

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ



دانشگاه حکیم سبزواری  
دانشکده علوم پایه

پایان نامه جهت دریافت درجه کارشناسی ارشد فیزیک حالت جامد

## بررسی اثر فشار بر گشتاورهای مغناطیسی عناصر ترکیب $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$ با در نظر گرفتن جفت شدگی اسپین مدار

استاد راهنما:

دکتر حسین اصغر رهنمای علی آباد

استاد مشاور:

دکتر جواد باعدی

پژوهشگر:

سارا صباغ سبزواری

زمستان ۱۳۹۲



دانشگاه حکیم سبزواری

سوگند نامه دانش آموختگان دانشگاه تربیت معلم سبزواری

کزین برتر اندیشه بر نگذرد

به نام خداوند جان و خرد

اینک که به خواست آفریدگار پاک ، کوشش خویش و بهره گیری از دانش استادان و سرمایه های مادی و معنوی این مرز و بوم، توشه ای از دانش و خرد گردآورده ام، در پیشگاه خداوند بزرگ سوگند یاد می کنم که در به کارگیری دانش خویش، همواره بر راه راست و درست گام بردارم. خداوند بزرگ، شما شاهدان، دانشجویان و دیگر حاضران را به عنوان داورانی امین گواه می گیرم که از همه دانش و توان خود برای گسترش مرزهای دانش بهره گیرم و از هیچ کوششی برای تبدیل جهان به جایی بهتر برای زیستن، دریغ نورزم. پیمان می بندم که همواره کرامت انسانی را در نظر داشته باشم و هموعان خود را در هر زمان و مکان تا سر حد امکان یاری دهم. سوگند می خورم که در به کارگیری دانش خویش به کاری که با راه و رسم انسانی، آیین پرهیزگاری، شرافت و اصول اخلاقی برخاسته از ادیان بزرگ الهی، به ویژه دین مبین اسلام، مبادینت دارد دست نیازم. همچنین در سایه اصول جهان شمول انسانی و اسلامی، پیمان می بندم از هیچ کوششی برای آبادانی و سرافرازی میهن و هم میهنانم فروگذاری نکنم و خداوند بزرگ را به یاری طلبم تا همواره در پیشگاه او و در برابر وجدان بیدار خویش و ملت سرافراز ، بر این پیمان تا ابد استوار بمانم.

نام و نام خانوادگی وامضای دانشجو

سارا صباغ سبزواری

## تاییدیه ی صحت و اصالت نتایج

بسمه تعالی

اینجانب سارا صباغ سبزواری به شماره دانشجویی ۹۰۱۳۷۳۲۰۵۴ رشته فیزیک (حالت جامد) مقطع تحصیلی کارشناسی ارشد تأیید می‌نمایم که کلیه نتایج این پایان نامه حاصل کار اینجانب و بدون هرگونه دخل و تصرف و موارد نسخه برداری شده از آثار دیگران را با ذکر کامل مشخصات منبع ذکر کرده ام در صورت اثبات خلاف مندرجات فوق به تشخیص دانشگاه مطابق با ضوابط و مقررات حاکم (قانون حمایت از حقوق مولفان و مصنفان . قانون ترجمه و تکثیر کتب و نشریات و آثار صوتی ضوابط و مقررات آموزشی پژوهشی و انضباطی ...) با اینجانب رفتار خواهد شد. و حق هرگونه اعتراض در خصوص احقاق حقوق مکتسب و تشخیص و تعیین تخلف و مجازات را از خویش سلب می‌نمایم . در ضمن مسئولیت هرگونه پاسخگویی به اشخاص اعم از حقیقی و حقوقی و مراجع ذی صلاح (اعم از اداری و قضایی) به عهده اینجانب خواهد بود و دانشگاه هیچگونه مسئولیتی در این خصوص نخواهد داشت .

نام و نام خانوادگی :

تاریخ و امضاء:

## مجوز بهره برداری از پایان نامه

بهره برداری از این پایان نامه در چهار چوب مقررات کتابخانه و با توجه به محدودیتی که توسط استاد راهنما به شرح زیر تعیین می شود بلامانع است:

- بهره برداری از این پایان نامه برای همگان بلامانع است
- بهره برداری از این پایان نامه با اخذ مجوز از استاد راهنما بلامانع است
- بهره برداری از این پایان نامه تا تاریخ ..... ممنوع است .

