

بررسی رفتار نیمه‌فلزی و هم‌ترازی نوارهای مرز مشترک Mn₂FeAl/GaAs(001) بر پایه نظریه تابعی چگالی

آرش بوچانی^{*}، ملیحه امیری

گروه فیزیک، واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران

دریافت: 1396/08/06 ویرایش نهائی: 1397/12/06 پذیرش: 1397/12/25

چکیده

ویژگی‌های الکترونی، انحراف نواری و مغناطیسی مرز مشترک Mn₂FeAl/GaAs توسط محاسبات اصول اولیه با استفاده از نظریه تابعی چگالی و تقریب گرادیان تعمیم‌یافته (GGA) مورد بررسی قرار گرفت. محاسبات نشان دادند که مرز مشترک Mn-Mn/Ga از نظر انرژی پایدارتر از دیگر مرز مشترک‌های قابل بررسی بود. مطالعه هم‌زمان سد شاتکی و پتانسیل الکتروستاتیکی برای این ساختار نشان‌دهنده هم‌ترازی نواری نوع III (شکسته) می‌باشد، جایی که لبه نوار ظرفیت Mn₂FeAl بالاتر از لبه نوار رسانش گالیوم آرسناید می‌باشد. ما یک انحراف نوار ظرفیت 1/54 الکترون‌ولت و یک انحراف نوار رسانش 1/39 الکترون‌ولت را یافتیم. از این رو Mn₂FeAl/GaAs(001) برای کاربردهای GMR و TMR پیشنهاد می‌شود. در این مرز مشترک شاهد بروز یک اختلاف به میزان 0/056 میکروولت و نیز بروز رفتار نیمه‌فلزی هستیم.

کلیدواژگان: مرز مشترک، انحراف نواری، نظریه تابعی چگالی، سد شاتکی، رفتار نیمه‌فلزی

مقدمه

شده است [2]. بنابراین گالیوم آرسناید زیرلایه مناسبی برای رشد لایه‌های Mn₂FeAl خواهد بود. شناخت رفتار هم‌ترازی نواری² انرژی در مرز مشترک نیمه‌فلز/نیم‌رسانا طبق مدل اندرسون [3 و 4] یک نیاز برای طراحی دستگاه‌های با ساختار چندلایه‌ای مانند لیزرهای آبخاری و ترانزیستورهای با تحرک الکترونی بالا می‌باشد.

جزئیات محاسبات

محاسبات اصول اولیه بر مبنای نظریه تابعی چگالی و تقریب گرادیان تعمیم‌یافته (GGA) در کد Wien2K و به کار گرفته شد [5]. تعداد نقاط K در منطقه اول

گالیوم آرسناید نیم‌رسانای مهمی که به سبب داشتن خواص فوتوالکتریک عالی توجهات بسیاری را به خود جلب نموده است. آلیاژهای هویسلر با ترکیب استوکیومتری X₂YZ به عنوان نیمه‌فلز¹ معرفی شده و بسیاری از خواص مغناطیسی و اسپینترونیکی آنها مورد مطالعه قرار گرفته است [1]. رفتار مرز مشترک بین دو ماده نیمه‌فلز و نیم‌رسانا بسیار حائز اهمیت است چرا که مرز مشترک قادر به از بین بردن خاصیت نیمه‌فلزی می‌باشد. ثابت‌های شبکه ساختارهای Mn₂FeAl و GaAs به ترتیب مقادیر 5/7 و 5/65 آنگستروم گزارش

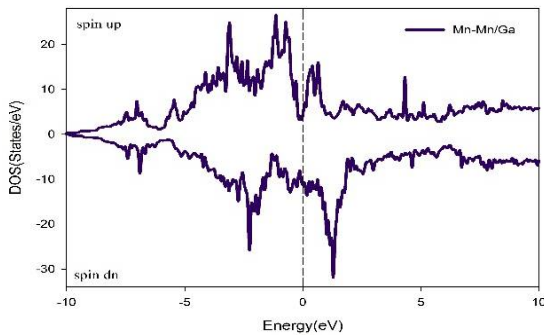
^{*} نویسنده مسئول: arash_bch@gmail.com

¹ Half-metal

² Band Alignment

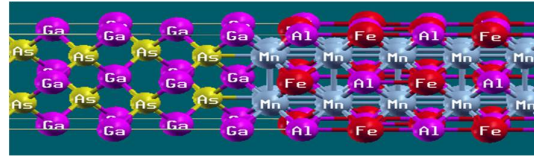
باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

