بررسی خواص مغناطیسی و الکترونی نانوصفحه زیگزاگ آلومینیم نیترایدآلایش یافته با عناصر واسطه

بیرانوند ، مهرزاد[۱] ؛ مولاروی، طیبه[۱] ؛ بدیعیان باغ‌سیاهی، فاطمه [۲]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود

[۲]گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه کوثر بجنورد

چکیده

در این پژوهش خواص الکترونی و مغناطیسی نانوصفحه زیگزاگ (۰-٦) آلومینیم نیترایدِ خالص و ٤٪ آلایش یافته با عناصر واسطه در مکان وسط ساختار با استفاده از رهیافت نظریه تابعی چگالی اسپینی و تقریب شیب تعمیم یافته GGA توسط بسته محاسباتی SIESTA مطالعه شده است. چگالی حالت‌های اسپینی قطبیده نشان می‌دهد که نانوصفحه زیگزاگ (۰-٦) خالص، یک نیمرسانای غیر مغناطیسی است درحالی که نانوصفحه‌های آلایش یافته با عناصر واسطه، نیمرسانای مغناطیسی رقیق شده یا نیم فلزاند. بیشترین گشتاور مغناطیسی محاسبه شده کل ساختار مربوط به حالت آلایش یافته با Fe می‌باشد. درحالی که بیشینه سهم گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه برای اتم Mn به دست آمده است. باتوجه به نتایج این تحقیق، نانوصفحه آلومینیم نیترایدِ آلایش یافته با عناصر واسطه به عنوان کاندیدای مناسب جهت کاربرد در قطعات اسپین ترونیکی پیشنهاد می‌شود.

واژه‌های کلیدی: نانوصفحه، آلومینیم نیترایدِ، نظریه تابعی چگالی، عناصر واسطه، اسپین‌ترونیک

Study of the magnetic and electronic properties of AlN zigzag nanosheet doped with transition metals

Mehrzad, Biranvand[1]; Tayebeh, Movlarooy[1] , Fatemeh, Badieian Baghsiyahi[2]

[1]Department of Physics, Shahrood University of Technology

[2]Department of Physics,Faculty of sciences,Kosar University of Bojnord

Abstract

In this work, the electronic and magnetic properties of pure Zigzag (6-0) AlN nano sheet and doped with % 4 of transition metals in the center of structure has been studied by spin polarized density functional theory using the generalized gradient approximation (GGA) with SIESTA computational code. The spin polarized density of states calculation revealed that while the pure (6-0) AlN nanosheet is a non magnetic semiconductor, the doped (6-0) AlN nanosheets with the transition metals are diluted magnetic semiconductors or half metals. The maximum total magnetic moment is obtained for Fe doped (6-0) AlN nanosheet while the highest transition metal magnetic moment is obtained for Mn. Our results show that the (6-0) AlN nanosheets doped with transition metals can be used as a spin polarized electron source for the spintronic devices in the future.

Keywords: nano sheet, AlN, DFT, transition metals, spin polarized

مقدمه

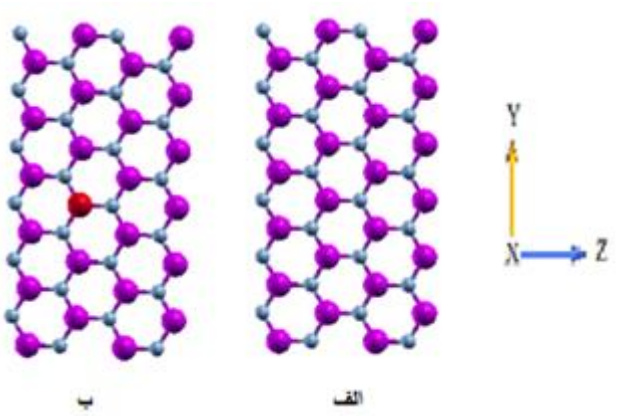
در سال‌های اخیر تحقیق بر روی مواد گرافنی دو بعدی به دلیل خواص الکترونیکی قابل توجه آنها رشد سریعی را در زمینه فیزیک نیم‌رساناها داشته است[۱]. الکترون دارای دو درجه ازادی بار و اسپین است که هر کدام از این درجات آزادی به طور جداگانه در فیزیک نیم‌رساناها و مغناطیس استفاده می‌شوند. اسپین‌ترونیک ناحیه اتصال فیزیک نیمرساناها و مغناطیس می‌باشد که هر دو درجه آزادی الکترون به طور همزمان در آن استفاده می‌شود [۲]. یک مولفه‌ی مهم دراستفاده از اسپین حامل‌ها درقطعات اسپین-ترونیکی، تزریق اسپین قطبیده از یک منبع فرو مغناطیس است. یک روش تزریق اسپین استفاده از مواد فرومغناطیس وعناصر واسطه‌ای مانندCu، Fe, Co, Mn، V, Cr, Ni و Ti است که تراز dآن‌ها درحال پر شدن است.

