

مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۶، شمارهٔ ۱، بهار ۱۳۹۵

خواص مغناطیسی نانولولهٔ گالیوم آرسناید زیگزاگ (۹،۰) آلايش يافته با عناصر واسطه

رضا فتحى و طيبه مولاروى

دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود

(دریافت مقاله ۱۳۹۳/۷/۲۲؛ دریافت نسخهٔ نهایی ۱۰ (۱۳۹۴/۹)

چکیدہ

در این پژوهش خواص الکترونی و مغناطیسی نانولولهٔ زیگزاگ (۹،۰) GaAs خالص و آلایش یافته با ۱۱٫۱۱ درصد عناصر واسطهٔ Sc, Ti, Cr, Mn (معافت با ین پژوهش خواص الکترونی و مغناطیسی نانولولهٔ زیگزاگ (۹،۰) GaAs خالص و تقریب چگالی موضعی LDA توسط کد محاسباتی Fe, Co, Ni) مطالعه شده است. ساختار نواری نشان دهندهٔ این است که نانولوله خالص زیگزاگ (۹،۰) GaAs نیم رسانای غیرمغناطیسی با گاف نواری مستقیم است. الایش این ۱۱٫۱۱ درصد آهن و منگنز جایگزین شده در جایگاههای گالیوم در فاز فرومغناطیس در وضعیت دور و کرم در وضعیت معاصر واسطهٔ Sc, Ti, Cr, Mn مستقیم است. ساختار نواری نشان دهندهٔ این است که نانولوله خالص زیگزاگ (۹،۰) GaAs نیم رسانای غیرمغناطیسی با گاف نواری مستقیم است. آلایش ۱۱٫۱۱ درصد آهن و منگنز جایگزین شده در جایگاههای گالیوم در فاز فرومغناطیس در وضعیت دور و کرم در وضعیت نزدیک حالت فرومغناطیس در وضعیت دور و کرم در وضعیت نزدیک حالت فرومغناطیس نشان دهندهٔ خاصیت نیم فلزی با ۱۰ درصد قطبش اسپینی است. ساختار منحصر به فرد قطبش اسپینی ترازهای انرژی با دمالت فرومغناطیس در وضعیت دور و کرم در وضعیت نزدیک حالت فرومغناطیس نشان دهندهٔ خاصیت نیم فلزی با ۱۰ درصد قطبش اسپینی است. ساختار منحصر به فرد قطبش اسپینی ترازهای انرژی به می در در بایگری با ۱۰ در در قطبش اسپینی است. ساختار منحصر به فرد قطبش اسپینی ترازهای انرژی به هیبرید شدگی بین اور بیتال ۲۵ آرسنایدهای همسایه آن مربوط می شود. نتایج حاصل از این تحقیق می تواند جهت مطالعات تجربی آینده روی نیم درساناهای مغناطیسی رقیق شده مفید واقع گردد. با توجه به نتایج حاصل از این پژوهش، نانولولههای GaAs آلایشیافته با عناصر واسطه، به عنوان کاندیدای مناسب جهت کاربرد در قطعات اسپین ترونیکی پیشنهاد می شود.

واژههای کلیدی: نانولولهٔ گالیوم آرسناید، نیمرسانای مغناطیسی رقیق شده، اسپینترونیک، نظریهٔ تابعی چگالی، فلزات واسطه

۱. مقدمه

افزایش تقاضا برای وسایل الکترونیکی حالت جامد کـه کیفیـت بهتر و سرعت بیشتری نسبت به نمونه های موجود داشـته باشـد سبب توجه زیاد به گالیوم آرسـناید شـده اسـت. بـا اسـتفاده از

گالیوم آرسناید، بسیاری از اسباب ها و قطعات الکترونیکی قادرند در بدترین و سخت ترین شرایط، به خوبی کار کنند. مقاومت آن در برابر تابش و کارایی خوب آن در دماهای زیاد، استفاده از آن را در بسیاری از کاربردهای فن آوری امروزه که در جلد ۱۶، شمارهٔ ۱

تقریب چگالی موضعی (LDA-CA) [۵۵] توسط آلدر-کپرلی^۲ استفاده شده است. مجموعهٔ پایهها به صورت (DZP)، [۱] انرژی قطع به جهت مشبندی فضای حقیقی Ry۰۰۵ و تعداد نقاط k برای مشبندی منطقهٔ اول بریلوئن برای نمونهٔ خالص ۱۰۰×۱×۱ و برای نمونههای آلایشیافته برابر ۵۰×۱×۱ در راستای محوری نانولوله در نظر گرفته شده است. یاختهٔ واحد خالص دارای ۸۸ اتم Ga و ۱۸ اتم As است، که برای اتم Ga آرایش ۴S^۲۴p^۱ و برای اتم As آرایش ۴۶^۲۴p^۱ به عنوان ناخالصی سلول شامل ۴۶ اتم است: ۶۱ اتم Ga ۸۰ اتم Ks ناخالصی سلول شامل ۴۶ اتم است: ۶۱ اتم Ga ۸۰ اتم دو جایگاه Ga را با ۱۱٪ آلایش دو ناخالصی مغناطیسی اشخال دو جایگاه Ga را با ۱۱٪ آلایش دو ناخالصی مغناطیسی اشخال دو جایگاه Ga را با ۱۱٪ آلایش دو ناخالصی مغناطیسی اشخال جو da حدود ۱۰ آنگستروم خلاء داده ایم تا از برهم کنش در این راستاها صرف نظر شود. برای واهلش ساختار از روش تقریب چگالی موضعی (LDA) تا جایی که نیروهای بین اتمی هلمن

