مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۴، شمارهٔ ۱، بهار ۱۳۹۳

<u>تو</u>هش فيريك

بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی (A=Er, Tb) A₂Ti₂O₇

الهام خراسانی، نجمه دیلینظر، مجتبی اعلایی و فرهاد شهبازی

دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

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

(دريافت مقاله: • ١٣٩٢/۶/٢ ؛ دريافت نسخهٔ نهايي: ٩/• ١٣٩٢/١)

چکيده

پدیدهٔ ناکامی هندسی در اکسیدهای پایروکلر مغناطیسی موجب بروز خواص جالب در این مواد در دماهای پایین می شود. از ایس رو دو مادهٔ چالش برانگیز، Er₂Ti₂O₇ و Tb₂Ti₂O₇ را از اکسیدهای پایروکلر انتخاب کردیم و این دو ماده را با استفاده از روش ابتدا به ساکن بر پایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی مورد بررسی قرار دادیم. برای اعمال صحیح برهم کنش های کولمبی الکترونهای f، رهیافت U+Th را با استفاده از روش تصحیح برام کنش های کولمبی الکترونهای f، رهیافت U+Th را با استفاده از روش تصحیح برام کنش های کولمبی الکترونهای f، رهیافت U+Th را با استفاده از روش تصحیح برام کنش های کولمبی الکترونهای f، رهیافت U+Th را با استفاده از روش تصحیح معابر در ابعان می تابعی چگالی مورد بررسی قرار دادیم. برای اعمال صحیح برام کنش های کولمبی الکترونهای f، رهیافت U+Th را با استفاده از روش تصحیح معابر در ابعان مرون بر می کنش اسپین ماین می معابر ای افزودیم هابارد را به کار گرفتیم. در این مواد برهم کنش اسپین – مدار بسیار مؤثر است. بنابراین برهم کنش اسپین – مدار را به محاسبات U+Th افزودیم (DFT+U+SOC). همچنین با استفاده از DFT+U الی معاطش ناهم استا را در نظر گرفتیم. نتایج محاسبات D+T+U، افزودیم معناطیسی ۲٫۸ و ۲٫۱ مگتون بوهر را به ترتیب برای DFT+U، اثر مغناطش ناهم استا را در نظر گرفتیم. نتایج محاسبات مده از محاسبات معناطیسی می مناطیسی ۲٫۸ و ۲٫۱ مگتون بوهر را به ترتیب برای Ti₂O₇ و ۲₂O⁷ به دست می دهند. مقادیر مغناطش به دست آمده از محاسبات معناطیسی می می با نتایج تجربی همخوانی ندارند. در واقع محاسبات DFT در کمینهای موضعی به دام می افتند و در نتیجه در محاسبات ساختار الکترونی فوق با نتایج تجربی هملق مبلی ندارند. در واقع محاسبات DFT در کمینه مای موضعی به دام می افتند و در نتیجه در محاسبات ساختار الکترونی فوق با نتایج تجربی هملق نیاز به روش هایی با پیچیدگی بیشتری داریم. اگر چه برای به دست آوردن مقادیر صحیح تر گشتاورهای معناطیسی، نوق با نتایج تحربی هملق نیاز داریم ولی مانتاری که به بینه مران یا زردن مقادیر محاسبات ساختار الکترونی به منظور یافتن کمینهٔ مطلق برای این مواد صورت نگیرد نیر را به بیند مردن این در مران یا دادست منجر شود.

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

۱. مقدمه

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 همبستهٔ اسپینیشان به خود جلب کرده است [1]. در این مواد، یونهای A وB روی دو شبکهٔ مجزای در هم فرو رفته با چهار وجهیهای از گوشه مشترک قرار گرفتهاند. هندسهٔ

قرار گیری اسپین ها در این شبکه ها باعث ایجاد پدیدهٔ ناکامی هندسهٔ مغناطیسی می شود. ناکامی در یک دستگاه فیزیکی هنگامی رخ می دهد که اسپین های یک صفحه با پیوندهای پاد فرومغناطیسی نتوانند برای قرار گیری در یک حالت یکتا انرژی را کمینه کنند. برای مثال در یک شبکهٔ پایروکلر هر کدام از چهاروجهی ها در این شبکه، از چهار صفحهٔ مثلثی تشکیل شدهاند و یک حالت پایهٔ یکتا که منجر به صفر شدن جمع اسپین ها شود، وجود ندارد. از این رو این دستگاهها، نامزدهای

| نوع اتم | موقعیت اتم در نمادگذاری وایکوف | تقارن جایگاہ | Х | Y | Z |
|---------|--------------------------------|---------------|-----|-----|-----|
| А | ١۶d | $3m(D_{3d})$ | 1/2 | 1/2 | 1/2 |
| В | 180 | $3m(D_{3d})$ | o | ٥ | o |
| О | ۴۸f | $mm(C_{2v})$ | Х | ۸,۸ | ١,٨ |
| О | ٨b | 43 m(T_d) | ٣,٨ | ٣,٨ | ٣/٨ |

جدول ۱. مختصات موقعیت یون های 'A, B, O, O در ساختار (A=Er,Tb) [۱۰] A₂B₂O₆O [۱۰].



شکل ۱. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) حالت پایهٔ ψ₂، که در این حالت ممانهای مغناطیسی عمود بر محورهای موضعی <۱۱۱> هـستند. جهتهای این ممانها را میتوان با بردارهای [1- ,1- ,2] = m، س₄ ای (2,1,1] س س⁴ سردارهای m₄ = [-2,1,1] س نشان داد.

