





دانشکده: فیزیک

گرایش: نانو فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد

بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله‌های گالیوم آرسناید آلاییده با عناصر واسطه

توسط رهیافت نظریه تابعی چگالی

رضا فتحی

استاد راهنما:

دکتر طیبه مولاروی

شهریور ۱۳۹۴

تقدیم به مادرم

که از نگاهشان صلابت

از رفتارشان محبت

و از صبرشان ایستادگی آموختم.

از استاد گرامی خانم دکتر طیبه مولاروی که با راهنمایی، دلسوزی و حمایت‌هایشان، امید به ادامه و پیمودن مسیری نو را در بنده ایجاد کردند کمال تشکر و قدردانی را دارم و از زحمات دوستان خوبم آقایان مصطفی شعبانی و مجید مرادی و همچنین عزیزانی که در این تحقیق مرا یاری نمودند سپاسگزارم.

تعهد نامه

اینجانب رضا فتحی دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک دانشکده فیزیک دانشگاه شاهرود نویسنده پایان نامه بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله‌های گالیوم آرسناید آلاییده با عناصر واسطه توسط رهیافت نظریه تابعی چگالی تحت راهنمایی خانم دکتر طیبه مولاروی متعهد می شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه شاهرود » و یا « Shahrood University » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است .

تاریخ :

۱۳۹۴/۶/۲۵

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

چکیده

طیف وسیعی از مواد نیمرسانا با آلایش عناصر واسطه (اتمهای مغناطیسی) وجود دارند، که این مواد را عموماً بعنوان نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده DMS می‌شناسند. از سوی دیگر DMS های حاصل از ترکیبات نیمرسانای گروه III-V، بعلاوه امکان کاربرد آنها در اسپینترونیک، توجه بسیاری از محققین را به خود جلب کرده است. افزایش تقاضا برای وسایل الکترونیکی حالت جامد که کیفیت بهتر و سرعت بیشتری نسبت به نمونه‌های موجود داشته باشد سبب توجه زیاد به ترکیبات گالیوم آرسناید شده است. در این پژوهش خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله‌های خالص و آلایش یافته GaAs با عناصر واسطه (V, Cr, Mn, Fe, Co, Sc, Ti, Ni)، با استفاده از رهیافت نظریه تابع چگالی قطبیده اسپینی و تقریب چگالی موضعی LDA توسط کد محاسباتی SIESTA مطالعه شده است. محاسبات روی نانولوله‌های خالص دسته‌بندی (۴,۴)، (۵,۵)، (۶,۶)، (۷,۷)، (۸,۸)، (۹,۹)، (۱۰,۱۰)، (۱۲,۱۲)، (۱۴,۱۴)، (۱۶,۱۶)، (۱۸,۱۸)، (۲۰,۲۰) و زیگزاگ (۴,۰)، (۵,۰)، (۶,۰)، (۷,۰)، (۸,۰)، (۹,۰)، (۱۰,۰)، (۱۲,۰)، (۱۴,۰)، (۱۶,۰)، (۱۸,۰)، (۲۰,۰) صورت گرفته است. نتایج حاصله از محاسبات الکترونی بیانگر خواص نیمرسانایی این نانولوله‌هاست. نانولوله‌های دسته‌بندی (۳,۳)، (۵,۵) و زیگزاگ (۹,۰)، (۵,۰) توسط عناصر واسطه مورد آلایش قرار گرفته است که نتایج حاصل از این تحقیق می‌تواند جهت مطالعات تجربی آینده روی نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده مفید واقع گردد. با توجه به نتایج حاصله از این پژوهش و انعطاف پذیری نانولوله‌های GaAs در حضور آلایش و مشاهده خاصیت فرومغناطیس در دمای اتاق، نانولوله‌های GaAs آلایش یافته با عناصر واسطه به عنوان کاندیدای مناسب جهت کاربرد در قطعات اسپین ترونیکی، فیلترهای جریان اسپینی و تزریق کننده‌های جریان اسپینی پیشنهاد می‌شوند.

کلمات کلیدی: نانولوله‌ی GaAs، نظریه تابع چگالی، کد SIESTA، نیمرسانای رقیق شده مغناطیسی (DMS)، عناصر واسطه‌ی مغناطیسی (TM)، اسپینترونیک.

لیست مقالات مستخرج از پایان نامه:

- 1- R. Fathi, T. Movlarooy, “**Ab initio Study of the Electronic Structure of GaAs Nanotubes**”, Proceedings of 5th International Congress on Nanoscience & Nanotechnology (ICNN2014) 22-24 October 2014, Tehran, Iran.
- 2- R. Fathi, T. Movlarooy, “**Transition metal doped (9,0) GaAs nanotube; a diluted magnetic semiconductor**”, Proceedings of 5th International Congress on Nanoscience & Nanotechnology (ICNN2014) 22-24 October 2014, Tehran, Iran.
- 3- R. Fathi, T. Movlarooy, “**Transition metals doped (5,5) GaAs nanotube as a DMS**”, 3rd International Congress on Nanoscience & Nanotechnology (ICNT2015) Istanbul, Turkey, July 2-3, 2015.

فهرست مطالب

فصل اول: مقدمه ای بر گالیوم آرسنید (Ga,As)، نانوساختارها، کاربردنا و خواص آن	۱
۱-۱ گالیوم آرسنید	۲
۲-۱ نانوساختارهای GaAs	۷
۳-۱ پارامترهای ساختاری نانولوله های تک جداره	۷
۴-۱ دسته بندی مواد از نظر خواص مغناطیسی	۱۲
۱-۴-۱ مواد دیا مغناطیس	۱۳
۲-۴-۱ مواد پارا مغناطیس	۱۳
۳-۴-۱ مواد فرومغناطیس	۱۴
۴-۴-۱ مواد آنتی فرومغناطیس	۱۴
۵-۴-۱ مواد فری مغناطیس	۱۵
۶-۴-۱ مروری بر خواص GaAs در ساختار بلوری	۱۶
۵-۱ مروری بر خواص الکترونی و مغناطیسی نانوساختارهای گروه III-V	۱۸
فصل دوم: اسپینترونیک و نیم رساناهای منطیسی رقیق شده (DMSs)	۲۳
۱-۲ مقدمه	۲۴
۲-۲ اسپینترونیک	۲۵
۳-۲ نیم رساناهای منطیسی	۲۷
۴-۲ تزریق یک عنصر مغناطیسی به نیمرسانا	۲۷
۵-۲ نیم رساناهای منطیسی رقیق شده	۲۸
۶-۲ DMS های بر پایه ترکیبات گروه III-V	۳۱
۷-۲ مدل های نظری برای توصیف رفتار فرومغناطیس ها در DMS ها	۳۱
۱-۷-۲ مدل تبدالی دوگانه	۳۲
۲-۷-۲ مدل زرن	۳۳

۳۳	مدل میدان میانگین
۳۴	مدل تبادل RKKY
۳۵	مدل تبادل مستقیم
۳۷	فصل سوم: نظریه تابعی چگالی (DFT)
۳۸	۱-۳ مقدمه
۳۹	۲-۳ مطالعه‌ی کوانتومی بلور
۴۰	۳-۳ تقریب بورن - اپنهايمر (آدياباتيك)
۴۱	۴-۳ تقریب الکترون مستقل
۴۲	۵-۳ تقریب هارتری
۴۴	۶-۳ تقریب هارتری-فوک
۴۵	۷-۳ نظریه‌ی توماس-فرمی
۴۵	۸-۳ نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT)
۴۶	۹-۳ قضایای هوهنبرگ-کوهن
۴۷	۱۰-۳ رهیافت کوهن-شم
۵۱	۱۱-۳ تقریب چگالی موضعی (LDA)
۵۳	۱۲-۳ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)
۵۴	۱۳-۳ نظریه تابعی چگالی قطبیده اسپینی (SDFT)
۵۵	۱۴-۳ روش حل معادلات تک ذره‌ای کوهن-شم
۵۶	۱۵-۳ کد SIESTA
۵۶	۱۶-۳ اوربیتال‌های زتای دوگانه (DZ)
۵۷	۱۷-۳ اوربیتال‌های قطبیده
۵۷	۱۸-۳ شبه پتانسیل
۵۹	فصل چهارم: نتایج؛ بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله‌های کالیوم آرسناید (Ga,As) خالص و آرایش یافتن عناصر واسطه
۶۰	۱-۴ مقدمه
۶۱	۲-۴ بهینه‌سازی پارامترها

۶۱	۱-۲-۴ انرژی قطع
۶۲	۲-۲-۴ بردار شبکه‌بندی و تعداد نقاط K در فضای وارون
۶۲	۳-۲-۴ تعیین پارامترهای ورودی نانولوله GaAs خالص و آرایش یافته
۶۲	۱-۳-۲-۴ انرژی قطع
۶۳	۲-۳-۲-۴ بردار شبکه‌بندی و تعداد نقاط K در فضای وارون
۶۵	۳-۳-۲-۴ مجموعه پایه‌ها
۶۵	۳-۴ بررسی خواص الکترونی نانولوله‌های خالص GaAs (زیگزاگ و دسته‌صندلی)
۶۵	۱-۳-۴ بهینه‌سازی ساختار
۶۶	۱-۱-۳-۴ ثابت شبکه
۶۸	۲-۱-۳-۴ طول پیوند
۶۹	۲-۳-۴ جدایی خمش
۷۱	۳-۳-۴ خواص الکترونی نانولوله‌های (زیگزاگ و دسته‌صندلی) خالص GaAs
۷۱	۱-۳-۳-۴ بررسی ساختار نواری
۷۷	۲-۳-۳-۴ محاسبه‌ی چگالی حالت‌های کلی (DOS) و جزئی (PDOS)
۸۰	۴-۴ بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله‌های GaAs آرایش یافته با عناصر واسطه فلزی
۸۱	۱-۴-۴ محاسبات نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs (۹,۰) با عناصر واسطه
۸۲	۱-۱-۴-۴ بررسی پارامترهای ساختاری نانولوله‌های آرایش یافته GaAs (۹,۰)
۸۴	۲-۱-۴-۴ بررسی خواص الکترونی نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs (۹,۰)
۸۵	۱-۲-۱-۴-۴ ساختار نواری نانولوله‌ی GaAs (۹,۰) آرایش یافته
۹۳	۲-۲-۱-۴-۴ بررسی چگالی حالت‌های نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs (۹,۰)
۹۹	۳-۱-۴-۴ بررسی خواص مغناطیسی نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs (۹,۰)
۹۹	۱-۳-۱-۴-۴ شناسایی فاز پایدار مغناطیسی نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs (۹,۰)
۱۰۲	۲-۳-۱-۴-۴ بررسی گشتاورهای مغناطیسی در نانولوله‌ی GaAs (۹,۰) آرایش یافته
۱۰۶	۲-۴-۴ محاسبات نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs (۵,۵)
۱۰۷	۱-۲-۴-۴ بررسی پارامترهای ساختاری نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs (۵,۵)
۱۰۸	۲-۲-۴-۴ بررسی خواص الکترونی نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs (۵,۵)

