباهت به دی کالکوژن های فلزات واسطه، دارای دو فاز $1T$ و $2H$ است.[2]

اخیراً لانگ پنگ و همکارانش توانستند فیلم های CrI_2 را در فاز $1T$ به صورت تجربی و با روش برآرایی پرتو مولکولی بر روی یک بستر $6H-SiC(0001)$ رشد دهند.[3]

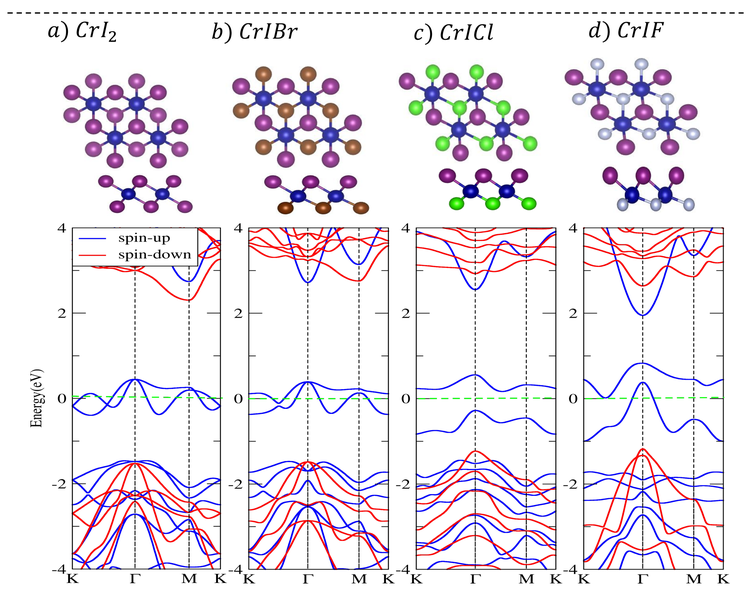
پیگن و همکارانش توانستند با رشد همبافته CrI_3 بر روی بستر طلا و با باز پخت نمونه تا دمای ٤٥٢ کلوین، ساختار CrI_2 را کشف کنند.[44] در کنار محاسبات نظری زیادی که بر روی تک لایه CrI_3 انجام شده است، تحقیقات نظری بر روی تک لایه CrI_2 ناشناخته است.

روش

محاسبات در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو و شبه پتانسیل فوق نرم $(USPP)$ انجام گرفته است. برای تابع تبادلی–همبستگی از تقریب شیب تعمیم یافته جامدات $(GGA+PBESOL)$ استفاده شده است. انرژی قطع تابع موج $95Ry$ و انتگرال گیری بر روی منطقه اول بریلوئن به روش منخورست–پک و با مش‌بندی ۱×۱۸×۱۸ انجام شده است. برای در نظر گرفتن اثرات همبستگی الکترونی قوی،روش $DFT+U$ با پارامتر هابارد $U=3eV$ لحاظ شده است.

$CrIX$	a (Å)	l_{Cr_X} (Å)	l_{I_X} (Å)	M (μ_B)	J (meV)	Δ (meV)	T_c (K)
CrI_2	4.00	2.81	3.95	3.51	1.179	0.46	86.6
$CrIBr$	3.97	2.68	3.85	3.80	7.99	−3.99	$In-plane$
$CrICl$	4.21	2.42	3.99	3.91	1.05	0.01	18
$CrIF$	3.71	1.98	3.36	3.31	1.73	0.48	113

پارامترها به ترتیب: a ثابت شبکه ، l_{Cr_X} طول پیوند کروم و اتم هالوژن ، l_{I_X} طول پیوند اتم ید و اتم هالوژن، M مغناطش اتم کروم، J پارامتر تبادلی، Δ انرژی ناهمسانگردی مغناطیس، T_c دمای کوری.



ساختار شبکه و ساختار نواری دی هالیدهای کروم ید (اتم کروم با رنگ آبی –اتم ید با رنگ بنفش–اتم فلوئور با رنگ خاکستری–اتم کلر با رنگ سبز – اتم برم با رنگ قهوه ای مشخص شده است.)

نتایج

با محاسبه $(E_{ex}=E^{AFM}-E^{FM})$، حالت پایه تمام دی هالیدهای کروم ید فرومغناطیس است.

با بررسی ساختار نواری دریافتیم، تک لایه های CrI_2،$CrIBr$ و $CrIF$ دارای رفتار شبه فلزی و تک لایه $CrICl$ دارای رفتار نیمه رسانایی است.

با محاسبه انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی، تک لایه های $CrIF$، $CrICl$ و CrI_2 دارای ممان های مغناطیسی عمود بر صفحه و $CrIBr$، دارای ممان های مغناطیسی درون صفحه می باشند. براساس قضیه مرمین–واگنر و درجه آزادی درون صفحه ای برای این ممان ها، در تک لایه $CrIBr$ امکان ایجاد مغناطش بلندبرد و در دمای $(T>0k)$ وجود ندارد.

برای سه ماده باقیمانده دمای کوری را با استفاده از مدل هایزنبرگ و تقریب فاز تصادفی محاسبه می کنیم.[5]

تحلیل نتایج

براساس نتایج ما، با جانشانی هالوژن ها امکان تغییر جهت محور آسان مغناطش و تغییر دمای کوری برای تک لایه دی یدید کروم وجود دارد.

مراجع

[1] Memarzadeh, Sara, et al. "Role of charge doping and strain in the stabilization of in-plane ferromagnetism in monolayer at room temperature." 2D Materials 8.3 (2021): 035022.

[2] Huang, Pu, et al. "Recent advances in two-dimensional ferromagnetism: materials synthesis, physical properties and device applications." Nanoscale 12.4 (2020): 2309-2327.

[3] Peng, Lang, et al. "Mott phase in a van der Waals transition-metal halide at single-layer limit." *Physical Review Research* 2.2 (2020): 023264

[4] Li, Peigen, et al. "Single-layer CrI_3 grown by molecular beam epitaxy." Science Bulletin 65.13 (2020): 1064-1071..

[5]Modarresi, Mohsen, et al. "Lateral spin valve based on the two-dimensional Cr N/P/Cr N heterostructure."