

## بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی $A_2Ti_2O_7$ (A = Er, Tb)

الهام خراسانی، نجمه دیلی نظر، مجتبی اعلائی و فرهاد شهبازی

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

پست الکترونیکی: e.khorasani@ph.iut.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۲/۶/۲۰؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۲/۱۰/۹)

### چکیده

پدیده ناکامی هندسی در اکسیدهای پایروکلر مغناطیسی موجب بروز خواص جالب در این مواد در دماهای پایین می‌شود. از این رو دو ماده چالش برانگیز،  $Er_2Ti_2O_7$  و  $Tb_2Ti_2O_7$  را از اکسیدهای پایروکلر انتخاب کردیم و این دو ماده را با استفاده از روش ابتدا به ساکن بر پایه نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار دادیم. برای اعمال صحیح برهم‌کنش‌های کولمبی الکترون‌های  $f$ ، رهیافت  $DFT+U$  را با استفاده از روش تصحیح هابارد را به کار گرفتیم. در این مواد برهم‌کنش اسپین-مدار بسیار مؤثر است. بنابراین برهم‌کنش اسپین-مدار را به محاسبات  $DFT+U$  افزودیم ( $DFT+U+SOC$ ). همچنین با استفاده از  $DFT+U+SOC$ ، اثر مغناطش ناهم‌راستا را در نظر گرفتیم. نتایج محاسبات  $DFT+U+SOC$ ، گشتاورهای مغناطیسی  $7/1$  و  $8/2$  مگنتون بوهر را به ترتیب برای  $Er_2Ti_2O_7$  و  $Tb_2Ti_2O_7$  به دست می‌دهند. مقادیر مغناطش به دست آمده از محاسبات فوق با نتایج تجربی همخوانی ندارند. در واقع محاسبات  $DFT$  در کمینه‌های موضعی به دام می‌افتند و در نتیجه در محاسبات ساختار الکترونی برای پیدا کردن کمینه مطلق نیاز به روش‌هایی با پیچیدگی بیشتری داریم. اگر چه برای به دست آوردن مقادیر صحیح‌تر گشتاورهای مغناطیسی، نیاز به بهینه‌سازی ساختاری نیز داریم ولی متأسفانه تا زمانی که بهینه‌سازی الکترونی، به منظور یافتن کمینه مطلق، برای این مواد صورت نگیرد بهینه‌سازی ساختاری نیز ممکن است به جواب‌های نادرست منجر شود.

**واژه‌های کلیدی:** اکسیدهای پایروکلر مغناطیسی، ناکامی هندسی، نظریه تابعی چگالی، مغناطش هم‌راستا، مغناطش ناهم‌راستا

### ۱. مقدمه

قرارگیری اسپین‌ها در این شبکه‌ها باعث ایجاد پدیده ناکامی هندسه مغناطیسی می‌شود. ناکامی در یک دستگاه فیزیکی هنگامی رخ می‌دهد که اسپین‌های یک صفحه با پیوندهای پاد فرومغناطیسی نتوانند برای قرارگیری در یک حالت یکتا انرژی را کمینه کنند. برای مثال در یک شبکه پایروکلر هر کدام از چهاروجهی‌ها در این شبکه، از چهار صفحه مثلثی تشکیل شده‌اند و یک حالت پایه یکتا که منجر به صفر شدن جمع اسپین‌ها شود، وجود ندارد. از این رو این دستگاه‌ها، نامزدهای

در طول سال‌های اخیر اکسیدهای پایروکلر مغناطیسی با فرمول شیمیایی  $A_2B_2O_7$ ، که در آن  $A^{3+}$  معمولاً از عناصر نادر خاکی و  $B^{3+}$  از عناصر واسطه است، توجه بسیاری از محققان نظری و تجربی را به علت خواص مغناطیسی دمای پایین و ساختار همبسته اسپینی‌شان به خود جلب کرده است [۱]. در این مواد، یون‌های A و B روی دو شبکه مجزای در هم فرو رفته با چهار وجهی‌های از گوشه مشترک قرار گرفته‌اند. هندسه

جدول ۱. مختصات موقعیت یون‌های A, B, O, O' در ساختار  $A_2B_2O_6O'$  ( $A=Er, Tb$ ) [۱۰].

نوع اتم	موقعیت اتم در نمادگذاری وایکوف	تقارن جایگاه	X	Y	Z
A	۱۶d	$3m(D_{3d})$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
B	۱۶c	$3m(D_{3d})$	۰	۰	۰
O	۴۸f	$mm(C_{2v})$	X	۱,۸	۱,۸
O	۸b	$43 m(T_d)$	۳,۸	۳,۸	۳,۸

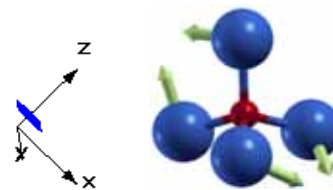
مغناطیسی برای آن نمایش داده شده است [۵، ۶].

$Tb_2Ti_2O_7$  از اکسیدهای پائروکلر با فاز مایع اسپینی است که برخلاف پیش‌بینی‌های نظری، با وجود همبستگی‌های کوتاه برد اسپین-اسپین حتی در دماهای پایین (۵۰ mK)، به علت نوسانات کوانتومی در حالت بی‌نظم اسپینی باقی می‌ماند [۴]. بررسی اثرات میدان بلوری روی یون‌های تربیم نشان دادند که می‌توان از مدل آیزینگ برای توصیف دستگاه استفاده کرد. در این مدل، اسپین اتم‌های تربیم در دماهای کمتر از ۱۰ K با داشتن ناهمسانگردی محوری قوی، در راستای  $\langle 111 \rangle$  موضعی جهت‌گیری می‌کند. براساس آنالیزهای تجربی به همراه نتایج به دست آمده از میدان بلوری مغناطش ذاتی دستگاه ۵/۱ مگنتون بوهر گزارش شده است [۷]. اما حالت پایه اکسید تربیم تیتانیوم هنوز به صورت یک مسئله حل نشده باقی مانده است.

## ۲. ساختار بلوری

مواد  $A_2Ti_2O_7$  ( $A = Er, Tb$ )، ترکیب‌های پائروکلر عایق دارای ساختار مکعبی با گروه فضایی  $m\bar{3}Fd$  می‌باشند. یاخته واحد آنها دارای ۲۲ اتم و فرمول شیمیایی  $A_2Ti_2O_6 O'$  است که A و Ti به ترتیب در موقعیت‌های ۱۶d، ۱۶c، O و O' در جایگاه‌های 48f و 8b طبق جدول ۱ در جای خود قرار گرفته‌اند. پارامترهای شبکه  $Er_2Ti_2O_7$  و  $Tb_2Ti_2O_7$  به ترتیب  $10.0787 \text{ \AA}$  و  $10.133 \text{ \AA}$  و پارامترهای اعوجاج از حالت مکعبی  $x = 0.3278$  و  $x = 0.3281$  توصیف می‌شوند [۸ و ۹].

هر یون A با هشت اکسیژن و هر Ti با شش اکسیژن احاطه شده است. طول پیوندهای A-O و A-O' به ترتیب برای Er برابر  $2.488 \text{ \AA}$  و  $2.182 \text{ \AA}$  و برای Tb برابر  $2.5$  و  $2$  آنگستروم



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) حالت پایه  $\frac{1}{2}$ ، که در این حالت ممان‌های مغناطیسی عمود بر محورهای موضعی  $\langle 111 \rangle$  هستند. جهت‌های این ممان‌ها را می‌توان با بردارهای  $m_1 = [2, -1, -1]$ ،  $m_2 = [2, 1, 1]$ ،  $m_3 = [-2, -1, 1]$  و  $m_4 = [-2, 1, -1]$  نشان داد.

مناسبی برای وجود نوسانات اسپینی کوانتومی با حالت‌های پایه مغناطیسی متفاوت مانند یخ اسپینی [۲]، شیشه اسپینی [۳]، مایع اسپینی [۴] و نظم بلند برد [۵] می‌باشند. در این مقاله به بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی دو ماده  $Er_2Ti_2O_7$  و  $Tb_2Ti_2O_7$  می‌پردازیم. دلیل انتخاب این دو ماده، مناقشه برانگیز بودن حالت پایه این دو ماده در میان دیگر اکسیدهای پائروکلر می‌باشد.