مناسبی برای وجود نوسانات اسپینی کوانتومی با حالتهای پایهٔ مغناطیسی متفاوت مانند یخ اسپینی [۲]، شیشه اسپینی [۳]، مایع اسپینی [۴] و نظم بلند برد [۵] میباشند. در این مقاله به بررسی نحواص الکترونی و مغناطییسی دو مادهٔ Er 2Ti2O7 و تحواص الکترونیم. دلیل انتخاب این دو ماده، مناقشه برانگیز بودن حالت پایهٔ این دو ماده در میان دیگر اکسیدهای پایروکلر میباشد.

 ${\rm Er}_{2}{\rm Ti}_{2}{\rm O}_{7}$ در گروه پایروکلرهای مغناطیسی جایگاه ویژهای دارد. این بلور از معدود ترکیبات شناخته شدهٔ این گروه است که ناهمسانگردی قوی صفحهٔ آسان با گشتاورهای موضعی در صفحههایی عمود بر محور موضعی <111> دارد. این مدل به مدل شبه XY معروف میباشد [۱]. نتایج تجربی و نظری حاصل از نظریهٔ میدان میانگین با در نظر گرفتن نظم حاصل از سازوکاری به نام نظم به وسیلهٔ بینظمی کوانتومی، گذار فاز مرتبهٔ دوم به حالت منظم نل را در دمای XK اج

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

Tb₂Ti₂O₇ از اکسیدهای پایروکلر با فاز مایع اسپینی است که برخلاف پیش بینی های نظری، با وجود همبستگی های کوتاه برد اسپین – اسپین حتی در دماهای پایین (۵ ۳ ۵)، به علت نوسانات کوانتومی در حالت بی نظم اسپینی باقی می ماند [۴]. بررسی اثرات میدان بلوری روی یون های تربیم نشان دادند که میتوان از مدل آیزینگ برای توصیف دستگاه استفاده کرد. در این مدل، اسپین اتم های تربیم در دماهای کمتر از ۲ ۱۰ با داشتن ناهم سانگردی محوری قوی، در راستای (۱۰۲> موضعی جهت گیری می کند. براساس آنالیزهای تجربی به همراه نتایج به دست آمده از میدان بلوری مغناطش ذاتی دستگاه اکسید تربیم مگنتون بوهر گزارش شده است [۷]. اما حالت پایهٔ اکسید تربیم تیتانیوم هنوز به صورت یک مسئلهٔ حل نشده باقی مانده است.

۲. ساختار بلوری

مواد $A_2Ti_2O_7$ (A = Er, Tb) $A_2Ti_2O_7$ میاند. یاخته دارای ساختار مکعبی با گروه فضایی $B \ Fd$ میباشند. یاخته واحد آنها دارای ۲۲ اتم و فرمول شیمیایی 'O $A_2Ti_2O_6$ است که A و Ti به ترتیب در موقعیتهای ۱۶۵، ۱۶۵، O و'O در جایگاههای $f \ 48 \ f$ و $86 \ d$ بق جدول ۱ در جای خود قرار گرفتهاند. پارامترهای شبکهٔ $Er_2Ti_2O_7$ و $Tb_2Ti_2O_7$ به ترتیب $A \ VAV \ A$

مکعبی ۲۲۷۸ «x=۰،۳۲۸۱ و x=۰،۳۲۸۱ توصیف می شوند [۸ و ۹]. هر یون A با هشت اکسیژن و هر Ti با شش اکسیژن احاطه شده است. طول پیوندهای O-A و 'O-A به ترتیب بارای Er برابر ۲٬۴۸۸ و ۲٬۱۸۲ و بارای Tb برابر۲٬۵۸ و ۲ آنگستروم



شکل ۲. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) نمایش سهب*عدی شبکهٔ* پایروکلر. یونهای ایربیوم (تربیوم) با کرههای آبی، و تیتانیوم و اکسیژن به ترتیب با رنگهای طوسی و قرمز نمایش داده شدهاند.

می باشند [۸]. همان طور که در شکل ۲ می بینیم یون های ^۳ A در رئوس شبکه ای از چهار وجهی هایی متصل شده از گوشه ها، قرار گرفته اند. مکان های بلور ^{۳+} A ها همه هم ارز هم هستند و تقارن موضعی آنها D_{3d} می باشد. محورهای سه گانه ای که از مرکز چهار وجهی ها عبور می کنند در جهت های [111], [117] مرکز چهار وجهی ها عبور می کنند در جهت های [111], [117] می باشند. محور تقارن سه گوشی در موقعیت هر A یکی از قطر های مکعب است.

۳. روش محاسبات

محاسبات ما بر پایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی و روش موج تخت بهبود یافتهٔ تمام پتانسیل (FP-LAPW) به کمک کد Fleur [۱۱] انجام شدهاند. برای بلورهای FP-LAPW) به کمک کد A=Er,Tb) برهم کنش بین یونها به ترتیب به وسیلهٔ پتانسیل تبادلی همبستگی LDA و بین یونها به ترتیب به وسیلهٔ پتانسیل تبادلی همبستگی GGA و GGA شبیهسازی شدهاند. به دلیل اینکه محاسبات بر روی شدهاند، در ابتدای محاسبات، تابعی (PZ) LDA [۲۲] برای شدهاند، در ابتدای محاسبات، تابعی (PZ) LDA [۲۲] برای شده بود. با توجه به حجم سنگین محاسبات به دلیل تعدد شده بود. با توجه به حجم سنگین محاسبات به دلیل تعدد اتمهای موجود در یاختهٔ واحد و اینکه در بسیاری از موارد انجام محاسبات با یک تابعی یکسان (یکسانسازی محاسبات)

باید هزینهٔ بسیار زیادی پرداخت می کردیم. از طرفی چون تابعی های LDA و GGA هر دو به نوعی تابعی های موضعی بودند انتظار می رفت که نتایج آنها در خواص مغناطیسی چندان با هم تفاوت نکند.