استاد راهنما : استاد راهنمای اول

تاریخ :

امضاء:

تقدیم به:

پدر، مادر و همسر

اینک که پشتوانه حمایت‌های مشفقانه پدر و مادر مهربانم و صبوریهای همسر عزیزم، به مراتبی از تحصیل و اکتساب علم در حد بضاعت نائل گشتم، به پاس مساعی بی بدیلشان، این پروژه را تقدیم میدارم. همواره محتاج دعای خیر والدین و حمایت‌های بی دریغ همسر بوده، هستم و خواهم بود.

## تقدیر و تشکر:

شکر و سپاس خدای را که توفیق تحصیل در راه علم و دانش را به بنده عطا فرمود، تقدیم می‌دارم این مقال را محضر استاد راهنما جناب آقای دکتر رهنما مشاور محترم جناب آقای دکتر باعدی و داور محترم جناب آقای دکتر آزادگان که حاصل تلمذ حقیر و صد البته ارشادات و هدایتهای مشفقانه شما بزرگواران است. به امید آنکه گوشه ای از زحمات و تلاشهای شما گرامیان را پاس داشته باشم.



دانشگاه حکیم سبزواری

## فرم چکیده پایان‌نامه‌ی دوره‌ی تحصیلات تکمیلی

مدیریت تحصیلات تکمیلی

ش دانشجویی: ۹۰۱۳۷۳۲۰۵۴	نام: سارا	نام خانوادگی: دانشجو: صباغ سبزواری
استاد مشاور: دکتر جواد باعدی		استاد راهنما: دکتر حسین اصغر رهنمای علی‌آباد
گرایش: حالت جامد	رشته: فیزیک	دانشکده: علوم پایه
تعداد صفحات: ۹۰	تاریخ دفاع: ۹۲/۱۱/۲۳	مقطع: کارشناسی ارشد

عنوان پایان‌نامه: بررسی اثر فشار بر گشتاورهای مغناطیسی عناصر ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  با در نظر گرفتن جفت شدگی اسپین مدار

کلیدواژه‌ها: ساختار نواری، چگالی حالت، قاعده ی جمع نوسانگر، گشتاور مغناطیسی.

### چکیده

در این پایان‌نامه خواص مغناطیسی، الکترونیکی و اپتیکی ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  در سه تقریب GGA، GGA+U، GGA+U+SO مطالعه شده است. خواص الکترونیکی شامل: ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی را با استفاده از سه تقریب محاسبه و با یکدیگر مقایسه گردید. نتایج بدست آمده نشان می‌دهند که این ترکیب گاف نواری غیر مستقیم در حالت اسپین بالا و پایین دارد که هرچه از تقریب GGA دور می‌شویم (با در نظر گرفتن برهم کنش اسپین-مدار) گاف نواری افزایش می‌یابد. نتایج اپتیکی نشان می‌دهد، با در نظر گرفتن برهم کنش اسپین مدار با تقریب شیب تعمیم یافته از شفافیت ترکیب کاسته می‌شود، که این بیشینه در دو راستای X و Z در انرژی‌های ۳/۵۲ eV و ۳/۷ eV اتفاق می‌افتند.

امضای استاد راهنما



## فهرست مطالب

صفحه

عنوان

### فصل اول: مروری بر ویژگی های ساختار $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$

۱-۱	مقدمه	۲
۲-۱	مواد فروالکترونیک	۳
۳-۱	مواد فروالاستیک	۴
۴-۱	مواد مولتی فرویس	۴
۵-۱	تقسیم بندی مولتی فرویس ها	۵
۱-۵-۱	مولتی فرویس های نوع یک	۵
۲-۵-۱	مولتی فرویس های نوع دو	۵
۶-۱	ویژگی های ساختاری $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$	۷
۷-۱	پیوند الکترومغناطیسی	۹

### فصل دوم: روش انجام محاسبات

۱۲	بخش اول: روش های محاسبه ی ساختار نواری	۱۲
۱-۲	مقدمه	۱۲
۲-۲	سیستم های بس ذره ای	۱۲
۳-۲	تقریب بورن - اپن هایمر	۱۳
۴-۲	تقریب هارتری و هارتری- فوک	۱۵
۵-۲	مدل توماس- فرمی	۱۶
۶-۲	نظریه ی تابعی چگالی	۱۶
۷-۲	قضایای هوهنبرگ- کوهن	۱۷
۸-۲	معادلات کوهن- شم	۱۸
۹-۲	تابع همبستگی- تبادل	۱۹
۱۰-۲	تقریب چگالی موضعی (LDA)	۱۹
۱۱-۲	تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)	۲۰
۱۲-۲	برهم کنش اسپین- مدار (SOC)	۲۰
۱۳-۲	میدان مداری (LDA+U)	۲۲
۲۵	بخش دوم: مقدمه ای بر خواص اپتیکی مواد	۲۵
۱۴-۲	مقدمه	۲۵
۱۵-۲	تابع دی الکترونیک	۲۵

