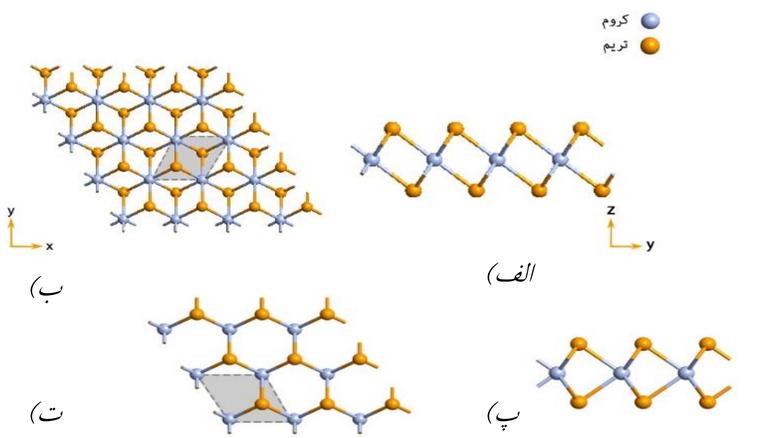
مقایسه نظم مغناطیسی در تک‌لایه $CrTe_2$ در فاز T و H

پورفرخ نویدهی ، مجتبی ؛ باقری تاجانی،میثم
دانشگاه گیلان ، گروه فیزیک

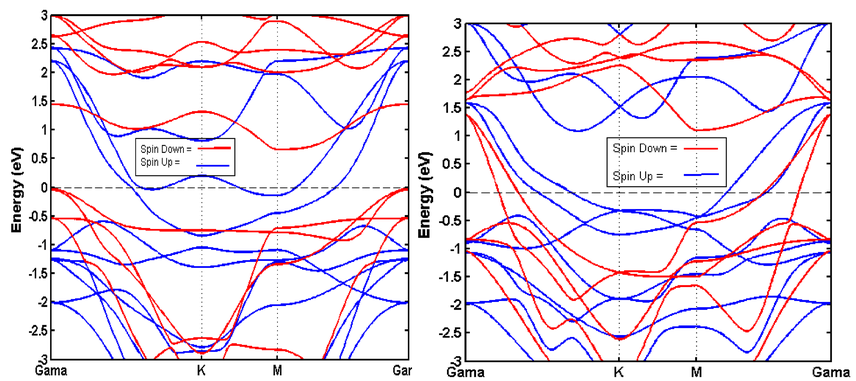
چکیده

اخیرا مادهی CrTe2 در آزمایشگاه سنتز شده است و در دو فاز متداول T و H دیده شده است. CrTe2 از دو اتم کالکوژن و فلز ساخته می‌شود. که عناصر واسطه عناصری با پر شوندگی اوربیتال d هستند که به همین دلیل می‌توانند از خود رفتار مغناطیسی نشان دهند. ساختار بلوری تک لایه CrTe2 دارای یک اتم کروم و یک جفت اتم تریم در سلول واحد می‌باشد. این تک‌لایه متشکل از سه لایه Te-Cr-Te است که در آن اتم های واسطه فلز کروم بین دو لایه از اتم‌های کالکوژن تریم محصور شده‌اند. شکل تک‌لایه CrTe2 در دو فاز H و T در زیر نشان داده شده است(شکل۱) در فاز T این تک‌لایه،اتم کروم در مرکز یک بلور سه وجهی توسط شش اتم تریم در وسط شش ضلعی قرار دارد،در واقع از نمای پهلو انباشت اتمی به صورت ABC است که A اتم کروم، B و C اتم تریم می‌باشد و اتم های فلزی به صورت هشت وجهی در همسایگی اتم‌های کالکوژن قرار گرفته‌اند. در فاز H آرایش اتم‌های کروم و تریم این تک‌لایه به صورت AB است، A اتم کروم و B اتم تریم می‌باشد، از نمای بالا همان شکل لانه زنبوری است. سلول واحد این تک لایه که لوزی رخ می باشد در هر دو فاز نشان داده شده است. مغناطش موضعی هر اتم کروم نیز در فاز T برابر ۳.۱۵ μB و برای اتم کروم در فاز H برابر ۲.۱۵ μB می‌باشد. درادامه ما نظم مغناطیسی این ماده را به کمک تئوری تابعی چگالی در دو فاز مورد نظر مورد بررسی قرار داده‌ایم.