پیکربندی الکترونهای ظرفیت در اکسیدهای ایربیوم تیتانیوم به صورت $Er(4f^{11}6s^06p^0)$ و $Ti(3d^24s^24p^0)$ و برای اکسید $Tb(4f^86s^06p^0)$ و $Ti(3d^24s^24p^0)$ تربيوم به صورت $Ti(3d^24s^24p^0)$ انتخاب و الکترونهای اوربیتالهای 5s²5p⁶ از یـون ایربیـوم و تربيوم و 3s²3p⁶ ازيون تيتانيوم بهعنوان الكترون هاى نيمه مغزه در نظر گرفته شدهاند. برای انجام محاسبات همان طور که این پیکربندی ها نشان میدهند، الکترون های 4f را به عنوان الکترون،های ظرفیت در نظر گرفته و برای بهبود اثرات همبستگی قوی برای الکترون های 4f، از روش DFT+U استفاده كردهايم. در آخر براى اعمال تصحيحات نسبيتي، محاسبات ناهمراستای DFT+U مقید در حضور برهم کنش اسپین- مدار (DFT+U+SOC) نیز انجام دادیم. در محاسبات شعاعهای موفین تین برای اتـمهای ایربیـوم و تربیـوم برابـر بـا ۱٫۵ a.u. تیتانیوم برابر با ۲ a.u. و اکسیژن ها برابر با ۱٫۵ a.u. انتخاب شدهاند. همچنین از بردار موج قطع ^۲۳۸ a.u⁻¹ برای بسط موج تخبت استفاده كردهايم. چون هدف اصلى اين محاسبات خواص الكتروني و مغناطيسي بوده، محاسبات تنها در یک ثابت شبکه که همان ثابت شبکهٔ تجربی است انجام شده است. در ادامه منظور از LDA ,DFT یا GGA است.

- ۴. نتايج
- ۴. ۱. آنالیز چگالی حالتها

نتایج محاسبات از رسم چگالی کلی حالتهای الکترونی در DFT برای Ef₂Ti₂O₇ و Tb₂Ti₂O7 در شکل۳، مقدار گاف را برای مادههای فوق برابر با E_g =0 eV نشان میدهند.

نتایج به دست آمده این مواد را فلز پیش بینی می کنند. ایس در حالی است که این ترکیب ها عایق می باشند از اینرو به سراغ تقریب DFT+U می رویم. در تقریب DFT+U با اضافه کردن پارامتر U با مقادیر P/A eV و ۵ به ترتیب برای Er و Tb و JC



شکل ۳. (راست) منحنی چگالی حالتهای کلی Er₂Ti₂O₇ در تقریب LDA. (چپ) منحنی چگالی حالتهای کلی Tb₂Ti₂O₇ در تقریب GGA.

J برابر با V ۱، برهم کنش کولنی الکترونها را در اربیت اله ای J برابر با V ۱، برهم کنش کولنی الکترونها را در اربیت اله ای 4f مصحیح می کنیم. مقدار U از نتایج تجربی [۱۴] و مقدار J همانند اکثر محاسبات برابر ۱ الکترون ولت انتخاب شده است. اعمال U باعث جدایی ترازه ای خالی و پر اوربیت ال f اعمال U باعث جدایی ترازه مای خالی و پر اوربیت ال f Er₂Ti₂O₇ در قلهٔ انرژی های V ۹ ۹ مرج و در نتیجه بهب ود The Tip Strain (1996) و در نتیجه بهب ود گاف های انرژی شده است.

همان طور که در شکل ۴ می بینیم مقادیر گاف انرژی برای ایربیوم تیتانیوم اکساید و تربیم تیتانیم اکساید به ترتیب برابر $E_g = 2/99 \text{ eV}$ و $E_g = 2/99 \text{ eV}$ متأسفانه هیچ اطلاعات تجربی در مورد مقدار گاف انرژی این مواد وجود ندارد و بنابراین نمی توانیم بر روی مقدار دقیق U بحث کرد. محاسبات DFT مقدار مغناطش ناشی از اسپین را برای ایربیوم و تربیوم در بلور برابر B/۸۵/۵ و μ ۵/۹۰ نشان می دهند. انتظار می رود در محاسبات U+TT ، مغناطش های اسپینی مواد بهبود یابند در حالی که مغناطش های ایربیوم و تربیوم به مقدارهای B/۵۰/۵ و ۵/۹۷ تغییر می یابند.

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 تربیوم نشان میدهند.

همین طور از رسم نمودار چگالی حالتهای جزیلی برای یونهای (Combined A (Er,Tb) می توان هیبرید شدگی بین اوربیتالهای 4f یون Aو O 2p و 'O 2p و اوربیتالهای 3d

یون Ti با 2p O را مشاهده کرد. در شکل ۳ می بینیم، اربیتالهای (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 Ab هستند کوتاهتر از طول پیوند شش اکسیژن O در موقعیت Ab می باشند ازاینرو هیبرید شدگی بین اوربیتالهای (48 f می باشند ازاینرو هیبرید شدگی بین اوربیتالهای (47 A(Er,Tb و 'O 2p نسبت به Af (Er,Tb) و O 2p قوی تر است. منفی تر شدن انرژی هیبرید شدگی اوربیتالهای Af ایربیوم و تربیوم با 'O 2p نسبت به O 2p در شکل ۳ شواهدی بر نتیجهٔ فوق است.

تیز بودن منحنی های اوربیتال های 4f در نمودار چگالی حالت های جزیی یون ایربیوم و تربیوم در شکل ۳ حاکی از این واقعیت است که این اوربیتال ها به شدت جایگزیده هستند و هیبرید شدگی ضعیف این اوربیتال ها با اوربیتال های اکسیژن، نیز نمی تواند این جایگزیدگی را از بین ببرد.