- ۲-۱۶ روابط کرامرز- کرونيک ..... ۲۸
- ۲-۱۷ طيف اتلاف انرژي الکترون ..... ۲۸

### فصل سوم: نتايج محاسبات الکترونيکی

- ۳-۱ مقدمه ..... ۳۱
- ۳-۲ روش انجام محاسبات ..... ۳۱
- ۳-۳ بهينه سازي پارامترهاي شبکه ..... ۳۲
- ۳-۴ بررسي خواص الکترونيکی  $Ca_3CoMnO_6$  با استفاده از تقريب GGA ..... ۳۴
- ۳-۴-۱ چگالي حالت هاي  $Ca_3CoMnO_6$  ..... ۳۴
- ۳-۴-۲ ساختار نواری انرژي  $Ca_3CoMnO_6$  ..... ۳۷
- ۳-۵ بررسي خواص الکترونيکی  $Ca_3CoMnO_6$  با استفاده از تقريب GGA +U ..... ۴۰
- ۳-۵-۱ چگالي حالت هاي  $Ca_3CoMnO_6$  ..... ۴۰
- ۳-۵-۲ ساختار نواری انرژي  $Ca_3CoMnO_6$  ..... ۴۲
- ۳-۶ بررسي خواص الکترونيکی  $Ca_3CoMnO_6$  با استفاده از تقريب GGA +U +SO ..... ۴۴
- ۳-۶-۱ چگالي حالت هاي  $Ca_3CoMnO_6$  ..... ۴۴
- ۳-۶-۲ ساختار نواری انرژي  $Ca_3CoMnO_6$  ..... ۴۶

### فصل چهارم نتايج محاسبات اپتيکی

- ۴-۱ مقدمه ..... ۵۰
- ۴-۲ بررسي خواص اپتيکی ترکيب  $Ca_3CoMnO_6$  با استفاده از تقريب GGA ..... ۵۰
- ۴-۲-۱ تابع دي الکتريک ..... ۵۰
- ۴-۲-۲ ضريب شکست ..... ۵۳
- ۴-۲-۳ ضريب جذب ..... ۵۵
- ۴-۲-۴ بازتابندگی ..... ۵۵
- ۴-۲-۵ هدايت اپتيکی ..... ۵۶
- ۴-۲-۶ طيف اتلاف انرژي الکترون ..... ۵۷
- ۴-۲-۷ شدت انتقال بين نواری ..... ۵۸
- ۴-۲-۸ قاعده جمع نوسانگر ..... ۵۹
- ۴-۳ بررسي خواص اپتيکی ترکيب  $Ca_3CoMnO_6$  با استفاده از تقريب GGA+ U ..... ۶۰
- ۴-۳-۱ مقدمه ..... ۶۰
- ۴-۳-۲ تابع دي الکتريک ..... ۶۰
- ۴-۳-۳ ضريب شکست ..... ۶۲
- ۴-۳-۴ ضريب جذب ..... ۶۳

۶۴	..... ۵-۳-۴ بازتابندگی
۶۴	..... ۶-۳-۴ هدایت اپتیکی
۶۵	..... ۷-۳-۴ طیف اتلاف انرژی الکترون
۶۶	..... ۸-۳-۴ شدت انتقال بین نواری
۶۷	..... ۹-۳-۴ قاعده جمع نوسانگر
۶۷	..... ۴-۴ بررسی خواص اپتیکی ترکیب $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$ با استفاده از تقریب $\text{GGA} + \text{U} + \text{SO}$
۶۷	..... ۱-۴-۴ مقدمه
۶۸	..... ۲-۴-۴ تابع دی الکترونیک
۶۹	..... ۳-۴-۴ ضریب شکست
۷۰	..... ۴-۴-۴ ضریب جذب
۷۱	..... ۵-۴-۴ بازتابندگی
۷۱	..... ۶-۴-۴ هدایت اپتیکی
۷۲	..... ۷-۴-۴ طیف اتلاف انرژی الکترون
۷۳	..... ۸-۴-۴ شدت انتقال بین نواری
۷۳	..... ۹-۴-۴ قاعده جمع نوسانگر