۱۰۹(۵,۵) GaAs یافته ساختار نواری نانولوله‌ی آلایش یافته
۱۱۲ (۵,۵) GaAs یافته حالت‌های نانولوله‌ی آلایش یافته
۱۱۴ (۵,۵) GaAs یافته خواص مغناطیسی نانولوله‌ی آلایش یافته
۱۱۵ (۵,۵) GaAs یافته شناسایی فاز پایدار مغناطیسی نانولوله‌ی آلایش یافته
۱۱۶ (۵,۵) GaAs یافته بررسی گشتاورهای مغناطیسی در نانولوله‌ی آلایش یافته
۱۱۹ (۳,۳) و (۵,۰) GaAs یافته محاسبات نانولوله‌های آلایش یافته
۱۲۰ (۵,۰) و (۳,۳) GaAs یافته پارامترهای ساختاری نانولوله‌های آلایش یافته
۱۲۲ (۳,۳) و (۵,۰) GaAs یافته خواص الکترونی نانولوله‌های آلایش یافته
۱۲۴ (۳,۳) و (۵,۰) GaAs یافته خواص مغناطیسی نانولوله‌های آلایش یافته
۱۲۸ نتیجه‌گیری
۱۳۰ پیشنهاد برای آینده
۱۳۱ مراجع

فهرست اشکال

- شکل ۱-۱: سلول واحد ساختار زینک بلند GaAs [۳]. ۳.....
- شکل ۲-۱: ساختار نواری GaAs [۴]. ۵.....
- شکل ۳-۱: منطقه اول بریلوئن در فضای وارون برای ساختار زینک بلند [۵]. ۵.....
- شکل ۴-۱: دمای کوری محاسبه شده بعضی از نیمرساناهای مغناطیسی بر حسب گاف نواری و مقایسه آن با مقادیر تجربی [۶]. ۶.....
- شکل ۵-۱ (الف): نانولوله تک جداره (ب): نانولوله چند جداره ۸.....
- شکل ۶-۱: در این شکل بردارهایی که تولید انواع نانولوله را می کنند نشان داده شده است. یاخته واحد یک نانولوله کایرال (۳, ۶) نیز نشان داده شده است (مستطیلی که با بردارهای و ساخته شده). ۱۰.....
- شکل ۷-۱ (نانولوله‌های الف): کایرال (ب): زیگزگ (ج): دسته‌سندلی. ۱۱.....
- شکل ۸-۱: دسته بندی مواد مغناطیسی. ۱۲.....
- شکل ۹-۱: پذیرفتاری مغناطیسی χ و معکوس آن $1/\chi$ بر حسب دما برای یک ماده پاد فرومغناطیس [۷]. ۱۵.....
- شکل ۱۰-۱: آرایش اسپین الکترون‌ها در خصوصیت‌های مختلف مغناطیسی. ۱۶.....
- شکل ۱۱-۱: چگالی حالت‌های جزئی (LDA) برای نمونه‌های (GaMn)As, (GaCr)As, (GaFe)As با غلظت $1/125 \times 10^20$ [۱۰]. ۱۷.....
- شکل ۱۲-۱: میانگین دمای کوری (GaMn)As, (GaCr)As, (GaFe)As [۱۴]. ۱۸.....
- شکل ۱۳-۱: گاف‌های نواری نانولوله‌های دسته‌سندلی و زیگزگ GaN بر حسب قطر و مقایسه با نانولوله‌های کربنی [۲۱]. ۱۹.....

شکل ۱-۱۴: جدایی خمش برای نانولوله‌های الف (زیگزاگ Gap [۱۷] و ب) دسته‌صندلی و زیگزاگ GaN بر حسب قطر. در قسمت (ب) کره‌های تیره و روشن به ترتیب بیانگر اتم‌های N و Ga می‌باشند.

۲۰ [۲۰] $\Delta R = R_{As} - R_{Ga}$

شکل ۱-۱۵: انرژی‌های کرنش به ازای هر اتم به عنوان تابعی از قطر، الف) برای نانولوله‌های دسته‌صندلی و زیگزاگ GaN و مقایسه با نانولوله‌های کربنی [۲۱]. ب) برای نانولوله‌های دسته‌صندلی و زیگزاگ SiN

۲۱ [۲۲]

شکل ۲-۱: آرایش اتمی برای آلیاژ سه گانه. الف) نیم‌رسانای فلزی (آلایش بالا). ب) نیم‌رسانای غیر مغناطیسی. ج) برای نیم‌رسانای مغناطیسی رقیق شده (DMS) [۲].

۲۹ [۲]

شکل ۲-۲: برهم‌کنش ابرتبادلی مستقیم: جفت‌شدگی دو یون TM مجاور هم به صورت آنتی‌فرومغناطیس توسط یک آنیون (یون مثبت) اشتراکی.

۳۳ [۲]

شکل ۲-۳: مدل میدان میانگین: جفت‌شدگی فرومغناطیسی اسپین‌های جایگزیده TM بواسطه‌ی حفره‌های آزاد.

۳۴ [۳]

شکل ۲-۴: انتگرال تبادلی J_{RKKY} بر حسب پارامتر $2K_F r$ ، انرژی تبادلی RKKY، وابسته به حاصل‌ضرب فاصله بین اتمی r و شعاع فرمی K_F می‌باشد [۳۴].

۳۵ [۳۴]

شکل ۴-۱: نمودار انرژی قطع بر حسب انرژی کل، الف) نانولوله خالص (۶،۰) ب) نانولوله خالص (۴،۴). ۶۳

شکل ۴-۲: بهینه‌ی تعداد نقاط K در هر راستا در فضای وارون، الف) نانولوله خالص (۶،۰) ب) نانولوله خالص (۴،۴).

۶۴ [۴،۴]

شکل ۴-۳: نمودار تغییرات ثابت شبکه در راستای محوری در نانولوله‌های GaAs بر حسب قطر. ۶۷

شکل ۴-۴: سلول واحد الف) ساختار (۹،۰) از نانولوله زیگزاگ، ب) ساختار (۵،۵) از نانولوله دسته‌صندلی.

۶۸ [۴،۴]

- شکل ۴-۵: روند تغییر طول پیوند Ga با دو (۲As-Ga) و دیگر (Ga-۱As) همسایه‌اش بر حسب قطر در نانولوله‌های خالص الف) دسته‌صندلی ب) زیگزاگ. ۶۹.....
- شکل ۴-۶: جدایی خمشی نانولوله‌های GaAs بر حسب قطر. دایره‌ها و مثلث‌ها بترتیب بیانگر نانولوله‌های زیگزاگ و دسته‌صندلی است. کره‌های تیره و روشن نیز به ترتیب بیانگر اتم‌های As و Ga می‌باشد $\Delta R = R_{As} - R_{Ga}$ ۷۰.....
- شکل ۴-۷: ساختار نواری نانولوله‌های خالص دسته‌صندلی GaAs. ۷۲.....
- شکل ۴-۸: ساختار نواری نانولوله‌های خالص زیگزاگ GaAs. ۷۳.....
- شکل ۴-۹: نمودار تغییرات گاف نواری در نانولوله‌های خالص GaAs بر حسب قطر در تقریب GGA. ۷۶..
- شکل ۴-۱۰: نمودار تغییرات گاف نواری در نانولوله‌های خالص GaAs بر حسب قطر در تقریب LDA. ۷۶.
- شکل ۴-۱۱: نمودار چگالی حالت‌های کل در نانولوله‌های خالص دسته‌صندلی (۵,۵) GaAs. ۷۸.....
- شکل ۴-۱۲: نمودار چگالی حالت‌های کل در نانولوله‌های خالص زیگزاگ (۹,۰) GaAs. ۷۹.....
- شکل ۴-۱۳: نمودار چگالی حالت‌های جزئی اتم‌های Ga و As در نانولوله‌های خالص الف) دسته‌صندلی (۵,۵) ب) زیگزاگ (۹,۰) GaAs. ۸۰.....
- شکل ۴-۱۴: الف) سلول خالص، ب) آلایش یافته ۵/۵٪، ج) آلایش یافته ۱۱/۱۱٪ وضعیت-۱، د) آلایش یافته ۱۱/۱۱٪ وضعیت-۲. ۸۲.....
- شکل ۴-۱۵: نمودار الف) ساختار نواری و ب) چگالی حالت سلول نانولوله‌ی خالص (۹,۰). ۸۵.....
- شکل ۴-۱۶: ساختار نواری آلایش ۵/۵٪ الف) آلایش Sc ب) آلایش Ti ج) آلایش V د) آلایش Cr ه) آلایش Mn و آلایش Fe ز) آلایش Co ر) آلایش Ni. ۸۶.....
- شکل ۴-۱۷: ساختار نواری آلایش ۱۱/۱۱٪ فاز فرومغناطیس-وضعیت (۱) الف) آلایش Sc ب) آلایش Ti ج) آلایش V د) آلایش Cr ه) آلایش Mn و آلایش Fe ز) آلایش Co ر) آلایش Ni. ۸۷.....