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

PFT+U+SOC .۲. محاسبات. ۲.۴

برهم کنش اسپین مدار برای اتمهای ایربیوم و تربیم به دلیل داشتن عدد اتمی بالا(H_{s-o} ∝ z⁴)، سهم به سزایی دارد.



شکل۴. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (راست) چگالی حالتهای جزیی یون ایربیوم، تیتانیوم، اکسیژن (۴۸۴) و اکسیژن (۸b) و (چـپ) چگـالی حالتهای جزیی یون تربیوم، تیتانیوم، اکسیژن (۴۸۴) و اکسیژن (۸b) در تقریب DFT+U.

محاسبات UFT+U نشان می دهد. نتایج محاسبات گاف انرژی را برای ایربیوم و تربیوم به ترتیب برابر با ۲٫۵ و ۲٫۴۷ الکترون ولت به دست می دهد. مقایسهٔ اوربیتاهای *f*f برای یون ایربیوم و تربیوم در محدودهٔ انرژیهای ۲ تا ۴ الکترون ولت در شکل۳ نشان می دهند با شکستن اوربیتالهای *f*و انرژی این اوربیتالها در محدودهٔ 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 ایربیـوم تیتانیوم و $\mu_s = 5/97 \mu_B$ در بلور اکـسید تـربیم برهم کنش اسپین – مدار در $Fr_2Ti_2O_7$ و $Tb_2Ti_2O_7$ ، باعث جفت شدن گشتاورهای اسپینی وگشتاورهای مداری در شبکه و در نتیجه مقید کردن جهت اسپین ها در جهت های خاص و اضافه شدن مغناطش مداری به مغناطش اسپینی نسبت به تقریب DFT+U می شود. در محاسبات همراستا، اسپین های یون های ایربیوم و ترییم در راستای محور سراسری z قرار می گیرند. در اثر برهم کنش اسپین – مدار، تقارن دستگاه کاهش می یابد و تبهگنی های اوربیتال های f بیشتر شکافته می شوند. نمودار چگالی حالت ها در شکل ۵ شکافتگی های بیشتر اربیتال های fدر محاسبات یاین این اربیتال ها در



شکل ۵. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (راست) چگالی کلی یون ایربیوم در محاسبات همراستای DFT+U+SOC. (چپ) چگالی کلی یـون تـربیم در محاسبات هم راستای DFT+U+SOC.



شکل ۶. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (راست) چگالی کلی یـون ایربیـوم و (چـپ) چگالی کلـی یـون تربیـوم در محاسـبات نـاهـمراسـتای DFT+U+SOC در پیکربندی all-in .

تیتانیوم نشان میدهند. مغناطش کل از جمع مغناطش اسـپینی و مداری برابر با۸٫۱ و ۷٫۲۹ مگنتون بوهر حاصل میشود.

همچنین در حضور برهم کنش اسپین – مدار در اکسیدهای پایروکلر فوق، برهم کنش های ناهمسانگردی موجب ناهمراستا شدن مغناطش میشوند. در محاسبات ناهمراستای DFT+U+SOC در ابتدا با انتخاب پیکربندی all-in، همهٔ گشتاورها روی اتمهای ایربیوم و همین طور تربیوم را همانند شکل ۲ به سمت مرکز چهاروجهی های شبکهٔ پایروکلر، روی

محورهای موضعی <۱۱۱> مقید میکنیم.

آنالیز چگالی کلی حالت های یون های ایربیوم و تربیوم در شکل ۶ برای پیکربندی ناهمراستای all-in، شکافتگی بیشتر اوربیتال های f را در مقایسه با حالت همراستا نشان می دهد. زیرا تقارن سیستم کمتر و در نتیجه تبهگنی های اوربیتال f بیشتر شکسته می شوند. نتایج محاسبات، مغناطش اسپینی و اربیتالی را برابر با می شوند. نتایج $\mu_{\rm g} = 2/981 \mu_{\rm g}$ برای ایربیوم و $\mu_{\rm g} = 5/2 \mu_{\rm g}$ و مغناطش کل

| ماده | Er ₂ Ti ₂ O ₇ | | | Tb ₂ Ti ₂ O ₇ | | | | |
|------------------------------------|--|---|---|--|--|--|---|------------------------------|
| نوع محاسبات | محاسبات همراستا با نظم فرومغناطيس DFT+U+SOC | محاسبات هم _ا راستا با نظم پادفرومغناطیس DFT+U+SOC | محاسبات ناهم استا با پیکربندی all-in DFT+U+SOC | نتایج میدان بلوری (تجربی) | محاسبات همراستا با نظم فرومغناطيس DFT+U+SOC | محاسبات همرراستا با نظم پادفرومغناطیس DFT+U+SOC | محاسبات ناهمراستا با پیکربندی all-in DFT+U+SOC | نتایج میدان بلوری (تجربی) |
| مغناطش اسپینی (µ _B) | ۲/۹۷ | ۲/۹۷ | ۲/۹۸ | 1,77 | ۵٫۹۵ | ۵٬۹۷ | ۵,۹۴ | ٣,۴۰ |
| مغناطش اوربیتالی (µ _B) | ۵/۸۶ | ۵/۸۶ | ۵/۲۲ | ١/٩ | ١/٣٢ | 1/1A | ١/١٨ | ۱/۷ ۰ |
| مغناطش کل | ۸/۸۳ | Λ/Λ ٣ | ٨/٢ • | ٣/١٢ | V/YV | V/10 | V/17 | ۵/۱ |

جدول ۲. مقدار مغناطشهای اوربیتالی و اسپینی به دست آمده از محاسبات همراستا و ناهمراسـتا DFT+U+SOC و مقـادیر تجربـی در واحـد_B µ برای بلورهای A=Er,Tb)A₂Ti₂O₇ (مارده شـده اوردن مقادیر مغناطش اسپینی و اربیتالی از نتایج میدان بلوری در پیوست ۱ آورده شـده است.



