

## خواص مغناطیسی نانولوله گالیوم آرسناید زیگزاگ (۰،۹)

### آلایش یافته با عناصر واسطه

رضا فتحی و طیبه مولاروی

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود

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

#### چکیده

در این پژوهش خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله زیگزاگ (۰،۹) GaAs خالص و آلایش یافته با ۱۱/۱۱ درصد عناصر واسطه (Sc, Ti, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) در دو وضعیت دور و نزدیک، با استفاده از رهیافت نظریه تابعی چگالی و تقریب چگالی موضعی LDA توسط کد محاسباتی SIESTA مطالعه شده است. ساختار نواری نشان دهنده این است که نانولوله خالص زیگزاگ (۰،۹) GaAs نیم رسانای غیرمغناطیسی با گاف نواری مستقیم است. آلایش ۱۱/۱۱ درصد آهن و منگنز جایگزین شده در جایگاه های گالیوم در فاز فرومغناطیس در وضعیت دور و کرم در وضعیت نزدیک حالت فرومغناطیس نشان دهنده خاصیت نیم فلزی با ۱۰۰ درصد قطبش اسپینی است. ساختار منحصر به فرد قطبش اسپینی ترازهای انرژی به هیبریدشدگی بین اوربیتال های تراز ۳d عناصر واسطه و اوربیتال ۴p آرسناید های همسایه آن مربوط می شود. نتایج حاصل از این تحقیق می تواند جهت مطالعات تجربی آینده روی نیم رساناهای مغناطیسی رقیق شده مفید واقع گردد. با توجه به نتایج حاصله از این پژوهش، نانولوله های GaAs آلایش یافته با عناصر واسطه، به عنوان کاندیدای مناسب جهت کاربرد در قطعات اسپین ترونیک پیشنهاد می شود.

**واژه های کلیدی:** نانولوله گالیوم آرسناید، نیم رسانای مغناطیسی رقیق شده، اسپین ترونیک، نظریه تابعی چگالی، فلزات واسطه

#### ۱. مقدمه

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

افزایش تقاضا برای وسایل الکترونیکی حالت جامد که کیفیت بهتر و سرعت بیشتری نسبت به نمونه های موجود داشته باشد سبب توجه زیاد به گالیوم آرسناید شده است. با استفاده از

تقریب چگالی موضعی (LDA-CA) [۱۵] توسط آلدِر-کپرلی<sup>۲</sup> استفاده شده است. مجموعه پایه‌ها به صورت (DZP)، [۱] انرژی قطع به جهت مش‌بندی فضای حقیقی ۵۰۰ Ry و تعداد نقاط k برای مش‌بندی منطقه اول بریلوئن برای نمونه خالص ۱۰۰×۱×۱ و برای نمونه‌های آرایش‌یافته برابر ۵۰×۱×۱ در راستای محوری نانولوله در نظر گرفته شده است. یاخته واحد خالص دارای ۱۸ اتم Ga و ۱۸ اتم As است، که برای اتم Ga آرایش ۳d<sup>۱۰</sup>۴s<sup>۲</sup>۴p<sup>۱</sup> و برای اتم As آرایش ۳d<sup>۱۰</sup>۴s<sup>۲</sup>۴p<sup>۳</sup> به عنوان اوربیتال‌های لایه ظرفیت در نظر گرفته شده‌اند. در حضور ناخالصی سلول شامل ۳۶ اتم است: ۱۶ اتم Ga، ۱۸ اتم As که دو جایگاه Ga را با ۱۱٪ آرایش دو ناخالصی مغناطیسی اشغال کرده‌اند. در دو راستای غیردوره‌ای نانولوله یعنی راستاهای a و b حدود ۱۰ آنگستروم خلاء داده‌ایم تا از برهم‌کنش 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 ۰.۰۵ eV/Å شوند، بهره برده‌ایم. ابتدا بحث خود را با بررسی نتایج نانولوله خالص Ga<sub>۱۸</sub>As<sub>۱۸</sub> (۰،۹) شکل ۱ (الف) شروع می‌کنیم. محاسبات نشان می‌دهد که این نانولوله یک نیم‌رسانا با گاف نواری مستقیم، با انرژی گافی در حدود ۱.۵ eV می‌باشد. 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 می‌باشد. مأخذ شبه پتانسیل‌های به کار رفته در این پروژه پایگاه اینترنتی SIESTA است، که در کد SIESTA از شبه پتانسیل‌های ترولیر-مارتین استفاده می‌شود [۱۶ و ۱۷].

### ۳. بحث و نتایج

از روی تجزیه و تحلیل چگالی حالت‌های کلی اتم‌ها و مقایسه آن می‌توان پی برد که کدام اتم‌ها نقش بیشتری در شکل‌گیری نوارهای انرژی (نوار ظرفیت و رسانش) داشته‌اند و همچنین می‌توان سهم اوربیتالی آنها در شکل‌گیری نوارهای انرژی را مشخص