### فصل پنجم: نتایج محاسبات خواص مغناطیسی و اثر فشار بر آن

۷۶	..... ۱-۵ مقدمه
۷۶	..... ۲-۵ گشتاور دو قطبی مغناطیسی چیست؟
۷۸	..... ۳-۵ بررسی خواص مغناطیسی ترکیب $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$
۷۹	..... ۴-۵ اثر فشار برگشتاورهای مغناطیسی اتم های $\text{Mn}$ و $\text{Co}$
۷۹	..... ۴-۵ مقدمه
۷۹	..... ۲-۴-۵ رفتار دو اتم $\text{Co}, \text{Mn}$ با استفاده از رهیافت $\text{GGA}$
۸۱	..... ۳-۴-۵ رفتار دو اتم $\text{Co}, \text{Mn}$ با استفاده از رهیافت $\text{GGA} + \text{U}$
۸۳	..... ۴-۴-۵ رفتار دو اتم $\text{Co}, \text{Mn}$ با استفاده از رهیافت $\text{GGA} + \text{U} + \text{SOC}$
۸۶	..... نتیجه گیری
۸۷	..... منابع و مأخذ

## فهرست جداول

صفحه

عنوان

۳۲.....	جدول (۱-۳): شعاع کره‌های مافین تین (برحسب a.u) در گروه فضایی ۱۶۷ (R-3C).....
۳۳.....	جدول (۲-۳): ثابت‌های شبکه (برحسب Å) برای ترکیب $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$ .....
۵۲.....	جدول (۱-۴): تابع دی‌الکتریک استاتیک و ضریب شکست استاتیک $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$ .....
۶۱.....	جدول (۲-۴): تابع دی‌الکتریک استاتیک و ضریب شکست استاتیک $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$ .....
۶۸.....	جدول (۳-۴): تابع دی‌الکتریک استاتیک و ضریب شکست استاتیک ترکیب $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$ .....
۷۹.....	جدول (۱-۵): گشتاور مغناطیسی کل ( $\mu_B$ ) و سهم تک تک اتم‌های ترکیب $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$ .....

## فهرست اشکال

صفحه

عنوان

- شکل (۱-۱): حلقه پسماند دی الکتریک در یک فروالکتریک ..... ۳
- شکل (۲-۱): نحوه شکل گیری مولتی فرویس ها ..... ۴
- شکل (۳-۱): مکانیسم هندسی تولید پولاریزاسیون در  $Y\text{MnO}_3$  هگزاگونال ..... ۶
- شکل (۴-۱): گونه‌ی مغناطیس چرخشی به عنوان مکانیسمی برای فروالکتریسیته ..... ۶
- شکل (۵-۱): نظم مغناطیسی واقع شده در یک خط به عنوان مکانیسمی برای فروالکتریسیته ..... ۷
- شکل (۶-۱): نمایش سلول واحد  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  در طول محور c ..... ۸
- شکل (۷-۱): گستره‌ی زنجیره‌ی  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  در حالت پایه ..... ۹
- شکل (۸-۱): برهم کنش میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی منجر به ایجاد مولتی فرویس ها می شود ..... ۱۰
- شکل (۱-۳): نمودار تغییرات انرژی بر حسب تغییرات درصد  $\frac{c}{a}$  برای ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۳۳
- شکل (۲-۳): چگالی حالت‌های کلی  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  با تقریب GGA در حالت ..... ۳۵
- شکل (۳-۳): چگالی حالت‌های کلی و جزئی  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  با تقریب GGA در حالت ..... ۳۶
- شکل (۴-۳): مسیر استفاده شده برای محاسبه ساختار نواری در منطقه اول بریلوئن با تعارن بالا برای ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۳۷
- شکل (۵-۳): ساختارهای نواری  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  با تقریب GGA ..... ۳۸
- شکل (۶-۳): چگالی حالت‌های کلی و ساختار نواری  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  با تقریب GGA در حالت اسپین بالا ..... ۳۹
- شکل (۷-۳): چگالی حالت‌های کلی و ساختار نواری  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  با تقریب GGA در حالت اسپین پایین ..... ۳۹
- شکل (۸-۳): چگالی حالت‌های کلی  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  در حالت با تقریب GGA+U ..... ۴۰
- شکل (۹-۳): چگالی حالت‌های کلی و جزئی  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  با تقریب GGA+U ..... ۴۲
- شکل (۱۰-۳): ساختارهای نواری  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  با تقریب GGA+U ..... ۴۳
- شکل (۱۱-۳): چگالی حالت‌های کلی و ساختار نواری  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  با تقریب GGA+U در حالت اسپین بالا ..... ۴۳
- شکل (۱۲-۳): چگالی حالت‌های کلی و ساختار نواری  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  با تقریب GGA+U در حالت اسپین پایین ..... ۴۴
- شکل (۱۳-۳): چگالی حالت‌های کلی  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  با تقریب GGA+U+SO ..... ۴۵
- شکل (۱۴-۳): چگالی حالت‌های کلی و جزئی  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  با تقریب GGA+U+SO ..... ۴۶
- شکل (۱۵-۳): ساختارهای نواری  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  با تقریب GGA+U+SO ..... ۴۷
- شکل (۱۶-۳): چگالی حالت‌های کلی و ساختار نواری  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  با تقریب GGA+U+SO ..... ۴۸
- شکل (۱۷-۳): چگالی حالت‌های کلی و ساختار نواری  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  با تقریب GGA+U+SO ..... ۴۸
- شکل (۱-۴): قسمت حقیقی تابع دی الکتریک ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۵۲
- شکل (۲-۴): قسمت موهومی تابع دی الکتریک ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۵۳
- شکل (۳-۴): نمودار ضریب شکست ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۵۴
- شکل (۴-۴): نمودار جذب اپتیکی ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۵۵