شکل ۴-۱۸: ساختار نواری آلایش ۱۱/۱۱٪ فاز آنتی فرومغناطیس-وضعیت دور (۱) الف) آلایش Sc (ب) آلایش Ti (ج) آلایش V (د) آلایش Cr (ه) آلایش Mn (و) آلایش Fe (ز) آلایش Co (ر) آلایش Ni ۸۸

شکل ۴-۱۹: ساختار نواری آلایش ۱۱/۱۱٪ فاز فرومغناطیس-وضعیت نزدیک (۲) الف) آلایش Sc (ب) آلایش Ti (ج) آلایش V (د) آلایش Cr (ه) آلایش Mn (و) آلایش Fe (ز) آلایش Co (ر) آلایش Ni ۸۹

شکل ۴-۲۰: ساختار نواری آلایش ۱۱/۱۱٪ فاز آنتی فرومغناطیس-وضعیت نزدیک (۲) الف) آلایش Sc (ب) آلایش Ti (ج) آلایش V (د) آلایش Cr (ه) آلایش Mn (و) آلایش Fe (ز) آلایش Co (ر) آلایش Ni ... ۹۰

شکل ۴-۲۱: چگالی حالت‌های کلی و جزئی (۳d-TM و ۴p-As) آلایش یافته ۵/۵۵٪ الف) Sc (ب) Ti (ج) V (د) Cr (ه) Mn (و) Fe (ز) Co (ر) Ni ۹۴

شکل ۴-۲۲: چگالی حالت‌های کلی و جزئی آلایش ۱۱/۱۱٪ فرو مغناطیس-وضعیت دور (۱) الف) Sc (ب) آلایش Ti (ج) V (د) Cr (ه) Mn (و) Fe (ز) Co (ر) Ni ۹۵

شکل ۴-۲۳: چگالی حالت‌های کلی و جزئی آلایش ۱۱/۱۱٪ آنتی فرومغناطیس-وضعیت دور (۱) الف) Sc (ب) Ti (ج) V (د) Cr (ه) Mn (و) Fe (ز) Co (ر) Ni ۹۶

شکل ۴-۲۴: چگالی حالت‌های کلی و جزئی آلایش ۱۱/۱۱٪ فرومغناطیس-وضعیت نزدیک (۲) الف) Sc (ب) آلایش Ti (ج) V (د) Cr (ه) Mn (و) Fe (ز) Co (ر) Ni ۹۷

شکل ۴-۲۵: چگالی حالت‌های کلی و جزئی آلایش ۱۱/۱۱٪ آنتی فرومغناطیس-وضعیت نزدیک (۲) الف) Sc (ب) آلایش Ti (ج) V (د) Cr (ه) Mn (و) Fe (ز) Co (ر) Ni ۹۸

شکل ۴-۲۶: گشتاور کل ایجاد شده (خطوط توپر) و سهم گشتاورهای موضعی فلزات واسطه (خطوط خط چین) در نانولوله‌های GaAs (۹,۰) آلایش یافته با غلظت ۵/۵۵٪ ۱۰۴

شکل ۴-۲۷: گشتاور کل ایجاد شده (خطوط توپر) و سهم گشتاورهای موضعی فلزات واسطه (خطوط خط چین) در نانولوله‌های GaAs (۹,۰) آلایش یافته با غلظت ۱۱/۱۱٪ در دو حالت الف) فرومغناطیس

- (ب) آنتی فرو مغناطیس در وضعیت دور (۱). ۱۰۵
- شکل ۴-۲۸: گشتاور کل ایجاد شده (خطوط توپر) و سهم گشتاورهای موضعی فلزات واسطه (خطوط خط چین) در نانولوله های GaAs (۹,۰) آرایش یافته با غلظت ۱۱/۱۱٪ در دو حالت الف) فرومغناطیس (ب) آنتی فرو مغناطیس در محاسبات نانولوله ی آرایش یافته GaAs (۹,۰). ۱۰۵
- شکل ۴-۲۹: الف) ابرسلول خالص، ب) آرایش یافته ۵٪، ج) آرایش یافته ۱۰٪ وضعیت دور (۱)، د) آرایش یافته ۱۰٪ وضعیت نزدیک (۲). ۱۰۶
- شکل ۴-۳۰: نمودار الف) ساختار نواری و ب) چگالی حالت ابرسلول نانولوله ی خالص (۵,۵). ۱۰۸
- شکل ۴-۳۱: ساختار نواری آرایش ۵٪ الف) آرایش V ب) آرایش Mn ج) آرایش Fe. ۱۰۹
- شکل ۴-۳۲: ساختار نواری آرایش ۱۰٪ فاز فرومغناطیس- وضعیت دور (۱) الف) آرایش V ب) آرایش Mn ج) آرایش Fe. ۱۰۹
- شکل ۴-۳۳: ساختار نواری آرایش ۱۰٪ فاز فرومغناطیس- وضعیت نزدیک (۲) الف) آرایش V ب) آرایش Mn ج) آرایش Fe. ۱۰۹
- شکل ۴-۳۴: ساختار نواری آرایش ۱۰٪ فاز آنتی فرومغناطیس- وضعیت دور (۱) الف) آرایش V ب) آرایش Mn ج) آرایش Fe. ۱۱۰
- شکل ۴-۳۵: ساختار نواری آرایش ۱۰٪ فاز آنتی فرومغناطیس- وضعیت نزدیک (۲) الف) آرایش V ب) آرایش Mn ج) آرایش Fe. ۱۱۰
- شکل ۴-۳۶: چگالی حالت های کلی و جزئی (TM-۳d و As-۴p) آرایش ۵٪ الف) V ب) Mn ج) Fe. ۱۱۲
- شکل ۴-۳۷: چگالی حالت های کلی و جزئی آرایش ۱۰٪ فرو مغناطیس- وضعیت دور (۱) الف) V ب) Mn ج) Fe. ۱۱۳

شکل ۴-۳۸: چگالی حالت‌های کلی و جزئی آرایش ۱۰٪ فرومگناطیس- وضعیت نزدیک (۲) الف (۷ ب)

۱۱۳ Fe (ج Mn)

شکل ۴-۳۹: چگالی حالت‌های کلی و جزئی آرایش ۱۰٪ آنتی فرومگناطیس- وضعیت دور (۱) الف (۷ ب)

۱۱۳ Fe (ج Mn)

شکل ۴-۴۰: چگالی حالت‌های کلی و جزئی آرایش ۱۰٪ آنتی فرومگناطیس- وضعیت نزدیک (۲) الف (۷ ب)

۱۱۴ Fe (ج Mn)

شکل ۴-۴۱: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها در نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs

(۵,۵) با غلظت ۵٪ ۱۱۸

شکل ۴-۴۲: گشتاور کل ایجاد شده (خطوط توپر) و سهم گشتاورهای موضعی فلزات واسطه (خطوط خط

چین) در نانولوله‌های GaAs (۵,۵) آرایش یافته با غلظت ۱۰٪ در دو حالت الف) فرومگناطیس ب) آنتی

فرومگناطیس در وضعیت دور (۱) ۱۱۸

شکل ۴-۴۳: گشتاور کل ایجاد شده (خطوط توپر) و سهم گشتاورهای موضعی فلزات واسطه (خطوط خط

چین) در نانولوله‌های GaAs (۵,۵) آرایش یافته با غلظت ۱۰٪ در دو حالت الف) فرومگناطیس ب) آنتی

فرومگناطیس در وضعیت نزدیک (۲) ۱۱۸

شکل ۴-۴۴: ابر سلول خالص ب) آرایش یافته ۵٪، آرایش یافته ۱۱٪ نانولوله‌ی (۵,۰) ج) وضعیت

(۲) د) وضعیت دور (۱) ۱۲۰

شکل ۴-۴۵: ابر سلول خالص ب) آرایش یافته ۵/۵٪، آرایش یافته ۱۱/۱۱٪ نانولوله‌ی (۳,۳) ج)

وضعیت دور (۱) د) وضعیت نزدیک (۲) ۱۲۰

فهرست جداول

- جدول ۴-۱: انرژی کل بر حسب انرژی قطع برای دو نانولوله خالص زیگزاگ (۶,۰) و دسته صندلی (۴,۴).
۶۳
- جدول ۴-۲: انرژی کل بر حسب تعداد نقاط K، برای دو نانولوله خالص زیگزاگ (۶,۰) و دسته صندلی (۴,۴).
۶۵
- جدول ۴-۳: پارامترهای ورودی محاسبات، برای نانولوله‌های (دسته صندلی-زیگزاگ) GaAs خالص. ... ۶۶
جدول ۴-۴: پارامتر ثابت شبکه در راستای محوری c (طول نانولوله) و قطر نانولوله‌های خالص GaAs. ۶۷
جدول ۴-۵: طول پیوند بین Ga-As در نانولوله‌های خالص GaAs بر حسب Å. ۶۸
- جدول ۴-۶: نوع، زاویه کایرالیته، قطر تقریبی، جدایی خمشی ($\Delta R(\text{Å})$)، برای نانولوله‌های خالص GaAs. ۷۰
جدول ۴-۷: گاف نواری نانولوله‌های خالص دسته صندلی GaAs و موقعیت تراز فرمی آن‌ها، نسبت به نواری انرژی. ۷۵
- جدول ۴-۸: گاف نواری نانولوله‌های خالص زیگزاگ GaAs و موقعیت تراز فرمی آن‌ها، نسبت به نواری انرژی. ۷۵
- جدول ۴-۹: پارامترهای ورودی جهت محاسبات. ۸۱
- جدول ۴-۱۰: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۹,۰) با غلظت ۵/۵٪. ۸۳
جدول ۴-۱۱: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۹,۰) با غلظت ۱۱/۱۱٪ در وضعیت دور (۱). ۸۳
- جدول ۴-۱۲: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۹,۰) با غلظت ۱۱/۱۱٪ در وضعیت نزدیک (۲). ۸۴

جدول ۴-۱۳: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌ی خالص GaAs (۹,۰). ۸۴

جدول ۴-۱۴: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله (۹,۰) آرایش یافته با غلظت ۵/۵۵٪ بر حسب (eV). ۹۱

جدول ۴-۱۵: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله (۹,۰) آرایش یافته با غلظت ۱۱/۱۱٪ فاز فرومغناطیس- وضعیت دور(۱) بر حسب (eV). ۹۱

جدول ۴-۱۶: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله (۹,۰) آرایش یافته با غلظت ۱۱/۱۱٪ فاز آنتی فرومغناطیس- وضعیت (۱) بر حسب (eV). ۹۲

جدول ۴-۱۷: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله (۹,۰) آرایش یافته با غلظت ۱۱/۱۱٪ فاز فرومغناطیس- وضعیت(۲) بر حسب (eV). ۹۲

جدول ۴-۱۸: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله (۹,۰) آرایش یافته با غلظت ۱۱/۱۱٪ فاز آنتی فرومغناطیس- وضعیت(۲) بر حسب (eV). ۹۲

جدول ۴-۱۹: انرژی فاز فرو (eV) در نانولوله‌های GaAs (۹,۰) آرایش یافته با غلظت ۵/۵۵٪. ۱۰۰

جدول ۴-۲۰: انرژی فاز فرومغناطیس، آنتی فرومغناطیس و اختلاف انرژی بین دو فاز و شناسایی فاز پایدار در نانولوله‌های GaAs (۹,۰) آرایش یافته با غلظت ۱۱/۱۱٪ در وضعیت دور (۱). ۱۰۰

جدول ۴-۲۱: انرژی فاز فرومغناطیس، آنتی فرومغناطیس و اختلاف انرژی بین دو فاز و شناسایی فاز پایدار در نانولوله‌های GaAs (۹,۰) آرایش یافته با غلظت ۱۱/۱۱٪ در وضعیت نزدیک(۲). ۱۰۱

جدول ۴-۲۲: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتم‌های Ga و As در نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs (۹,۰) با آرایش ۵/۵۵٪. ۱۰۲