شکل۷. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) (راست) پیکربندی all-in (چب) پیکربندی 2*in*-20ut.

و μ_B ۷٫۱۲ و μ_B برای ایربیوم و تربیوم به دست میآید. $B/2\mu_B$

حالت پایهٔ بلوراکسید ایربیوم تیتانیوم متناظر با ویژه بردار 2 در شکل ۱ است. محاسبات ناهمراستا در تقریب DFT+U+SOC برای حالت پایهٔ بلور اکسید ایربیوم تیتانیوم با اسپینهای مقید در راستای متناظر با ویژه بردار 2 س نیز انجام شدند اما در نهایت این محاسبات همگرا نشدند.

مطالعات نظری روی اکسید تربیم تیتانیوم احتمال گذار فاز از حالت مایع اسپینی به یخ اسپینی را گـزارش مـیدهنـد [۱۵].

براساس مدل آیزینگ، پیکر بندی اسپینی که در آن دو تا از اسپینها روی محورهای موضعی <۱۱۱ به سمت داخل چهاروجهی و دوتای دیگر به سمت خارج از مرکز این چهاروجهیها قرار می گیرند، حالت 2001 یا حالت یخ اسپینی را تشکیل می دهند. هر دو پیکربندی اسپینی ail-in و 2001 در شکل ۷ نشان داده شدهاند. در ادامه محاسبات با پیکربندی اسپینی 2001–21 انجام شدند و آنالیز نتایج تفاوت انرژی کل در پیکربندی متا می دهد. نسبت به حالت 2001–210 کمتر نشان می دهد.

در جدول ۲ مقادیر مغناطش اکسیدهای پایروکلر ایربیوم تیتانیوم و تربیوم 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



DFT+U وجود چند جواب برای هامیلتونی چنین روش هایی است. در حقیقت با تغییر مقدار عدد اشغال اربیتالهای f در ماتریس چگالی می توانیم جوابهای نهایی را که مستقیماً باعث تغییر در انرژی کل میشوند، تغییر دهیم. این نکته قـبلاً نیـز در محاسبات DFT+U برای UO_۲ مشاهده شده است [۱۷]. مغناطش ناشی از انرژی کولنی و اصل طرد پائولی است و وقتی انرژی حالتها به درستی انتخاب نمی شوند، الکترونها به درستی در اوربیتالها نمینشینند و در نتیجه مغناطش به درستی به دست نمی آید. همچنین مقدار گشتاور مغناطیسی وابسته به پارامتر شبکه و فاصلهٔ بین اتـمهـا اسـت. بنـابراین پیـدا کـردن پارامترهای بهینه که با روش های محاسباتی سازگار باشند، می تواند نتایج قابل قبول تری 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 کمینـه مطلق قرار گیرند تا با همدیگر قابل مقایسه شوند و از نتایج آن، ساختار بهینهٔ 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

از دیگر دلایل می توان به مقادیر U اشاره کرد که ممکن است برای این دستگاه ها مقادیر نامناسبی باشند. اما برای محاسبهٔ مقدارهای U و J در دستگاه های فوق، باید ابتدا مطمئن شویم جواب های محاسبات در کمینه های مطلق خود قرار گیرند. بنابراین تا زمانی که این مشکل برطرف نشود نمی توانیم

دست به محاسبات U و J بزنیم. اما ما برای اطمینان در این مرحله، محاسبات U+U را در بلور Tb₂Ti₂O₇ با (U-J) مرحله، محاسبات V/۵ تا V/۵ انجام دادیم و طبق شکل ۸ دیدیم Ueff های مختلف ۵٫۰ تا ۷٫۵ انجام دادیم و طبق شکل ۸ دیدیم که گشتاور مغناطیسی با افزایش مقدار Ueff، فقط به مقدار که مناطر معناطیس می بابد که این اثر با توجه به تفاوت در مقدار مغناطش محاسبه شده و تجربی برای بلور Tb₂Ti₂O₇ قابل اغماض می باشد.

همچنین مقایسهٔ نتایج به دست آمده برای موادی با اوربيتالهاي f حاکي از اين واقعيت است که مسئلهٔ چند جوابي بودن منحصر به بلورهای ما نیست و به دست آوردن اختلاف در انرژی های کل (حدود ۱ الکترون ولت یا حتی بیـشتر) بـرای یک ماده، که توسط محققان مختلف با روش های محاسباتی یکسان انجام شده است، غیر محتمل نمی باشد [۱۸-۲۳]. در محاسبات ما نیز اگر تقارن را بشکنیم، جوابهایی با انرژی های کل کمتر به دست می آوریم. این موضوع نشان از تعدد جوابها دارد. متأسفانه تعداد حالتهای اولیهای که می توان 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 μ_l و μ_s از طریق نتایج تجربی در پیوست ۱ آورده شـده اسـت. همان طور که گفته شد تعداد حالتهای مختلفی که می توان برای اشغال شدگی اربیتال های f در این دو ماده در نظر گرفت بسیار زیاد است. از طرفی اضافه کردن اثـر اسـپین-مـدار بـه پیچیدگیهای مسئله بعد بیشتری میبخشد. میدانیم که اگر ، حالت پایهٔ اربیتال های $f \left(arphi_g
ight)$ ، برای این مواد را داشته باشیم، مىتوان ماترىس چگالى يعنى $\left| arphi_{g}
ight
angle \left| arphi_{g}
ight
angle
ight|$ را تـشكيل داد. و بـا استفاده از این ماتریس چگالی در شروع محاسبات DFT+U+SOC مي توان محاسبات را به سمت جواب صحيح سوق داد. منتها مشکل اینجا است که به دلیـل قـوی بـودن اثـر اسپین- مدار مجبوریم $\langle \varphi_g
angle$ را در پایههای $\langle Jm
angle$ ، که J تکانهٔ مداری کل و m عدد کوانتومی مغناطیسی کل است، بسط دهـیم در حالی که ماتریس چگالی در روشهای DFT+U با استفاده از پایههای توابع هماهنگ کروی، $\langle lm
angle$ ، که l تکانهٔ زاویـهای و

