

بررسی خواص مغناطیسی نانولوله گالیوم نیتراید زیگزاگ (۵.۰) آلایش یافته با عناصر واسطه

مصطفی شعبانی^۱، طیبه مولاروی^۱، سعید حسامی پيله رود^۱

^۱ دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود

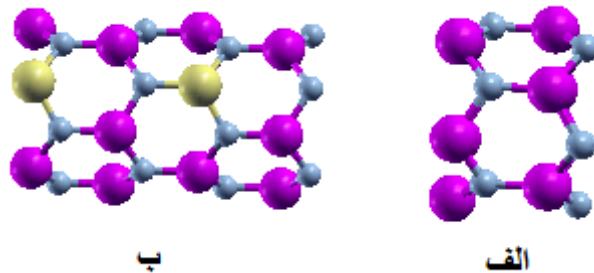
چکیده

در این مقاله خواص الکتریکی و مغناطیسی نانولوله‌ی زیگزاگ (۵.۰) گالیوم نیتراید خالص و با ۱۰ درصد آلایش در حضور عناصر واسطه (V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) بر پایه نظریه تابع چگالی، با استفاده از کد محاسباتی SIESTA با تقریب شبه پتانسیل بررسی شده است. نتایج ما بیانگر فاز پایدار فرومغناطیس در حضور (V, Cr, Mn, Fe) و آنتی فرو در حضور (Co, Ni) می باشد. همچنین رفتار نیم فلزی، در حضور آلایش Mn مشاهده شد. مکانیزم فرومغناطیسی شدن در این ترکیبات را می توان توسط مکانیزم هیبریداسیون $p-d$ بین اوربیتال $3d$ عناصر واسطه و $2p$ نیتروژن‌های اطراف آن توجیه کرد. با توجه به این پژوهش، نانولوله‌های GaN آلاییده شده با عناصر واسطه مغناطیسی به عنوان نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده، و منبع الکترونیایی با اسپین قطبیده به منظور تزریق در قطعات نانو اسپینترونیک در آینده پیشنهاد می شود.

نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده (DMS)، با جایگزینی کسر کوچکی از کاتیون‌های میزبان نیمرساناهای ترکیبی، اغلب گروه‌های (III-V, II-VI)، با آلاییده‌های مغناطیسی، نوعاً فلزات عناصر واسطه (V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) شکل می گیرد. این ترکیبات علائق زیادی را به دلیل پتانسیل کاربردی در قطعات اسپینترونیک به خود جذب کرده است. [۱] این علاقه به نیمرساناهای مغناطیسی با انجام کارهای تجربی و کشف فرومغناطیس شدن $InAs, GaAs$ در حضور ۵ درصد ناخالصی Mn با دمای کوری $110K$ آغاز شد. [۲] یک نیمرسانای مغناطیسی ایده آل، به منظور پتانسیل کاربردی باید یک رفتار فرومغناطیسی با دمای کوری بالا در گستره‌ی دمای اتاق از خود نشان دهد. بر روی GaN به دلیل دارا بودن خواص منحصر به فردی نظیر: طول عمر اسپینی بالا نسبت به $GaAs$ [۳]، فاز فرومغناطیسی با دمای کوری در حدود دمای اتاق هنگامی که با (Mn, Cr) آلاییده می شود، گاف نواری بزرگ در حدود $3/5 eV$ و قابلیت کاربرد در قطعات اپتوالکتریکی در فرکانس‌های بالا، کارهای زیادی انجام شده است. اخیراً توجهات بیشتری به سمت ساختارهای یک بعدی و شبه یک بعدی به عنوان اجزای سازنده، در قطعات الکترونیکی و اپتیکی جلب شده است. نانولوله‌های GaN با موفقیت سنتز، و مکانیزم شکل‌گیری، پایداری و خواص الکترونیکی آنها بررسی شده است. [۴،۵] فضای خالی نانولوله‌ها نسبت به نانوسیم‌ها به آنها انعطاف‌پذیری بیشتری در حضور آلایش می دهد. همچنین می توان از فضای داخلی آنها به عنوان سیستم‌های پیچیده، به منظور وارد کردن داروها، مواد شیمیایی و ملکول‌ها استفاده کرد. با توجه به مقدمه ارائه شده در این مقاله تاثیر عناصر واسطه را با آلایش ۱۰٪ بر روی خواص مغناطیسی نانولوله‌ی زیگزاگ (۵.۰) گالیوم نیتراید بررسی کرده‌ایم.

محاسبات بر مبنای رهیافت نظریه تابع چگالی (DFT)، توسط کد SIESTA [۶] براساس تقریب شبه پتانسیل انجام شده است. برای تابع همبستگی - تبدالی از تقریب شبه تعمیم یافته پردو، برک، ارزنرهورف (PBE-GGA) [۷] استفاده کرده‌ایم. مجموعه پایه‌ها را به صورت (DZP)، [۶] انرژی قطع به جهت مش بندی فضای حقیقی $500 Ry$ ، و تعداد نقاط k برای مش بندی منطقه اول بریلوئن، برای نمونه خالص $100 \times 100 \times 1$ ، و برای نمونه‌های آلایش یافته برابر $50 \times 100 \times 1$ در راستای محوری نانولوله اختیار کرده‌ایم. یاخته واحد خالص ما دارای 10 اتم Ga و 10 اتم N می باشد که برای اتم Ga آرایش $3d^10 4s^2 4p^1$ و برای اتم N آرایش $2s^2 2p^3$ به عنوان اوربیتال‌های لایه ظرفیت در نظر گرفته شده اند. در

حضور ناخالصی ابرسلول ما به صورت $1 \times 1 \times 2$ ، شامل ۴۰ اتم، ۲۰ اتم Ga، ۲۰ اتم N، که ۲ جایگاه Ga را با آرایش $1 \times 1 \times 10$ ، ۲ ناخالصی مغناطیسی اشغال کرده‌اند. در دو راستای غیر دوره‌ای نانولوله یعنی راستاهای a, b حدود 10 \AA گسترده‌تر تا از برهمکنش در این راستاها صرف نظر شود. و در نهایت برای واهلش ساختار از روش شیب تعمیم یافته (CG) تا جایی که نیروهای بین اتمی هلمن - فایمن کمتر از 0.05 eV/\AA شوند، بهره برده‌ایم. ابتدا بحث خود را با بررسی نتایج نانولوله‌ی خالص $(0.0) \text{ Ga}_2\text{N}_2$ شکل (۱-الف) شروع می‌کنیم. محاسبات نشان می‌دهد که این نانولوله یک نیم‌رسانا با گاف نواری مستقیم، با انرژی گافی در حدود $1/8 \text{ eV}$ می‌باشد. هر اتم Ga با سه نیتروژن اطراف خود پیوند برقرار کرده که طول پیوند Ga-N با 2 نیتروژن اطراف خود $1/92 \text{ \AA}$ و با دیگری $1/90 \text{ \AA}$ می‌باشد.



شکل ۱: ساختار نانولوله $(0.0) \text{ GaN}$ (الف) یاخته واحد ب) ابر یاخته در حضور ناخالصی آلیاژ شده

در شکل (۲-الف) چگالی حالت های کل و سهم چگالی حالت های جزئی اوربیتال $2p$ نیتروژن برای نمونه خالص رسم شده است چگالی حالت های اکثریت (اسپین بالا) و اقلیت (اسپین پایین) کاملاً متقارن بوده و حاکی از آن است که ساختار غیر مغناطیسی می‌باشد. همچنین بیشترین سهم چگالی حالت ها در نوار ظرفیت مربوط به اوربیتال $2p$ نیتروژن می‌باشد. موقعیت عناصر مغناطیسی در ساختار آلیاژ یافته نانولوله GaN ، در شکل (۱-ب) نشان داده شده است. جفت شدگی مغناطیسی بین 2 ناخالصی اعمال شده به هر دو صورت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در نظر گرفته شده است. نتایج انرژی کل سیستم، در 2 حالت فرو و آنتی فرو و اختلاف انرژی آنها در جدول ۱ گزارش شده است.