- شکل (۴-۵): نمودار بازتابندگی ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۵۶
- شکل (۴-۶): نمودار هدایت اپتیکی ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۵۷
- شکل (۴-۷): طیف اتلاف انرژی الکترون ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۵۸
- شکل (۴-۸): شدت انتقال بین نواری ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۵۹
- شکل (۴-۹): تغییرات قاعده‌ی جمع نوسانگر ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۶۰
- شکل (۴-۱۰): قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۶۱
- شکل (۴-۱۱): قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۶۲
- شکل (۴-۱۲): نمودار ضریب شکست ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۶۳
- شکل (۴-۱۳): نمودار جذب اپتیکی ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۶۳
- شکل (۴-۱۴): نمودار بازتابندگی ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۶۴
- شکل (۴-۱۵): نمودار هدایت اپتیکی ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۶۵
- شکل (۴-۱۶): طیف اتلاف انرژی الکترون ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۶۶
- شکل (۴-۱۷): شدت انتقال بین نواری ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۶۶
- شکل (۴-۱۸): تغییرات قاعده‌ی جمع نوسانگر ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۶۷
- شکل (۴-۱۹): قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۶۸
- شکل (۴-۲۰): قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۶۹
- شکل (۴-۲۱): نمودار ضریب شکست ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۷۰
- شکل (۴-۲۲): نمودار جذب اپتیکی ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۷۰
- شکل (۴-۲۳): نمودار بازتابندگی ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۷۱
- شکل (۴-۲۴): نمودار هدایت اپتیکی ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۷۲
- شکل (۴-۲۵): طیف اتلاف انرژی الکترون ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۷۲
- شکل (۴-۲۶): شدت انتقال بین نواری ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۷۳
- شکل (۴-۲۷): تغییرات قاعده‌ی جمع نوسانگر ترکیب  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$  ..... ۷۴
- شکل (۵-۱): نمودار تغییرات گشتاور مغناطیسی اتم Co بر حسب فشار با استفاده از رهیافت GGA ..... ۸۰
- شکل (۵-۲): نمودار تغییرات گشتاور مغناطیسی اتم Mn بر حسب فشار با استفاده از رهیافت GGA ..... ۸۰
- شکل (۵-۳): نمودار تغییرات گشتاور مغناطیسی مابین دو اتم Co, Mn بر حسب فشار با استفاده از رهیافت GGA ..... ۸۰
- شکل (۵-۴): نمودار تغییرات گشتاور مغناطیسی اتم Co بر حسب فشار با استفاده از رهیافت GGA+U ..... ۸۲
- شکل (۵-۵): نمودار تغییرات گشتاور مغناطیسی اتم Mn بر حسب فشار با استفاده از رهیافت GGA+U ..... ۸۲
- شکل (۵-۶): نمودار تغییرات گشتاور مغناطیسی مابین دو اتم Co, Mn بر حسب فشار با استفاده از رهیافت GGA+U ..... ۸۲
- شکل (۵-۷): نمودار تغییرات گشتاور مغناطیسی اتم Co بر حسب فشار با استفاده از رهیافت GGA+U+SOC ..... ۸۳
- شکل (۵-۸): نمودار تغییرات گشتاور مغناطیسی اتم Mn بر حسب فشار با استفاده از رهیافت GGA+U+SOC ..... ۸۴
- شکل (۵-۹): نمودار تغییرات گشتاور مغناطیسی مابین دو اتم Co, Mn بر حسب فشار با استفاده از رهیافت GGA+U+SOC ..... ۸۴