m عدد کوانتومی مغناطیسی . برای اربیتالهای Er f و To و To I = 3 است و بنابراین ماتریس چگالی ابعادی برابر با 7×7 برای هر یک از جهتهای اسپینی خواهد داشت. در حالی که این ابعاد ماتریسی اگر در پایهٔ $\langle Jm \rangle$ 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 پایهٔ $\langle g_g \rangle$ بر حسب $\langle Jm \rangle$ ها بسط داده شده است.

۵. نتیجه گیری

اربیتالهای الکترونهای 4f بسیار جایگزیده می باشند و این مشخصه موجب بزرگ شدن نقص های تابعی های تبادلی-همبستگی مانند LDA و GGA مے شوند زیرا جایگزیدگی موجب ناهمگنی اربیتال ها می شود و این تابعی ها برای توصيف اربيتال هاى همگن مثل s و p مناسب تر هستند. از اینرو برای بهبود تابعی تبادلی- همبستگی از تقریب DFT+U استفاده کردیم. محاسبات DFT+U هـر دو اکسید پایروکلر ايربيوم تيتانيوم و تربيوم تيتانيوم را منطبق بر تجرب عايق مغناطیسی پیش بینی میکند که منشاء مغناطش در این مواد برهم کنش بین الکترون های موجود در اوربیتال های 4f یونهای ایربیوم و تربیوم، میباشند. اما مغناطشهای به دست آمده از محاسبات ابتدا به ساکن برای هر دو بلور با نتایج تجربی همخوانی ندارنـد. یکی از دلایـل ایـن امـر وجـود کمینه های موضعی است که منجر به مشکلاتی در پیدا کردن حالت پایهٔ الکترونی صحیح و همچنین سخت همگرایی محاسبات در این دستگاهها می شوند. دلیل این امر وجود تعداد انتخاب های زیادی است که ماتریس چگالی در محاسبات DFT+U مى تواند به خود بگيرد. بنابراين پيدا كردن حالت پايه 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 پایهٔ دستگاه را پيدا مي کند.

پيوست ۱

تابع موج حالتهای پایهٔ یونهای ایربیوم و تربیوم در بلورهای اکسید ایربیوم تیتانیوم و تربیوم تیتانیوم، با استفاده از نتایج تجربی از بررسی اثر میدان بلوری به صورت زیر می باشند [۱۶ و ۲۴]:

$$\left| \varphi_g^{\text{Er}} \right\rangle = 0/471 \left| \pm \frac{13}{2} \right\rangle \pm 0/421 \left| \pm \frac{7}{2} \right\rangle$$

$$- 0/569 \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle \mp 0/240 \left| \pm \frac{5}{2} \right\rangle + 0/469 \left| \pm \frac{11}{2} \right\rangle$$

$$(1)$$

$$\left| \varphi_g^{\text{Tb}} \right\rangle = 0/956 \left| \pm 4 \right\rangle \pm 0/128 \left| \pm 1 \right\rangle$$

$$- 0/121 \left| \mp 2 \right\rangle \mp 0/226 \left| \mp 5 \right\rangle$$

$$(Y)$$

تابع موج حالتهای پایهٔ فوق بر حسب پایههای $\langle J, m_j \rangle$ ها نوشته شدهاند. همان طور که مشاهده می کنید ایس حالتهای نوشته شدهاند. همان طور که مشاهده می کنید ایس حالتهای پایه تبهگن هستند. مقدار لا برای Tb و Tb به ترتیب برابر با ۶ و $\frac{15}{2}$ است. برای به دست آوردن سهم مغناطش های ناشی از گشتاور مداری و گشتاور اسپینی به صورت جداگانه، با اعمال اثر عملگر بالابرنده و یا پایینبرنده به صورت متوالی روی پایههای عملگر بالابرنده و یا پایینبرنده به صورت متوالی روی پایههای اثر $\langle J, m_j \rangle$ ها می توان هر ویژه حالت را بر حسب ترکیبات خطی از $\langle s, m_j \rangle$ ها می توان هر ویژه حالت را بر حسب ترکیبات خطی در نهایت تابعموجهای حالت پایه در رابطهٔ ۱ و ۲ در پایههای در نهایت تابعموجهای حالت پایه در رابطهٔ ۱ و ۲ در پایههای $\langle m_s \rangle$