شکل۱. پیکر بندی ساختاری تکلایه CrTe2 .
در فاز T از نمای الف) پهلو ب)بالا و در فاز H نمای پ) پهلو ت) بالا

شکل۲ ساختار نواری ماده را در دو فاز مذکور نشان می دهد. در فاز T اسپین‌های بالا به رنگ آبی و اسپین های پایین به رنگ قرمز تراز فرمی را قطعی کرده و این قطع شدن، حاکی از فلز بودن ماده دارد.اما در فاز H می‌بینیم که تنها یکی از نوارها(اسپین بالا) سطح فرمی را قطع کرده و نوار دیگر همچنان در نزدیکی سطح فرمی باقی مانده است؛ در واقع ماده در اینجا نیم فلز شده و گافی به میزان ۰.۶۹۲ الکترون ولت برای اسپین پایین بدست می‌آید. تفاوت رفتار مشاهده شده به میدان بلوری متفاوت در این دو فاز منتسب می شود. ساختار شبه اکتاهدرال احاطه کننده فلز واسطه توسط اتم های کالکوژن در فاز T اوربیتال d را به دو زیر تراز می شکافت، مادامی که ساختار هرم گونه ناشی از کالکوزن های احاطه کننده فلز وسطه اوربیتال d را به سه زیر تراز می شکافت و منجر به نیم فلز شدن ساختار می شود.



شکل۲ساختار نواری CrTe2 .در دو فاز T (راست) و فاز (H چپ)

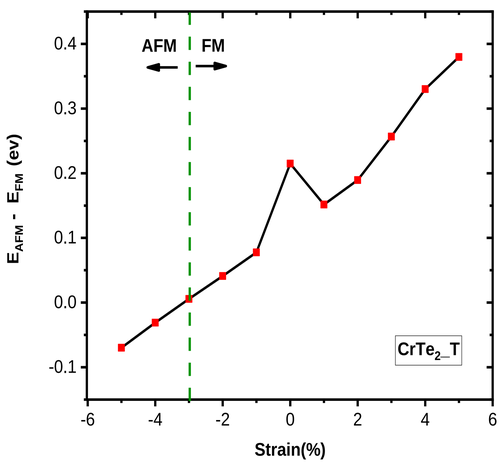
انرژی تبادلی به اختلاف انرژی در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیسی ماده اطلاق میشود. ما برای بدست آن یک مدل اسپینی کلاسیکی ساده بصورت :

$$H = -\frac{1}{2} j \sum_{<i.j>} s_i \cdot s_j$$

تعریف کردیم و با در نظر گرفتن دو آرایش فرومغناطیس و انتی فرومغناطیس ثابت تبادلی J را بدست آوردیم.مقدار به دست آمده برای این نتایج نشان از وجود دمای نیل برای فاز H و دمای کوری k ۱۱۶ برای فاز T این ماده دارد. پس از بررسی‌های فوق و بررسی ناهمسناگردی مغناطیسی به روی ساختار تک‌لایه CrTe2 نیز دریافتیم که محور آسان ما برای فاز T، درون صفحه‌ای و در راستای y بوده و برای فاز H، نیز درون صفحه‌ای اما در راستای x می‌باشد.

کرنش کششی دومحوره تک‌لایه CrTe2_T

در اینجا ابتدا ساختار بهینه شده‌ی فرومغناطیسی را تحت اعمال کرنش کششی در بازه‌ی عددی ۵ تا ۵-درصد بهینه سازی کرده و آن را در دو آرایش فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیسی مورد بررسی انرژی کل قرار می‌دهیم.شکل ۳ نمودار اختلاف انرژی بین حالات آنتی فرومغناطیس و فرومغناطیس بر حسب استرین را نشان می‌دهد. همانطور که پیداست حالت پایه‌ی ساختار تک‌لایه $CrTe_2$_T در استرین ۳- درصد تغییر ماهیت داده و بین دو حالت سوییچ می‌کند .



شکل۳. بررسی اثر استرین بر انرژی ساختار تک‌لایه $CrTe_2$_T

مراجع

[1] G. Özbal et al," Ballistic thermoelectric properties of monolayer semiconducting transition metal dichalcogenides and oxides",physics review B, 100, 085415(2019).

[2] H. Y. Lv et al," Strain-controlled switch between ferromagnetism and antiferromagnetism in 1T−CrX2 (X=Se, Te) monolayers",physics review B, 92, 214419(2015).

[3] Xingdan Sun et al," Room temperature ferromagnetism in ultra-thin van der Waals crystals of 1T-CrTe2",physics review B, 13, 3355-3363(2020).

26th Annual IASBS Meeting on
Condensed Matter Physics

بیست و ششمین گردهمایی فیزیک ماده چگال
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان