

عنوان مقاله:

مقاله پژوهشی: تک لایه های دوبعدی $(\text{MnSX} \text{ (X= Cl, Br, I)})$ با فرومغناطیس ذاتی و نیمه فلزی

محل انتشار:

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران، دوره 14، شماره 2 (سال: 1403)

تعداد صفحات اصل مقاله: 17

نویسندگان:

مارال آزمونفر - دانش آموخته دکتری، گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران

محمود رضایی رکن آبادی - استاد، گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران

سید محسن مدرس سربزیدی - استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران

خلاصه مقاله:

ویژگی های ساختاری، پایداری، ویژگی های الکترونی و مغناطیسی تک لایه های دوبعدی $(\text{MnSX} \text{ (X= Cl, Br, I)})$ با استفاده از محاسبات اصول اولیه قطبش اسپینی به کمک نظریه تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفت. با محاسبه طیف فونونی تک لایه های ZnOS منگنز سولفید هالید پایداری دینامیکی آن ها تایید شد. همچنین با مطالعه ساختار الکترونی این تک لایه های ZnOS نشان داده شد که این تک لایه ها نیمه فلز یا شکاف نیمه فلزی کمابیش بزرگی می باشند، که سبب قطبش اسپینی صد درصد در این تک لایه ها می شود. همچنین با محاسبات تابعی چگالی غیرخطی نشان داده شد که تک لایه های ZnOS منگنز سولفید هالید دارای حالت پایه فرومغناطیس می باشند و محور آسان مغناطش آنها درون صفحه تک لایه ها قرار دارد. شدت ناهمسانگردی مغناطیسی تک لایه های ZnOS با افزایش جرم اتمی اتم های هالید، به دلیل قوی تر شدن جفت شدگی اسپین-مدار و نامتقارن تر شدن ساختار، افزایش می یابد. همچنین با معرفی هامیلتونی ناهمسانگرد اسپینی هایزنبرگ و تبدیلات مرتبه اول هولشتین-پریماکوف، دمای کوری این تک لایه ها به وسیله محاسبات خودسازگار مغناطش به عنوان تابعی از دما تخمین زده شد. یافته های نظری بدست آمده در این پژوهش، گروه جدیدی از مواد مغناطیسی دو بعدی برای کاربرد در زمینه اسپین ترونیک را ارائه می دهند.

کلمات کلیدی:

تک لایه های منگنز سولفید هالید، فرومغناطیس، ناهمسانگردی مغناطیسی، دمای کوری

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1961438>