$Er_2Ti_2O_7$  در گروه پائروکلرهای مغناطیسی جایگاه ویژه‌ای دارد. این بلور از معدود ترکیبات شناخته شده این گروه است که ناهمسانگردی قوی صفحه آسان با گشتاورهای موضعی در صفحه‌هایی عمود بر محور موضعی  $\langle 111 \rangle$  دارد. این مدل به مدل شبه XY معروف می‌باشد [۱]. نتایج تجربی و نظری حاصل از نظریه میدان میانگین با در نظر گرفتن نظم حاصل از سازوکاری به نام نظم به وسیله بی‌نظمی کوانتومی، گذار فاز مرتبه دوم به حالت منظم نل را در دمای  $T_N = 1.2 \text{ K}$  به دست می‌آورند [۵]. این ساختار پادفرم مغناطیس متناظر با ویژه برداری است که  $\frac{1}{2}$  نامیده می‌شود و در شکل ۱ پیکربندی متناظر

باید هزینه بسیار زیادی پرداخت می‌کردیم. از طرفی چون تابعی‌های LDA و GGA هر دو به نوعی تابعی‌های موضعی بودند انتظار می‌رفت که نتایج آنها در خواص مغناطیسی چندان با هم تفاوت نکند.

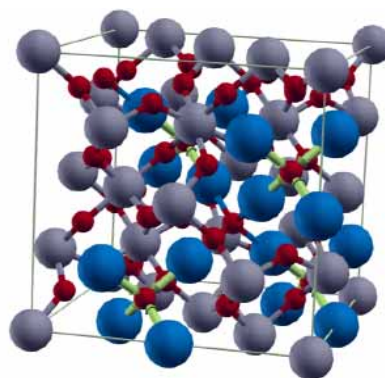
پیکربندی الکترون‌های ظرفیت در اکسیدهای ایربیوم تیتانیوم به صورت  $Ti(3d^24s^24p^0)$  و  $Er(4f^{11}6s^06p^0)$  برای اکسید تریبیوم تیتانیوم به صورت  $Ti(3d^24s^24p^0)$  و  $Tb(4f^86s^06p^0)$  انتخاب و الکترون‌های اوربیتال‌های  $5s^25p^6$  از یون ایربیوم و تریبیوم و  $3s^23p^6$  از یون تیتانیوم به‌عنوان الکترون‌های نیمه مغزه در نظر گرفته شده‌اند. برای انجام محاسبات همان‌طور که این پیکربندی‌ها نشان می‌دهند، الکترون‌های  $4f$  را به‌عنوان الکترون‌های ظرفیت در نظر گرفته و برای بهبود اثرات همبستگی قوی برای الکترون‌های  $4f$ ، از روش DFT+U استفاده کرده‌ایم. در آخر برای اعمال تصحیحات نسبی، محاسبات ناهم‌راستای DFT+U مقید در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار (DFT+U+SOC) نیز انجام دادیم. در محاسبات شعاع‌های موافین تین برای اتم‌های ایربیوم و تریبیوم برابر با ۲٫۵ a.u.، تیتانیوم برابر با ۲ a.u. و اکسیژن‌ها برابر با ۱٫۵ a.u. انتخاب شده‌اند. همچنین از بردار موج قطع  $3/8 \text{ a.u.}^{-1}$  برای بسط موج تخت استفاده کرده‌ایم. چون هدف اصلی این محاسبات خواص الکترونی و مغناطیسی بوده، محاسبات تنها در یک ثابت شبکه که همان ثابت شبکه تجربی است انجام شده است. در ادامه منظور از DFT، LDA یا GGA است.

#### ۴. نتایج

##### ۴.۱. آنالیز چگالی حالت‌ها

نتایج محاسبات از رسم چگالی کلی حالت‌های الکترونی در DFT برای  $Tb_2Ti_2O_7$  و  $Er_2Ti_2O_7$  در شکل ۳، مقدار گاف را برای ماده‌های فوق برابر با  $E_g = 0 \text{ eV}$  نشان می‌دهند.

نتایج به دست آمده این مواد را فلز پیش‌بینی می‌کنند. این در حالی است که این ترکیب‌ها عایق می‌باشند از اینرو به سراغ تقریب DFT+U می‌رویم. در تقریب DFT+U با اضافه‌کردن پارامتر U با مقادیر ۶٫۸ eV و ۵ به ترتیب برای Er و Tb و پارامتر

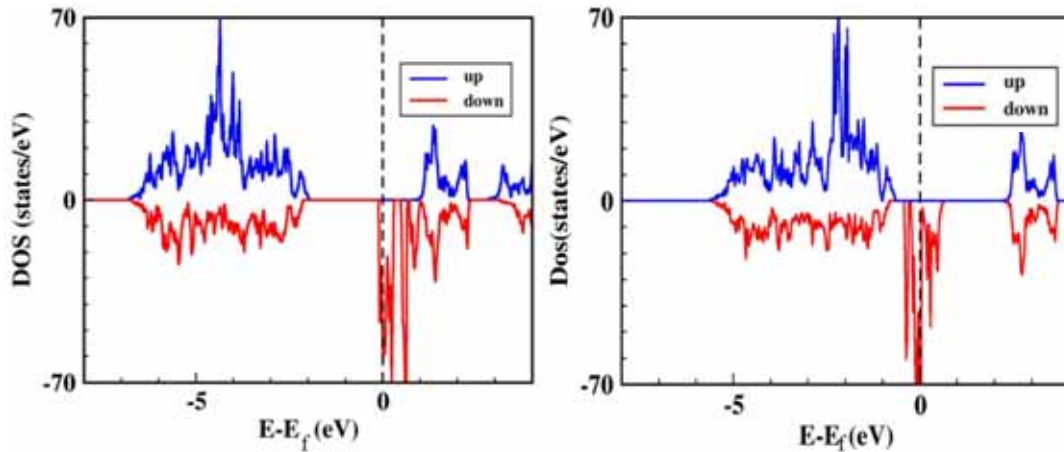


شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمایش سه‌بعدی شبکه پایروکلر. یون‌های ایربیوم (تریبیوم) با کره‌های آبی، و تیتانیوم و اکسیژن به ترتیب با رنگ‌های طوسی و قرمز نمایش داده شده‌اند.

می‌باشند [۸]. همان‌طور که در شکل ۲ می‌بینیم یون‌های  $A^{+3}$  در رئوس شبکه‌ای از چهار وجهی‌هایی متصل شده از گوشه‌ها، قرار گرفته‌اند. مکان‌های بلور  $A^{+3}$ ها همه هم‌ارز هم هستند و تقارن موضعی آنها  $D_{3d}$  می‌باشد. محورهای سه‌گانه‌ای که از مرکز چهاروجهی‌ها عبور می‌کنند در جهت‌های  $[111]$ ،  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$  و  $[\bar{1}\bar{1}1]$  برای چهار مکان روی یک چهاروجهی می‌باشند. محور تقارن سه‌گوشی در موقعیت هر  $A$  یکی از قطره‌های مکعب است.

##### ۳. روش محاسبات

محاسبات ما بر پایه نظریه تابعی چگالی و روش موج تخت بهبود یافته تمام پتانسیل (FP-LAPW) به کمک کد Fleur [۱۱] انجام شده‌اند. برای بلورهای  $A_2Ti_2O_7$  ( $A=Er, Tb$ ) برهم‌کنش بین یون‌ها به ترتیب به وسیله پتانسیل تبادلی همبستگی LDA و GGA شبیه‌سازی شده‌اند. به دلیل اینکه محاسبات بر روی  $Er_2Ti_2O_7$  و  $Tb_2Ti_2O_7$  به‌طور جداگانه و مستقل انجام شده‌اند، در ابتدای محاسبات، تابعی LDA (PZ) [۱۲] برای  $Er_2Ti_2O_7$  و GGA (PBE) [۱۳] برای  $Tb_2Ti_2O_7$  انتخاب شده بود. با توجه به حجم سنگین محاسبات به دلیل تعدد اتم‌های موجود در یاخته واحد و اینکه در بسیاری از موارد امکان همگرایی محاسبات وجود نمی‌داشت، از این رو برای انجام محاسبات با یک تابعی یکسان (یکسان‌سازی محاسبات)



شکل ۳. (راست) منحنی چگالی حالت‌های کلی  $\text{Er}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  در تقریب LDA (چپ) منحنی چگالی حالت‌های کلی  $\text{Tb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  در تقریب GGA.