فایمن کمتر از Å ۵۰٬۰۵ شوند، بهره برده ایم. ابتدا بحث خود را با بررسی نتایج نانولولهٔ خالص ۵۵٬۸۸ (۹،۰) شکل ۱ (الف) شروع میکنیم. محاسبات نشان می دهد که این نانولوله یک نیمرسانا با گاف نواری مستقیم، با انرژی گافی در حدود ۷۵ ۵/۱ می باشد. هر اتم Ga با سه آرسناید اطراف خود پیوند برقرار کرده که طول پیوند Ga-As با ۲ آرسناید اطراف خود ۲٫۳۸ آنگستروم و با دیگری ۲٫۳۹ آنگستروم می باشد. مأخذ شبه پتانسیل های به کار رفته در این پروژه پایگاه اینترنتی ماخذ شبه پتانسیل های به کار رفته در این پروژه پایگاه اینترنتی Tرولیر – مارتین استفاده می شود [۱۶ و ۱۷].

۳. بحث و نتايج

از روی تجزیه و تحلیل چگالی حالتهای کلی اتمها و مقایسهٔ آن می توان پی برد که کدام اتمها نقش بیشتری در شکل گیری نوارهای انرژی (نوار ظرفیت و رسانش) داشتهاند و همچنین می توان سهم اوربیتالی آنها در شکل گیری نوارهای انرژی را مشخص آنها عامل جا یا فضا نقش اساسی بازی می کنند، امکان پذیر ساخته است. تحرک بسیار زیاد الکترون ها در این ماده، طراحی و ساخت ابر رایانه های سریعتر و کارآمدتر را ممکن ساخته است. مطمئناً این مادہ ویژگی ہایی دارد کے برای قطعات الکترونیکی امروزی مورد نیاز است. با توجه به روند کوچکسازی قطعات الکترونیکی و با ورود به عرصه فناوری نانو در دهههای اخیر، صنایع تولیدی و تحقیقات علمی و دانشگاهی به سمت نانوساختارهای مواد سوق پیدا کرده است [۱– ۳]. اکثریت ترکیبات گروه III-۷ هم از این قاعـده مسـتثنی نبوده و برای بررسی نانوساختارهای این ترکیبات، به صورت نظری و تجربی کارهای زیادی انجام شده است. طیف وسیعی از مواد نیمرسانا با آلایش عناصر واسطه (اتـمهـای مغناطیسـی) وجود دارند، که این مواد را عموماً بعنوان نیمرساناهای مغناطیسی رقیق DMS می شناسند [۲–۲]. اگر چه مزایای فراوانی برای استفادهٔ نیمرساناها در کاربردهای اسپینترونیک وجود دارند، اما مسائل فراوانی از جمله چگونگی انتخاب ترکیبات مواد مغناطیسی در نیم رساناها وجود دارد. زیرا به طور کلی تمام نیمرساناها غیرمغناطیسی هستند. به همین دلیل ایجاد جریان اسپینی در این مواد مشکل می باشد. محققین، برای حل این مشکل از ترکیب مواد نیمرسانا با آلایش مواد مغناطیسی یعنی همان DMSها استفاده می کنند [۸–۱۳].

۲. روش محاسبات

با توجه به مقدمهٔ ارائه شده و اهمیت گالیوم آرسناید آلایش یافته با عناصر واسطه، در این پژوهش به بررسی خواص الکترونی نظیر ساختار نواری و چگالیحالتهای جزئی و کلی و خواص مغناطیسی نانولولهٔ زیگزاگ (۹، ۰) GaAs خالص و آلایش یافته با عناصر واسطهٔ فلزی ⁽ (TM) با آلایش ۱۱٪ در دو وضعیت نزدیک و دور در دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس پرداخته می شود. محاسبات بر مبنای رهیافت نظریهٔ تابعی چگالی (DFT)، توسط کد SIESTA [۱۴] براساس تقریب شبه پتانسیل انجام شده است. برای تابع هم بستگی – تبادلی از

Y. Alder - Ceperley

^{1.} Transition Metals



شکل ۱. ساختار نانولولهٔ (۹,۰) GaAs– (الف) یاختـهٔ خـالص، (ب) یاخته در حضور ناخالصی آلاییده شده در وضـعیت نزدیـک بـه هـم، (ج) یاخته در حضور ناخالصی آلاییده شده در وضعیت دور.

نمود. چگالی حالتهای جزئی محاسبه شده در شکل ۲ (الف) که فقط اوربیتالهای Ga-۴p و As-۴p نظر گرفته شده است، چگالی حالتهای مثبت، مربوط به اسپین بالا و چگالی حالتهای منفی، مربوط به اسپین پایین هستند. در نانولولهٔ خالص GaAs، نمودار اسپین بالا و اسپین پایین برای حالت خالص که هیچ آلایشی در آن صورت نگرفته است، کاملاً متقارن بوده و در نتیجه هیچ قطبش اسپینی مشاهده نشده و نانولولهٔ ما هیچ خصلت مغناطیسی از خود نشان نمی دهد.