طیف وسیعی از مواد نیمرسانا با آلایش عناصر واسطه (عناصر مغناطیسی) وجود دارند که این مواد را عموما به عنوان نیمرسانای مغناطیسی رقیق DMS می‌شناسند. آلایش ترکیبات گروه (III-V) با یون‌های مغناطیسی نیز از موضوعات قابل توجه در مطالعات محققان در زمینه DMS هاست. نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده غالبا نیمرسانایی از گروه (III-V) وگروه (II-VI) جدول تناوبی می‌باشند که با عناصر مغناطیسی واسطه رقیق شده‌اند [۳]. AlN از نیم‌رساناهای گروه (III-V) است که از خصوصیات منحصر به فرد و مفید آن می‌توان به گاف نواری بزرگ (٦/٢ eV) آن اشاره کرد که باعث افزایش جذب در خواص اپتیکی، الکترونیکی و فوتوالکترونیکی می‌شود [٤و ٥]. علاوه بر این AlN ماده‌ای با خواص فیزیکی بسیار عالی نظیر هدایت حرارتی، مقاومت الکتریکی و پایداری حرارتی بالا و ضریب انبساط حرارتی، ثابت دی الکتریک و چگالی پایین است. همچنین خواص مکانیکی مناسبی همچون مقاومت سایشی بالا و سختی قابل قبول دارد [٦و ٧] . نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده بر پایه نانوساختارهای AlN کاربرد گسترده‌ای در صنعت اسپین‌ترونیک دارند. به همین دلیل در این پژوهش به بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانوصفحات آلایش یافته AlN با عناصر واسطه پرداخته‌ایم.

روش محاسبات

هدف اصلی این پژوهش بررسی اثر ناخالصی عناصر واسطه آلایش یافته در وسط نانوصفحه AlN (٠-٦) است که محاسبات مربوطه، برحسب نظریه تابع چگالی، توسط بسته محاسباتی siesta انجام شده است. دراین محاسبات از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) استفاده شده است. مقدار انرژی قطع بهینه شده ٦٠٠ Ry و بردار نقاط k ، ٤×٤×١در نظر گرفته شده است.

عناصر واسطه در موقعیت وسط نانوصفحه (٠-٦) AlN که در راستای Z ٢×١×١، دو برابر شده است جایگزین شده‌اند. به منظور جلوگیری از برهم کنش‌های بین صفحات در راستای x، خلا حدود ١٢ آنگستروم در نظر گرفته شده است. در ابتدا این ساختار بهینه شده است تا پایدارترین ساختار با بهترین فاصله که همان فاصله تعادلی است به دست آید. سپس اتم‌های واسطه در موقعیت وسط نانوصفحه همانطور که در شکل ١ دیده می‌شود به جای اتم Al جایگزین شده‌اند. در شکل ١ موقعیت عناصر واسطه جایگزین شده در مکان اتم Al نشان داده شده است.



شکل ١ : الف) نانوصفحه خالص زیگزاگ (٠-٦) AlN و ب) نانوصفحه آلایش یافته با عناصر واسطه. (Al= بنفش، N=آبی، عنصرواسطه = قرمز).