جدول ۴-۲۳: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتم‌های Ga و As در نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs (۹,۰) با آرایش ۱۱/۱۱٪ فرومغناطیس- وضعیت دور(۱). ۱۰۲

جدول ۴-۲۴: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۹,۰) با آلایش ۱۱/۱۱٪ آنتی فرومغناطیس- وضعیت دور (۱)..... ۱۰۳

جدول ۴-۲۵: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۹,۰) با آلایش ۱۱/۱۱٪ فرومغناطیس- وضعیت نزدیک (۲)..... ۱۰۴

جدول ۴-۲۶: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۹,۰) با آلایش ۱۱/۱۱٪ آنتی فرومغناطیس- وضعیت نزدیک (۲)..... ۱۰۴

جدول ۴-۲۷: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۵,۵) با غلظت ۵٪.. ۱۰۷

جدول ۴-۲۸: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۵,۵) با غلظت ۱۰٪ در وضعیت دور (۱)..... ۱۰۷

جدول ۴-۲۹: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۵,۵) با غلظت ۱۰٪ در وضعیت نزدیک (۲)..... ۱۰۷

جدول ۴-۳۰: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌ی ابرسلول نانولوله‌ی GaAs (۵,۵) خالص.. ۱۰۸

جدول ۴-۳۱: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله‌ی آلایش یافته (۵,۵) با غلظت ۵٪..... ۱۱۱

جدول ۴-۳۲: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله‌ی آلایش یافته (۵,۵) با غلظت ۱۰٪ با دو حالت فرو و آنتی فرومغناطیس در وضعیت دور (۱)..... ۱۱۱

جدول ۴-۳۳: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله‌ی آلایش یافته (۵,۵) با غلظت ۱۰٪ با دو حالت فرو و آنتی فرومغناطیس در وضعیت نزدیک (۲)..... ۱۱۱

جدول ۴-۳۴: انرژی فاز فرو، آنتی فرو و شناسایی فاز پایدار در نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs..... ۱۱۵

جدول ۴-۳۵: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولوله‌ی

- آلایش یافته GaAs (۵,۵) با آلایش ۵٪: ۱۱۶
- جدول ۴-۳۶: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولولهی آلایش یافته GaAs (۵,۵) با آلایش ۱۰٪ فرومغناطیس - وضعیت دور (۱). ۱۱۶
- جدول ۴-۳۷: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولولهی آلایش یافته GaAs (۵,۵) با آلایش ۱۰٪ آنتی فرومغناطیس - وضعیت دور (۱). ۱۱۷
- جدول ۴-۳۸: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولولهی آلایش یافته GaAs (۵,۵) با آلایش ۱۰٪ فرومغناطیس - وضعیت نزدیک (۲). ۱۱۷
- جدول ۴-۳۹: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولولهی آلایش یافته GaAs (۵,۵) با آلایش ۱۰٪ آنتی فرومغناطیس - وضعیت نزدیک (۲). ۱۱۷
- جدول ۴-۴۰: پارامترهای ساختاری بهینه شدهی نانولولهی آلایش یافته GaAs (۵,۰). ۱۲۱
- جدول ۴-۴۱: پارامترهای ساختاری بهینه شدهی نانولولهی آلایش یافته GaAs (۳,۳). ۱۲۱
- جدول ۴-۴۲: پارامترهای ساختاری بهینه شدهی نانولولههای خالص GaAs (۳,۳) و (۵,۰). ۱۲۱
- جدول ۴-۴۳: اندازه اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولولهی (۵,۰) آلایش یافته. ... ۱۲۳
- جدول ۴-۴۴: اندازه اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولولهی (۳,۳) آلایش یافته. ... ۱۲۳
- جدول ۴-۴۵: انرژی فاز فرومغناطیس، آنتی فرومغناطیس در نانولولهی آلایش یافته GaAs (۵,۰). ۱۲۴
- جدول ۴-۴۶: انرژی فاز فرومغناطیس، آنتی فرومغناطیس و اختلاف انرژی بین دو فاز و شناسایی فاز پایدار در نانولولهی آلایش یافته GaAs (۳,۳). ۱۲۵
- جدول ۴-۴۷: گشتاور کل موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولولهی آلایش یافته GaAs (۵,۰). ۱۲۶
- جدول ۴-۴۸: گشتاور کل و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولولهی آلایش یافته GaAs (۳,۳). ۱۲۶

فصل اول

مقدمه ای بر گالیوم آرسناید (GaAs)، نانوساختارها،

کاربردها و خواص آن

۱-۱ گالیوم آرسناید

افزایش تقاضا برای وسایل الکترونیکی حالت جامد که کیفیت بهتر و سرعت بیشتری نسبت به نمونه‌های موجود داشته باشد سبب توجه زیاد به گالیوم آرسناید^۱ شده است. این ماده نخستین بار در اواخر دهه‌ی ۱۹۲۰ میلادی توسط گلدشمیت^۲ به دست آمد که ترکیبی از عنصرهای گروه سه و پنج جدول تناوبی عناصر است و راهی طولانی را در جاده‌ی پژوهشی برای رسیدن به بازار نیمرساناها پیموده است، این ماده دارای ساختار مکعبی اسفالریت^۳ (زینک بلند)^۴ می‌باشد (شکل ۱-۱) [۱]. گالیوم آرسناید جزو موادی است که انتظار می‌رود جایگزین مناسبی برای ماده سیلیسیوم^۵ در صنعتی همچون الکترونیک باشد.

با استفاده از گالیوم آرسناید، بسیاری از اسباب‌ها و قطعات الکترونیکی قادرند در بدترین و سخت‌ترین 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 فن‌آوری امروزه که در آنها عامل جا یا فضا نقش اساسی بازی می‌کند، امکان‌پذیر ساخته است. تحرک بسیار زیاد الکترون‌ها در این ماده، طراحی و ساخت ابرکامپیوترهای سریع‌تر و کارآمدتر را ممکن ساخته است. مطمئناً این ماده ویژگی‌هایی دارد که برای قطعات الکترونیکی امروزی مورد نیاز است. گالیوم آرسناید در ساخت ابزارهایی مانند: مدارهای میکروویو با فرکانس یکپارچه، دیودهای ساطع‌کننده نور مادون قرمز، دیودهای لیزری، سلول‌های خورشیدی و غیره به کار می‌رود [۲]. فرکانس گالیوم آرسناید در ساختاری مشابه با شبکه‌ی بلوری اسفالریت (سولفید روی - آهن طبیعی) متبلور می‌شود که در آن هر اتم (اعم از گالیوم یا آرسنیک) در یک شبکه‌ی چهار وجهی

^۱ . Gallium Arsenide (GaAs)

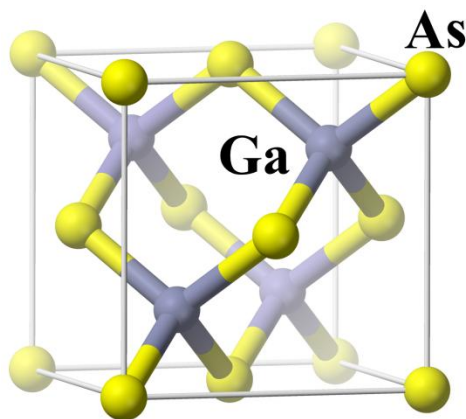
^۲ . Goldschmidt

^۳ . Sphalerite

^۴ . Zinblend

^۵ . silicon

توسط چهار تا از نزدیک‌ترین همسایه‌هایش در شبکه‌های مشابه دیگر احاطه شده است و با آنها پیوند شیمیایی دارد. این ساختار به ساختار شبکه‌ی بلوری الماس بسیار شبیه است. اما در الماس فقط یک نوع اتم (کربن) وجود دارد در حالی که در این ماده هر موضع اتمی به تناوب توسط یکی از اتم‌های آرسنیک یا گالیوم اشغال می‌شود. پیوندهای شیمیایی مانع فروریختن این شبکه‌ی بلوری می‌شوند.



شکل ۱-۱: سلول واحد ساختار زینک بلند GaAs [۳].

در نیمرساناهای ذاتی، الکترون‌های رسانشی اتم‌ها تحت تأثیر تحریکاتی مثل افزایش دمای آزاد شده می‌توانند در رسانش الکتریکی ماده نقش ایفا کنند. در نیمرساناهای غیر ذاتی، به طور تصنعی با افزودن ناخالصی‌هایی به شکل اتم‌های خارجی به ماده‌ی پایه، الکترون‌های رسانشی فراوانی که به راحتی آزاد می‌شوند را در اختیار ماده قرار می‌دهیم. اگر اتمی دارای یک الکترون بیش از اندازه‌ی لازم برای کامل کردن پیوند چهار وجهی باشد آن را اتم دهنده^۱ می‌نامند. ورود این اتم به ماده‌ی پایه سبب تولید نیمرسانای نوع n می‌شود. اما اگر اتم خارجی یک الکترون کمتر از اندازه‌ی لازم برای کامل کردن پیوند چهار وجهی داشته باشد آن گاه آن اتم را گیرنده یا پذیرنده^۲ می‌نامند. ورود این اتم به ماده‌ی پایه، سبب

^۱. Donor

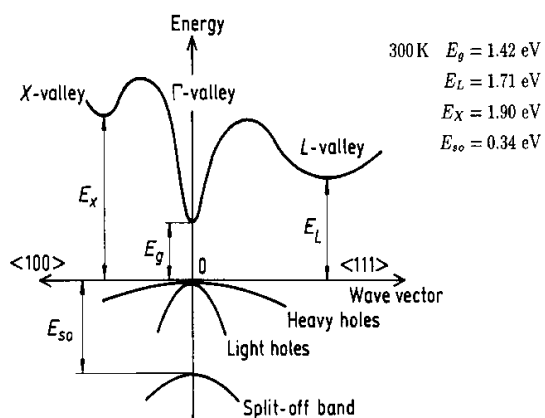
^۲. Acceptor

تولید نیمرسانای نوع p می‌شود. با انتخاب ناخالصی‌های مناسب، خواص الکتریکی ماده‌ی نیمرسانای غیر ذاتی را می‌توان تغییر داد.