## فصل اول

مروری برویژگی های ساختاری  $\text{Ca}_3\text{CoMnO}_6$

## ۱-۱ مقدمه

الکساندر نکام<sup>۱</sup> دانشمند انگلیسی نخستین فرد اروپایی بود که در سال ۵۶۶ خورشیدی (۱۱۸۷ میلادی) به شرح علم مغناطیس پرداخت. مغناطیس واژه‌ای است که برای نشان دادن پاسخ میکروسکوپی ماده به میدان مغناطیسی بکار می‌رود؛ و فاز مغناطیسی ماده را به چند دسته تقسیم‌بندی می‌کنند. برای نمونه شناخته‌شده‌ترین فاز مغناطیس، فرومغناطیس است. فرومغناطیسی مکانیزمی اساسی است که توسط آن مواد خاص (مانند آهن) فرم آهنربای دائم پیدا می‌کنند و یا به آهنربا جذب می‌شوند. در فیزیک، چندین نوع مختلف از خاصیت مغناطیسی وجود دارد. فرومغناطیسی قویترین نوع آن است و تنها نوعی است که آن قدر قوی است که در زندگی روزمره می‌توان آن‌ها را احساس کرد [۱]. اثر میدان بر برخی مواد قابل چشم‌پوشی است که آن‌ها را غیرمغناطیسی می‌نامند. آلومینیوم، مس، آب و گازها از این دسته‌اند. یک ماده می‌تواند چندین فاز (حالت) مغناطیسی را دارا باشد زیرا دما، فشار و شدت میدان بر فاز مغناطیسی تاثیرگذار هستند. دیامغناطیس<sup>۲</sup> ویژگی است که در آن، ماده پذیرفتاری مغناطیسی منفی (اما کوچک) دارد. مواد دیامغناطیس در واقع مخالف با میدان است. دیامغناطیس یک پدیده بسیار کلی است؛ زیرا تمام الکترونهای جفت شده، که شامل الکترونهای یک اتم می‌باشد، همیشه یک سهم ضعیفی را در واکنش مواد ایجاد خواهند کرد بنابراین، برای موادی که هر شکل دیگری از مغناطیس را نشان می‌دهند، (مثل فرومغناطیس یا پارامغناطیس)، دیامغناطیس به صورت کامل مقاومت ناپذیر است [۲]. پارامغناطیس<sup>۳</sup> ویژگی است که در آن، ماده پذیرفتاری-