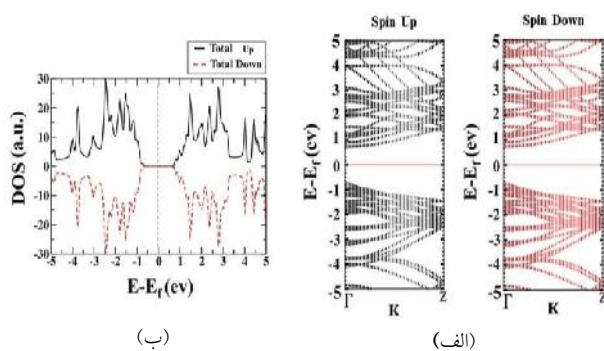
آنها عامل جا یا فضا نقش اساسی بازی می‌کنند، امکان‌پذیر ساخته است. تحرک بسیار زیاد الکترون‌ها در این ماده، طراحی و ساخت ابررایانه‌های سریعتر و کارآمدتر را ممکن ساخته است. مطمئناً این ماده ویژگی‌هایی دارد که برای قطعات الکترونیکی امروزی مورد نیاز است. با توجه به روند کوچک‌سازی قطعات الکترونیکی و با ورود به عرصه فناوری نانو در دهه‌های اخیر، صنایع تولیدی و تحقیقات علمی و دانشگاهی به سمت نانو ساختارهای مواد سوق پیدا کرده است [۱-۳]. اکثریت ترکیبات گروه III-V هم از این قاعده مستثنی نبوده و برای بررسی نانو ساختارهای این ترکیبات، به صورت نظری و تجربی کارهای زیادی انجام شده است. طیف وسیعی از مواد نیم‌رسانا با آرایش عناصر واسطه (اتم‌های مغناطیسی) وجود دارند، که این مواد را عموماً بعنوان نیم‌رساناهای مغناطیسی رقیق DMS می‌شناسند [۴-۷]. اگر چه مزایای فراوانی برای استفاده نیم‌رساناها در کاربردهای اسپین‌ترونیک وجود دارند، اما مسائل فراوانی از جمله چگونگی انتخاب ترکیبات مواد مغناطیسی در نیم‌رساناها وجود دارد. زیرا به طور کلی تمام نیم‌رساناها غیرمغناطیسی هستند. به همین دلیل ایجاد جریان اسپینی در این مواد مشکل می‌باشد. محققین، برای حل این مشکل از ترکیب مواد نیم‌رسانا با آرایش مواد مغناطیسی یعنی همان DMSها استفاده می‌کنند [۸-۱۳].

### ۲. روش محاسبات

با توجه به مقدمه ارائه شده و اهمیت گالیوم آرسناید آرایش‌یافته با عناصر واسطه، در این پژوهش به بررسی خواص الکترونی نظیر ساختار نواری و چگالی حالت‌های جزئی و کلی و خواص مغناطیسی نانولوله زیگزاگ (۰،۹) GaAs خالص و آرایش‌یافته با عناصر واسطه فلزی<sup>۱</sup> (TM) با آرایش ۱۱٪ در دو وضعیت نزدیک و دور در دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس پرداخته می‌شود. محاسبات بر مبنای رهیافت نظریه تابعی چگالی (DFT)، توسط کد SIESTA [۱۴] براساس تقریب شبه پتانسیل انجام شده است. برای تابع هم‌بستگی-تبادلی از

۲. Alder - Ceperley

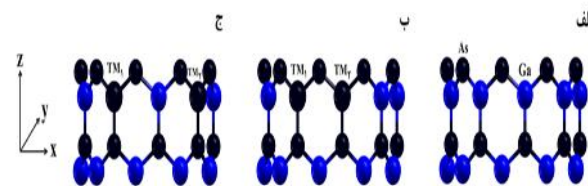
۱. Transition Metals



شکل ۲. (الف) ساختار نواری نانولوله‌های خالص زیگزاگ GaAs (ب) چگالی حالت‌های کل.

ساختار نواری نانولوله‌های زیگزاگ، شاهد این هستیم که در یک سری قطرها نوارهای ظرفیت نزدیک تراز فرمی (رفتار نوع p)، و در برخی دیگر نوارهای رسانش نزدیک به تراز فرمی (رفتار نوع n)، قرار می‌گیرند که این می‌تواند ناشی از اثر قطر و انحنا نانولوله و تأثیر آن در هیبریدشدگی اوربیتالی باشد [۱۸]. در حالت خالص فاصله بین یک اتم گالیوم با سه اتم آرسناید مجاورش به ترتیب ۲,۳۸، ۲,۳۸ و ۲,۳۹ آنگستروم می‌باشد که می‌توان به صورت میانگین طول پیوند بین Ga و As در نانولوله خالص GaAs را ۲,۳۸ آنگستروم در نظر گرفت. گشتاور مغناطیسی کل ( $\sim B$ ) در ساختار نانولوله خالص (۰,۹) صفر است، که نشان از غیرمغناطیسی بودن ساختار بوده و سهم ( $\sim B$ ) برای گالیوم و آرسناید مقداری برابر و با علامت مخالف است، انرژی گاف برای هر دو اسپین بالا و پایین نیز به دلیل غیرمغناطیسی بودن نانولوله خالص (۰,۹) یک مقدار خواهند داشت. گشتاور مغناطیسی کل، گشتاور مغناطیسی سهم گالیوم و آرسناید، اندازه گاف نواری در دو حالت اسپین بالا و پایین، طول نانولوله و رفتار ناخالصی در جدول ۱ آورده شده است.

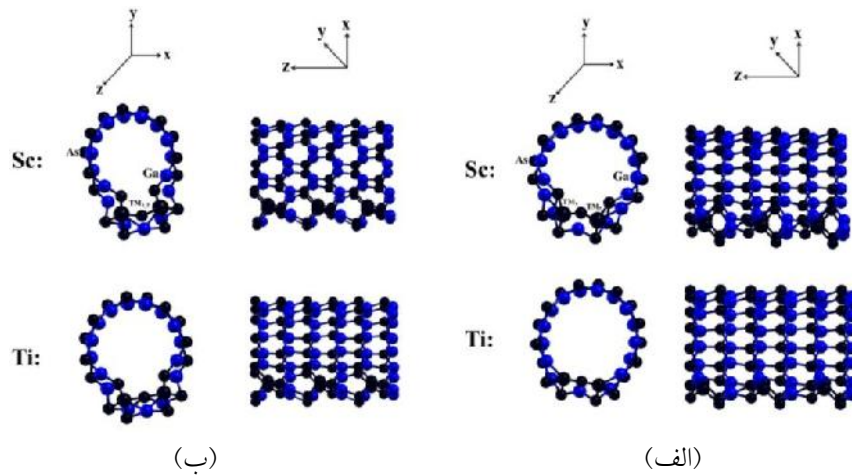
با آرایش دو عنصر Sc (شکل ۳ الف) و Ti (شکل ۳ ب)) در حالت‌های فرومغناطیسی و پادفرومغناطیسی در دو وضعیت نزدیک و دور نیز شاهد یک بی‌نظمی در دستگاه هستیم که باعث کشیده شدن ساختار در راستای قطر نانولوله می‌شود و این امر به دلیل شعاع‌های مختلف اتمی Ti و Sc است که با جانمایی کردن در موقعیت انتخابی Ga تغییراتی را در دستگاه اعمال می‌کند و ساختار به هم می‌ریزد.