$$\begin{split} \left|\varphi_{g}^{\mathrm{Er}}\right\rangle &= 0/21 \left|6, \pm 6\right\rangle \left|\pm \frac{1}{2}\right\rangle + 0/42 \left|6, \pm 5\right\rangle \left|\pm \frac{3}{2}\right\rangle \\ &\pm 0/04 \left|6, \pm 5\right\rangle \left|\mp \frac{3}{2}\right\rangle \pm 0/16 \left|6, \pm 4\right\rangle \left|\mp \frac{1}{2}\right\rangle \\ &\pm 0/31 \left|6, \pm 3\right\rangle \left|\pm \frac{1}{2}\right\rangle \pm 0/25 \left|6, \pm 2\right\rangle \left|\pm \frac{3}{2}\right\rangle \\ &- 0/16 \left|6, \pm 2\right\rangle \left|\mp \frac{3}{2}\right\rangle - 0/35 \left|6, \pm 1\right\rangle \left|\mp \frac{1}{2}\right\rangle \\ &- 0/38 \left|6,0\right\rangle \left|\pm \frac{1}{2}\right\rangle - 0/2 \left|6, \mp 1\right\rangle \left|\frac{3}{2}\right\rangle \\ &\mp 0/12 \left|6, \mp 1\right\rangle \left|\mp \frac{3}{2}\right\rangle \mp 0/17 \left|6, \mp 2\right\rangle \left|\mp \frac{1}{2}\right\rangle \\ &\mp 0/11 \left|6, \mp 3\right\rangle \left|\pm \frac{1}{2}\right\rangle \mp 0/04 \left|6, \mp 4\right\rangle \left|\pm \frac{3}{2}\right\rangle \\ &+ 0/37 \left|6, \mp 4\right\rangle \left|\mp \frac{3}{2}\right\rangle + 0/28 \left|6, \mp 5\right\rangle \left|\mp \frac{1}{2}\right\rangle \\ &+ 0/08 \left|6, \mp 6\right\rangle \left|\pm \frac{1}{2}\right\rangle. \end{split}$$

به صورت زیر به دست می اید:

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

$$\left\langle S_{z}^{Tb} \right\rangle = \left| \left\langle \varphi_{g}^{Tb(\pm)} \left| S_{z} \left| \varphi_{g}^{Tb(\pm)} \right\rangle \right| = 1/69 \right|$$
(14)

$$\left\langle S_{\pm}^{Tb} \right\rangle = \left| \left\langle \varphi_{g}^{Tb(\pm)} \middle| S_{\pm} \middle| \varphi_{g}^{Tb(\mp)} \right\rangle \right| = 0/00 \tag{10}$$

$$\left\langle L_{z}^{Tb} \right\rangle = \left| \left\langle \varphi_{g}^{Tb(\pm)} \middle| L_{z} \middle| \varphi_{g}^{Tb(\pm)} \right\rangle \right| = 1/69 \tag{17}$$

$$\left\langle L_{\pm}^{Tb} \right\rangle = \left| \left\langle \varphi_g^{Tb(\pm)} \middle| L_{\pm} \middle| \varphi_g^{Tb(\mp)} \right\rangle \right| = 0,00 \tag{1V}$$

و در انتها مغناطش مداری و اسپینی را برای اتـم تـربیم در بلـور اکسید تربیم تیتانیوم به صورت زیر به دست میآوریم:

$$\left\langle \mu_{s\parallel}^{Tb} \right\rangle = g_s \left\langle S_z^{Tb} \right\rangle \mu_B = 3/38\,\mu_B \tag{1A}$$

$$\left\langle \mu_{l\parallel}^{Tb} \right\rangle = g_s \left\langle L_z^{Tb} \right\rangle \mu_B = 1/69 \mu_B \tag{19}$$

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:

$$\mu_{||}^{Tb} = \mu_{s||}^{Tb} + \mu_{l||}^{Tb} = 5/07\,\mu_B$$

کد Fleur بر پایهٔ نظریهٔ تابع چگالی (DFT) است و از روش FP-LAPW استفاده می کند. روش موج تخت بهبود یافتهٔ 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 ناحیهٔ بینجایگاهی (I) تقسیم شده است. رابطهٔ زیر تابع موج را در پایههای LAPW نشان می دهد.

$$\Psi_{G}(\vec{k}) = \begin{cases} \sum_{L} (a_{L}^{\mu,G}(\vec{k})u_{l}(r) + b_{L}^{\mu,G}(\vec{k})\dot{u}_{l}(r))Y_{L}(\hat{r}^{\mu}) & r \in MT \\ \\ e^{i(\vec{k}+\vec{G}).r} & r \in I \end{cases}$$

$$\begin{split} \left| \varphi_{g}^{\text{Tb}} \right\rangle = & 0/455 \left| 3, -3 \right\rangle \left| -1 \right\rangle + & 0/705 \left| 3, -2 \right\rangle \left| -2 \right\rangle \\ & + & 0/455 \left| 3, -1 \right\rangle \left| -3 \right\rangle - & 0/043 \left| 3, 1 \right\rangle \left| -2 \right\rangle \\ & - & 0/078 \left| 3, 0 \right\rangle \left| -1 \right\rangle - & 0/078 \left| 3, -1 \right\rangle \left| 0 \right\rangle \\ & - & 0/043 \left| 3, -2 \right\rangle \left| 1 \right\rangle - & 0/011 \left| 3, 2 \right\rangle \left| -3 \right\rangle \\ & - & 0/011 \left| 3, -3 \right\rangle \left| 2 \right\rangle - & 0/021 \left| 3, 3 \right\rangle \left| -1 \right\rangle \\ & - & 0/059 \left| 3, 2 \right\rangle \left| 0 \right\rangle - & 0/081 \left| 3, 1 \right\rangle \left| 1 \right\rangle \\ & - & 0/059 \left| 3, 0 \right\rangle \left| 2 \right\rangle - & 0/021 \left| 3, -1 \right\rangle \left| 3 \right\rangle \\ & + & 0/159 \left| 3, 3 \right\rangle \left| 2 \right\rangle + & 0/159 \left| 3, 2 \right\rangle \left| 3 \right\rangle. \end{split}$$

برای به دست آوردن مغناطش اسپینی و مداری، ابتدا مقدار چشمداشتی عملگرهای \hat{S}_z ، \hat{S}_z و را در $\hat{L}_z = L_x \pm iL_y$ و را در پایههای $\left< J, m_I \right> |m_s >$ هایی که از شکستن حالتهای $\left< J, m_j \right>$ ها در معادلههای ۱ و ۲ به دست آمدهاند محاسبه می کنیم.