<sup>1</sup> Alexander Nekam

<sup>2</sup> diamagnetic

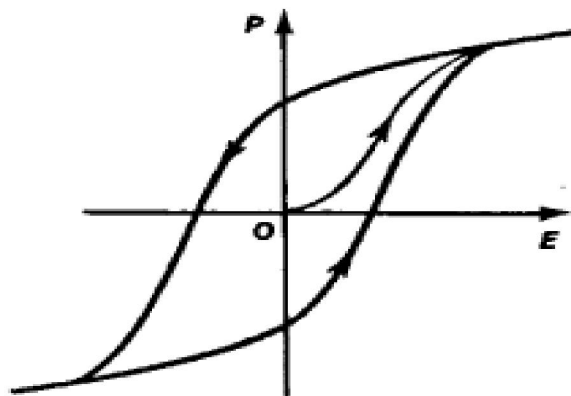
<sup>3</sup> Paramagnetic



مغناطیسی مثبت (اما کوچک) دارد و در نتیجه‌ی الکترونهای جفت نشده (همانند کیلات‌های گادولینیوم) باعث تشدید میدان مغناطیسی در محیط دور و اطراف می‌گردند. ماده فرومغناطیس<sup>۱</sup> مانند پارامغناطیس دارای الکترون جفت نشده است. ممان‌های مغناطیسی این مواد تمایل به موازی شدن با همدیگر و با میدان دارند. از این رو هنگامی که میدان بیرونی قطع شود ماده همچنان مغناطیسی می‌ماند. هر ماده فرومغناطیسی دمای کوری<sup>۲</sup>  $T_c$  خود را دارد که در بالاتر از آن ویژگی فرومغناطیسی‌اش را بدلیل افزایش انرژی گرمایی و بی‌نظمی از دست می‌دهد [۳].

### ۲-۱ مواد فرو الکتریک

فروالکتریک<sup>۳</sup> خاصیتی در مواد است که باعث می‌شود در سطح سلول واحد، به علت چینش منظم مولکول‌ها دو قطبی‌های الکتریکی دائمی به وجود بیاید، به نحوی که جهت آن‌ها با اعمال میدان الکتریکی خارجی قابل تنظیم باشد. مواد فروالکتریک زیرگروهی از پیروالکتریک‌ها هستند، با این تفاوت که جهت قطبش خودبه‌خودی در پیروالکتریک ساده با اعمال میدان الکتریکی معکوس نمی‌شود، اما در فروالکتریک این کار امکان‌پذیر است. بنابراین این بلور فروالکتریک می‌تواند با اعمال میدان تغییر یابد و همراه حلقه پسماند ظاهر می‌شود. همان‌طور که در شکل (۱-۱) نشان داده شده است P قطبش نمونه‌ی فروالکتریک و E شدت میدان الکتریکی است [۴].



شکل (۱-۱): حلقه پسماند دی‌الکتریک در یک فروالکتریک

<sup>1</sup> Ferromagnetic

<sup>2</sup> curi

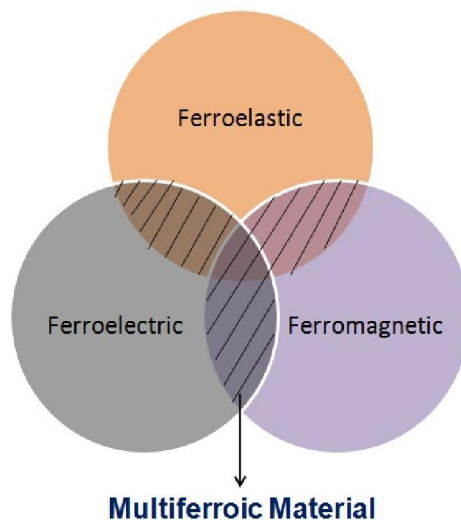
<sup>3</sup> ferroelectric

### ۳-۱ مواد فروالاستیک

ایجاد فشار در مواد فروالاستیک<sup>۱</sup> می‌تواند موجب یک تغییر خود به خود در جهت یا ساختار بلوری شود که می‌تواند دوباره به حالت اول باز گردد. یک ماده‌ی فرو دارای مناطقی است که توسط دیواره‌های محیط جدا شده‌اند، که یکی یا چند تا از ذرات داخل ماده در اثر این فشار در جهت‌های مختلف حرکت می‌کنند [۵].

### ۴-۱ مواد مولتی فرویس

مولتی فرویس‌ها دو یا چند ویژگی فرو بودن را در یک فاز از خود نشان می‌دهند ویژگی‌های فرو بودن شامل مشخصه‌های فروالکتریسیته، فرومغناطیس و فروالاستیک می‌باشد [۵]. مواد فروالاستیک حالت ارتجاعی در مقابل فشار از خود نشان می‌دهند و می‌توانند به شکل نمودار هیزستریکی<sup>۲</sup> تغییر یابند. اصطلاح مولتی فرویس توصیف جهت سیستم با نوع مغناطیسی و فروالکتریکی به کاربرده می‌شود. مولتی فرویس‌ها چندان رایج نبوده است و بسیاری از مشخصه‌های آنان درک نمی‌شود. در نتیجه همان‌طور که در شکل (۲-۱) نشان داده شده است مولتی فرویس‌ها ویژگی‌های فروالکتریکی و مغناطیسی را ترکیب می‌کنند [۷].