شکل ۱. ساختار نانولوله  $\text{GaAs}(9,0)$  (الف) یاخته خالص، (ب) یاخته در حضور ناخالصی آلاییده شده در وضعیت نزدیک به هم، (ج) یاخته در حضور ناخالصی آلاییده شده در وضعیت دور.

نمود. چگالی حالت‌های جزئی محاسبه شده در شکل ۲ (الف) که فقط اوربیتال‌های  $\text{Ga-}2p$  و  $\text{As-}2p$  نظر گرفته شده است، چگالی حالت‌های مثبت، مربوط به اسپین بالا و چگالی حالت‌های منفی، مربوط به اسپین پایین هستند. در نانولوله 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 نانولوله ما هیچ خصلت مغناطیسی از خود نشان نمی‌دهد.

با بررسی ساختار نواری در نمونه خالص شکل ۱ (الف) نیز می‌توان از مقدار گاف نواری (مستقیم یا غیرمستقیم بودن) و روند تغییرات آن، که بسیاری از خواص فیزیکی مربوط به آنها می‌شود، اطلاعاتی به دست آورد. قابل توجه است که در شکل‌های مورد نظر جهت z در راستای افزایش طول نانولوله است و دو جهت x و y در راستای افزایش قطر نانولوله است. مطابق شکل ۲ (ب) نانولوله زیگزاگ GaAs دارای اندازه گاف نواری ۱,۵ eV و به صورت مستقیم می‌باشد و علاوه بر این در نمودار ساختار نواری، سطح انرژی صفر بیانگر موقعیت تراز فرمی می‌باشد که با خط افقی مستقیم نشان داده شده است. در نیم‌رساناهای ذاتی که چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها با هم برابر است، تراز فرمی در وسط گاف نواری بین نوار ظرفیت و نوار رسانش قرار می‌گیرد. 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 نزدیک‌تر می‌شود. با توجه به



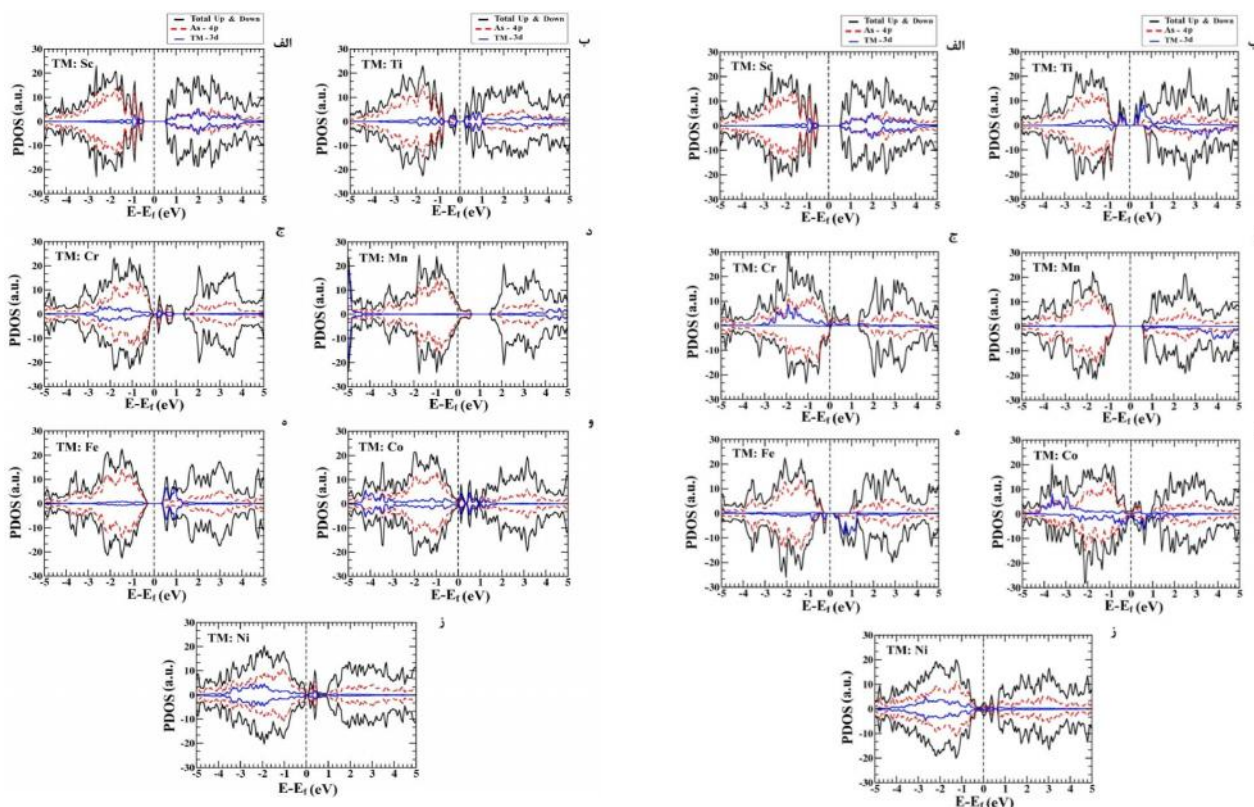
شکل ۳. ساختار بهینه شده نانولوله GaAs(۰,۹)، (الف) ابرسلول  $1 \times 1 \times 3$  در حضور ناخالصی Sc و Ti در وضعیت نزدیک در حالت فرومغناطیس (FM) (ب) ابرسلول  $1 \times 1 \times 3$  در حضور ناخالصی Sc و Ti در وضعیت دور در حالت فرومغناطیس (FM). قابل توجه است که برای حالت‌های فرومغناطیس (FM) و پادفرومغناطیس (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، اندازه گاف نواری در دو حالت اسپین بالا و پایین، طول نانولوله و رفتار الکترونیکی نانولوله خالص (۰,۹) گالیوم آرسناید.