یون Ti با  $2p$  O را مشاهده کرد. در شکل ۳ می‌بینیم، اوربیتال‌های  $4f$  A(Er,Tb) با اوربیتال‌های  $2p$  O به صورت ضعیف هیبرید شده‌اند. طول پیوندهای Er و Tb با دو اکسیژن  $O'$  که در موقعیت وایکوف ۸b هستند کوتاهتر از طول پیوند شش اکسیژن O در موقعیت  $4f$  می‌باشند از اینرو هیبرید شدگی بین اوربیتال‌های  $4f$  A(Er,Tb) و  $2p$  O نسبت به  $4f$  A(Er,Tb) و  $2p$  O قوی‌تر است. منفی‌تر شدن انرژی هیبرید شدگی اوربیتال‌های  $4f$  ایربیوم و تریبوم با  $2p$  O نسبت به  $2p$  O در شکل ۳ شواهدی بر نتیجه فوق است.

تیز بودن منحنی‌های اوربیتال‌های  $4f$  در نمودار چگالی حالت‌های جزیی یون ایربیوم و تریبوم در شکل ۳ حاکی از این واقعیت است که این اوربیتال‌ها به شدت جایگزیده هستند و هیبرید شدگی ضعیف این اوربیتال‌ها با اوربیتال‌های اکسیژن، نیز نمی‌تواند این جایگزیدگی را از بین ببرد.

در این بخش، با استفاده از آنالیز نمودارها مغناطش سیستم را ناشی از اوربیتال‌های  $4f$  یون ایربیوم و تریبوم گرفتیم و دیدیم یون‌های دیگر سهمی در مغناطش ندارند. از اینرو در ادامه فقط روی تغییرات نمودارهای یون‌های ایربیوم و تریبوم صحبت می‌کنیم.

#### ۲.۴. محاسبات DFT+U+SOC

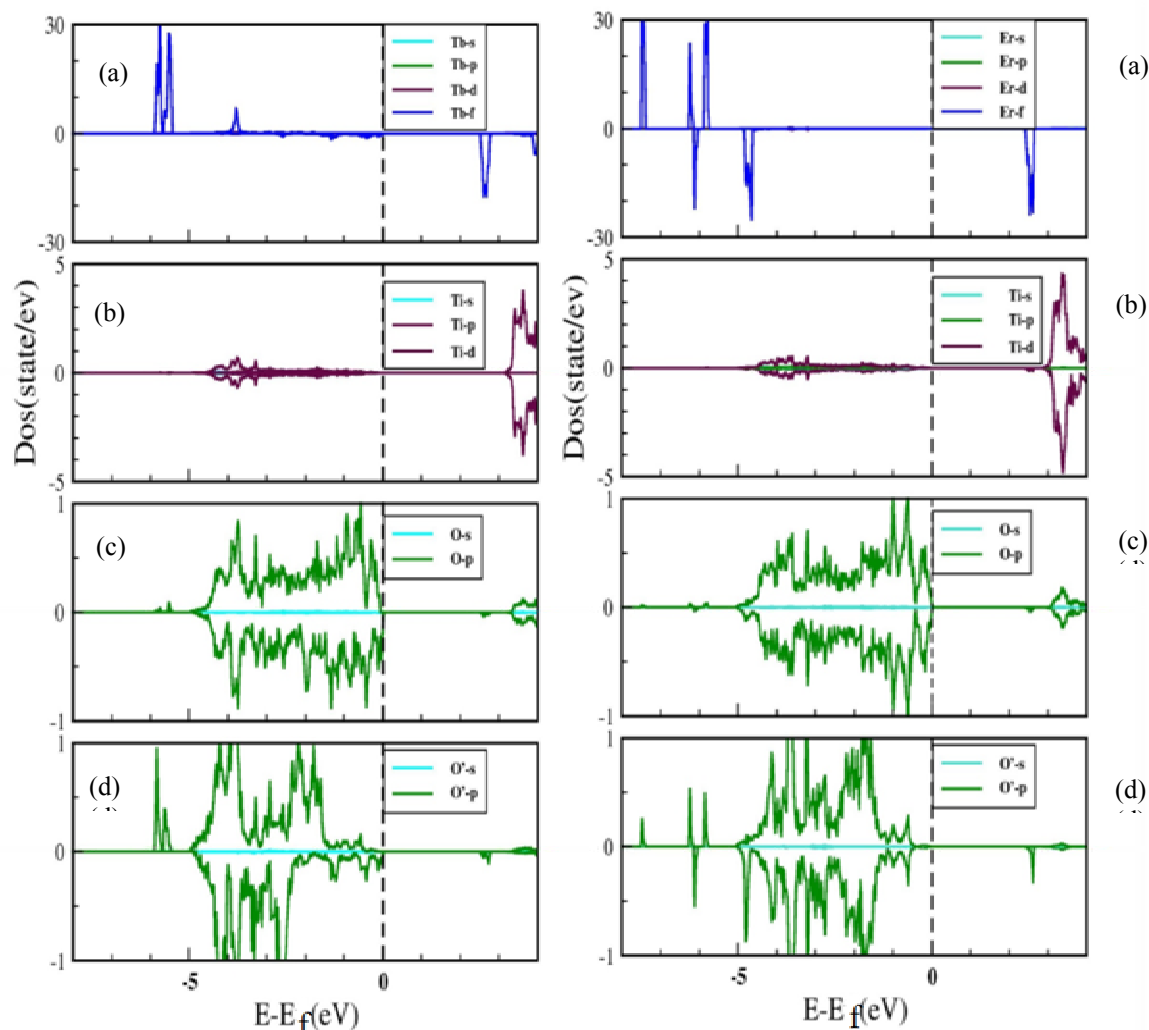
برهم‌کنش اسپین مدار برای اتم‌های ایربیوم و تریبوم به دلیل داشتن عدد اتمی بالا ( $H_{s-0} \propto z^4$ )، سهم به‌سزایی دارد.

$J$  برابر با  $1 \text{ eV}$ ، برهم‌کنش کولنی الکترون‌ها را در اوربیتال‌های  $4f$  تصحیح می‌کنیم. مقدار  $U$  از نتایج تجربی [۱۴] و مقدار  $J$  همانند اکثر محاسبات برابر  $1 \text{ eV}$  الکترون ولت انتخاب شده است. اعمال  $U$  باعث جدایی ترازهای خالی و پر اوربیتال  $f$  در  $\text{Er}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  در قله انرژی‌های  $30 \text{ eV}$  و  $3.8 \text{ eV}$  و قله‌های انرژی در  $\text{Tb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  در  $37.9 \text{ eV}$  و  $2.68 \text{ eV}$  و در نتیجه بهبود گاف‌های انرژی شده است.

همان‌طور که در شکل ۴ می‌بینیم مقادیر گاف انرژی برای ایربیوم تیتانیوم اکساید و تریبوم تیتانیوم اکساید به ترتیب برابر  $E_g = 2.99 \text{ eV}$  و  $E_g = 2.52 \text{ eV}$  دست آمده‌اند. متأسفانه هیچ اطلاعات تجربی در مورد مقدار گاف انرژی این مواد وجود ندارد و بنابراین نمی‌توانیم بر روی مقدار دقیق  $U$  بحث کرد. محاسبات DFT مقدار مغناطش ناشی از اسپین را برای ایربیوم و تریبوم در بلور برابر  $2.815 \mu_B$  و  $5.90 \mu_B$  نشان می‌دهند. انتظار می‌رود در محاسبات DFT+U، مغناطش‌های اسپینی مواد بهبود یابند در حالی که مغناطش‌های ایربیوم و تریبوم به مقدارهای  $3.0 \mu_B$  و  $5.97 \mu_B$  تغییر می‌یابند.