نیمه‌فلز با قطبش اسپینی 100% دارند اما در لایه‌های میانی رفتار کاملاً غیرمغناطیسی دارند. اتم‌های آلومنیوم رفتار غیرمغناطیسی در ناحیه فرمی را نشان می‌دهند. چگالی حالات اتم‌های آرسنیک نیز در ناحیه زیرسطح فرمی اندکی مغناطیسی است. شکل 4 منحنی مغناطش جزئی اتم‌ها در زیرلایه گالیوم آرسناید و فیلم Mn_2FeAl را نشان می‌دهد. ممان مغناطیسی اتم‌های گالیوم، آرسنید و آلومنیوم صفر است. اما برای آهن 1/5 مگنتون بوهر و منگنز با نزدیک شدن به مرز مشترک افزایش و از 0/5 به 2/2 مگنتون بوهر رسیده است.



شکل 2. منحنی چگالی حالات کل مرز مشترک Mn.Mn/Ga

بریلوئن 1000 و پارامتر قطع 6-ریدبرگ انتخاب شد. نیروهای وارد بر اتم‌ها تا 1 (dy/a.u.) بهینه شده است.



شکل 1. ساختار مرز مشترک $Mn_2FeAl/GaAs(001)$ در پایانش Mn. Mn/Ga

نتایج

در ابریاخته $Mn_2FeAl/GaAs(001)$ چهار مرز مشترک شامل: Fe-Al، Mn-Mn/A، Mn-Mn/Ga، Al/Ga وجود دارد. هدف ما بررسی مرز مشترکی است که بالاترین پایداری را داشته باشد، پس از بهینه‌سازی نیروهای وارد بر اتم‌ها در ابریاخته‌ها انرژی چسبندگی هرکدام از مرز مشترک‌های ذکر شده به ترتیب: -6/78، -4/32، -3/49، و -2/61 الکترون‌ولت به دست آمده‌اند. لذا پایدارترین مرز مشترک یعنی Mn-Mn/Ga را به عنوان ساختار هدف برگزیدیم. منحنی‌های چگالی حالات الکترونی کلی و جزئی¹ اتم‌های سهم در لایه مرز مشترک² و لایه‌های میانی³ فیلم و زیرلایه⁴ در شکل‌های 2 و 3 نشان داده شده‌اند. ممان مغناطیسی کل برای مرز مشترک مقدار 19/2 مگنتون بوهر و قطبش اسپینی از رابطه $P=(N^{up}-N^{dn})/(N^{up}+N^{dn})$ حدود 70% است. در شکل 3 حالات الکترونی در محدوده سطح فرمی اتم منگنز در اسپین بالا به صورت یک پیک تیز است و در بالای سطح فرمی نسبت به لایه‌های میانی آن کاهش نشان می‌دهد. منحنی چگالی حالات آهن در لایه‌های میانی و زیر مرز مشترک تقریباً یکسان است. از منحنی حالات الکترونی گالیوم نیز ملاحظه می‌شود که در مرز مشترک، رفتار یک