رفتار الکترونیکی	$B \sim$ کل	$B \sim$ آرسناید	$B \sim$ گالیوم	انرژی کل (eV)	انرژی گاف اسپین پایین (eV)	انرژی گاف اسپین بالا (eV)	ساختار
نیم‌رسانا	۰	-۰,۰۰۰۸	+۰,۰۰۰۸	-۳۵۶۱۲,۳۳	۱,۵	۱,۵	خالص (۰,۹)

مناسب اسپین بالا با اسپین پایین نیم‌رسانای مغناطیسی رقیق شده خواهیم داشت، برای عنصر Cr (شکل ۴ ج) رفتار نیم‌فلزی 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 تقارن بودن حالت‌ها در اسپین بالا و پایین نشان از نیم‌رسانای غیرمغناطیسی است. برای عنصر Mn (شکل ۴ د) حاکی از آن است که رفتار دستگانه در حالت فرومغناطیسی برای اسپین بالا و پایین در تراز فرمی وجود نداشته و غیرمقارن نیز می‌باشد که به مغناطیسی بودن نیم‌رسانا 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 می‌باشد. عنصر Fe (شکل ۴ و ۵ ه) نیز برای هر دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس به رفتارهای مغناطیسی و غیرمغناطیسی اشاره دارد. برای عنصر Co

(برای حالت‌های فرومغناطیس (FM) و پاد فرومغناطیس (AFM) اشکال ساختاری نانولوله‌ها شبیه به هم بوده‌اند 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 آلیش یافته در وضعیت نزدیک (شکل ۴)  $11/11\%$  فاز فرومغناطیس و (شکل ۵)  $11/11\%$  فاز پادفرومغناطیس با آلیش (Cr, Mn, Ti, Co, Fe, Sc, Ni) شاهد یک عدم تقارن در حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین اطراف تراز فرمی هستیم. این عدم تقارن با توجه به گشتاورهای ایجاد شده بیان‌گر ایجاد یک قطبش اسپینی است. با آلیش 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 فرومغناطیس به دلیل نداشتن حالت در تراز فرمی و عدم تقارن



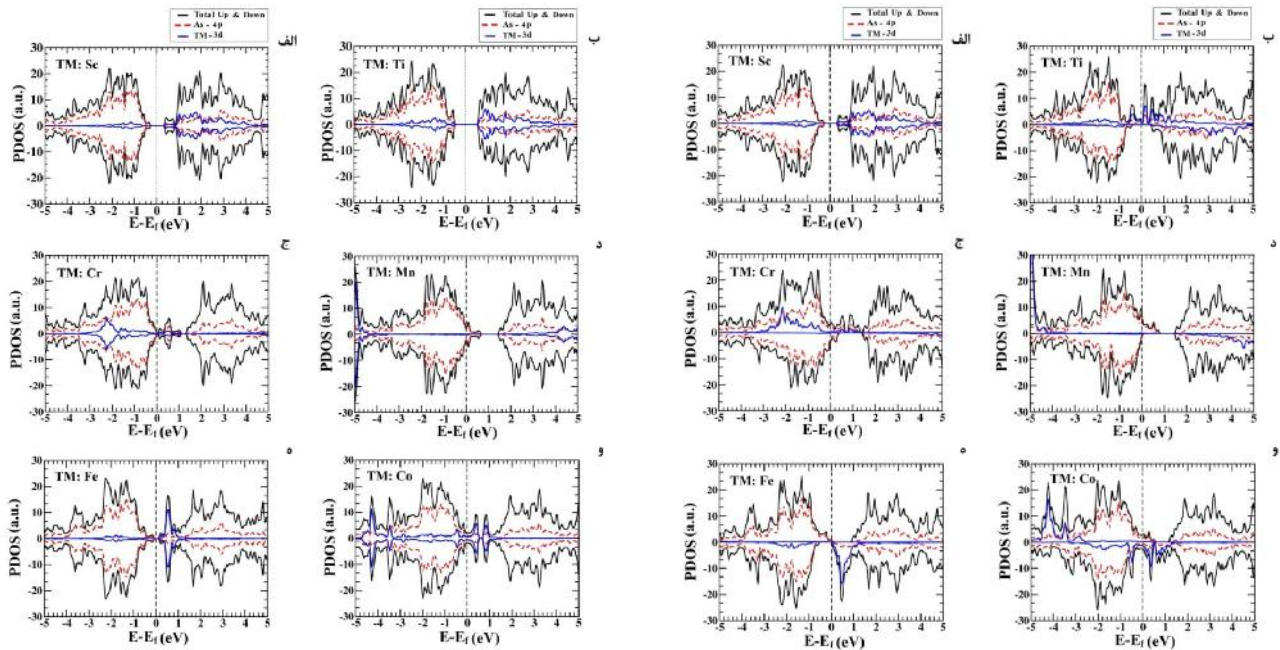
شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) چگالی حالت‌های کلی و جزئی سهم اوربیتال ۴p آرسناید و ۳d عنصر واسطه با ۱۱,۱۱٪ آرایش در وضعیت نزدیک حالت فرومغناطیس (FM) برای (الف) Sc، (ب) Ti، (ج) Cr، (د) Mn، (ه) Fe، (و) Co و (ز) Ni.

شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) چگالی حالت‌های کلی و جزئی سهم اوربیتال ۴p آرسناید و ۳d عنصر واسطه با ۱۱,۱۱٪ آرایش در وضعیت نزدیک حالت پادفرومغناطیس (AFM) 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 می‌دهد، 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 آرایش 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) برای دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس به ترتیب شاهد مغناطیسی و غیرمغناطیسی بودن نیم‌رسانا هستیم و در مورد عنصر Cr شکل ۶ (ج) و شکل ۷ (ج) در حالت‌های فرومغناطیس و پادفرومغناطیس به ترتیب رفتارهای فلز مغناطیسی و نیم‌رسانای غیرمغناطیسی را مشاهده می‌کنیم. در مورد عنصر Mn شکل ۶ (د)

و شکل ۷ (د) نیز در حالت فرومغناطیس رفتار نیم‌فلز و در حالت پادفرومغناطیس رفتار فلز مغناطیسی را شاهد هستیم. شکل ۶ (ه) و شکل ۷ (ه) نیز به ترتیب بیان‌گر مغناطیسی و غیرمغناطیسی بودن فلز مورد نظر با آرایش 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 نمونه‌ها کاملاً مشخص است که بیشترین سهم در حالت‌های قطبشی ایجاد شده ناشی از هیبریدشدگی اوربیتالی بین ۴p-As و ۳d-TM و اطراف آنهاست. سهم این هیبریدشدگی در آرایش با عناصر مختلف، متفاوت است. از طرفی می‌توان به سهم بیشتر Cr و Co در نوار ظرفیت و سهم Sc، Fe، Ti و Mn در نوار رسانش اشاره کرد.

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

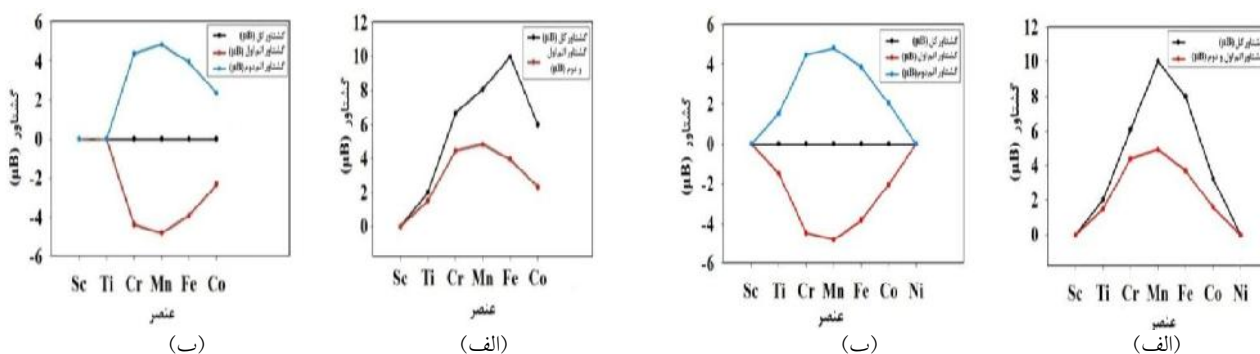


شکل ۶. (رنگی در نسخه الکترونیکی) چگالی حالت‌های کلی و جزئی سهم اوربیتال ۴p آرسناید و ۳d عناصر واسطه با ۱۱/۱۱٪ آرایش در وضعیت دور، حالت فرومغناطیس (FM) برای (الف) Sc، (ب) Ti، (ج) Cr، (د) Mn، (ه) Fe و (و) Co.

شکل ۷. (رنگی در نسخه الکترونیکی) چگالی حالت‌های کلی و جزئی سهم اوربیتال ۴p آرسناید و ۳d عناصر واسطه با ۱۱/۱۱٪ آرایش در وضعیت دور، حالت پادفرومغناطیس (AFM) برای (الف) Sc، (ب) Ti، (ج) Cr، (د) Mn، (ه) Fe و (و) Co.

لایه ۳d آن می‌باشد چون که در این حالت فقط حالت‌های با اسپین پایین و یا فقط با اسپین بالا داریم، و برای گشتاور کل  $B$  در بین عناصر واسطه مذکور، باز هم عنصر Mn بیشترین سهم را به دلیل تأثیرپذیری سهم آرسناید‌های اطراف آن دارد. از بین عناصر واسطه با آرایش دادن دو عنصر Mn به نانولوله خالص GaAs در دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس، شاهد تغییر فاصله بین دو عنصر آرایش شده هستیم، که در حالت پادفرومغناطیس فواصل بین دو عنصر آرایش‌یافته نسبت به فرومغناطیس بیشتر شده است. در جدول ۳ برای حالت فرومغناطیس از Sc به سمت Fe شاهد افزایش گشتاور مغناطیسی کل و از Fe به سمت Co شاهد کاهش آن هستیم، Mn نیز بیشترین مقدار را در بین دیگر عناصر واسطه دارد (شکل ۹ (الف)) و برای گشتاور کل  $B$  در بین عناصر واسطه مذکور، عنصر Fe نیز بیشترین سهم را به دلیل آرسناید‌های اطراف آن دارد. از بین عناصر واسطه با آرایش دادن دو عنصر Cr به نانولوله خالص GaAs در دو فاز فرومغناطیس و