بحث ونتایج

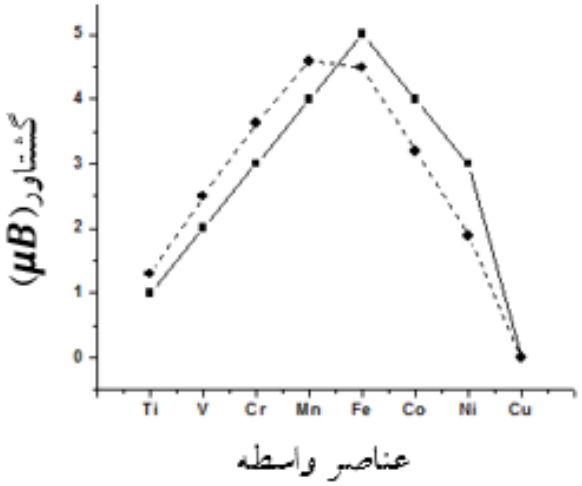
درجدول ١ سهم گشتاور مغناطیسی کل ساختار و همچنین سهم گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه Cu، Ti ، Fe، Co، Mn، V، Cr، Ni، Al، N درنانو صفحه آلایش یافته نشان داده شده است.

نمودار گشتاور مغناطیسی کل ساختار و همچنین سهم گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه در نانوصفحه آلایش یافته AlN (٠-٦) در شکل ٢ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود بیشترین گشتاور کل ساختار مربوط به حالت آلایش با Fe است. همچنین بیشینه سهم گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه مربوط به اتم Mn می‌باشد.

در این قسمت به بررسی چگالی حالت‌های نمونه‌های آلایش یافته می‌پردازیم. برای مقایسه و درک بهتر اثر آلایش عناصر واسطه بر روی چگالی حالت‌ها، در شکل ٣ نمودارچگالی حالت‌ها برای نمونه خالص است رسم شده است.

جدول۱: گشتاور مغناطیسی کل ساختار و همچنین سهم گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه بر حسب مگنتون بوهر در نانوصفحه آلایش یافته(۰-٦) AlN

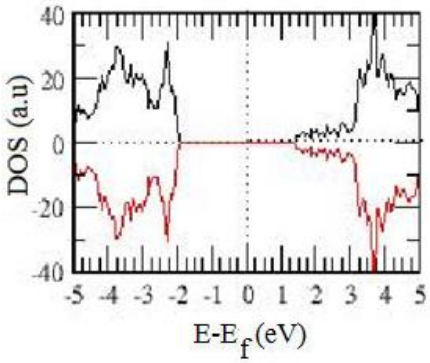
آلاینده / گشتاور مغناطیسی(μB)	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
μ_{Al}	-۰/۰۵	-۰/۰۰۵	۰/۰٤	۰/۰٦۷	۰/۱۸۰	۰/۲۱۵	۰/۱۹۲	۰/۰۰۲
μ_{N}	-۰/۲۵	-۰/٦٤	-۰/٦۷	-۰/٦۵	۰/۳۳	۰/۵۹٦	۰/۹۲	۰/۰۰۵
μ_{TM}	۱/۳۰۲	۲/٦۵۷	۳/٦۳	٤/۵۸۸	٤/٤۹۱	۳/۱۹۳	۱/۸۸۳	-۰/۰۰۷
μ_{total}	۱	۲	۳	٤	۵	٤	۳	۰