همچنین تفاوت مقدارهای چگالی حالت‌ها در نمودارهای چگالی جزیی یون Er و Tb در شکل ۴ مغناطش دستگاه را ناشی از اوربیتال‌های  $4f$  یون ایربیوم و تریبوم نشان می‌دهند.

همین‌طور از رسم نمودار چگالی حالت‌های جزیی برای یون‌های A(Er,Tb)، O و  $O'$  می‌توان هیبرید شدگی بین اوربیتال‌های  $4f$  یون A و  $2p$  O و  $2p$  O' و اوربیتال‌های  $3d$

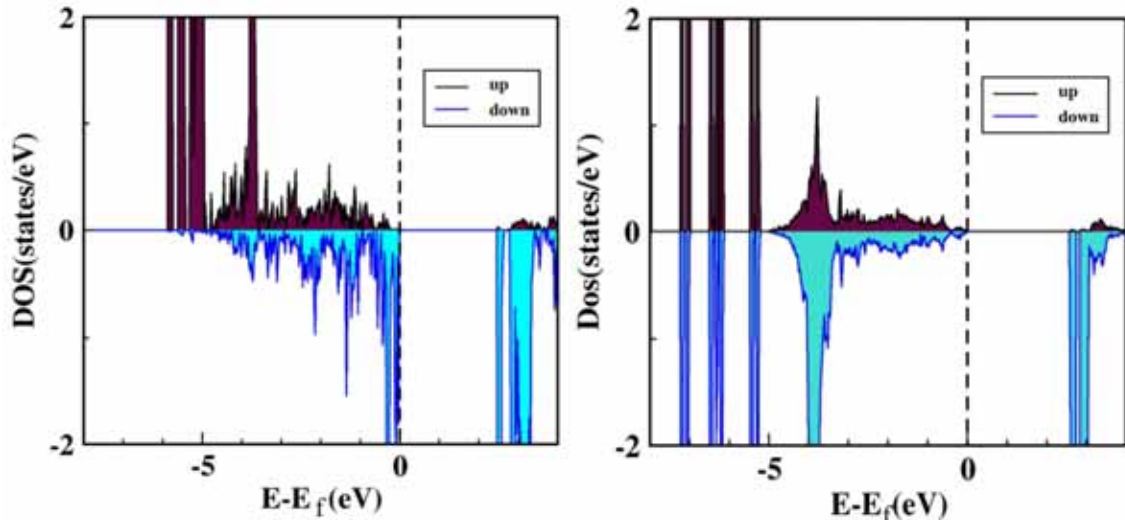


شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) چگالی حالت‌های جزئی یون اربیم، تیتانیوم، اکسیژن (۴f) و اکسیژن (۸b) و (چپ) چگالی حالت‌های جزئی یون تریم، تیتانیوم، اکسیژن (۴f) و اکسیژن (۸b) در تقریب DFT+U.

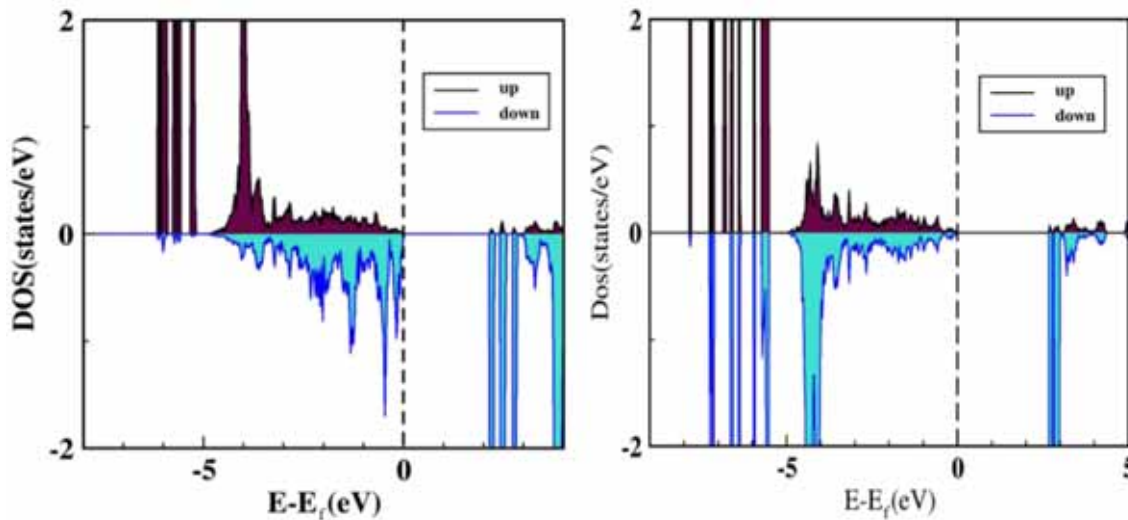
محاسبات DFT+U نشان می‌دهد. نتایج محاسبات گاف انرژی را برای اربیم و تریم به ترتیب برابر با ۲٫۵ و ۲٫۴۷ الکترون ولت به دست می‌دهد. مقایسه اوربیتال‌های  $4f$  برای یون اربیم و تریم در محدوده انرژی‌های ۲ تا ۴ الکترون ولت در شکل ۳ نشان می‌دهند با شکستن اوربیتال‌های  $f$  انرژی این اوربیتال‌ها در محدوده فوق به سمت انرژی فرمی جابه‌جا و موجب کمتر شدن گاف انرژی شده‌اند.

نتایج محاسبات در این تقریب مغناطش اسپینی و اربیتالی را برابر با  $\mu_s = 2.97 \mu_B$  و  $\mu_l = 5.86 \mu_B$  در بلور اکسید اربیم و تیتانیوم و  $\mu_s = 5.97 \mu_B$  و  $\mu_l = 1.32 \mu_B$  در بلور اکسید تریم

برهم‌کنش اسپین-مدار در  $Tb_2Ti_2O_7$  و  $Er_2Ti_2O_7$ ، باعث جفت شدن گشتاورهای اسپینی و گشتاورهای مداری در شبکه و در نتیجه مقید کردن جهت اسپین‌ها در جهت‌های خاص و اضافه شدن مغناطش مداری به مغناطش اسپینی نسبت به تقریب DFT+U می‌شود. در محاسبات هم‌راستا، اسپین‌های یون‌های اربیم و تریم در راستای محور سراسری Z قرار می‌گیرند. در اثر برهم‌کنش اسپین-مدار، تقارن دستگاه کاهش می‌یابد و تبهگنی‌های اوربیتال‌های  $f$  بیشتر شکافته می‌شوند. نمودار چگالی حالت‌ها در شکل ۵ شکاف‌نگی‌های بیشتر اربیتال‌های  $f$  در محاسبات DFT+U+SOC را در مقایسه با این اربیتال‌ها در



شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) (راست) چگالی کلی یون ابریوم در محاسبات هم‌راستای DFT+U+SOC. (چپ) چگالی کلی یون تریبیم در محاسبات هم‌راستای DFT+U+SOC.



شکل ۶. (رنگی در نسخه الکترونیکی) (راست) چگالی کلی یون ابریوم و (چپ) چگالی کلی یون تریبیم در محاسبات ناهم‌راستای DFT+U+SOC در پیکربندی all-in.

محورهای موضعی  $\langle 111 \rangle$  مقید می‌کنیم.