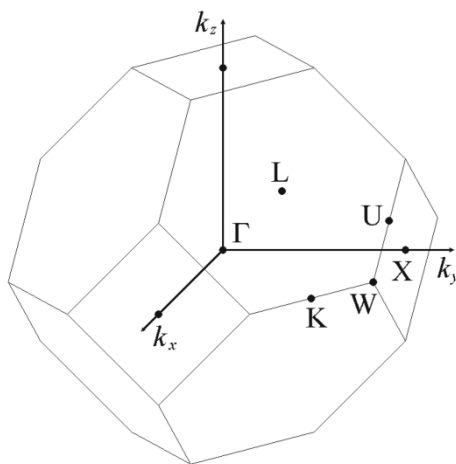
علت موفقیت گالیوم آرسناید به عنوان نیمرسانای پرسرعت، تحرک الکترونی زیاد آن، از $10^7/1$ تا $10^7/5$ سانتیمتر در ثانیه، در مقایسه با سیلیسیوم است که تحرک الکترونی آن تقریباً $10^6/6$ سانتیمتر در ثانیه است. این سرعت زیاد الکترونی به سبب جرم مؤثر الکترون قابل دستیابی است که مقدار آن در گالیوم آرسناید هفت درصد مقدار آن در سیلیسیوم است. شکل‌های (۱-۲) و (۱-۳) به ترتیب ساختار نواری و منطقه اول بریلوئن GaAs را نشان می‌دهند. همانطور که مشاهده می‌شود این نیمرسانا دارای گاف نواری مستقیم به مقدار $1/424$ الکترون ولت می‌باشد و در برابر تابش‌های الکترومغناطیسی و رادیواکتیو نیز مقاوم است [۴]، و به همین سبب ماده‌ی مهمی در کاربردهای نظامی و فضایی است. مقاومت گالیوم آرسناید در برابر تابش ذرات باردار، حداقل ده برابر مقاومت سیلیسیوم است. همچنین، چون گالیوم آرسناید فاصله‌ی نواری پهن تری دارد، در دماهای خیلی کم یا خیلی زیاد (از $200-$ تا $200+$ درجه‌ی سانتیگراد) نیز می‌تواند کار کند. در حقیقت با تکنیک‌های خاصی می‌توان شرایطی فراهم آورد که تراشه‌های گالیوم آرسناید در دماهایی در حدود 300 تا 400 درجه سانتیگراد بتوانند کار کنند. رابطه تنگاتنگی بین گاف نواری نیمرساناهای مورد استفاده در DMS ها و دمای کوری آنها وجود دارد به طوری که هر چه اندازه گاف نواری بیشتر باشد دمای کوری آن ماده بالاتر بوده و لذا امکان استفاده از آن در دمای محیط به منظور استفاده آن در صنعت اسپینترونیک افزایش خواهد یافت (شکل ۱-۴) با توجه به کاربردهای فراوان این ماده در صنایع اپتوالکترونیک، محققین تلاش کرده‌اند که از این ماده در صنایع اسپینترونیک نیز بهره جویند. لذا آرایش^۱ این ماده با یک ماده مغناطیسی مناسب می‌تواند این

^۱.Doping

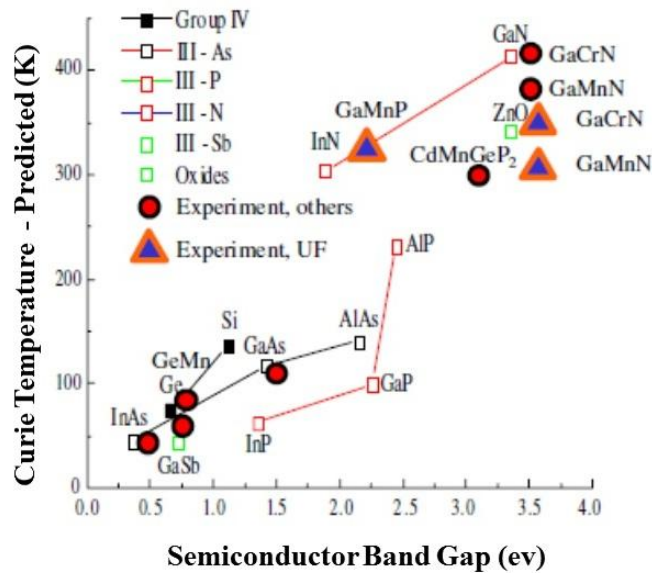
نیمرسانا را به ماده‌ای قابل کاربرد در قطعات وابسته به اسپین نظیر ترانزیستورهای مغناطیسی، تبدیل نماید.



شکل ۲-۱: ساختار نواری GaAs [۴].



شکل ۳-۱: منطقه اول بریلوئن در فضای وارون برای ساختار زینک بلند [۵].



شکل ۱-۴: دمای کوری محاسبه شده بعضی از نیمرساناهای مغناطیسی بر حسب گاف نواری و مقایسه آن با مقادیر تجربی [۶].

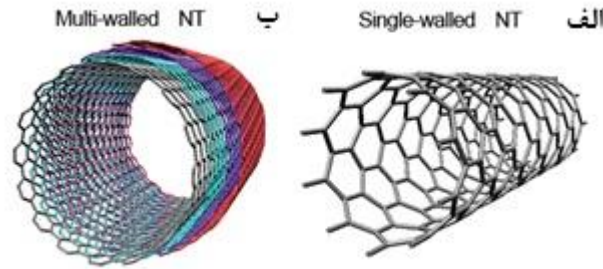
از معایب گالیوم آرسناید می توان به رسانندگی گرمایی کمی که آن در مقایسه با نیمرساناهای دیگر اشاره کرد. رسانندگی گرمایی گالیوم آرسناید و سیلیسیوم به ترتیب تقریباً ۰/۵۵ و ۱/۵ وات بر سانتیمتر بر درجه‌ی سانتیگراد است. این امر باعث بروز مسایل و مشکلاتی می شود زیرا لازم می شود که برای خنک نگاه داشتن پیوندگاه، طول قطعه در حداقل مقدار ممکن طراحی شود. برای جبران کم بودن رسانندگی گرمایی این ماده، فن آوری ویژه‌ای به کار گرفته می شود تا جریان گرما را به حداقل برساند. گالیوم آرسناید حقیقتاً ماده‌ی قابل توجهی است. این که گالیوم آرسناید جایگزین سیلیسیوم خواهد شد یا نه، پرسشی است که هنوز پاسخ قطعی نیافته است. هنوز باید پژوهش بیشتری انجام شود و مسایل زیادتری، به ویژه در زمینه‌ی خالص سازی و رشد دادن تک بلورهای بزرگ، حل گردد. قیمت تراشه گالیوم آرسناید نیز مانع مهم دیگری است که باید برطرف شود. اگر چه بازار گالیوم آرسناید تاکنون بیشتر در کنترل صنایع نظامی بوده است اما اخیراً رقابتی جدی در ارتباطات و مخابرات و پردازش الکترونیکی داده‌ها یافت شده‌اند.

۲-۱ نانوساختارهای GaAs

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. اکثریت ترکیبات گروه III-V هم از این قاعده مستثنی نبوده و برای بررسی نانوساختارهای این ترکیبات، به صورت نظری و تجربی کارهای زیادی انجام شده است. حوزه‌ی مقیاسی نانو مواد، نوعاً زیر ۱۰۰nm است. خواص نانو مواد بطور قابل ملاحظه‌ای متفاوت از خواص آن‌ها در حالت کپه‌ای بوده، در آن‌ها شاهد خواص منحصر به فردی هستیم که ناشی از محدودیت کوانتومی و اثرات سطحی می‌باشد. نانو مواد پتانسیل بسیار بالایی را برای بکارگیری در الکترونیک جدید، قطعات اپتیکی، الکترومکانیکی و سنسورهای با بهره‌ی بالا دارند. در طی دو دهه‌ی اخیر نیز علاقه و توجهات زیادی از شکل کپه‌ای گالیوم آرسناید به سمت نانو ساختارهای این ماده سوق پیدا کرده است. کارهای تجربی و نظری مختلفی بر روی نانوساختارهای GaAs صورت گرفته است که میتوان هم به بررسی خواص آن و همچنین نمونه‌های آرایش یافته اشاره نمود.

۳-۱ پارامترهای ساختاری نانولوله‌های تک جداره

نانولوله‌های تک جداره را می‌توان به صورت صفحات گرافیتی دانست که به دور یک استوانه پیچیده شده باشند. همانطور که در شکل (۱-۵) نشان داده شده است؛ اگر تنها یک صفحه‌ی گرافیت را به دور استوانه بپیچانیم شکل حاصل یک نانولوله تک جداره خواهد بود و اگر چندین صفحه‌ی گرافیت را به دور استوانه بپیچانیم نانولوله چند جداره خواهیم داشت.



شکل ۵-۱: الف) نانولوله تک جداره ب) نانولوله چند جداره.

اتم O را در شکل (۶-۱) در نظر بگیرید. از این اتم به وسیله بردار \vec{C}_h که به صورت زیر تعریف می‌شود، به اتم A می‌رسیم.

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (1-1)$$

که در رابطه‌ی بالا $\vec{a}_1 = a(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2})$ و $\vec{a}_2 = a(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2})$ بردارهای پایه‌اند و a ثابت شبکه می‌باشد. حال اگر محوری را عمود بر بردار \vec{C}_h از نقطه‌ی A رسم کنیم و همین کار را در نقطه‌ی O انجام دهیم و صفحه‌ی گرافیت را از روی این خطها ببریم، شکل حاصل به صورت یک مستطیل با طولی برابر $|\vec{C}_h|$ خواهد شد (شکل ۶-۱). اگر با این مستطیل یک استوانه درست کنیم یک نانولوله تک دیواره خواهیم داشت. محیط این نانولوله دقیقاً برابر بردار \vec{C}_h است. چون نانولوله‌ها را می‌توان به وسیله‌ی بردار \vec{C}_h تولید کرد، از این پس به این بردار نام ویژه‌ای را اختصاص می‌دهیم و آن را با نام بردار کایرال می‌شناسیم. این بردار به وسیله‌ی دو مؤلفه‌ی (n,m) مشخص می‌شود، بنابراین نانولوله‌ها را می‌توان بر اساس همین جفت اعداد طبیعی (n,m) نام گذاری یا معرفی کرد. سه گونه مختلف نانولوله را می‌توان بر اساس نحوه‌ی انتخاب بردار کایرال تولید کرد. اگر در بردار کایرال \vec{C}_h مقدار $n = m$ باشد، نانولوله حاصله را دسته‌صندلی^۱

^۱. Armchair

می‌نامند و اگر $m = 0$ باشد، نانولوله حاصله را زیگزاگ^۱ می‌نامند. در بقیه‌ی حالت‌ها نانولوله را کایرال^۲ می‌نامند. در شکل (۶-۱) بردارهای زیگزاگ و دسته‌صندلی نشان داده شده‌اند. اندازه‌ی بردار کایرال $|\vec{C}_h|$ و قطر نانولوله (d) از روابط زیر بدست می‌آیند.

$$|\vec{C}_h| = a(n^2 + m^2 + nm)^{\frac{1}{2}} \quad (۲-۱)$$

$$d = \frac{|\vec{C}_h|}{\pi} \quad (۳-۱)$$

زاویه‌ی کایرال را به صورت زاویه‌ی بین محور زیگزاگ و بردار کایرال تعریف می‌کنند. در شکل (۴-۱) این زاویه با نماد θ نشان داده شده است.