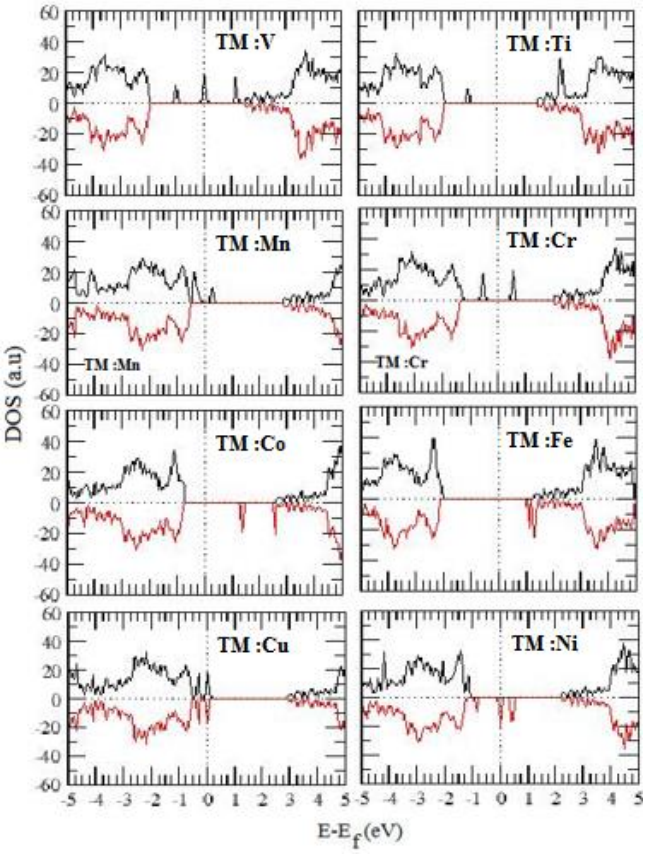
شکل ۲ : نمودار گشتاور مغناطیسی کل ساختار (منحنی خط پر) و همچنین سهم گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه (منحنی خط چین) در نانوصفحه آلایش یافته(۰-٦) AlN بر حسب افزایش عدد اتمی عناصر واسطه است.

همانگونه که مشاهده می‌شود در حالت خالص، چگالی حالت‌های اسپین بالا و پایین کاملا متقارن هستند و بنابراین همانطور که انتظار می‌رود گشتاور مغناطیسی کل ساختار صفر است. نمودار چگالی حالت‌های اسپین بالا و پایین برای هر یک از نمونه‌های آلایش یافته در شکل ٤ رسم شده است. همانطور که نمودارها نشان می-دهند با آلایش عناصر واسطه در نانوصفحه AlN زیگزاگ (۰-٦) شاهد عدم تقارن در چگالی حالت‌های اسپین بالا و پایین در اطراف تراز فرمی هستیم. این عدم تقارن با توجه به گشتاورهای ایجاد شده بیانگر ایجاد قطبش اسپینی ناشی از هیبریداسیون در لایه ظرفیت عناصر واسطه است. بررسی‌ها نشان می‌دهد که این حالت-های قطبش در نوار ظرفیت در حالت‌های اسپینی بالا و در نوار رسانش در حالت‌های اسپینی پایین ایجاد می‌شود. چگالی حالت-های اسپینی قطبیده نشان می‌دهد که نانوصفحه زیگزاگ (۰-٦) خالص نیمرسانای غیر مغناطیسی است در حالی که نانوصفحه آلایش یافته با عناصر واسطه نیمرسانای مغناطیسی رقیق شده یا نیم فلز است. با توجه به نتایج به دست آمده در شکل ٤، همانطور که مشاهده می‌شود با ٤ ٪ آلایش عناصر واسطه Fe، Co، Mn، Ti، Cr در ساختار نانوصفحه AlN زیگزاگ (٦،۰) به دلیل عدم تقارن چگالی حالات در اسپین بالا و اسپین پایین، رفتار نیم‌رسانای مغناطیسی از خود نشان می دهند. علاوه بر این چگالی حالت‌های اسپینی قطبیده نشان می‌دهد که نانوصفحه زیگزاگ (٦،۰) با آلایش ٤ ٪ از اتم های V و Ni جایگزین شده ساختار خاصیت نیم‌فلزی با ۱۰۰درصد قطبش اسپینی و نانوصفحه آلایش یافته با Cu فلز غیر مغناطیسی می باشد. بنابراین با توجه به نتایج این تحقیق، نانوصفحه آلومینیم نیترایدِ آلایش یافته با Ti، Fe، Co، Mn، V، Cr، Ni، به عنوان کاندیدای مناسب جهت کاربرد در قطعات اسپین‌ترونیکی پیشنهاد می‌شود.