آنالیز چگالی کلی حالت‌های یون‌های ابریوم و تریبیم در شکل ۶ برای پیکربندی ناهم‌راستای all-in، شکافتگی بیشتر اوربیتال‌های f را در مقایسه با حالت هم‌راستا نشان می‌دهد. زیرا تقارن سیستم کمتر و در نتیجه تبهگنی‌های اوربیتال f بیشتر شکسته می‌شوند. نتایج محاسبات، مغناطش اسپینی و اریتالی را برابر با  $\mu_s = 5,9\mu_B$  و  $\mu_l = 5,219\mu_B$  برای ابریوم و  $\mu_s = 2,981\mu_B$  و  $\mu_l = 1,18\mu_B$  برای تریبیم نشان می‌دهند. و مغناطش کل

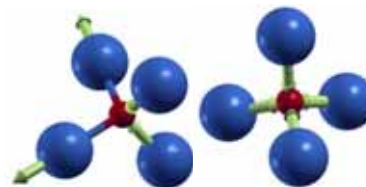
تیتانیوم نشان می‌دهند. مغناطش کل از جمع مغناطش اسپینی و مداری برابر با  $8,1$  و  $7,29$  مگنتون بوهر حاصل می‌شود. همچنین در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار در اکسیدهای پایروکلر فوق، برهم‌کنش‌های ناهمسانگردی موجب ناهم‌راستا شدن مغناطش می‌شوند. در محاسبات ناهم‌راستای DFT+U+SOC در ابتدا با انتخاب پیکربندی all-in همه گشتاورها روی اتم‌های ابریوم و همین‌طور تریبیم را همانند شکل ۲ به سمت مرکز چهاروجهی‌های شبکه پایروکلر، روی

جدول ۲. مقدار مغناطش‌های اوربیتالی و اسپینی به دست آمده از محاسبات هم‌راستا و ناهم‌راستا DFT+U+SOC و مقادیر تجربی در واحد  $\mu_B$  برای بلورهای  $A_2Ti_2O_7$  (A=Er,Tb). چگونگی به دست آوردن مقادیر مغناطش اسپینی و اوربیتالی از نتایج میدان بلوری در پیوست ۱ آورده شده است.

ماده	$Er_2Ti_2O_7$				$Tb_2Ti_2O_7$			
	محاسبات هم‌راستا با نظم فرومغناطیس DFT+U+SOC	محاسبات هم‌راستا با نظم پادفرومغناطیس DFT+U+SOC	محاسبات ناهم‌راستا با پیکربندی all-in DFT+U+SOC	نتایج میدان بلوری (تجربی)	محاسبات هم‌راستا با نظم فرومغناطیس DFT+U+SOC	محاسبات هم‌راستا با نظم پادفرومغناطیس DFT+U+SOC	محاسبات ناهم‌راستا با پیکربندی all-in DFT+U+SOC	نتایج میدان بلوری (تجربی)
مغناطش اسپینی ( $\mu_B$ )	۲/۹۷	۲/۹۷	۲/۹۸	۱,۲۲	۵/۹۵	۵/۹۷	۵/۹۴	۳,۴۰
مغناطش اوربیتالی ( $\mu_B$ )	۵/۸۶	۵/۸۶	۵/۲۲	۱/۹	۱/۳۲	۱/۱۸	۱/۱۸	۱/۷۰
مغناطش کل	۸/۸۳	۸/۸۳	۸/۲۰	۳/۱۲	۷/۲۷	۷/۱۵	۷/۱۲	۵/۱

بر اساس مدل آیزینگ، پیکر بندی اسپینی که در آن دو تا از اسپین‌ها روی محورهای موضعی  $\langle 111 \rangle$  به سمت داخل چهاروجهی و دوتای دیگر به سمت خارج از مرکز این چهاروجهی‌ها قرار می‌گیرند، حالت  $2in-2out$  یا حالت یخ اسپینی را تشکیل می‌دهند. هر دو پیکربندی اسپینی all-in و  $2in-2out$  در شکل ۷ نشان داده شده‌اند. در ادامه محاسبات با پیکربندی اسپینی  $2in-2out$  انجام شدند و آنالیز نتایج تفاوت انرژی کل در پیکربندی all-in را به اندازه  $0.12 \text{ eV}$  نسبت به حالت  $2in-2out$  کمتر نشان می‌دهد.

در جدول ۲ مقادیر مغناطش اکسیدهای پایروکلر ایربیوم تیتانیوم و تریبوم تیتانیوم به دست آمده از روش ابتدا به ساکن با مقادیر تجربی این پارامترها مقایسه شده‌اند. مقایسه مغناطش‌های به دست آمده با نتایج تجربی از روش میدان بلوری نشان می‌دهند [۶, ۷, ۱۶]، مغناطش حاصل از محاسبات به درستی به دست نمی‌آیند. در واقع مشکل روش‌های مانند

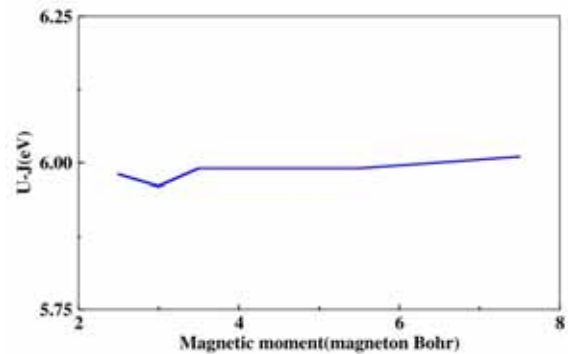


شکل ۷. (رنگی در نسخه الکترونیکی) (راست) پیکربندی all-in (چپ) پیکربندی  $2in-2out$ .

$8/2\mu_B$  و  $7/12\mu_B$  برای ایربیوم و تریبوم به دست می‌آید. حالت پایه بلوراکسید ایربیوم تیتانیوم متناظر با ویژه بردار  $\psi_2$  در شکل ۱ است. محاسبات ناهم‌راستا در تقریب DFT+U+SOC برای حالت پایه بلور اکسید ایربیوم تیتانیوم با اسپین‌های مفید در راستای متناظر با ویژه بردار  $\psi_2$  نیز انجام شدند اما در نهایت این محاسبات همگرا نشدند. مطالعات نظری روی اکسید تریبوم تیتانیوم احتمال گذار فاز از حالت مایع اسپینی به یخ اسپینی را گزارش می‌دهند [۱۵].

دست به محاسبات  $U$  و  $J$  بزنیم. اما ما برای اطمینان در این مرحله، محاسبات LDA+ $U$  را در بلور  $Tb_2Ti_2O_7$  با  $(U-J)$   $U_{eff}$ ‌های مختلف ۰٫۵ تا ۷٫۵ انجام دادیم و طبق شکل ۸ دیدیم که گشتاور مغناطیسی با افزایش مقدار  $U_{eff}$ ، فقط به مقدار  $0,06\mu_B$  افزایش می‌یابد که این اثر با توجه به تفاوت در مقدار مغناطش محاسبه شده و تجربی برای بلور  $Tb_2Ti_2O_7$  قابل اغماض می‌باشد.

همچنین مقایسه نتایج به دست آمده برای موادی با اوربیتال‌های  $f$  حاکی از این واقعیت است که مسئله چند جوابی بودن منحصر به بلورهای ما نیست و به دست آوردن اختلاف در انرژی‌های کل (حدود ۱ الکترون ولت یا حتی بیشتر) برای یک ماده، که توسط محققان مختلف با روش‌های محاسباتی یکسان انجام شده است، غیر محتمل نمی‌باشد [۱۸-۲۳]. در محاسبات ما نیز اگر تقارن را بشکنیم، جواب‌هایی با انرژی‌های کل کمتر به دست می‌آوریم. این موضوع نشان از تعدد جواب‌ها دارد. متأسفانه تعداد حالت‌های اولیه‌ای که می‌توان برای شروع محاسبات برای ماتریس چگالی حدس زد بسیار زیاد است و برای اینکه محاسبات به نتایج درست‌تری منجر شود باید راه‌کارهای جدیدی پیشنهاد کرد. چگونگی به دست آوردن  $\mu_f$  و  $\mu_g$  از طریق نتایج تجربی در پیوست ۱ آورده شده است. همان‌طور که گفته شد تعداد حالت‌های مختلفی که می‌توان برای اشغال‌شدگی اوربیتال‌های  $f$  در این دو ماده در نظر گرفت بسیار زیاد است. از طرفی اضافه کردن اثر اسپین-مدار به پیچیدگی‌های مسئله بعد بیشتری می‌بخشد. می‌دانیم که اگر حالت پایه اوربیتال‌های  $f$ ،  $|\varphi_g\rangle$ ، برای این مواد را داشته باشیم، می‌توان ماتریس چگالی یعنی  $|\varphi_g\rangle\langle\varphi_g|$  را تشکیل داد. و با استفاده از این ماتریس چگالی در شروع محاسبات DFT+U+SOC می‌توان محاسبات را به سمت جواب صحیح سوق داد. منتها مشکل اینجا است که به دلیل قوی بودن اثر اسپین-مدار مجبوریم  $|\varphi_g\rangle$  را در پایه‌های  $|Jm\rangle$ ، که  $J$ ، تکانه مداری کل و  $m$  عدد کوانتومی مغناطیسی کل است، بسط دهیم در حالی که ماتریس چگالی در روش‌های DFT+U با استفاده از پایه‌های توابع هماهنگ کروی،  $|lm\rangle$ ، که  $l$ ، تکانه زاویه‌ای و



شکل ۸. منحنی  $U_{eff}$  بر حسب گشتاور مغناطیسی.