با بررسی بیشتر در این شکل، می‌توان رابطه‌ی زیر را بدست آورد.

$$\vec{C}_h \cdot \vec{a}_1 = |\vec{C}_h| |\vec{a}_1| \cos \theta \quad (۴-۱)$$

با توجه به رابطه‌ی ۲-۲ و تعریف مختصات بردار پایه‌ی \vec{a}_1 ، می‌توان زاویه‌ی کایرال را بر حسب اعداد مشخصه‌ی (n, m) به صورت زیر محاسبه کرد.

$$\cos \theta = \frac{2n+m}{2\sqrt{n^2+m^2+nm}} \quad (۵-۱)$$

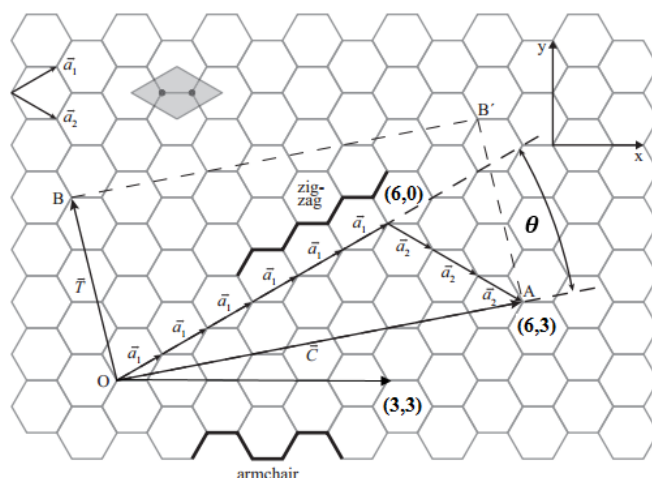
مقدار این زاویه در گستره‌ی زیر قرار خواهد گرفت.

$$\theta \in [0^\circ, 30^\circ] \quad (۶-۱)$$

بردار زیگزاگ کمترین زاویه یعنی صفر را دارد و بردار دسته‌صندلی بیشترین زاویه را اتخاذ می‌کند.

^۱. Zigzag

^۲. Chiral



شکل ۶-۱: در این شکل بردار هایی که تولید انواع نانولوله را می کنند نشان داده شده است. یاخته واحد یک نانولوله کایرال (۶, ۳) نیز نشان داده شده است (مستطیلی که با بردارهای و ساخته شده).

اگر در جهت محور نانولوله شروع به حرکت کنیم بعد از پیمودن مسافت \vec{T} به وضعیت مشابه هندسی خواهیم رسید. در واقع بردار انتقال \vec{T} همان بردار پایه شبکه یک بعدی نانولوله می باشد. این بردار را به لحاظ هندسی به این صورت تصور کنید که از نقطه‌ی O نشان داده شده در شکل (۶-۱) عمود بر بردار کایرال \vec{C}_n به اولین اتمی که از نوع اتم O باشد برداری رسم می کنیم، این بردار همان بردار انتقال \vec{T} است. در واقع در طول نانولوله اگر از هر نقطه به اندازه‌ی بردار انتقال جلو یا عقب برویم به موقعیت یکسان هندسی خواهیم رسید. اما این بردار را می توان به صورت جبری نیز بر حسب اعداد مشخصه‌ی (n,m) نیز بیان کرد.

مؤلفه‌های این بردار را می توان بر حسب بردارهای پایه‌ی شبکه‌ی گرافیت به صورت زیر نوشت.

$$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2 \quad (7-1)$$

شرط عمود بودن این بردار بر بردار کایرال به صورت زیر، اعداد t_1 و t_2 را به ما می دهد.

$$(t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2) \cdot (n \vec{a}_1 + m \vec{a}_2) = 0 \quad (۸-۱)$$

واضح است که انتخاب اعداد زیر شرط ۲-۸ را برآورده می کند.

$$t_1 = n + 2m \quad (۹-۱ \text{ الف})$$

$$t_2 = -(2n + m) \quad (۹-۱ \text{ ب})$$

با انتخاب این اعداد ما برداری موازی بردار انتقال خواهیم داشت. اگر این دو عدد را بر بزرگترین

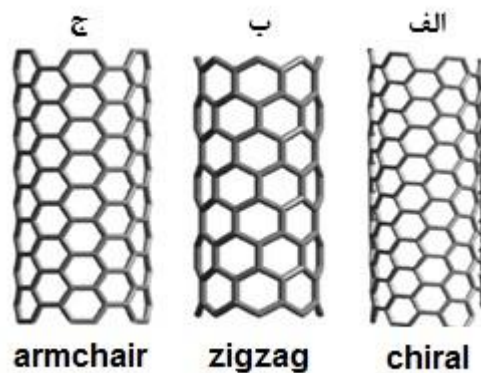
شمارنده‌ی مشترکشان تقسیم کنیم آنگاه بردار انتقال به صورتی که در ۱-۷ آمده، بدست می آید.

$$t_1 = \frac{(n+2m)}{p} \quad (۱۰-۱ \text{ الف})$$

$$t_2 = -\frac{(2n+m)}{p} \quad (۱۰-۱ \text{ ب})$$

p بزرگترین شمارنده‌ی مشترک $n + 2m$ و $2n + m$ است. در شکل (۱-۷) سه گونه متفاوت از نانولوله-

های لوله‌ای شکل تک‌جداره را نشان داده‌ایم.



شکل ۱-۷: نانولوله‌های (الف) کایرال (ب) زیگزاگ (ج) دسته‌صندلی.

۴-۱ دسته بندی مواد از نظر خواص مغناطیسی

همه مواد بسته به نوع رفتار مغناطیسی که در دمای اتاق از خود بروز می‌دهند، در زمره یکی از پنج دسته فرومغناطیس، دیامغناطیس، پارامغناطیس، آنتی فرومغناطیس، فری مغناطیس قرار می‌گیرند. بر مبنای جدول نشان داده شده در شکل (۸-۱) بیشتر عناصر جدول تناوبی دیامغناطیس و پارامغناطیس می‌باشند. این عناصر معمولاً منسوب به عناصر غیر مغناطیسی می‌باشند. در صورتی که مواد مغناطیسی در زمره فرومغناطیس‌ها قرار می‌گیرند. یکی دیگر از انواع فرومغناطیس‌های مشاهده شده در عناصر خالص در دمای اتاق، آنتی فرومغناطیس‌ها می‌باشند. دسته آخر از مواد شامل فری مغناطیس‌ها می‌باشند. اگر چه این مورد در هیچ عنصر خالصی دیده نشده است، ولی می‌توان آن را در ترکیباتی، از قبیل اکسیدهای مخلوط موسوم به فریت‌ها مشاهده نمود. در ادامه در خصوص این پنج دسته از مواد توضیحات بیشتری ارائه خواهد شد [۷].

1																	2	
H																	He	
	Ferromagnetic										Antiferromagnetic							
	Paramagnetic																Diamagnetic	
3	4											5	6	7	8	9	10	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
11	12											13	14	15	16	17	18	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
87	88	89																
Fr	Ra	Ac																
			58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71		
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		

شکل ۸-۱: دسته بندی مواد مغناطیسی.

۱-۴-۱ مواد دیا مغناطیس

در مورد مواد دیامغناطیس، هر اتم که دربردارنده الکترون‌ها در ماده می‌باشد، دارای هیچ گشتاور مغناطیسی خالص نمی‌باشد، از این رو گشتاور مغناطیسی مواد دیامغناطیس صفر است، که تئوری آنها توسط لانژوین ارائه شده است. گازهای تک اتمی نادر نظیر He، Ne که دارای ساختار الکترونی با پوسته بسته می‌باشند، در گروه مواد دیا مغناطیس قرار دارند. گازهای دو اتمی نظیر H₂، N₂ نیز در گروه مواد دیامغناطیس طبقه بندی می‌شوند و همچنین جامدهای یونی مثل NaCl و ابر رساناها دیا مغناطیس می‌باشند. به این دلیل که فرایند تشکیل مولکولی منجر به تشکیل پوسته‌های الکترونی بسته می‌شود، از این رو هیچ گشتاور مغناطیسی در واحد مولکول وجود ندارد. تشکیل پوسته‌های الکترونی بسته در جامدات با پیوند یونی و مواد با پیوند کوالانسی نیز منجر به تشکیل مواد دیامغناطیس می‌شود [۷].

۲-۴-۱ مواد پارامغناطیس

مواد پارامغناطیس در بردارنده اتم‌هایی می‌باشند که هر کدام گشتاور مغناطیسی μ دارند، تصادفی بودن جهت گشتاورهای اسپینی و مداری سبب خنثی کردن اثرات یکدیگر می‌شود و مجموع گشتاورهای اسپینی و مداری الکترون‌ها برابر با صفر می‌شود، بنابراین مغناطیدگی مربوط به نمونه پارامغناطیس صفر می‌باشد. با اعمال میدان مغناطیسی، تمام گشتاورها میل به نظم در راستای میدان دارند، اما اغتشاشات گرمایی^۱ سیستم، توزیع کاتوره‌ای را در گشتاورها ایجاد می‌کند، بر اثر این دو عامل، تراوایی نمونه مثبت و کوچک معین می‌شود [۷]. تراوایی جرمی مواد پارامغناطیس، با رابطه زیر بیان می‌گردد:

$$\chi_m = \frac{C}{T-\theta} \quad (1-11)$$

^۱. Thermal agitation

این رابطه قانون کوری ویس^۱ نامیده می‌شود و C ثابت کوری در واحد گرم (gr) می‌باشد. اگر برای ماده‌ای θ در رابطه بالا برابر با صفر باشد، اصطلاحاً گفته میشود که ماده از قانون کوری^۲ تبعیت می‌کند [۷].

۳-۴-۱ مواد فرومغناطیس

مواد فرومغناطیس گشتاور مغناطیسی خودبه‌خودی دارند، یعنی حتی در میدان مغناطیسی صفر، دارای گشتاور مغناطیسی می‌باشند. وجود گشتاور خودبه‌خودی بیانگر آنست که گشتاورهای مغناطیسی و اسپین الکترون‌ها به گونه منظمی آرایش یافته‌اند. در مواد فرومغناطیس در دماهای کاملاً پایین‌تر از دمای کوری (T_C)، گشتاور مغناطیسی اتم‌ها، اساساً موازی‌اند [۸]. ممکن است گشتاور مغناطیسی کل، بسیار کمتر از گشتاور اشباعی باشد و برای اشباع نمونه لازم باشد که میدان مغناطیسی خارجی اعمال گردد. فرومغناطیس، در دماهای بالاتر از T_C ، تبدیل به پارامغناطیس می‌شود و تراوایی جرمی آن از قانون کوری ویس تبعیت می‌کند. در دماهای پایین‌تر از T_C ، یک میدان مولکولی قوی روی ماده اثر می‌کند، همانطور که در دماهای بالاتر از T_C ، این میدان وجود دارد. از این رو، در نبود میدان اعمالی، جسم می‌تواند به حالت اشباع برسد که در این حالت جسم را، خود مغناطیده^۳ می‌نامند [۷].