با بررسی ساختار نواری در نمونهٔ خالص شکل ۱ (الف) نیز می توان از مقدار گاف نواری (مستقیم یا غیرمستقیم بودن) و روند تغییرات آن، که بسیاری از خواص فیزیکی مربوط به آنها می شود، اطلاعاتی به دست آورد. قابل توجه است که در شکلهای مورد نظر جهت z در راستای افـزایش طـول نانولولـه است و دو جهت x و y در راستای افزایش قطر نانولولـه اسـت. مطابق شکل ۲ (ب) نانولولهٔ زیگزاگ GaAs دارای اندازهٔ گاف نواری ۱٫۵ eV و به صورت مستقیم می باشد و علاوه بر این در نمودار ساختار نواری، سطح انرژی صفر بیانگر موقعیت تراز فرمی می باشد که با خط افقی مستقیم نشان داده شده است. در نیمرساناهای ذاتی که چگالی الکترونها و حفرهها بـا هـم برابـر است، تراز فرمی در وسط گاف نواری بین نوار ظرفیت و نـوار رسانش قرار می گیرد. در نیمرسانای نوع n که چگالی الکترونها بیشتر از حفرهها است، تراز فرمی به نوار رسانش و در نیمرساناهای نوع p که چگالی حفرهها بیشتر از الکترونها است، تراز فرمی به نوار ظرفیت نزدیک تر می شود. با توجـه بـه



شکل ۲. (الف) ساختار نواری نانولوله های خالص زیگزاگ GaAs (ب) چگالی حالت های کل.

ساختار نواری نانولولههای زیگزاگ، شاهد این هستیم که در یک سری قطرہا نوارہای ظرفیت نزدیک تراز فرمی (رفتار نوع p)، و در برخی دیگر نوارهای رسانش نزدیک به تراز فرمی (رفتار نوع n)، قرار میگیرند که این می تواند ناشی از اثر قطر و انحنای نانولوله و تأثیر آن در هیبریدشدگی اوربیتالی باشد [۱۸]. در حالت خالص فاصلهٔ بین یک اتم گالیوم با سه اتـم آرسـناید مجاورش به ترتیب ۲٫۳۸ ، ۲٫۳۸ و ۲٫۳۹ آنگستروم می باشد که می توان به صورت میانگین طول پیوند بین Ga و As در نانولولهٔ خـالص GaAs را ۲٬۳۸ آنگستروم در نظر گرفت. گشتاور مغناطیسی کل (₈~) در ساختار نانولولـهٔ خـالص (۹،۹) صفر است، که نشان از غیرمغناطیسی بودن ساختار بوده و سهم (₈) برای گالیوم و آرسناید مقداری برابر و با علامت مخالف است، انرژی گاف برای هر دو اسپین بالا و پایین نیـز بـه دلیـل غیرمغناطیسی بودن نانولولهٔ خالص (۹، ۰) یک مقدار خواهند داشت .گشتاور مغناطیس کل ، گشتاور مغناطیس سهم گـالیوم و آرسناید ، اندازهٔ گاف نواری در دو حالت اسپین بالا و پایین، طول نانولوله و رفتار ناخالصی در جدول ۱ آورده شده است.

با آلایش دو عنصر Sc (شکل ۳ (الف)) و Ti ((شکل ۳ (ب)) در حالت های فرومغناطیس و پادفرومغناطیس در دو وضعیت نزدیک و دور نیز شاهد یک بی نظمی در دستگاه هستیم که باعث کشیده شدن ساختار در راستای قطر نانولوله میشود و این امر به دلیل شعاع های مختلف اتمی Sc و Ti است که با جانشانی کردن در موقعیت انتخابی Ga تغییراتی را در دستگاه اعمال میکند و ساختار به هم می ریزد.



شکل ۳. ساختار بهینه شدهٔ نانولولهٔ (۹،۰)GaAs، (الف) ابرسلول ۳×۱×۱ در حضور ناخالصی Sc و Ti در وضعیت نزدیک در حالت فرومغناطیس (FM) (ب) ابرسلول ۳×۱×۱ در حضور ناخالصیSc و Ti در وضعیت دور در حالت فرومغناطیس (FM). قابل توجه است که بـرای حالـتهـای فرومغناطیس (FM) و پادفرومغناطیس (AFM) ساختارها شبیه به هم بوده و فقط ساختارهای حالت فرومغناطیس (FM) در شکل آورده شده است.

جدول ۱. گشتاور مغناطیس کل و سهم گالیوم و آرسناید ، اندازهٔ گاف نواری در دو حالت اسپین بالا و پایین، طول نانولولـه و رفتـار الکتریکـی نانولولهٔ خالص (۹،۰) گالیوم آرسناید.

ساختار	انرژی گاف اسپین بالا (eV)	انرژی گاف اسپین پایین (eV)	انرژی کل (eV)	B~ گاليوم	<i>B~</i> آرسناید	<i>B</i> ~ کل	رفتار الکترونیکی
خالص (٩، •)	١٫۵	۵٫۱	_20815,77	$+\circ_{/}\circ\circ\Lambda$	- °, ° ° A	o	نيمرسانا

(برای حالت های فرومغناطیس (FM) و پاد فرومغناطیس (AFM) اشکال ساختاری نانولوله ها شبیه به هم بوده اند که فقط اشکال مربوط به حالت فرومغناطیس (FM) در (شکل ۳ (الف) و (ب)) برای هر دو عنصر SC و Ti آورده شده است.