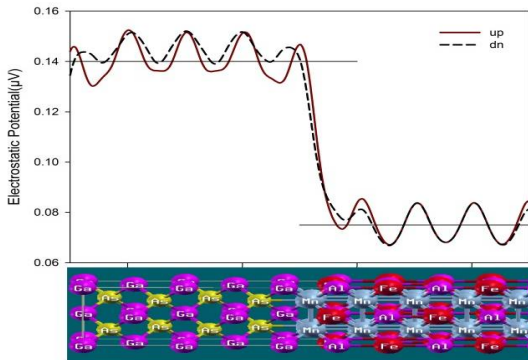
³ Middle

⁴ Sub-Interface

¹ PDOS

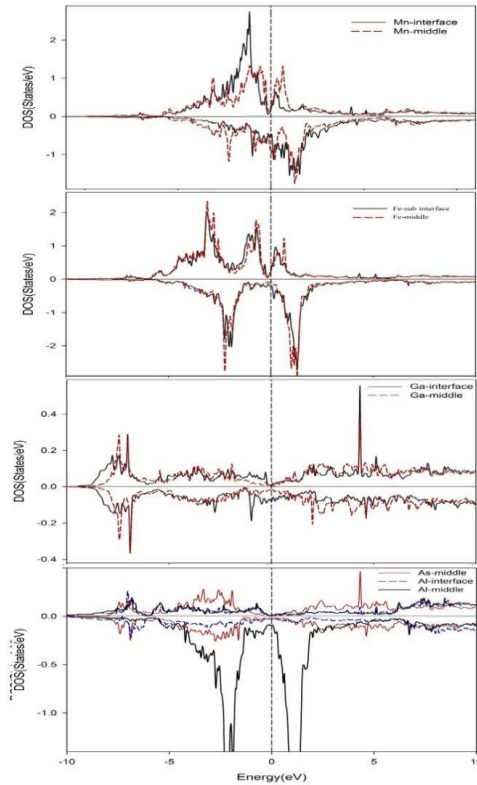
² Interface

میلی‌الکترون‌ولت) هستیم که این سد پتانسیل ضامن تزریق اسپینی الکترون است. در ناحیه فیلم با توجه به رفتار اسپینی Mn_2FeAl مقدار پتانسیل در دو اسپین بالا و پایین کاملاً متفاوت است طوری که در اسپین اقلیت سد پتانسیل بالاتر از اسپین اکثریت است.

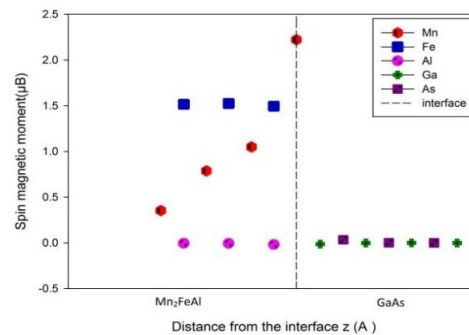


شکل 5. پتانسیل الکتروستاتیکی مرز مشترک $Mn_2FeAl/GaAs(001)$ در پائین Mn . Mn/Ga

وضعیت ساختار نواری $Mn_2FeAl/GaAs(001)$ در اسپین اکثریت به حالت مرز مشترک نیم‌رسانا/نیم‌رسانا شباهت دارد و مقدار انحراف نوار ظرفیت¹ قابل تعیین است. به طور مشابه در اسپین اقلیت این سیستم شبیه مرز مشترک فلز/نیم‌رسانا است و می‌توان مقدار سد-شاتی اکثریت و اقلیت (ϕ_n, ϕ_p) را استخراج نمود. برای بررسی هم‌ترازی نواری مرز مشترک Mn . Mn/Ga به طور هم‌زمان ساختار نواری و پتانسیل الکتروستاتیکی را مطالعه نمودیم. طبق شکل 7، نمودار هم‌ترازی نواری مرز مشترک Mn . Mn/Ga از نوع گاف شکسته است و دارای مقادیر بزرگی برای انحراف نوار رسانش² و ظرفیت است که قابل مقایسه با نتایج کارهای دیگر ذکر شده در جدول 1 می‌باشد. با توجه به اینکه مقدار ماکزیمم نوار ظرفیت برای گالیوم‌آرسناید بزرگتر از



شکل 3. چگالی حالات جزئی مرز مشترک Mn . Mn/Ga برای اتم‌های تشکیل‌دهنده آن.



شکل 4. ممان مغناطیسی لایه‌های اتمی در ابرباخته Mn . Mn/Ga در پائین $Mn_2FeAl/GaAs(001)$.

شکل 5 منحنی پتانسیل الکتروستاتیک را زیر لایه گالیوم آرسناید و فیلم Mn_2FeAl در دو حالت اسپینی بالا و پایین نشان داده است. در مرز مشترک شاهد یک افزایش پتانسیل الکتروستاتیکی خوب (0/065)

² CBO

¹ VBO

است و مرز مشترک Mn-Mn/Ga دارای مقادیر پتانسیل Φ_p و CBO مناسب است.

Mn₂FeAl است لذا مرز مشترک Mn-Mn/Ga برای تزریق الکترون مناسب است.