DFT+U وجود چند جواب برای هامیلتونی چنین روش‌هایی است. در حقیقت با تغییر مقدار عدد اشغال اوربیتال‌های  $f$  در ماتریس چگالی می‌توانیم جواب‌های نهایی را که مستقیماً باعث تغییر در انرژی کل می‌شوند، تغییر دهیم. این نکته قبلاً نیز در محاسبات DFT+U برای  $UO_2$  مشاهده شده است [۱۷]. مغناطش ناشی از انرژی کولنی و اصل طرد پائولی است و وقتی انرژی حالت‌ها به درستی انتخاب نمی‌شوند، الکترون‌ها به درستی در اوربیتال‌ها نمی‌نشینند و در نتیجه مغناطش به درستی به دست نمی‌آید. همچنین مقدار گشتاور مغناطیسی وابسته به پارامتر شبکه و فاصله بین اتم‌ها است. بنابراین پیدا کردن پارامترهای بهینه که با روش‌های محاسباتی سازگار باشند، می‌تواند نتایج قابل قبول‌تری را ارائه کند. اما با نظر به اینکه برای هر پارامتر شبکه و یا مکان جدید اتم‌ها باید ابتدا محاسبات ابتدا به ساکن انجام شود و این محاسبات در کمینه مطلق قرار گیرند تا با همدیگر قابل مقایسه شوند و از نتایج آن، ساختار بهینه سازگار با محاسبات به دست آید، بنابراین تا زمانی که راه حلی برای کمینه‌سازی ساختار الکترونی پیدا نشود، ممکن است با بهینه‌سازی ساختاری به جواب‌های ناصحیح‌تری برسیم.

از دیگر دلایل می‌توان به مقادیر  $U$  اشاره کرد که ممکن است برای این دستگاه‌ها مقادیر نامناسبی باشند. اما برای محاسبه مقادیر  $U$  و  $J$  در دستگاه‌های فوق، باید ابتدا مطمئن شویم جواب‌های محاسبات در کمینه‌های مطلق خود قرار گیرند. بنابراین تا زمانی که این مشکل برطرف نشود نمی‌توانیم



## پیوست ۱

تابع موج حالت‌های پایه یون‌های اربیم و تریم در بلورهای اکسید اربیم تیتانیوم و تریم تیتانیوم، با استفاده از نتایج تجربی از بررسی اثر میدان بلوری به صورت زیر می‌باشند [۱۶ و ۲۴]:

$$\left| \phi_g^{Er} \right\rangle = 0,471 \left| \pm \frac{13}{2} \right\rangle \pm 0,421 \left| \pm \frac{7}{2} \right\rangle - 0,569 \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle \mp 0,240 \left| \mp \frac{5}{2} \right\rangle + 0,469 \left| \mp \frac{11}{2} \right\rangle \quad (۱)$$

$$\left| \phi_g^{Tb} \right\rangle = 0,956 \left| \pm 4 \right\rangle \pm 0,128 \left| \pm 1 \right\rangle - 0,121 \left| \mp 2 \right\rangle \mp 0,226 \left| \mp 5 \right\rangle \quad (۲)$$

تابع موج حالت‌های پایه فوق بر حسب پایه‌های  $|J, m_j\rangle$  ها نوشته شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌کنید این حالت‌های پایه تهگن هستند. مقدار J برای Tb و Er به ترتیب برابر با ۶ و  $\frac{15}{2}$  است. برای به دست آوردن سهم مغناطش‌های ناشی از گشتاور مداری و گشتاور اسپینی به صورت جداگانه، با اعمال اثر عملگر بالابرنده و یا پایین‌برنده به صورت متوالی روی پایه‌های  $|J, m_j\rangle$  ها می‌توان هر ویژه حالت را بر حسب ترکیبات خطی از  $|m_s\rangle |l, m_l\rangle$  ها و با ضرائب کلبش گوردن معین نوشت. و در نهایت تابع موج‌های حالت پایه در رابطه ۱ و ۲ در پایه‌های  $|l, m_l\rangle |m_s\rangle$  به صورت زیر در می‌آیند:

$$\begin{aligned} \left| \phi_g^{Er} \right\rangle = & 0,21 \left| 6, \pm 6 \right\rangle \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle + 0,42 \left| 6, \pm 5 \right\rangle \left| \pm \frac{3}{2} \right\rangle \\ & \pm 0,04 \left| 6, \pm 5 \right\rangle \left| \mp \frac{3}{2} \right\rangle \pm 0,16 \left| 6, \pm 4 \right\rangle \left| \mp \frac{1}{2} \right\rangle \\ & \pm 0,31 \left| 6, \pm 3 \right\rangle \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle \pm 0,25 \left| 6, \pm 2 \right\rangle \left| \pm \frac{3}{2} \right\rangle \\ & - 0,16 \left| 6, \pm 2 \right\rangle \left| \mp \frac{3}{2} \right\rangle - 0,35 \left| 6, \pm 1 \right\rangle \left| \mp \frac{1}{2} \right\rangle \\ & - 0,38 \left| 6, 0 \right\rangle \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle - 0,2 \left| 6, \mp 1 \right\rangle \left| \frac{3}{2} \right\rangle \\ & \mp 0,12 \left| 6, \mp 1 \right\rangle \left| \mp \frac{3}{2} \right\rangle \mp 0,17 \left| 6, \mp 2 \right\rangle \left| \mp \frac{1}{2} \right\rangle \\ & \mp 0,11 \left| 6, \mp 3 \right\rangle \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle \mp 0,04 \left| 6, \mp 4 \right\rangle \left| \pm \frac{3}{2} \right\rangle \\ & + 0,37 \left| 6, \mp 4 \right\rangle \left| \mp \frac{3}{2} \right\rangle + 0,28 \left| 6, \mp 5 \right\rangle \left| \mp \frac{1}{2} \right\rangle \\ & + 0,08 \left| 6, \mp 6 \right\rangle \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle. \end{aligned} \quad (۳)$$

$m$  عدد کوانتومی مغناطیسی. برای اربیتال‌های Er f و Tb,  $l=3$  است و بنابراین ماتریس چگالی ابعادی برابر با  $7 \times 7$  برای هر یک از جهت‌های اسپینی خواهد داشت. در حالی که این ابعاد ماتریسی اگر در پایه  $|Jm\rangle$  نوشته شود ابعادی بیشتر و برای هر ماده دارای بعدی متفاوت است. برای اینکه به پیچیدگی این مسئله بیشتر پی ببرید می‌توانید به پیوست ۱ مراجعه کنید که در آن حالت پایه  $|\phi_g\rangle$  بر حسب  $|Jm\rangle$  ها بسط داده شده است.