با توجه به بررسی نمودار چگالی حالتهای نمونههای آلایش یافته در وضعیت نزدیک (شکل ۴) ۱۱/۱۱٪ فاز فرومغناطیس و (شکل ۵) ۱۱/۱۱٪ فاز پادفرومغناطیس با آلایش (۲۵، Mn ۲۲، Ti ، Mn ۵۲) ۵۱، ۵۱٪ فاز پادفرومغناطیس با آلایش (۲۵، ۲۰ اسپین پایین اطراف تراز فرمی هستیم. این عدم تقارن با توجه به گشتاورهای ایجاد شده بیانگر ایجاد یک قطبش اسپینی است. با آلایش دادن عنصر SC (شکل ۴ و ۵ (الف)) به ترتیب در دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس نیمرسانای گالیوم آرسناید، به دلیل نداشتن حالت در تراز فرمی و داشتن تقارن کامل غیرمغناطیسی میباشد، برای عنصر Ti (شکل ۴ و ۵ (ب)) نیز در حالت

مناسب اسپین بالا با اسپین پایین نیم رسانای مغناطیسی رقیق شده خواهیم داشت، برای عنصر Cr (شکل ۴ (ج)) رفتار نیم فلزی را شاهد هستیم که برای اسپین بالا در تراز فرمی دارای حالت است، در حالی که در اسپین پایین هیچ حالتی نداریم، در فاز پادفرومغناطیس (شکل ۵ (ج)) نیز هیچ حالتی در تراز فرمی نداریم و به دلیل متقارن بودن حالتها در اسپین بالا و پایین نشان از نیم رسانای غیرمغناطیسی است.برای عنصر Mn (شکل ۴ (د)) حاکی از آن است که رفتار دستگاه در حالت فرومغناطیسی برای اسپین بالا و پایین در تراز فرمی حالتی وجود نداشته و غیرمتقارن نیز می باشد که به مغناطیسی بودن نیم رسانا اشاره دارد، در حالی که حالت پادفرومغناطیس (شکل ۴ (د))، رفتار فلز غیرمغناطیسی پیدا کرده است. چون در تراز فرمی اسپین بالا و اسپین پایین دارای حالت می باشد. عنصر ۴ (شکل ۴ و ۵ (ه)) نیز برای هر دو مناطیسی داری ها در مالی می بای و می داری مالیت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس به رفتارهای می دارای مالیت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس به رفتارها م



شکل ۴. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) چگالی حالتهای کلی و جزئی سهم اوربیتال ۴۶ آرسناید و ۳۵ عناصر واسطه با ۱۱٬۱۱٪ آلایش در وضعیت نزدیک حالت فرومغناطیس (FM) برای (الف) Sc (ب) Ti (ج) Cr (د) Mn (ه) Fe (و) Co و (ز) Ni.

(شکل ۴ (و)) که فرومغناطیس بودن فاز، ساختار ما را به صورت فلز مغناطیسی و فاز پادفرومغناطیس (شکل ۵ (و)) ساختار ما را به صورت فلز غیرمغناطیسی نشان می دهد، که در فلز مغناطیسی تقارن بین اسپین پایین و اسپین بالا است و در تراز فرمی نیز حالت وجود در حالی که در حالت پادفرومغناطیس برای تمامی عناصر واسطه در وضعیت دور، تقارن برای اسپینهای بالا و اسپینهای پایین نیز مشهود است. با آلایش دادن عنصر SC (شکل ۶ (الف)) و (شکل ۷ (الف)) در حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس شاهد نیمرسانای غیرمغناطیسی هستیم. برای عنصر Ti شکل ۶ (ب) و شکل ۷ (ب) مغناطیسی و غیرمغناطیس و پادفرومغناطیس به ترتیب شاهد مغناطیسی و غیرمغناطیس و پادفرومغناطیس به ترتیب شاهد مغناطیسی و غیرمغناطیس و پادفرومغناطیس می و در مورد عنصر رای دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس به ترتیب شاهد مغناطیسی و غیرمغناطیسی بودن نیمرسانا هستیم و در مورد عنصر مغناطیسی و نیمرسانای کا (ج) در حالت هستیم و در مورد دنص و پادفرومغناطیسی و نیمرسانای فلز مغناطیسی و نیمرسانای



شکل ۵. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) چگالی حالتهای کلی و جزئی سهم اوربیتال ۴p آرسناید و ۳۵ عناصر واسطه با ۱۱٬۱۱٪ آلایش در وضعیت نزدیک حالت پادفرومغناطیس (AFM) بـرای (الـف)sc (ب)Ti، (ج)Td، (د)Mn، (و)Ge و (ز)N.

و شکل ۷ (د) نیز در حالت فرومغناطیس رفتار نیم فلز و در حالت پادفرومغناطیس رفتار فلز مغناطیسی را شاهد هستیم. شکل ۶ (ه) و شکل ۷ (ه) نیز به ترتیب بیان گر مغناطیسی و غیرمغناطیسی بودن فلز مورد نظر با آلایش عنصر Fe است، در شکل ۶ (و) و شکل ۷ (و) برای عنصر Co در دو فاز فرومغناطیس و پادفرومغناطیس شاهد مغناطیسی و غیرمغناطیسی بودن نیمرسانا هستیم. با بررسی نمودار چگالی حالتهای جزئی این نمونه ها کاملاً مشخص است که بیشترین سهم در حالت های قطبشی ایجاد شده ناشی از سهم این هیبریدشدگی در آلایش با عناصر مختلف، متفاوت است. از طرفی می توان به سهم بیشتر Cr و Co در نوار ظرفیت و سهم از طرفی می توان به سهم بیشتر Cr و Co در نوار ظرفیت و سهم از مرد.

برای هر دو فراز فرومغناطیس و پادفرومغناطیسی در دو وضعیت دور و نزدیک، گشتاور مغناطیسی کل ساختار (GaTMAs)



شکل ۶. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) چگالی حالت های کلی و جزئی سهم اوربیتال ۴p آرسناید و ۳۵ عناصر واسطه با۱۱٬۱۱٪ آلایش در وضعیت دور، حالت فرومغناطیس (FM) برای (الف) Sc (ب) Ti (ج) Cr (د) Mn (ه) Fe و (و) Co.