سهم گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه (TM) به ازای هر اتم در این گشتاور کل، سهم گالیوم، سهم آرسناید، فاصله بین ناخالصی‌ها پس از آرایش، اندازه گاف نواری در دو حالت اسپین بالا و پایین، طول نانولوله، فاز پایدار مغناطیسی و مقادیر انرژی کل حالت‌های آرایش‌یافته محاسبه شده و در جداول ۲ و ۳ خلاصه و مقایسه شده است. گشتاور کل ساختار (که حاصل جمع گشتاور اتم‌های (گالیوم و آرسناید و فلز واسطه) می‌باشد  $B$  - و سهم گشتاور جزئی اتم‌های عناصر واسطه برای هر دو فاز فرومغناطیس و پادفرومغناطیس در هر دو وضعیت نزدیک و دور در جداول ۲ و ۳ گزارش و در شکل‌های ۸ و ۹ رسم شده است. در فاز فرومغناطیسی بیشترین سهم در گشتاور کلی ایجاد شده در ساختار، ناشی از گشتاورهای موضعی TM‌ها است. در جدول ۲ برای حالت فرومغناطیس از Cr به سمت Mn شاهد افزایش گشتاور مغناطیسی کل و از Mn به سمت Co شاهد کاهش آن هستیم، Mn بیشترین مقدار گشتاور مغناطیسی را در بین دیگر عناصر واسطه دارد (شکل ۸ (الف)) و این به دلیل نیمه‌پر بودن



شکل ۸. (رنگی در نسخه الکترونیکی) گشتاور کل ساختار GaTMs ( $\sim B$ ) و سهم گشتاور اتم اول و دوم ( $\sim B$ ) عناصر واسطه در دو حالت (الف) فرومغناطیس (ب) پادفرومغناطیس در وضعیت نزدیک.

شکل ۹. (رنگی در نسخه الکترونیکی) گشتاور کل ساختار GaTMs ( $\sim B$ ) و سهم گشتاور اتم اول و دوم ( $\sim B$ ) عناصر واسطه در دو حالت (الف) فرومغناطیس (ب) پادفرومغناطیس در وضعیت دور.

جدول ۲. گشتاور مغناطیس کل ساختار (GaTMs) در دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های گالیوم و آرسناید در ساختار، فاصله بین ناخالصی‌ها پس از آرایش، اندازه گاف نواری در دو حالت اسپین بالا و پایین، طول نانولوله و رفتار الکتریکی و فاز پایدار مغناطیسی در دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس در وضعیت نزدیک.

	فاز	Sc	Ti	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
dTM-TM (Å)	FM	۳,۷۵	۳,۹۳	۳,۵۳	۲,۹۹	۲,۷۳	۳,۱۶	۲,۶۷
	AFM	۳,۷۲	۳,۲۹	۳,۲۶	۱,۴	۳,۵۵	۳,۵۹	۲,۵۷
طول نانولوله (Å)	FM	۶,۴۸	۶,۷۳	۶,۷۵	۶,۸۱	۶,۷۵	۶,۷۴	۶,۷۱
	AFM	۶,۴۹	۶,۵۳	۶,۷۶	۶,۷۱	۶,۷۲	۶,۷۳	۶,۵۶
گشتاور گالیوم ( $\sim B$ )	FM	۰	۰,۰۵	-۰,۲۲	۰,۱۲	۰,۲۵	۰,۰۴	۰
	AFM	.	-۰,۰۱	-۰,۰۰۵	-۰,۰۰۱	۰,۰۰۱	-۰,۰۰۹	۰
گشتاور آرسناید ( $\sim B$ )	FM	۰	-۱,۰۰۸	-۲,۴۵	۰,۰۹	۰,۳۷	۰,۰۵	۰
	AFM	۰	-۰,۰۲۱	۰,۰۰۵	-۰,۰۰۱	-۰,۰۰۲	۰,۰۰۱	۰
گشتاور ناخالصی (TM) اتم اول	FM	۰	۱,۴۷	۴,۳۶	۴,۸۹	۳,۶۸	۱,۵۷	۰
	AFM	۰	-۱,۴۷	-۴,۴۶	-۴,۸۳	-۳,۸۴	-۲,۰۳	۰
گشتاور ناخالصی (TM) اتم دوم	FM	۰	۱,۴۷	۴,۳۶	۴,۸۹	۳,۶۸	۱,۵۷	۰
	AFM	۰	۱,۵	۴,۴۶	۴,۸۳	۳,۸۴	۲,۰۳	۰,۰۰۱
گشتاور کل ساختار ( $\sim B$ ) (GaTMs)	FM	۰	۱,۹۹	۶,۰۵	۱۰,۰۰۳	۸,۰۰۲	۳,۲۴۷	۰
	AFM	۰	-۰,۰۰۴	۰	-۰,۰۰۲	-۰,۰۰۱	-۰,۰۰۸۹	۰,۰۰۱
گاف نواری بالا (eV)	FM	۱,۱۵	۰,۴۸	۰	۱,۳۷	۱,۳۳	۰	۰
	AFM	۱,۱۵	۰,۴۷	۰,۳۲	۰	۰,۸	۰,۱۲	۰,۲۲
گاف نواری پایین (eV)	FM	۱,۱۵	۱,۴	۱,۴۲	۱,۴۴	۰,۴۴	۰	۰
	AFM	۱,۱۵	۰,۴۷	۰,۳۲	۰	۰,۸	۰,۱۴	۰,۲۲
رفتار الکتریکی	FM	NMS	DMS	HM	DMS	DMS	MM	NMM
	AFM	NMS	NMS	NMS	NMM	NMS	NMS	NMS
اختلاف انرژی EAFM-EFM (eV)	—	۰,۰۱۱	-۱,۵۰۳	۰,۰۴۲	۱,۱۷۸	-۰,۱۸۹	-۰,۰۷	۰,۷۴
	—	FM	AFM	FM	FM	AFM	AFM	FM

MM: فلز مغناطیسی  
 NMM: فلز غیر مغناطیسی  
 HM: نیم فلز است.