۴-۴-۱ مواد آنتی‌فرومغناطیس

مواد آنتی‌فرومغناطیس در همه دماها دارای تراوایی کوچک و مثبت می‌باشند. تغییرات تراوایی این مواد بر حسب دما در شکل (۱-۹) نمایش داده شده است. بیشینه تراوایی در دمای نیل T_N ^۴ می‌باشد. بالای دمای T_N ، ماده خاصیت پارامغناطیسی و پایین‌تر از آن دما، خاصیت آنتی‌فرومغناطیسی دارد.

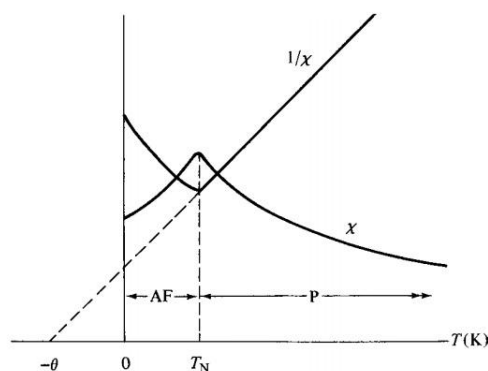
^۱. Curie Weiss law

^۲. Curie law

^۳. Self-saturating

^۴. Neel temperature

پایین تر از دمای T_N و در غیاب میدان اعمالی، گشتاورها تمایل دارند که به صورت پاد موازی نسبت به یکدیگر قرار گیرند. در دمای صفر کلوین و در غیاب میدان اعمالی، دو زیر شبکه مستقل در این ماده، به طور خودبه خودی و به صورت اشباع، مغناطیده می گردند. گشتاور مغناطیسی مواد آنتی فرومغناطیس صفر است و تنها در حضور میدان اعمال گردیده قوی، می تواند گشتاور غیر صفر داشته باشد [۷].



شکل ۱-۹: پذیرفتاری مغناطیسی χ و معکوس آن $1/\chi$ بر حسب دما برای یک ماده پاد فرومغناطیس [۷].

۱-۴-۵ مواد فری مغناطیس

مواد فری مغناطیس، رده ای دیگر از مواد می باشند که از نظر آرایش گشتاورها، مشابه مواد آنتی فرومغناطیس بوده، ولی در این مواد، اندازه گشتاورهای دو زیر شبکه با هم برابر نمی باشد. از این رو مواد فری مغناطیس، مشابه مواد فرومغناطیس دارای گشتاور مغناطیسی غیر صفر هستند [۷]. آرایش های منظم اسپین الکترون ها در شکل (۱-۱۰) نشان داده شده است.



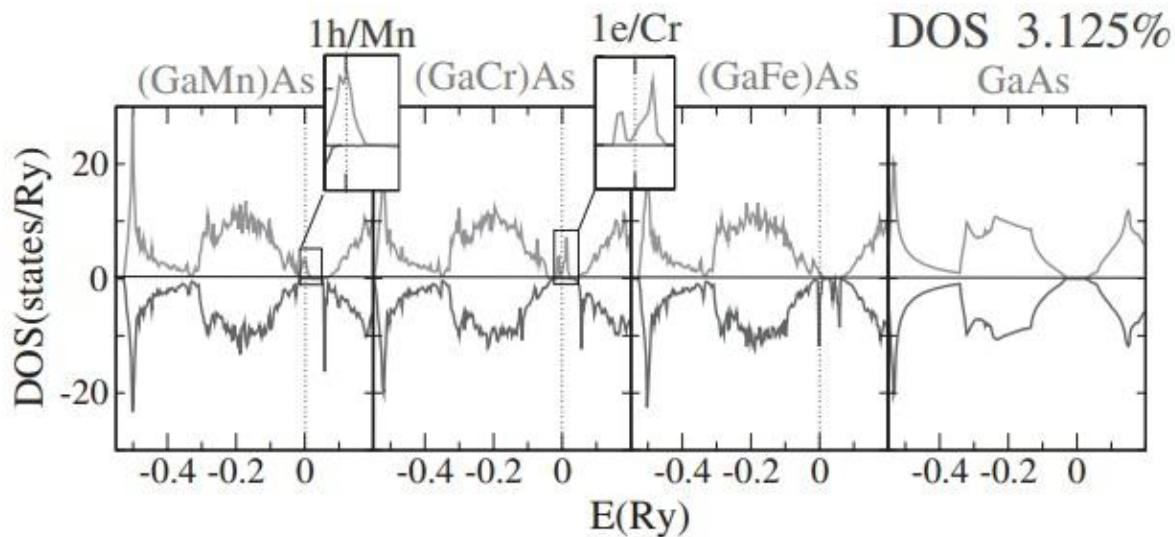
شکل ۱-۱۰: آرایش اسپین الکترون‌ها در خصوصیت‌های مختلف مغناطیسی.

۱-۴-۶ مروری بر خواص GaAs در ساختار بلوری

ترکیب GaAs از اولین نیمرساناهای گروه III-V است که به منظور استفاده در نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده^۱ (DMS) ها مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است. GaAs بعنوان یک نیمرسانای با گاف نواری کوچک استفاده‌های فراوانی در کاربردهای اپتوالکترونیکی داشته است و به همین دلیل محققین علاقمند بودند که با تزریق یک عنصر واسطه به این نیمرسانا بتوانند از خواص مگنتوالکترونیکی نیز در کنار خواص اپتوالکترونیکی آن استفاده کنند. دمای کوری ترکیب (Ga,Mn)As در ساختار بلوری، وابسته به تعداد حاملهای بار آن است. مطالعات تجربی نشان می‌دهد که غلظت حفره‌ها در (Ga,Mn)As کمتر از غلظت اتمهای Mn است [۹]. یکی از فاکتورهایی که باعث این مطلب است حضور جایگاه As است که دو الکترون بیشتر از Ga دارد و هر جایگاه As کمبود این حفره‌ها را با اتمهای Mn جبران می‌کند. بنابراین دمای کوری به غلظت Mn وابسته است. از دهه ۹۰ که تحقیقات روی ترکیب (Ga,Mn)As آغاز شده است [۱۰] دانشمندان همواره سعی کرده‌اند که دمای کوری این ترکیب را با روشهای مختلفی از جمله افزایش غلظت Mn، با بکارگیری روشهای مختلف در رشد بلور و انجام عملیات باز پخت افزایش دهند. در سال ۲۰۰۲ محققان موفق شده‌اند این دما را به ۱۷۰K و ۱۹۰K برسانند [۱۱-۱۲]. پیش بینی

^۱ . Diluted Magnetic Semiconductor

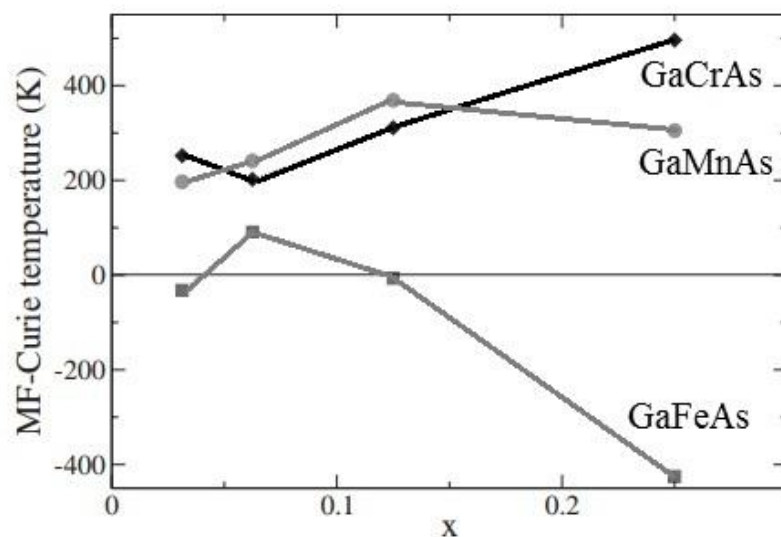
می‌شود که در سال‌های آتی نیز دمای کوری این ترکیب را به $500\text{ K} - 625\text{ K}$ یعنی دمای اتاق هم رسانید [۱۳]. ساندراتسکی^۱ و برونو^۲ نیز با آرایش سه عنصر واسطه Fe، Mn و Cr توسط رهیافت DFT و با تقریب LDA به بررسی خواص مغناطیسی GaAs پرداختند [۱۴]، شکل (۱-۱۱) چگالی حالت‌های جزئی (DOS) نمونه خالص و آرایش یافته GaAs در حضور عناصر واسطه را نشان داده است. در شکل (۱-۱۲) نیز دمای کوری GaAs آرایش یافته با عناصر واسطه Fe، Mn و Cr نیز محاسبه شده است که نتایج نشان می‌دهد که با آرایش Cr و Mn نیمرسانای GaAs حالت فرو مغناطیسی و با آرایش Fe حالت آنتی‌فرومغناطیسی پیدا کرده است که این نتایج بدست آمده با آرایش عناصر واسطه Cr و Mn برای غلظت‌های زیر ۱۵٪ دقیق‌تر است [۱۴].



شکل ۱-۱۱: چگالی حالت‌های جزئی (LDA) برای نمونه‌های (GaMn)As، (GaCr)As، (GaFe)As با غلظت ۱۵٪/۳/۱۲۵ [۱۰].

^۱. Sandratskii

^۲. Bruno



شکل ۱-۱۲: میانگین دمای کوری (GaMn)As, (GaCr)As, (GaFe)As [۱۴].