سهم گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه (TM) به ازای هر اتم در ایـن گشتاور كل، سهم گاليوم، سهم آرسنايد ، فاصلهٔ بين ناخالصيها پس از آلایش، اندازهٔ گاف نواری در دو حالت اسپین بالا و پایین، طول نانولوله، فاز پایدار مغناطیسی و مقادیر انرژی کـل حالـتهـای آلایش یافته محاسبه شده و در جداول ۲ و ۳ خلاصه و مقایسه شده است. گشتاور کل ساختار (کے حاصل جمع گشتاور اتے ہای (گالیوم و آرسناید و فلز واسطه) میباشـد _B~ و سـهم گشـتاور جزئی اتمهای عناصر واسطه بـرای هـر دو فـاز فرومغنـاطیس و پادفرومغناطیس در هر دو وضعیت نزدیک و دور در جـداول ۲ و ۳ گـزارش و در شـکل هـای ۸ و ۹ رسـم شـده اسـت. در فـاز فرومغناطیسی بیشترین سهم در گشتاور کلی ایجاد شده در ساختار، ناشی از گشتاورهای موضعی TMها است. در <mark>جـدول۲</mark> برای حالت فرومغناطیس از Cr به سمت Mn شاهد افزایش گشتاور مغناطیسی کل و از Mn به سـمت Co شـاهد کـاهش آن هستیم، Mn بیشترین مقدار گشتاور مغناطیسی را در بین دیگر عناصر واسطه دارد (شکل ۸ (الف)) و این به دلیل نیمـهپـر بـودن



شکل ۷. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) چگالی حالت های کلی و جزئی سهم اوربیتال ۴p آرسناید و ۳۵ عناصر واسطه با ۱۱٬۱۱٪ آلایش در وضعیت دور، حالت پادفرومغناطیس (AFM) برای (الف) Sc (ب) Ti (ج) Cr (ج) ده (Mn (ه) ها و (و) Co.

لایهٔ ۳۵ آن می باشد چون که در این حالت فقط حالت های با اسپین پایین و یا فقط با اسپین بالا داریم، و برای گشتاور کـل _B در بین عناصر واسطهٔ مذکور، باز هم عنصر Mn بیشترین سهم را به دلیل تأثیرپذیری سهم آرسینایدهای اطراف آن دارد. از بین عناصر واسطه با آلایش دادن دو عنصر Mn به نانولوله خـالص GaAs در دو حالـت فرومغنـاطيس و پادفرومغنـاطيس، شاهد تغيير فاصلهٔ بين دو عنصر آلايش شده هستيم، كه در حالت پادفرومغناطیس فواصل بین دو عنصر آلایش یافته نسبت به فرومغناطیس بیشتر شده است. در جدول ۳ برای حالت فرومغناطیس از Sc به سمت Fe شاهد افزایش گشتاور مغناطیسی کےل و از Fe بے سےمت Co شےاہد کےاہش آن ہستیم، Mn نیےز بیشترین مقدار را در بین دیگر عناصر واسطه دارد (شکل ۹ (الف)) و برای گشتاور کل _B~ در بین عناصر واسطه مـذکور، عنصر Fe نیز بیشترین سهم را به دلیل آرسنایدهای اطراف آن دارد. از بین عناصر واسطه با آلایش دادن دو عنصر Cr به نانولولهٔ خــــــــالص GaAs در دو فــــــــاز فرومغنـــــــاطيس و



شکل ۸. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) گشتاور کل ساختار GaTMAs (_B~) و سهم گشتاور اتم اول و دوم (_B~) عناصر واسطه در دو حالت (الف) فرومغناطیس (ب) پادفرومغناطیس در وضعیت نزدیک.



شکل ۹. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) گشتاور کل ساختار GaTMAs (₈~) و سهم گشتاور اتم اول و دوم (₈~) عناصـر واسـطه در دو حالت (الف) فرومغناطیس (ب) پادفرومغناطیس در وضعیت دور.

جدول ۲. گشتاور مغناطیس کل ساختار(GaTMAs) در دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتمهای گالیوم و آرسناید در ساختار، فاصله بین ناخالصیها پس از آلایش، اندازهٔ گاف نواری در دو حالت اسپین بـالا و پـایین، طـول نانولولـه و رفتـار الکتریکی و فاز پایدار مغناطیسی در دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس در وضعیت نزدیک.