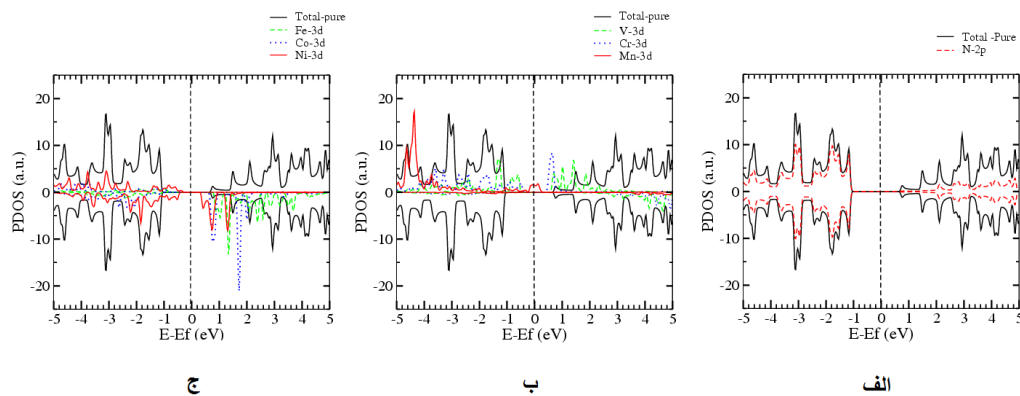
جدول ۱: گشتاور مغناطیس کل در حالت فرو، گشتاور مغناطیس سهم ناخالصی ها و مقایسه انرژی ها در دو حالت فرو و آنتی فرو

مغناطیس $E_F - E_{AF}$

ناخالصی	وانادیوم (V)	کروم (Cr)	منگنز (Mn)	آهن (Fe)	کبالت (Co)	نیکل (Ni)
انرژی فرو (eV)	-۳۸۴۹۴/۲۷۷۵۰۸	-۳۸۶۸۴/۶۵۹۲۹۵	-۳۸۹۲۸/۹۸۸۳۲۹	-۳۹۲۳۵/۶۰۹۵۱۴	-۳۹۶۰۲/۳۷۵۵۲۰	-۴۰۰۵۰/۹۰۸۴۹۴
انرژی آنتی (eV)	-۳۸۴۹۴/۲۷۲۱۶۸	-۳۸۶۸۴/۶۳۸۴۱۵	-۳۸۹۲۸/۸۸۰۴۳۱	-۳۹۲۳۵/۶۰۵۶۷۱	-۳۹۶۰۲/۳۹۰۴۹۵	-۴۰۰۵۰/۹۲۶۱۲۹
گشتاور کل (μ_B) در فاز فرو مغناطیس	۴/۰۰۰۰۰۱	۶/۰۰۰۰۰۲	۸/۰۰۰۰۰۳	۹/۹۹۹۹۹۸	۸/۰۰۰۰۰۱۳	۶/۰۰۰۰۰۵
گشتاور-ناخالصی (TM)	۴/۹۸۴	۷/۴۵	۹/۳۱۴	۸/۴۱	۵/۹	۳/۵۶۸
اختلاف انرژی $E_F - E_{AF}$	-۰/۰۰۵۳۴۰	-۰/۰۲۰۸۸۰	-۰/۱۰۷۸۹۸	-۰/۰۰۳۸۴۳	+۰/۰۱۴۹۷۵	+۰/۰۱۷۶۳۵
حالت پایدار	فرو مغناطیس	فرو مغناطیس	فرو مغناطیس	فرو مغناطیس	آنتی فرو مغناطیس	آنتی فرو مغناطیس