علائم اختصاری در جدول فوق بیانگر:  
 NMS نیم‌رسانای غیر مغناطیسی  
 DMS نیم‌رسانای مغناطیسی رقیق شده

**جدول ۳.** گشتاور مغناطیس کل ساختار (GaTMs) در دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های گالیوم و آرسناید در ساختار، فاصله بین ناخالصی‌ها پس از آرایش، اندازه گاف نواری در دو حالت اسپین بالا و پایین، طول نانولوله و رفتار 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	۴,۳۰	۴,۳۱	۴,۵۳	۶,۷۱	۶,۵۴	۶,۶۶
	AFM	۴,۲۸	۴,۳۸	۶,۰۳	۶,۶۱	۶,۵۲	۶,۷۳
طول نانولوله (Å)	FM	۶,۵۳	۶,۵۹	۶,۶۷	۶,۷۳	۶,۷۷	۶,۷۱
	AFM	۶,۵۴	۶,۶۴	۶,۷۵	۶,۷۵	۶,۷۷	۶,۷۱
گشتاور گالیوم ( $\sim B$ )	FM	۰	۰,۰۲	-۰,۳۲	۰,۰۱	۰,۶۵	۰,۴۵
	AFM	۰	۰	-۰,۰۰۱	-۰,۰۰۱	۰	۰
گشتاور آرسناید ( $\sim B$ )	FM	۰	-۱,۰۳	-۱,۹	-۱,۵۶	۱,۴۲	۰,۸۹
	AFM	۰	۰	۰	۰,۰۰۵	۰	-۰,۰۰۱
گشتاور ناخالصی (TM) اتم اول	FM	۰	۱,۵	۴,۴۴	۴,۸۱	۳,۹۴	۲,۳۱
	AFM	۰	۰	-۴,۳۶	-۴,۸۱	-۳,۹۲	-۲,۳۴
گشتاور ناخالصی (TM) اتم دوم	FM	۰	۱,۵	۴,۴۳	۴,۸۱	۳,۹۴	۲,۳۱
	AFM	۰	۰	۴,۳۶	۴,۸۱	۳,۹۲	۲,۳۴
گشتاور کل ( $\sim B$ )	FM	۰	۱,۹۹	۶,۶۵۱	۸,۰۶	۹,۹۶	۵,۹۷
	AFM	۰	۰	۰,۰۰۰۲	۰,۰۰۴	۰	-۰,۰۰۱
گاف نواری بالا (eV)	FM	۰,۷۱	۰,۱۵	۰	۱,۴۹	۰,۶۶	۰
	AFM	۰,۷۱	۱,۱۶	۰,۱۶	۰	۰,۳	۰
گاف نواری پایین (eV)	FM	۰,۷۱	۰,۹۷	۰	۰	۰	۰
	AFM	۰,۷۱	۱,۱۶	۰,۱۶	۰	۰,۳	۰
رفتار الکتریکی	FM AFM	NMS NMS	DMS NMS	MM NMS	HM NMM	HM NMS	MM NMM
اختلاف انرژی (eV) EAFM-EFM	—	۰,۰۰۰۸	-۰,۷۴۴	۰,۴۴۵	۰,۰۳۴	-۰,۰۹۱	-۰,۰۲۸
فاز پایدار مغناطیسی	—	FM	AFM	FM	FM	AFM	AFM

اتم‌ها و برهم‌کنش آنها و در نتیجه تغییر سهم گشتاورهای اتم‌های همسایه 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 آرایش ۱۱/۱۱٪ اختلاف انرژی ((EAFM-EFM (eV) محاسبه شده در جداول ۲ و ۳ اختلاف انرژی فازهای فرومغناطیسی و پادفرومغناطیس است که به صورت فرومغناطیس - پادفرومغناطیس  $E = E\Delta E$  تعریف شده است. اختلاف انرژی مثبت بیانگر فاز پایدار فرومغناطیسی می‌باشد. این اختلاف انرژی برای دو وضعیت دور و نزدیک آرایش ۱۱/۱۱٪ برای آلاینده‌های

NMM پاد فرومغناطیس، شاهد تغییر فاصله بین دو عنصر آرایش شده هستیم که در حالت پادفرومغناطیس فواصل بین دو عنصر آرایش یافته نسبت به فرومغناطیس بیشتر شده است.

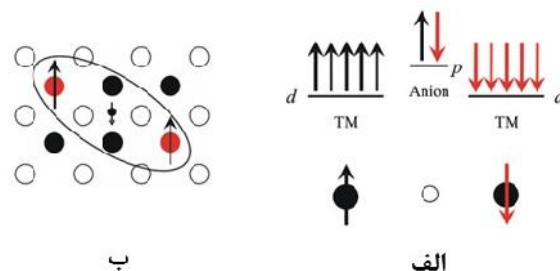
با توجه به شکل های ۸ و ۹ و همچنین جداول ۲ و ۳ از بین عناصر واسطه آرایش یافته با نانولوله گالیوم آرسناید، گشتاور مغناطیسی عنصر Mn بیشترین مقدار را دارد. گشتاور کل ساختار GaTMs که حاصل جمع گشتاور اتم‌های (گالیوم و آرسناید و فلز واسطه) می‌باشد، در زمان آرایش Fe در حالت دور بیشترین مقدار را دارد در صورتی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



زمانی امکان دارد که برهم کنش ابرتبادلی غیرمستقیم بر برهم کنش ابرتبادلی مستقیم غالب باشد.