	فاز	Sc	Ti	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
dTM-TM	FM AFM	٣,٧۵	٣/٩٣	۳٫۵۳	۲٫۹۹	۲٫۷۳	٣٫١۶	۲,۶۷
(Å)		٣٫٧٢	٣٫٢٩	۳,۲۶	١,۴	۳,۵۵	٣٫۵٩	۲٬۵۷
طول نانولوله	FM AFM	۶,۴۸	۶,۷۳	۶,۷۵	۶,۸۱	۶,۷۵	۶٫۷۴	۶٫۷۱
(Å)		۶,۴۹	۶,۵۳	9,V9	۶,۷۱	۶,۷۲	۶٫۷۳	۶,۵۶
گشتاور گاليوم	FM	۰	۰٬۰۵	-•,YY	۰٫۱۲	۵۲٬۰	°,°۴	۰
(~ _B)	AFM		- °, ° 1	-•,••۵	-•,•• \	٥/٥٠١	-•,• ٩	۰
گشتاور آرسناید	FM AFM	۰	-1/°°A	۵۴٫۲_	۰٬۰۹	•,٣٧	۰٬۰۵	۰
(~ _B)		٥	_•,•۲١	•,••۵	_°,° ° ۱	_°,° ° ۲	٥,٠٠١	۰
1 * (TM)	FM	۰	١,۴٧	4,49	۴٫۸٩	۳,۶۸	١,۵٧	۰
فساورنا خالصی (۱۱۷۱) ایم اون	AFM	٥	-1,44	-4,49	_*,^*	_٣/٨۴	_۲/°۳	•
• " (TM) • . " ! · ! · ! · ! ·	FM	۰	١,۴٧	4,49	۴٫۸٩	۳,۶۸	١,۵٧	۰
کستاورنا خالصی (۱۱۷۱) انم دوم	AFM	۰	۱,۵	۴,۴۶	۴٫۸۳	٣٨۴	۲٫۰۳	•/••1
$(C_{0}TMA_{0})(z_{0})$	FM	۰	1,99	۶,۰۵	١٠,٠٠٣	۸٫۰۰۲	٣,٢٤٧	•
کستاور کل ساختار (B ²) (CarivitAs)	AFM	۰	-•/•• *	۰	-•,• • Y	-•/••1	-•,•A٩	•/••1
(\mathbf{eV}) NL \mathbf{e} (\mathbf{i}	FM	1,10	•_۴۸	•	٣٧)	١٦٣٣	٥	۰
	AFM	1,10	•,*V	۳۳\.	•	• ⁄^	۰٫۱۲	•,77
(eV) د باید د.ا.: (i)	FM	1,10	۲,۴	1,47	1,44	•,44	٥	۰
	AFM	1,10	•, * V	৽ৢ৻৺۲	•	۰,۸	۰٫۱۴	•,77
رفتار الكتريكي	FM AFM	NMS NMS	DMS NMS	HM NMS	DMS NMM	DMS NMS	MM NMS	NMM NMS
اختلاف انرژی (eV)		0,011	_1,007	0,047	1,184	_•/\A9	_°,°V	• /V¥
EAFM-EFM		· · ·	/*	,	,		/	'
فاز پايدار مغناطيسى		FM	AFM	FM	FM	AFM	AFM	FM

علائم اختصاری در جدول فوق بیانگر: NMS نیمرسانای غیرمغناطیسی DMS: نیمرسانای مغناطیسی رقیقشده

MM: فلز مغناطیسی NMM: فلز غیرمغناطیسی HH: نیم فلز است. رضا فتحى و طيبه مولاروى

جلد ۱۶، شمارهٔ ۱

جدول ۳ . گشتاور مغناطیس کل ساختار (GaTMAs) در دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتمهای
گالیوم و آرسناید در ساختار، فاصلهٔ بین ناخالصیها پس از آلایش، اندازهٔ گاف نواری در دو حالت اسپین بـالا و پـایین، طـول نانولولـه و رفتـا
الکتریکی و فاز پایدار مغناطیسی در دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس در وضعیت دور.

	فاز	Sc	Ti	Cr	Mn	Fe	Co
dTM-TM (Å)	FM AFM	۴٫۳۰	۴٫۳۱	۴,۵۳	۶٫٧١	۶٫۵۴	9,99
		۴,۲۸	۴,۳۸	۶,۰۳	8,81	۶,۵۲	۶,۷۳
طول نانولوله	FM	۶٬۵۳	۶٬۵۹	9,9V	۶٫۷۳	۶ _/ VV	۶٫٧١
(Å)	AFM	۶,۵۴	8,9¥	۶,۷۵	۶٫۷۵	۶ _/ VV	۶٫٧١
گشتاور گاليوم	FM AFM	o	۰٬۰۲	۳۲ - ۰	۰٬۰۱	۰,۶۵	۰٫۴۵
(~ _B)		٥	٥	-•,•• \	- °, ° ° \	٥	٥
گشتاورآرسنايد	FM AFM	0	۳۰_/	-1/9	-1,08	1,42	•٫٨٩
(~ _B)		٥	٥	٥	٥,٠٠۵	٥	_°,° °)
گشتاورناخالصی (TM)	FM AFM	0	١٫۵	4,44	۴٫۸۱	٣/٩۴	۲٫۳۱
اتم اول		٥	۰	-۴,۳۶	-۴,۸۱	-۳ /۹۲	-7,74
گشتاورناخالصی (TM)	FM AFM	o	١٫۵	۴,۴۳	۴٫۸۱	٣,٩۴	۲٫۳۱
اتم دوم		o	٥	۴,۳۶	۴٫۸۱	٣/٩٢	۲,۳۴
گشتاورکل (_B ~)	FM AFM	0	١,٩٩	۶,۶۵۱	۸٫۰۶	٩,٩۶	۵٫۹۷
		o	٥	°,° ° ° Y	۰٫۰۰۴	٥	_°,° ° \
گاف نواری بالا (eV)	FM AFM	٥٫٧١	۰٬۱۵	0	1,49	•,99	0
		٥٫٧١	1,18	°/18	٥	٣٫٥	٥
گاف نواری پایین (eV)	FM AFM	٥٫٧١	۰٫۹۷	٥	0	0	0
		٥٫٧١	1,18	•/18	۰	٣٫٣	٥
رفتار الكتريكي	FM AFM	NMS NMS	DMS NMS	MM NMS	HM NMM	HM NMS	MM NMM
اختلاف انرژی (eV)		۰٬۰۰۰۸	_°/V۴۴	•,440	°,°74	_°/°٩١	_°/°YA
EAFM-EFM							
فاز پايدار مغناطيسي		FM	AFM	FM	FM	AFM	AFM

NMM پاد فرومغناطیس، شاهد تغییر فاصلهٔ بین دو عنصر آلایش شده هستیم که در حالت پادفرومغناطیس فواصل بـین دو عنصـر آلایش یافته نسبت به فرومغناطیس بیشتر شده است.