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

$$\left\langle S_{z}^{Er}\right\rangle = \left|\left\langle \varphi_{g}^{Er(\pm)} \left| S_{z} \right| \varphi_{g}^{Er(\pm)} \right\rangle\right| = 0/17 \qquad (\Delta)$$

$$\left\langle S_{\pm}^{Er} \right\rangle = \left| \left\langle \varphi_g^{Er(\pm)} \right| S_{\pm} \left| \varphi_g^{Er(\mp)} \right\rangle \right| = 1/22 \tag{9}$$

$$\left\langle L_{z}^{Er} \right\rangle = \left| \left\langle \varphi_{g}^{Er(\pm)} \left| L_{z} \left| \varphi_{g}^{Er(\pm)} \right\rangle \right| = 0/696 \right| \tag{V}$$

$$\left\langle L_{\pm}^{Er} \right\rangle = \left| \left\langle \varphi_g^{Er(\pm)} \middle| L_{\pm} \middle| \varphi_g^{Er(\mp)} \right\rangle \right| = 3/8 \tag{A}$$

و بنابراین با داشتن g_s =2، مغناطش اسپینی در راستای (z موازی با محورهای موضعی<۱۱۱>) و عمود بر محورهای z در صفحهٔ xy برابر است با:

$$\left\langle \mu_{s\parallel}^{Er} \right\rangle = g_s \left\langle S_z^{Er} \right\rangle \mu_B = 0/34 \mu_B \tag{9}$$

$$\left\langle \mu_{s\perp}^{Er} \right\rangle = \frac{1}{2} g_s \left\langle S_{\pm}^{Er} \right\rangle \mu_B = 1/22 \mu_B \tag{10}$$

و چـون g_I =1، مغنـاطشهـای اربیتـالی مـوازی و عمـود بـر محورهای موضعی z (محورهای موضعی<۱۱۱>)بـه صـورت زیر بیان میشوند:

$$\left\langle \mu_{l\parallel}^{Er} \right\rangle = g_s \left\langle L_z^{Er} \right\rangle \mu_B = 0/696 \mu_B \tag{11}$$

$$\left\langle \mu_{l\perp}^{Er} \right\rangle = \frac{1}{2} g_l \left\langle L_{\pm}^{Er} \right\rangle \mu_B = 1/9 \mu_B \tag{11}$$

از آنجایی که مدل توصیفی برای اکسید ایربیـوم تیتـانیوم، شـبه XY میباشد و با توجه به مقادیر به دست آمده برای مغناطش ها که به صورت غالب در راستای عمود هستند، مغناطش مؤثر کل



شکل ۱. درون هر اتم، میانگین جهت گشتاورهای مغناطیسی با مقـدار m^a(r)e^a_M تقریب زده شده است و در بین اتمها به صورت برداری می باشد [۲۶].

لی ا^{μ,G} (k) و (k) ^{μ,G} (k) ضرایب بسط هستند و با اعمال شرایط مرزی پیوستگی به دست می آیند. ۳ مکان هر کره موفین تین، Y_L هماهنگهای کروی با اعداد کوانتومی *l* و *m* و(*r*)*u* جواب قسمت شعاعی معادله شرودینگر با پتانسیل کروی می باشد [۲۵]. برای استفاده از پایه های LAPW، برای مواد با مغناطش ناهمراستا در روش FLAPW، توابع پایه LAPW را برحسب آنجایی که در روش FLAPW، کرههای موفین-تین کوچکتر از کرههای اتمی هستند و از طرفی، انتخاب شعاعهای موفین از تینها تا حد زیادی، دلخواه است، با تقریب خوبی می توان از روش هیبریدی برای بررسی مغناطش ناهمراستا استفاده کرد که در این روش توابع پایه دیگر مستقل از اسپین نیستند. در روش

$$m(r) = \begin{cases} m^{\alpha}(r)e_{M}^{\alpha} & r \in MT \\ m(r) & r \in I \end{cases}$$
(Y)

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

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

بر این اساس، توابع پایـه درون کـرههـای مـوفین-تـین بـا استفاده از دو مجموعه تابع شعاعی به صورت ترکیب خطی از توابع شعاعی (u^α_{lσ}(r) و (u^α_{lσ}(r) (اندیس σ که به صورت ↑ و ↓ است، نشان دهندهٔ وابستگی توابع u به اسپین است) و در ناحیهٔ بینجایگاهی به صورت زیر تعریف می شوند:

$$\phi_{G,\sigma}(k,r) = \begin{cases} \sum_{L} \sum_{L} \left[A_{L\sigma^{\mu(\alpha)}}^{\alpha G}(k) u_{l\sigma^{\mu(\alpha)}}^{\alpha(\mu)}(r) + B_{L\sigma^{\mu\alpha}}^{\alpha G}(k) \dot{u}_{l\sigma^{\mu(\alpha)}}^{\mu(\alpha)}(r) \right] Y_{L}(\hat{r}) \chi_{\sigma^{\mu(\alpha)}} & r \in MT \\ e^{i(K+G).r} \chi_{\sigma}^{g} & r \in I \end{cases}$$

$$(\Upsilon)$$

ا 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.

α در معادلات بالا نمایش اسپینورها است. اندیس α، مشخصهٔ هر کره، I و g به ترتیب برای نشان دادن چارچوبهای موضعی و کلی به کار می روند. K و G به ترتیب بردار موج بلاخ و بردار موج در شبکهٔ 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.