#### ۴. نتیجه گیری

در این پژوهش خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله زیگزاگ (۰،۹) گالیوم آرسناید خالص و آرایش یافته با عناصر واسطه (Ni, Co, Fe, Mn, Cr, Ti, Sc) با استفاده از رهیافت نظریه تابعی چگالی و تقریب چگالی موضعی LDA توسط کد محاسباتی SIESTA مطالعه شد. ساختار نانولوله زیگزاگ (۰،۹) گالیوم آرسناید آرایش یافته با ۲ اتم واسطه (۱۱/۱۱٪) در موقعیت های متفاوت دور و نزدیک با دو آرایش مختلف مورد بررسی قرار گرفت. آرایش نانولوله با جایگزینی عناصر واسطه به جای اتم های Ga صورت گرفت. نتایج ساختار نواری و چگالی حالت ها نشان داد که نانولوله زیگزاگ (۰،۹) گالیوم آرسناید خالص نیم رسانای غیرمغناطیسی هستند، در حالی که نانولوله های آرایش یافته با عناصر واسطه، بسته به نوع آرایش، رفتارهای متفاوتی نظیر: نیم رسانای مغناطیسی، نیم رسانای غیرمغناطیسی، فلز مغناطیسی، فلز غیرمغناطیسی و رفتار نیم فلزی از خود نشان دادند. گشتاور مغناطیسی کل و سهم گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه در ساختارهای مختلف مورد بررسی، محاسبه شد. بیشینه گشتاور مغناطیسی در حضور آرایش Mn مشاهده شد. گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه برای آرایش های Sc, Ti, Cr و افزایش یافته و بیشینه مقدار را آرایش Mn نشان می دهد. در حالی که با افزایش عدد اتمی از Fe به سمت Ni گشتاور مغناطیسی کاهش می یابد. در آرایش ۱۱/۱۱٪ نانولوله (۰،۹) گالیوم آرسناید با Fe و Mn فاز پایدار مغناطیسی به ترتیب آنتی پادفرومغناطیس و فرومغناطیس به دست آمد. رفتار نیم فلزی با ۱۰۰ درصد قطبش اسپینی، به ازای آرایش ۱۱/۱۱٪ نانولوله (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



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 اسپین های جایگزیده به واسطه الکترون های رسانش [۲۲].

(Cr و Ti, Co, Fe, Sc, Ni, Mn) محاسبه شده است. با توجه به جداول ۲ و ۳ و اختلاف انرژی های به دست آمده، فاز پایدار مغناطیسی برای هر دو وضعیت دور و نزدیک برای آلاینده های (Cr و Sc, Ni, Mn) فرومغناطیس و برای آلاینده های (Co, Fe) و (Ti) پادفرومغناطیس به دست آمد. فاز پایدار مغناطیسی در آرایش عناصر یاد شده در هر دو وضعیت دور و نزدیک وابسته به فاصله عناصر و موقعیت عناصر واسطه از یکدیگر نبوده و در هر دو وضعیت به یک صورت به دست آمد. این رفتار را می توان با استفاده از مدل ابر تبادلی زرن توجیه کرد [۱۹ و ۲۰]، نظریه ای که توسط زرن مطرح شد نشان می دهد که برهم کنش ابرتبادلی [۲۱] مستقیم، بین لایه d نیمه پر الکترون های یون های کاتیونی TM و اوربیتال های p کاملاً پر آنیون های اطراف آن، به صورت پادفرومغناطیس (شکل ۱۰ الف)) است. به دلیل این که الکترون های لایه d دو اتم TM مجاور هم، تراز p مشابه را پر می کنند، بر طبق اصل طرد پائولی، اسپین آنها باید در جهت خلاف هم قرار گیرد که این باعث جفت شدگی پادفرومغناطیسی بین نزدیکترین کاتیون های TM همسایه، توسط آنیون اشتراکی می شود. از طرفی دیگر برهم کنش غیرمستقیم ابر تبادلی بین الکترون های لایه جایگزیده d کاتیون های TM، توسط واسطه گری حامل های نواری غیرجایگزیده، تمایل به نظم لایه های d نیمه پر TM به صورت جفت شدگی فرومغناطیس فقط (شکل ۱۰ ب)) در مدل زرن رفتار فرومغناطیسی فقط

رقیق شده مفید واقع شود. با توجه به نتایج حاصله از این پژوهش و انعطاف‌پذیری نانولوله‌های GaAs در حضور آلاینش و مشاهده خاصیت فرومغناطیس در دمای اتاق، نانولوله‌های GaAs آلاینش‌یافته با عناصر واسطه به عنوان گزینه‌ای مناسب جهت کاربرد در قطعات اسپین‌ترونیکی، فیلترهای جریان اسپینی و تزریق کننده‌های جریان اسپینی پیشنهاد می‌شوند.

فرد قطبش اسپینی ترازهای انرژی به هیبریداسیون بین اوربیتال‌های تراز ۳d عناصر واسطه و اوربیتال‌های ۴p آرسناید‌های همسایه آن مربوط می‌شود. نتایج بیانگر فاز پایدار فرومغناطیس در حضور Ni، Mn، Cr و Sc و پادفرومغناطیس در حضور Ti، Fe و Co در دو وضعیت دور و نزدیک می‌باشد. نتایج حاصل از این تحقیق می‌تواند جهت مطالعات تجربی آینده روی نیم‌رساناهای مغناطیسی

## مراجع

1. P M Krstaji, V A Ivanov, F M. Peeters, V Fleurov and K Kikoin, *Europhys. Lett.* **61**, 2 (2003) 235.
2. 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).
3. 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.
10. N Akdogan, "Origin of Ferromagnetism in Oxide-Based Diluted Magnetic Semiconductors", PhD. thesis Ruhr-University Bochum, Germany (2008).
11. H C Kandpal, G H Fecher and C Felser, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40** (2007) 1507.
12. M Getzla, "Fundamentals of Magnetism", Springer, 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.
16. 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.
18. 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.
22. N. Akdogan; "Origin of Ferromagnetism in Oxide-based Diluted Magnetic semiconductors", Ruhr-Universität Bochum, Germany (2008).