با توجه به شکل های ۸ و ۹ و همچنین جداول ۲ و ۳ از بین عناصر واسطه آلایش یافته با نانولولهٔ گالیوم آرسناید، گشتاور مغناطیسی عنصر Mn بیشترین مقدار را دارد. گشتاور کل ساختار GaTMAs که حاصل جمع گشتاور اتمهای (گالیوم و آرسناید و فلز واسطه) می باشد، در زمان آلایش Fe در حالت دور بیشترین مقدار را دارد در صورتی که در حالت نزدیک برای آلایش Mn بیشترین مقدار به دست آمد، که این تفاوت در اثر تغییر فاصلهٔ

اتم ها و برهم کنش آنها و در نتیجه تغییر سهم گشتاورهای اتم های همسایهٔ گالیوم و آرسناید و تأثیر آن روی سهم گشتاور کل دستگاه، به وجود آمده است، که میزان این تغییرات در جداول ۲ و ۳ گزارش شده است. در هر دو وضعیت آلایش ۱۱٬۱۱٪ اختلاف انرژی ((eV) EAFM-EFM) محاسبه شده در جداول ۲ و ۳ اختلاف انرژی فازهای فرومغناطیسی و پادفرومغناطیس است که به صورت فرومغناطیس – پادفرومغناطیس $A\Delta = 3$ تعریف شده است. اختلاف انرژی مثبت بیانگر فاز پایدار فرومغناطیسی می باشد. این اختلاف انرژی برای دو وضعیت دور و نزدیک



شکل ۱۰. (الف) برهم کنش ابرتبادلی مستقیم: جفت شدگی دو یون TM مجاور هم به صورت پادفرومغناطیس توسط یک آنیون (یون مثبت) اشتراکی. (ب) برهم کنش ابرتبادلی غیرمستقیم: جفت شدگی فرومغناطیسی اسپینهای جایگزیده به واسطهٔ الکترونهای رسانش [۲۲].

(Ti ،Co ،F ،Sc ،Ni ،Mn) و Ti ،Co ،F ،Sc ،Ni ،Mn جداول ۲ و ۳ و اختلاف انرژی های به دست آمده، فاز پایدار مغناطیسی برای هر دو وضعیت دور و نزدیک برای آلاینـدههـای (Cr ، Sc ، Ni ، Mn) فرومغناطیس و برای آلاینده های (Cr ، Fe وTi) پادفرومغناطیس به دست آمـد. فـاز پایـدار مغناطیسـی در آلایش عناصر یاد شده در هر دو وضعیت دور و نزدیک وابسته به فاصلهٔ عناصر و موقعیت عناصر واسطه از یکدیگر نبوده و در هر دو وضعیت به یک صورت بـه دسـت آمـد. ایـن رفتـار را می توان با استفاده از مدل ابر تبادلی زنر توجیه کرد [۱۹ و ۲۰]، نظریهای که توسط زنر مطرح شد نشان میدهد که برهمکنش ابرتبادلی [۲۱] مستقیم، بین لایهٔ d نیمه پر الکترون های یون های کاتیونی TM و اوربیتالهای p کاملاً پر آنیونهای اطراف آن، به صورت پادفرومغناطیس (شکل ۱۰ (الف)) است. به دلیل این که الکترون های لایهٔ d دو اتم TM مجاور هم، تـراز p مشـابه را پر میکنند، بر طبق اصل طرد پائولی، اسپین آنها باید در جهت خلاف هم قرار گیرد که این باعث جفت شدگی پادفرومغناطیسی بین نزدیکترین کاتیونهای TM همسایه، توسط آنیون اشتراکی میشود. از طرفی دیگر برهمکنش غیرمستقیم ابر تبادلي بين الكترون هاي لاية جايگزيدة d كاتيون هاي TM، توسط واسطه گری حامل های نواری غیرجایگزیده، تمایل به نظم لایه های d نیمه پر TM به صورت جفت شدگی فرومغناطیس دارد (شکل ۱۰ (ب)) در مدل زنر رفتار فرومغناطیسی فقط

زمانی امکان دارد که بـرهمکـنش ابرتبـادلی غیرمسـتقیم بـر برهمکنش ابرتبادلی مستقیم غالب باشد.