به منظور بررسی وتعیین پایدارترین نمونه، انرژی تشکیل نمونه‌های



شکل ۳: چگالی حالت اسپین بالا وپایین نمونه خالص AlN زیگزاگ (۰-٦)



شکل ٤ :چگالی حالتهای کلی نانوصفحه AlN زیگزاگ (٠-٦) آلایش یافته در موقعیت وسط ساختار با عناصر واسطه

E_f = E_{T1} + n E(Al) – [E_{T2} + n E_{TM}] آلایش یافته با کمک رابطه زیر محاسبه شده است[٨]:

در این رابطه E_{T1} انرژی نهایی ساختار آلایش یافته، E(Al) انرژی نهایی یک اتم آلومینیم، n تعداد اتم‌های جایگزین شده، E_{T2} انرژی نهایی ساختار خالص وE_{TM} انرژی نهایی اتم‌های جایگزین شده Cu، Fe، Co، Mn، V، Cr، Ni، Ti است. مقادیر به دست آمده برای انرژی تشکیل هر یک از نمونه‌ها در جدول ٢ ذکر شده است. با توجه به مقادیر محاسبه شده انرژی تشکیل برای ساختارآلایش یافته با عناصر واسطه، پایدارترین ساختار، مربوط به آلایش نانوصفحه با اتم Ti است که انرژی تشکیل کمتری دارد.

نتیجه گیری

دراین پژوهش با استفاده از محاسبات اولیه خواص مغناطیسی نانوصفحه AlN آلایش یافته با عناصر واسطه که جایگزین اتم Al شده اند، مطالعه شده است. نتایج نشان می‌دهد که نانوصفحه AlN. خالص یک نیمرسانای غیر مغناطیسی است در حالی که یک اتم

جدول ٢: مقادیر انرژی تشکیل نانوصفحه(٠-٦) Al N آلایش یافته باغلظت ٤ ٪ با عناصر واسطه در وسط ساختار

آلاینده	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
انرژی تشکیل	٠,١٦	٠,٩٥	٤,٢٥	٤,٢٦	١,١٠	١,٣٩	١,٨١	٤,٥٣

مغناطیسی از عناصر واسطه می‌تواند به طور عمده با جایگزینی اتم-های Al درساختار نانوصفحه AlN خواص مغناطیسی را بوجودآورد. روند تغییرات با روند پیش بینی شده مشابه است. بیشترین گشتاور مغناطیسی محاسبه شده کل ساختارمربوط به حالت آلایش Fe می‌باشد. درحالی که بیشینه سهم گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه برای اتم Mn بدست آمده است. درنتیجه می‌توان گفت که آلایش دادن ساختار با ا تم Mn درمکان Al انتخاب خوبی برای استفاده در قطعات اسپین‌ترونیک است. با توجه به مقادیر محاسبه شده انرژی تشکیل برای ساختارآلایش یافته با عناصر واسطه، پایدارترین ساختار، مربوط به آلایش نانوصفحه با اتم Ti به دست آمد.

مراجع

[١] U. Treske , F. Ortmann , B. Oetzel , K. Hannewald and F. Bechstedt , Electronic and transport properties of graphene nanoribbons , Phys. Status Solidi A 207, No. 2 , 304–308 (2010)
[٢] M. SHIRAISHI , Graphene spintronics , Woodhead Publishing Limited , Pages 324-340 (2014)
.[٣] Zhang, C.W. and Wang, P.J. Tuning electronic and magnetic properties of AlN nanosheets with hydrogen and fluorine: First-principles prediction. Physics Letters A, 375(41), (2011) , pp.3583-3587
[٤] Du, A.J., Zhu, Z.H., Chen, Y., Lu, G.Q. and Smith, S.C.. First principle studies of zigzag AlN nanoribbon. Chemical physics letters, 469(1-3), (2009) , pp.183-185
[٥] Somayeh Faghihzadeh, Nasser Shahtahmasebi,Mahmood Rezaee Roknabadi, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures (2017),1-19.
[٦] Slack, G.A, Nonmetallic Crystals with High Thermal Conductivity . *J.Phys .Chem . Solids*.34. (1973) 321-335
[٧] Strite, S . and H . Morkoc, Gallium Nitride, Aliuminum Nitride and Indiunm Nitride: A Review .*J . Vac. Sci Technol. B*, 10(4). (1992) 1237-1266.
[٨] Soler, J.M., Artacho, E., Gale, J.D., García, A., Junquera, J., Ordejón, P. and Sánchez-Portal, D. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation. Journal of Physics: Condensed Matter, (2002) , 14(11), p.2745.