مرجع‌ها

[1] De-ming Ma, Yong-yong Chai, Vei Wang, En-ling Li, Wei Shi, Electronic structure, magnetic and optical properties of Cr-doped GaAs using hybrid density functional, *Computational Materials Science* 113 (2016) 75–79.

[2] Kazutaka Nagao, Yoshio Miura, and Masafumi Shirai, Half-metallicity at the (110) interface between a full Heusler alloy and GaAs, *PHYSICAL REVIEW B* 73 (2006) 104447.

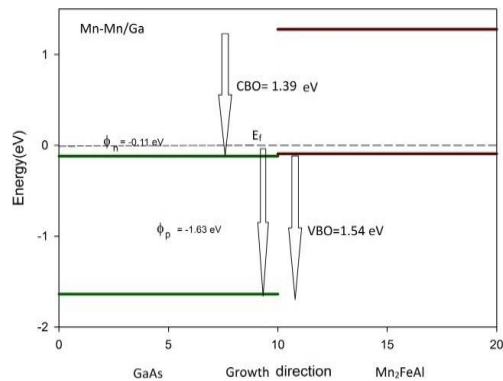
[3] Yiannis Karafyllidis, Prediction of band discontinuities in semiconductor heterojunctions: A simple model, *Microelectronics Journal* 22, 7–8(1991) 59–65.

[4] Sh. Khosravizadeh, S. Javad Hashemifar, and Hadi Akbarzadeh, First-principles study of the Co₂FeSi(001) surface and Co₂FeSi/GaAs(001) interface, *Physical Review B* 79(2009) 235203.

[5] J. Perdew, K. Burke and M. Enzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Physical Review Letters*, 77 (1996) 3865.

[6] Jheng-Sin Liu, Yan Zhu, Patrick S. Goley, and Mantu K. Hudait, Heterointerface Engineering of Broken-Gap InAs/GaSb Multilayer Structures, *ACS Applied Materials & Interfaces* 7 (2015) 2512–2517.

[7] Cheng-Tai Kuo, Karuppanan Balamurugan, Hung Wei Shiu, Hyun Ju Park, Soobin Sinn, Michael Neumann, Moonup Han, Young Jun Chang, Chia-Hao Chen, Hyeong-Do Kim, Je-Geun Park, Tae Won Noh, The energy band alignment at the interface between mechanically exfoliated few-layer NiPS₃ nanosheets and ZnO, *Current Applied Physics* 16 (2016) 404-408.



شکل 7. نمودار هم ترازای نواری مرز مشترک Mn-Mn/Ga

جدول 1. مقادیر سد شاتکی (eV) و انحراف نواری (eV) برای Mn₂FeAl/GaAs و مقایسه با کار دیگران.

	Φ_n	Φ_p	VBO	CBO
Mn-Mn/Ga	-0,11	-1,63	1,54	1,39
InAs/GaSb ^a	----	---	0,51	0,72
ZnGeN ₂ /GaN ^b	0,08	2,7	1,5	1,4
Sc ₂ CF ₂ /MoS ₂ ^c	---	---	1,75	1,51

^a6، ^b7 و ^c8

نتیجه گیری

ساختار الکترونیکی مرز مشترک Mn-Mn/Ga با استفاده از محاسبات اصول اولیه DFT و بهره‌گیری از روش (FP-LAPW) مورد مطالعه قرار گرفت. مشاهده شد که مرز مشترک Mn-Mn/Ga به لحاظ ترمودینامیکی پایدار است. همچنین منحنی‌های چگالی حالات نشان دادند که خاصیت نیمه‌فلزی در سطح فرمی از بین نرفته ولی قطبش اسپینی آن کامل نیست و حدود 70% می‌باشد. بررسی نمودار پتانسیل الکتروستاتیکی به‌خوبی نشان می‌دهد که مرز مشترک Mn₂FeAl/GaAs کاندید مناسبی برای تزریق الکترون می‌باشد. بررسی نمودار هم‌ترازی نواری بیانگر آن است که این اتصال مرز مشترک از نوع شکسته (type-III)

[8] S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, and S.-i. Nagahama, InGaN Multi-Quantum-Well-Structure Laser Diodes with Cleaved Mirror Cavity Facets, *Journal of Applied Physics* 34 (1995)797.