شکل (۲-۱): نحوه شکل‌گیری مولتی فرویس‌ها

<sup>1</sup> ferroelastic  
<sup>2</sup> hysteretically

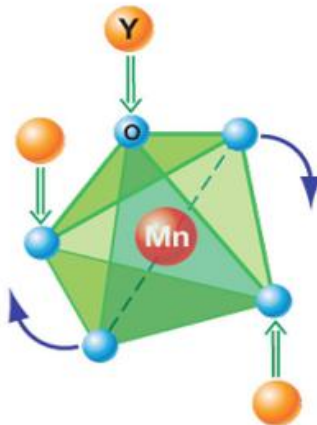
## ۱-۵-۵ تقسیم بندی مولتی فرویس ها

### ۱-۵-۱ مولتی فرویس های نوع یک

مولتی فرویس های نوع یک همان هایی می باشند که در آنها فروالکتريسيته و مغناطيس دارای منابع و منشأهای مختلفی هستند. در این مورد سایر پارامترها به شدت مستقل از دیگری بوده که معمولاً پیوندهایی بین آنها برقرار است. آنان معمولاً فروالکتريک های خوبی بوده و دماهای اولیه ی مغناطیسی و فروالکتريکی احتمالاً بالاتر از دمای اتاق می باشد.

### ۱-۵-۲ مولتی فرویس های نوع دو

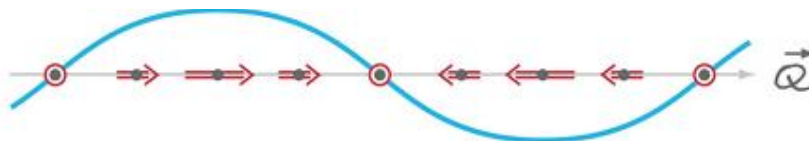
مولتی فرویس های نوع دو مولتی فرویس هایی می باشند که در آنها مغناطيس منجر به بروز فروالکتريسيته شده و این مسئله اشاره به برقراری پیوند مستحکمی بین این دو دارد. با این وجود معمولاً میزان پولاریزاسیون در این گونه مواد کمتر از میزان پولاریزاسیون در مواد مولتی فرویس نوع یک است. به عنوان مثال ترکیب هایی مانند  $[Tb_8MnO_3]$  و  $[Tb_9Mn_2O_5]$  مولتی فرویس نوع دو هستند. به میزان وسیعی این دسته بندی می تواند در قالب موادی چون مغناطيس، به صورت چرخش در یک راستا طبقه بندی شود. همان طور که در شکل (۱-۲) نشان داده شده است یون Y در سطح کره ی زمین در قالب  $MnO_5$  حرکت می کند [۶]. یون Mn در مرکز باقی می ماند. پیکان های سبز رنگ دوقطبی ها را نشان می دهند، و دو دوقطبی «بالا» در هر دوقطبی «پایین» ظاهر می شوند به طوری که سیستم فروالکتريکی شود، و زمانی که اسپین های Mn در دماهای پایین تر باشند سیستم مولتی فرویس می شود.



شکل (۱-۳): مکانیسم هندسی تولید پولاریزاسیون در  $YMnO_3$  هگزاگونال [۱۱].

الف) مولتی فرویس‌های نوع دو چرخشی

در این دسته از مولتی فرویس‌ها، فروالکتریسیته در فاز مغناطیسی چرخشی (اسپیرال)<sup>۱</sup> موادی نظیر  $MnWO_4$  و  $Ni_3V_2O_6-TbMnO_3$  اتفاق می‌افتد. مغناطیس چرخشی از طریق سیستم خنثی مغناطیسی ایجاد می‌شود و این نوع مواد اکتشافات بسیار جدیدی می‌باشند، مغناطیس موجود در آنها باعث به وجود آمدن فروالکتریسیته شده که پیوند محکمی بین آنها وجود دارد. اغلب مولتی-فرویس‌های نوع دو متعلق به این زیرگروه بوده و معمولاً در سیستم‌های خنثی که فروالکتریسیته و آنتی‌فرومغناطیس بایوندهای عظیم وجود دارند، یافت می‌شود. شکل (۱-۴) عمل پولاریزاسیون الکتریکی را نشان می‌دهد.



شکل (۱-۴): گونه‌ی مغناطیس چرخشی به عنوان مکانیسمی برای فروالکتریسیته [۷].

<sup>۱</sup>Spiral