۴. نتیجهگیری

در این پژوهش خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله زیگزاگ (۹،۹) گالیوم آرسناید خالص و آلایشیافته با عناصر واسطه(Ni، Fe، Co، Ni) و Sc و Ti، Cr، Mn، Fe، Co، استفاده از رهیافت نظریهٔ تابعی چگالی و تقریب چگالی موضعیLDA توسط کد محاسباتی SIESTA مطالعه شد. ساختار نانولولهٔ زیگزاگ (٩،٩) گاليوم أرسنايد آلايش يافته بـ ٢ اتـم واسـطه (١١،١١٪) در موقعیت های متفاوت دور و نزدیک با دو آرایش مختلف مورد بررسی قرار گرفت. آلایش نانولوله با جایگزینی عناصر واسطه به جای اتم، ای Ga صورت گرفت. نتایج ساختار نواری و چگالی حالت ها نشان داد که نانولولهٔ زیگزاگ (۰،۹) گالیوم آرسناید خالص نیمرسانای غیرمغناطیسی هستند، درحالي كه نانولولههاي آلايش يافته با عناصر واسطه، بسته به نوع آلایش، رفتارهای متفاتی نظیر: نیمرسانای مغناطیسی، نیمرسانای غیرمغناطیسی، فلز مغناطیسی، فلز غیرمغناطیسی و رفتار نیمفلزی از خود نشان دادند. گشتاور مغناطیسی کل و سهم گشتاور مغناطیسے عناصر واسطه در ساختارهای مختلف مورد بررسی، محاسبه شد. بیشینهٔ گشـتاور مغناطیسـی در حضـور آلایـش Mn مشـاهده شـد. گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه برای آلایش های Sc ، Ti و Cr افزایش یافته و بیشینهٔ مقدار را آلایش Mn نشان می دهد. در حالی که با افزایش عدد اتمی از Fe به سمت Ni گشتاور مغناطیسی کاهش می یابد. در آلایش ۱۱٬۱۱٪ نانولولهٔ (۰،۹) گالیوم آرسناید با Fe و Mn فاز پایدار مغناطیسی به ترتيب آنتی پادفرومغناطیس و فرومغناطیس به دست آم.د. رفتار نيم فلزي با ١٠٠ درصد قطبش اسپيني، به ازاي آلايش ۱۱٬۱۱٪ نانولولهٔ (۰،۹) گالیوم آرسناید با Fe و Mn در فاز فرومغناطیس مشاهده شد. در فاز فرومغناطیسی بیشترین سهم در گشتاور کلی ایجاد شده در ساختار، ناشی از گشتاورهای موضعی عناصر واسطه است. ساختار منحصر به جلد ۱۶، شمارهٔ ۱

رقیق شده مفید واقع شود. با توجه به نتایج حاصله از این پژوهش و انعطاف پذیری نانولوله های GaAS در حضور آلایش و مشاهدهٔ خاصیت فرومغناطیس در دمای اتاق، نانولوله های GaAs آلایشیافته با عناصر واسطه به عنوان گزینه ای مناسب جهت کاربرد در قطعات اسپین ترونیکی، فیلترهای جریان اسپینی و تزریق کننده های جریان اسپینی پیشنهاد می شوند.

Berlin Heidelberg (2008).

- 13. C Liu, F Yun, H Morkoc, J. Mat. Sci: Materials in Electronics. 16 (2005) 555.
- 14. J M. Soler, E Artacho, J D Gale, A Garcia, J Junquera, P Ordejon, and D Sanchez-Portal, *J. Phys: Condens. Matter* **14** (2002) 2745.
- 15. J P Perdew, K Burke, and M Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865.
- N Troullier and J Martins, *Phys. Rev.* B 43, 3 (1991-2) 1993.
- 17. N Troullier and J Martins, *Phys. Rev.* B **43** (1991) 8861.
- Y Guo, X Yan and Y Yang, "First-principles Study of Narrow Single-walled GaN Nanotubes", College of Science, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Jiangsu 210016, China (2000).
- 19. C Zener, Phys. Rev. 81 (1951) 440.
- 20. T Dietl, H Ohno, F Matsukura, J Cibert, and D Ferrand, *Science* **287** (2000) 1019.
- 21. P W Anderson, Phys. Rev., 79 (1950) 350.
- N. Akdogan; "Origin of Ferromagnetism in Oxidebased Diluted Magnetic semiconductors", Ruhr-Universitat Bochum, Germany (2008).

فرد قطبش اسپینی ترازهای انرژی به هیبریداسیون بین اوربیتالهای تراز ۳۵ عناصر واسطه و اوربیتالهای ۴۶ آرسنایدهای همسایهٔ آن مربوط می شود. نتایج بیانگر فاز پایادار فرومغناطیس در حضور ۲۵، ۹۲ Cr و Sc و پادفرومغناطیس در حضور ۲۵، ۶۲ و Co در دو وضعیت دور و نزدیک می باشد. نتایج حاصل از این تحقیق می تواند جهت مطالعات تجربی آینده روی نیم رساناهای مغناطیسی

مراجع

- 1. P M Krstaji , V A Ivanov, F M. Peeters, V Fleurov and K Kikoin, *Europhys. Lett.* **61**, 2 (2003) 235.
- L Loureiro da Silva, M A Boselli, X F Wang, J Weberszpil, S S Makler, and I C da Cunha Lima, *Braz. J. Phys.* 32, 2 (2002).
- J Hellsvik, B Skubic, L Nordström, B Sanyal, O Eriksson, P Nordblad, and P Svedlindh, *Phys. Rev.* B 78 (2008) 144419.
- 4. H Li, et al, J. Phys. Chem, 114 (2010) 11390.
- 5. Y P Song, P W Wang, X H Zhang, and D P Yu, *Physica* B **368** (2005) 16.
- 6. Q Wang, Q Sun, and P Jena, *Nano Lett.* **5** (2005) 1587.
- 7. Q Wang, Q Sun, and P Jena, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 167202.
- 8. H Ohno, J. Vac. Sci. Technol. B 18 (2000) 2039.
- 9. H Ohno, F Matsukura, and Y Ohno, JSAP International 5 (2002) 4.
- N Akdogan, "Origin of Ferromagnetisimin Oxide-Based Diluted Magnetic Semiconductors", PhD. thesis Ruhr-University Bochum, Germany (2008).
- H C Kandpal, G H Fecher and C Felser, J. Phys. D: Appl. Phys. 40 (2007) 1507.
- 12. M Getzla, "Fundamentals of Magnetism", Springer,