## ۵. نتیجه‌گیری

اربیتال‌های الکترون‌های  $4f$  بسیار جایگزیده می‌باشند و این مشخصه موجب بزرگ شدن نقص‌های تابعی‌های تبدلی-همبستگی مانند LDA و GGA می‌شوند زیرا جایگزیدگی موجب ناهمگنی اربیتال‌ها می‌شود و این تابعی‌ها برای توصیف اربیتال‌های همگن مثل  $s$  و  $p$  مناسب‌تر هستند. از اینرو برای بهبود تابعی تبدلی-همبستگی از تقریب DFT+U استفاده کردیم. محاسبات DFT+U هر دو اکسید پایروکلر اربیم تیتانیوم و تریم تیتانیوم را منطبق بر تجربه عایق مغناطیسی پیش بینی می‌کند که منشاء مغناطش در این مواد برهم‌کنش بین الکترون‌های موجود در اربیتال‌های  $4f$  یون‌های اربیم و تریم، می‌باشند. اما مغناطش‌های به دست آمده از محاسبات ابتدا به ساکن برای هر دو بلور با نتایج تجربی همخوانی ندارند. یکی از دلایل این امر وجود کمینه‌های موضعی است که منجر به مشکلاتی در پیدا کردن حالت پایه الکترونی صحیح و همچنین سخت همگرایی محاسبات در این دستگاه‌ها می‌شوند. دلیل این امر وجود تعداد انتخاب‌های زیادی است که ماتریس چگالی در محاسبات DFT+U می‌تواند به خود بگیرد. بنابراین پیدا کردن حالت پایه برای این مواد به سادگی ممکن نیست. برای حل این مشکل از اساس، باید به دنبال راه‌هایی باشیم که به طور سیستماتیک بین جواب‌های مختلف جستجو می‌کند و حالت پایه دستگاه را پیدا می‌کند.

به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\mu_{\perp}^{Er} = \mu_{s\perp}^{Er} + \mu_{l\perp}^{Er} = 3,12\mu_B \quad (۱۳)$$

و مقادیر فوق برای تربیم به صورت زیر می‌باشند:

$$\langle S_z^{Tb} \rangle = \left| \langle \phi_g^{Tb(\pm)} | S_z | \phi_g^{Tb(\pm)} \rangle \right| = 1,69 \quad (۱۴)$$

$$\langle S_{\pm}^{Tb} \rangle = \left| \langle \phi_g^{Tb(\pm)} | S_{\pm} | \phi_g^{Tb(\mp)} \rangle \right| = 0,00 \quad (۱۵)$$

$$\langle L_z^{Tb} \rangle = \left| \langle \phi_g^{Tb(\pm)} | L_z | \phi_g^{Tb(\pm)} \rangle \right| = 1,69 \quad (۱۶)$$

$$\langle L_{\pm}^{Tb} \rangle = \left| \langle \phi_g^{Tb(\pm)} | L_{\pm} | \phi_g^{Tb(\mp)} \rangle \right| = 0,00 \quad (۱۷)$$

و در انتها مغناطش مداری و اسپینی را برای اتم تربیم در بلور اکسید تربیم تیتانیوم به صورت زیر به دست می‌آوریم:

$$\langle \mu_{s\parallel}^{Tb} \rangle = g_s \langle S_z^{Tb} \rangle \mu_B = 3,38\mu_B \quad (۱۸)$$

$$\langle \mu_{l\parallel}^{Tb} \rangle = g_s \langle L_z^{Tb} \rangle \mu_B = 1,69\mu_B \quad (۱۹)$$

مقادیری که برای مغناطش به دست آمده‌اند، نشان می‌دهد که سهم غالب مغناطش در راستای موازی می‌باشد یعنی مدل مناسب برای توصیف این دستگاه آیزینگ می‌باشد. پس مغناطش کل تربیم در بلور اکسید تربیم تیتانیوم دارای مقدار زیر می‌باشد:

$$\mu_{\parallel}^{Tb} = \mu_{s\parallel}^{Tb} + \mu_{l\parallel}^{Tb} = 5,07\mu_B \quad (۲۰)$$

## پیوست ۲

### مغناطش ناهم‌راستا در کد Fleur

کد Fleur بر پایه نظریه تابع چگالی (DFT) است و از روش FP-LAPW استفاده می‌کند. روش موج تخت بهبود یافته پتانسیل کامل (FP-LAPW) انتخاب ترکیبی از مجموعه پایه‌های LAPW با در نظر گرفتن پتانسیل کامل است که در آن فضا به دو ناحیه کره‌های موفین-تین (MT) به شعاع کره‌های اتمی و ناحیه بین‌جایگاهی (I) تقسیم شده است. رابطه زیر تابع موج را در پایه‌های LAPW نشان می‌دهد.

$$\Psi_G(\vec{k}) = \begin{cases} \sum_L (a_L^{\mu,G}(\vec{k})u_l(r) + b_L^{\mu,G}(\vec{k})\dot{u}_l(r))Y_L(\vec{r}^{\mu}) & r \in MT \\ e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot r} & r \in I \end{cases} \quad (۱)$$

$$\begin{aligned} \langle \phi_g^{Tb} \rangle = & 0,455|3,-3\rangle|-1\rangle + 0,705|3,-2\rangle|-2\rangle \\ & + 0,455|3,-1\rangle|-3\rangle - 0,043|3,1\rangle|-2\rangle \\ & - 0,078|3,0\rangle|-1\rangle - 0,078|3,-1\rangle|0\rangle \\ & - 0,043|3,-2\rangle|1\rangle - 0,011|3,2\rangle|-3\rangle \\ & - 0,011|3,-3\rangle|2\rangle - 0,021|3,3\rangle|-1\rangle \\ & - 0,059|3,2\rangle|0\rangle - 0,081|3,1\rangle|1\rangle \\ & - 0,059|3,0\rangle|2\rangle - 0,021|3,-1\rangle|3\rangle \\ & + 0,159|3,3\rangle|2\rangle + 0,159|3,2\rangle|3\rangle. \end{aligned} \quad (۴)$$

برای به دست آوردن مغناطش اسپینی و مداری، ابتدا مقدار چشمداشتی عملگرهای  $S_z$ ،  $S_{\pm}$ ،  $L_z$  و  $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$  را در پایه‌های  $|l, m_l\rangle$  یا  $|J, m_j\rangle$  که از شکستن حالت‌های در معادله‌های ۱ و ۲ به دست آمده‌اند محاسبه می‌کنیم.

مقادیر چشمداشتی عملگرهای فوق برای ایربیوم به صورت زیر به دست آمدند:

$$\langle S_z^{Er} \rangle = \left| \langle \phi_g^{Er(\pm)} | S_z | \phi_g^{Er(\pm)} \rangle \right| = 0,17 \quad (۵)$$

$$\langle S_{\pm}^{Er} \rangle = \left| \langle \phi_g^{Er(\pm)} | S_{\pm} | \phi_g^{Er(\mp)} \rangle \right| = 1,22 \quad (۶)$$

$$\langle L_z^{Er} \rangle = \left| \langle \phi_g^{Er(\pm)} | L_z | \phi_g^{Er(\pm)} \rangle \right| = 0,696 \quad (۷)$$

$$\langle L_{\pm}^{Er} \rangle = \left| \langle \phi_g^{Er(\pm)} | L_{\pm} | \phi_g^{Er(\mp)} \rangle \right| = 3,8 \quad (۸)$$

و بنابراین با داشتن  $g_s = 2$ ، مغناطش اسپینی در راستای  $z$  موازی با محورهای موضعی  $\langle 111 \rangle$  و عمود بر محورهای  $z$  در صفحه  $xy$  برابر است با:

$$\langle \mu_{s\parallel}^{Er} \rangle = g_s \langle S_z^{Er} \rangle \mu_B = 0,34\mu_B \quad (۹)$$

$$\langle \mu_{s\perp}^{Er} \rangle = \frac{1}{2} g_s \langle S_{\pm}^{Er} \rangle \mu_B = 1,22\mu_B \quad (۱۰)$$

و چون  $g_l = 1$ ، مغناطش‌های اربیتال موازی و عمود بر محورهای موضعی  $z$  (محورهای موضعی  $\langle 111 \rangle$ ) به صورت زیر بیان می‌شوند:

$$\langle \mu_{l\parallel}^{Er} \rangle = g_l \langle L_z^{Er} \rangle \mu_B = 0,696\mu_B \quad (۱۱)$$

$$\langle \mu_{l\perp}^{Er} \rangle = \frac{1}{2} g_l \langle L_{\pm}^{Er} \rangle \mu_B = 1,9\mu_B \quad (۱۲)$$