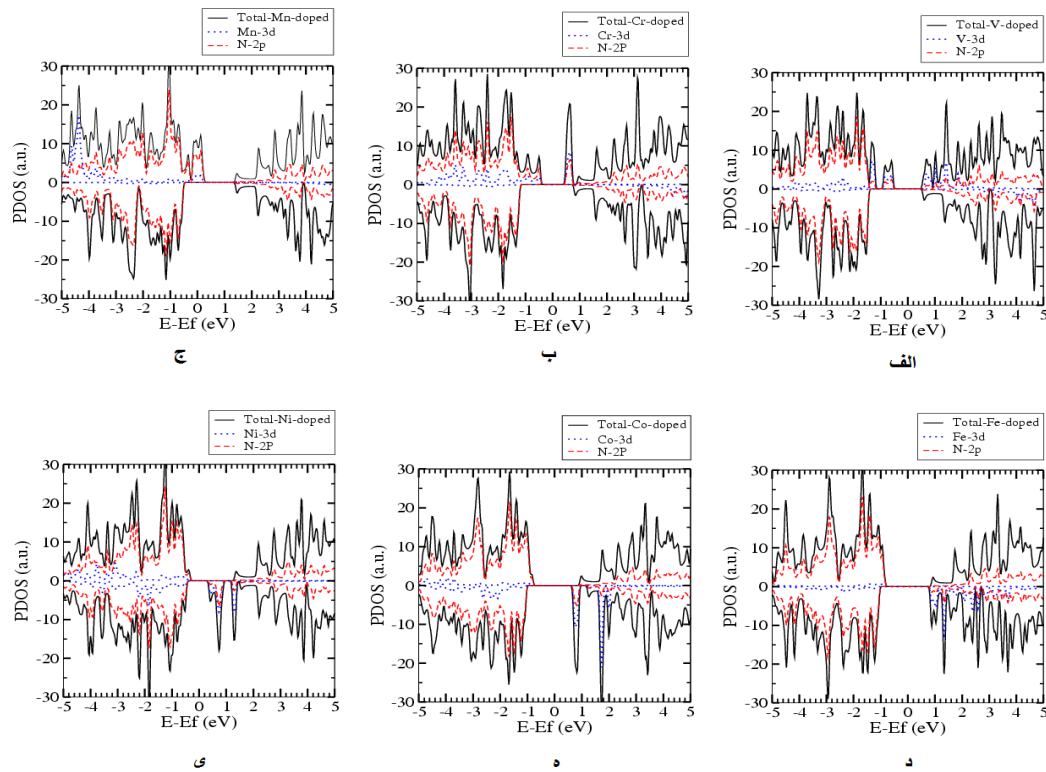
باتوجه به اختلاف انرژی‌های حالت فرو نسبت به آنتی فروی بدست آمده، فاز پایدار فرومغناطیس را به ازای آلایش‌های (V, Cr, Mn, Fe) و حالت آنتی فرومغناطیس را در حضور آلایش (Co, Ni) یافتیم. شکل (۲-ب، ج) چگالی حالت‌های اوربیتال‌های ۳d عناصر مغناطیسی واسطه را در فاز فرو مغناطیس نشان می‌دهد. همانگونه که مشاهده می‌شود در حالت آلایش (V, Cr, Mn) اوربیتال‌های d آنها بیشتر در حالت‌های اکثریت (اسپین بالا) سهم داشته‌اند در حالیکه در موارد (Fe, Co, Ni) در حالت‌های اقلیت (اسپین پایین) شاهد سهم بیشتری هستیم. همچنین در حالت اول با افزایش عدد اتمی از V به سمت Mn، شاهد یک جابجایی انرژی در حالت‌های اکثریت به سمت انرژی‌های پایین‌تر می‌باشیم. در حالت دوم شاهد همین جابجایی انرژی از Fe به سمت Ni (با افزایش عدد اتمی) به سمت انرژی‌های پایین‌تر، با آن تفاوت که در حالت‌های اقلیت می‌باشد هستیم.

گشتاور مغناطیسی کل ایجاد شده در ساختار در حالت فرو، وگشتاور مغناطیسی سهم اتم‌های ناخالصی عناصر واسطه نیز در جدول ۱ گزارش شده‌اند. از V به سمت Fe شاهد افزایش گشتاور مغناطیسی کل و از Fe به سمت Ni شاهد کاهش آن می‌باشیم.



شکل ۲: چگالی حالت‌های جزئی (الف) سهم اوربیتال ۲p نیتروژن (ب) سهم اوربیتال‌های d - V, Cr, Mn (ج) سهم اوربیتال‌های d - Fe, Co, Ni

چگالی حالت‌های کل، و چگالی حالت‌های جزئی ۳d عناصر واسطه فلزی و ۲p نیتروژن در فاز فرومغناطیس نانولوله GaN آلایش یافته در شکل ۳ رسم شده است. همانگونه که مشاهده می‌شود حضور ناخالصی مغناطیسی در ساختار، سهم چگالی حالت‌های اقلیت و اکثریت در نزدیکی تراز فرمی را تغییر داده و باتوجه به گشتاورهای ایجاد شده در ساختار، یک قطبش اسپینی ایجاد کرده است. در همه موارد، حالت‌های قطبشی ایجاد شده در نزدیکی تراز فرمی ناشی از هیبریداسیون بین اوربیتال‌های ۳d عناصر واسطه و ۲p نیتروژن‌ها می‌باشد. همچنین در مورد نانولوله‌ی GaN آلایش یافته با Mn، حالت نیم فلزی با ۱۰۰ درصد قطبش اسپینی مشاهده می‌شود. میزان سهم هیبریداسیون اوربیتال‌ها با توجه به آنچه که در جابجایی انرژی اوربیتال‌های ۳d به سمت انرژی‌های پایین‌تر گفته شد متفاوت است، چون حالت‌های با انرژی پایین‌تر بیشتر توسط ۲p نیتروژن‌ها احاطه شده است، سهم آنها در هیبریداسیون از سمت V به سمت Mn در حالت‌های اکثریت و از Fe به سمت Ni در حالت‌های اقلیت افزایش می‌یابد و از سهم اوربیتال‌های ۳d آنها کاسته می‌شود.



شکل ۳: چگالی حالت‌های جزئی سهم اوربیتال ۲p نیتروژن و ۳d عناصر واسطه و سهم هیبریداسیون آن‌ها

نتیجه گیری:

ما تاثیر حضور عناصر واسطه (V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) را به ازای ۱۰ درصد آرایش در نانولوله GaN (۵,۰) بررسی کردیم. در حضور Mn، حالت نیم فلزی با ۱۰۰ درصد قطبش اسپینی مشاهده شد. بیشترین گشتاور مغناطیسی کل ایجاد شده در ساختار، در حضور ناخالصی Fe مشاهده گردید. از لحاظ اختلاف انرژی بین حالت های فرو و آنتی فرو، حالت فرو مغناطیس در حضور ناخالصی های V, Mn, Cr, Fe و حالت‌های آنتی فرو مغناطیس در حضور Co, Ni مشاهده شدند. عامل جفت شدگی فرو و آنتی فرو را میتوان بر حسب مدل تبدلی p-d (هیبریداسیون اوربیتالی بین ۳d اتمهای فلزی واسطه و ۲p نیتروژن های اطراف آن) توجیه کرد.

مرجع ها:

- [۱] R. Q. Wu, G. W. Peng, L. Liu, and Y. P. Feng, Z. G. Huang and Q. Y. Wu, *Appl. Phys. Lett.* ۸۹, ۰۶۲۵۰۵ (۲۰۰۶)
- [۲] H. Ohno, *Science*, ۲۸۱, ۹۵۱ (۱۹۹۸)
- [۳] V. A. Guzenko, N. Thillozen, A. Dahmen, R. Calarco, and Th. Schäpers, *Appl. Phys. Lett.* ۹۶ (۲۰۰۴)
- [۴] Q. Wang, Q. Sun, P. Jena and Y. Kawazoe, *Phys. Rev. B*, ۷۳ ۲۰۵۳۲۰ (۲۰۰۶)
- [۵] S. M. Lee, Y. H. Lee, Y. J. Hwang, J. Elsner, D. Porezagand T. Frauenheim, *Phys. Rev. B*, ۶۰ ۲۰۵۳۲۰ (۱۹۹۹)
- [۶] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. Garcia, J. Junquera, P. Ordejon, and D. Sanchez-Portal, *J. Phys.: Condens. Matter*, ۱۴ ۲۷۴۵-۲۷۷۹ (۲۰۰۲)
- [۷] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* ۷۷ ۳۸۶۵ (۱۹۹۶)