از آنجایی که مدل توصیفی برای اکسید ایربیوم تیتانیوم، شبه XY می‌باشد و با توجه به مقادیر به دست آمده برای مغناطش‌ها که به صورت غالب در راستای عمود هستند، مغناطش مؤثر کل

هیبریدی، مغناطش در ناحیه بین جایگاهی به صورت یک کمیت برداری بررسی می‌شود و برای درون کره‌های اتمی (MT)، میانگین جهت چگالی مغناطش، به صورت یکتایی، جهت مغناطش برای هر کره را تعریف می‌کند [۲۷]

$$m(r) = \begin{cases} m^\alpha(r) e_M^\alpha & r \in MT \\ m(r) & r \in I \end{cases} \quad (2)$$

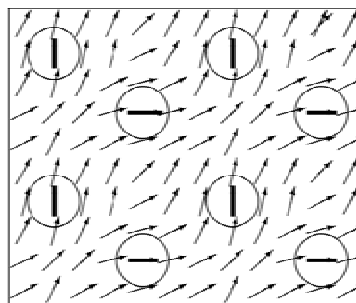
جهت بردارهای مغناطش در روش هیبریدی به صورت شماتیک در شکل ۱ نشان داده شده است. در شکل می‌بینیم، اگر چه مغناطش درون هر کره در چارچوب مخصوص به خود دارای یک جهت مشخص است، اما از یک کره به کره دیگر این جهت تغییر می‌کند.

برای تفکیک و بررسی توابع پایه برای مغناطش غیر هم‌راستا از دو چارچوب اسپینی در دو ناحیه فضا، یعنی کره‌های موفین-تین و ناحیه بین جایگاهی استفاده می‌شود. در ناحیه بین جایگاهی یک چارچوب کلی و روی هر کره اتمی یک چارچوب موضعی تعریف می‌شود که جهت میانگین چگالی مغناطش اسپینی (برای هر کره دلخواه) در هر کره در راستای محور کوانتس موضعی (جهت Z در چارچوب موضعی) فرض می‌شود.

بر این اساس، توابع پایه درون کره‌های موفین-تین با استفاده از دو مجموعه تابع شعاعی به صورت ترکیب خطی از توابع شعاعی  $u_{l\sigma}^\alpha(r)$  و  $u_{l\sigma}^{\alpha(\mu)}(r)$  (اندیس  $\sigma$  که به صورت  $\uparrow$  و  $\downarrow$  است، نشان دهنده وابستگی توابع  $u$  به اسپین است) و در ناحیه بین جایگاهی به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\phi_{G,\sigma}(k,r) = \begin{cases} \sum_{\sigma^{\mu(\alpha)}} \sum_L [A_{L\sigma^{\mu(\alpha)}}^{\alpha G}(k) u_{l\sigma^{\mu(\alpha)}}^{\alpha(\mu)}(r) + B_{L\sigma^{\mu\alpha}}^{\alpha G}(k) u_{l\sigma^{\mu(\alpha)}}^{\mu(\alpha)}(r)] Y_L(\hat{r}) \chi_{\sigma^{\mu(\alpha)}} & r \in MT \\ e^{i(K+G)r} \chi_\sigma^g & r \in I \end{cases} \quad (3)$$

می‌باشد. در نهایت با اعمال شرط پیوستگی در معادلات ۱ ضرایب بسط توابع موج بر حسب پایه‌های فوق در مغناطش ناهم‌راستا به دست می‌آید. علاقمندان می‌توانند برای جزئیات بیشتر به مرجع [۲۶] مراجعه کنند.



شکل ۱. درون هر اتم، میانگین جهت گشتاورهای مغناطیسی با مقدار  $m^\alpha(r) e_M^\alpha$  تقریب زده شده است و در بین اتم‌ها به صورت برداری می‌باشد [۲۶].

$a_L^{\mu,G}(\vec{k})$  و  $b_L^{\mu,G}(\vec{k})$  ضرایب بسط هستند و با اعمال شرایط مرزی پیوستگی به دست می‌آیند.  $\mathbb{R}^3$  مکان هر کره موفین-تین، هماهنگ‌های کروی با اعداد کوانتومی  $l$  و  $m$  و  $u_l(r)$  جواب قسمت شعاعی معادله شرودینگر با پتانسیل کروی می‌باشد [۲۵].

برای استفاده از پایه‌های LAPW، برای مواد با مغناطش ناهم‌راستا در روش FLAPW، توابع پایه LAPW را بر حسب اربیتال‌های موضعی وابسته به اسپین بسط می‌دهیم [۲۶]. از آنجایی که در روش FLAPW، کره‌های موفین-تین کوچک‌تر از کره‌های اتمی هستند و از طرفی، انتخاب شعاع‌های موفین-تین‌ها تا حد زیادی، دلخواه است، با تقریب خوبی می‌توان از روش هیبریدی برای بررسی مغناطش ناهم‌راستا استفاده کرد که در این روش توابع پایه دیگر مستقل از اسپین نیستند. در روش

$\chi_\sigma$  در معادلات بالا نمایش اسپینورها است. اندیس  $\alpha$ ، مشخصه هر کره،  $l$  و  $g$  به ترتیب برای نشان دادن چارچوب‌های موضعی و کلی به کار می‌روند.  $K$  و  $G$  به ترتیب بردار موج بلاخ و بردار موج در شبکه وارون

## مراجع

16. A Bertin *et al.*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **24** (2012) 256003.
17. F Zhou and V Ozoliņš, *Physical Review B* **83** (2011) 085106.
18. G Jomard *et al.*, *Physical Review B* **78** (2008) 075125.
19. B Amadon, F Jollet, and M Torrent, *Physical Review B* **77** (2008) 155104.
20. E R Ylvisaker, W E Pickett, and K Koepernik, *Physical Review B* **79** (2009) 035103.
21. B Dorado *et al.*, *Physical Review B* **79** (2009) 235125.
22. B Meredig *et al.*, *Physical Review B* **82** (2010) 195128.
23. F Zhou and V Ozoliņš, *Physical Review B* **83** (2011) 085106.
24. I Mirebeau, P Bonville, and M Hennion, *Physical Review B* **76** (2007) 184436.
25. S Blugel and G Bihlmayer, "Computational Nanoscience: Do It Yourself", NIC Series **31** (2006) 85.
26. P Kurz, G Bihlmayer, F Fiorster, and S Bliugel, "FLAPW goes non-collinear", psi-k, 10 Scientific Highlight of the Month, Warrington UK (2000).
27. P Kurz *et al.*, *Physical Review B* **69** (2004) 024415.
1. M Zhitomirsky *et al.*, *Physical Review Letters* **109** (2012) 077204.
2. D J Flood, *Journal of Applied Physics* **4** (2012) 4041.
3. C Booth *et al.*, *Physical Review B* **62** (2012) R755.
4. J S Gardner *et al.*, *Physical Review Letters* **82** (1999) 1012.
5. J Champion *et al.*, *Physical Review B* **68** (2003) 020401.
6. A Poole, A Wills, and E Lelievre-Berna, *Journal of Physics: Condensed Matter* **19** (2007) 452201.
7. M J P Gingras *et al.*, *Physical Review B* **62** (2000) 6496.
8. J Lian *et al.*, *Physical Review B* **68** (2003) 134107.
9. S W Han, J S Gardner, and C H Booth, *Physical Review B* **69** (2004) 024416.
10. J S Gardner, M J Gingras, and J E Greedan, *Reviews of modern Physics* **82** (2010) 53.
11. www.flapw.de.
12. J P Perdew and A Zunger, *Physical Review B* **23** (1981) 5048.
13. J P Perdew, K Burke, and M Ernzerhof, *Physical Review Letters* **77** (1996) 3865.
14. S Sanna, "Rare Earth point defects in GaN", PhD Thesis, Paderborn University Germany (2007).
15. H R Molavian, M J Gingras, and B Canals, *Physical review letters* **98** (2007) 157204.

Archive SID