۵-۱ مروری بر خواص الکترونی و مغناطیسی نانوساختارهای گروه III-V

اولین گزارش‌ها از بررسی بر روی خواص نانولوله‌های خالص GaAs توسط چنچال گوش^۱ و همکارانش در سال ۲۰۰۷ بوسیله روش بستگی قوی^۲، که توسط پورزاگ^۳ و همکاران ارائه شده بود صورت گرفته است [۱۵]. نتایج حاصل از این کار که برای هر دو ساختار زیگزاگ و دسته‌صندلی انجام گرفت، مشاهده شد که انرژی کرنشی نانولوله‌های GaAs کوچکتر از نانولوله‌های کربنی است و همچنین انرژی کرنشی با افزایش قطر نانولوله کاهش پیدا می‌کند و گاف نواری هر دو نمونه دسته‌صندلی و زیگزاگ در نانولوله‌های GaAs با افزایش قطر نانولوله کاهش پیدا می‌کند. وی-فنگ سون^۴ و همکارانش در سال ۲۰۱۳ توسط رهیافت محاسباتی نظریه تابع چگالی با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)^۵ که تابع تبدیلی

^۱. Chanchal Ghosh

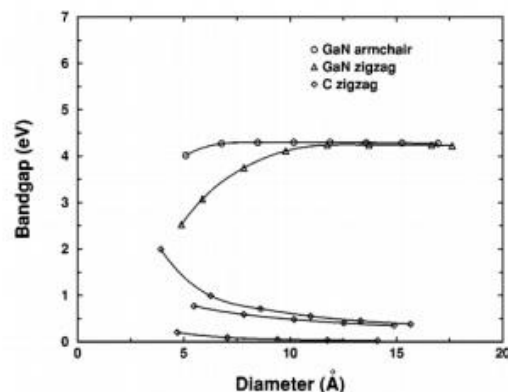
^۲. tight binding method

^۳. Porezag

^۴. Wei-Feng Sun

^۵. general gradient approximation

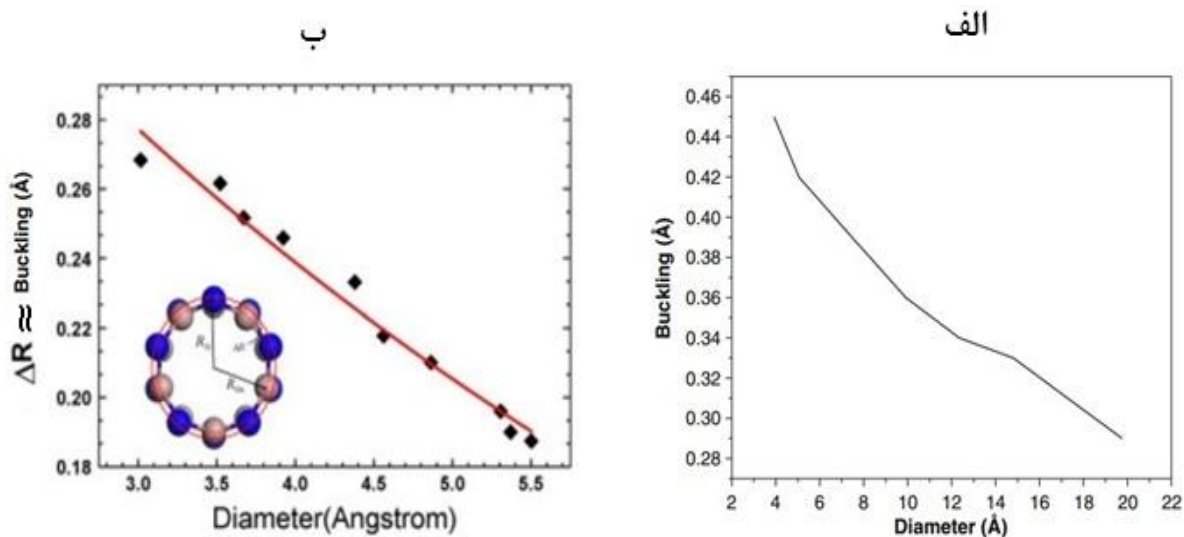
همبستگی آن توسط (BLYP)^۱ ارائه شده بود و توسط کد محاسباتی DMol3 انجام گرفت [۱۶]. آن‌ها با در نظر گرفتن مدلی لوله‌ای برای نانولوله‌های GaAs به بررسی خواص الکترونی و پایداری ساختار زیگزاگ نانولوله‌های GaAs پرداختند. این بررسی‌ها نشان داد که با افزایش غلظت آلیس و افزایش قطر نانولوله، اندازه گاف نواری به ترتیب کاهش و افزایش می‌یابد. از کارهای انجام شده بر روی دیگر عناصر ترکیبی از گروه III-V نیز می‌توان به نانولوله‌های [۱۷] GaP, [۱۸] BN, [۱۹] AlN, [۲۰] GaN اشاره کرد که نتایج بدست آمده کاملاً با نتایج کار ما از لحاظ روند افزایشی گاف نواری با افزایش قطر منطبق است. بررسی ساختار نواری و الکترونی همه این نمونه‌ها نشان داد که نانولوله‌های زیگزاگ دارای گاف نواری مستقیم و نانولوله‌های دسته‌صندلی دارای گاف نواری غیر مستقیم می‌باشند. به عنوان نمونه می‌توان به نانولوله GaN اشاره کرد که محاسبات آن‌ها نشان داد برخلاف نانولوله‌های کربنی زیگزاگ، که در آن‌ها روند تغییرات گاف نواری با افزایش قطر نانولوله‌ها تناوبی است [۲۱]، در شکل (۱-۱۳) نانولوله‌های GaN با افزایش قطر نانولوله‌ها، گاف نواری روندی افزایشی داشته و بعد از قطری خاص تقریباً ثابت می‌شوند. شدت تغییرات گاف نواری مشاهده شده بر حسب قطر، در نانولوله‌های زیگزاگ GaN نسبت به دسته‌صندلی در قطرهای پایین‌تر بیشتر می‌باشد.



شکل ۱-۱۳: گاف‌های نواری نانولوله‌های دسته‌صندلی و زیگزاگ GaN بر حسب قطر و مقایسه با نانولوله‌های کربنی [۲۱].

^۱. Becke_Lee_Yang_Parr

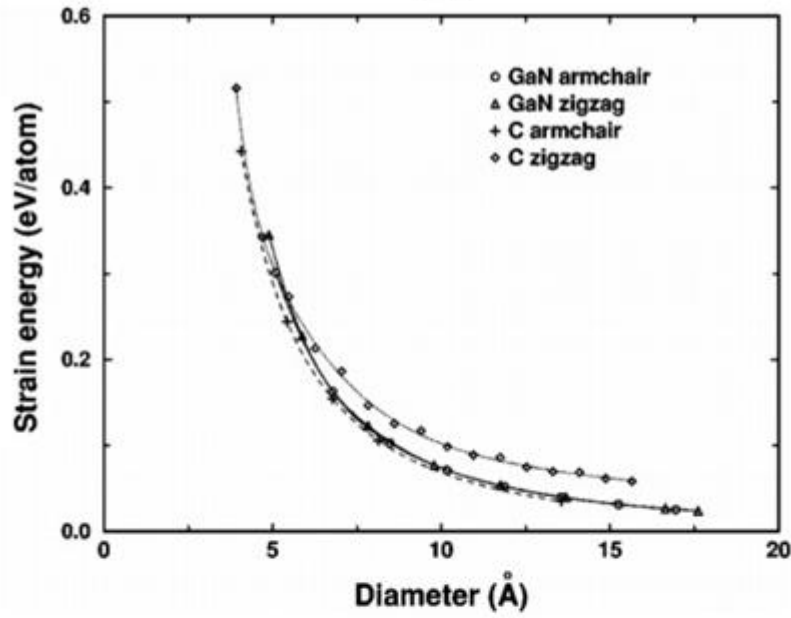
در نانولوله‌های GaN و GaP، اتم‌های Ga با تمایل به حرکت به سمت داخل، و اتم‌های P و N با تمایل به حرکت به سمت خارج نانولوله تشکیل دو استوانه لوله‌ای شکل هم مرکز با شعاع‌های متفاوت را می‌دهند. اختلاف فاصله‌ی بین شعاع‌های دو استوانه، همان جدایی خمشی^۱ نامیده می‌شود. در شکل (۱-۱۴) نحوه تغییر این جدایی بر حسب افزایش قطر نانولوله‌های مورد بررسی آورده شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش قطر نانولوله‌ها این جدایی کاهش می‌یابد. همچنین برای نانولوله‌های تک جداره GaN از گروه III-V جدول تناوبی در محاسبه‌ی انرژی کرنشی مورد نیاز برای پیچاندن صفحات گرافیتی به شکل لوله‌ای به ازای هر اتم شاهد رفتار یکسانی هستیم، مشاهده شد که انرژی کرنشی با افزایش قطر نانولوله کاهش می‌یابد شکل (۱-۱۵).



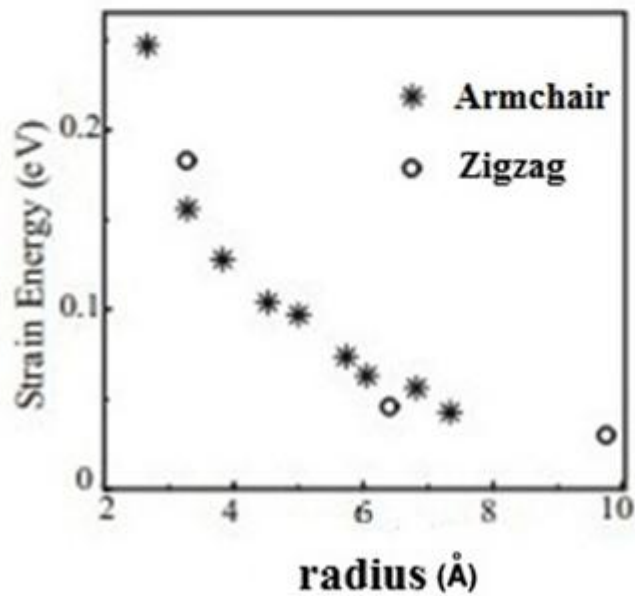
شکل ۱-۱۴: جدایی خمشی برای نانولوله‌های الف) زیگزاگ GaP [۱۷]. و ب) دسته‌صندلی و زیگزاگ GaN بر حسب قطر. در قسمت (ب) کره‌های تیره و روشن به ترتیب بیانگر اتم‌های N و Ga می‌باشند. $\Delta R = R_{As} - R_{Ga}$ [۲۰].

^۱. Buckling

الف



ب



شکل ۱-۱۵: انرژی‌های کرنش به ازای هر اتم به عنوان تابعی از قطر، الف) برای نانولوله‌های دسته‌سندلی و زیگزاگ GaN و مقایسه با نانولوله‌های کربنی [۲۱]. ب) برای نانولوله‌های دسته‌سندلی و زیگزاگ SiN [۲۲].

از کارهای انجام شده بر روی ساختارهای دیگر GaAs، می‌توان به فرم ساختار نانوسیم آن‌ها اشاره کرد کارهای خوبی در این چند سال انجام گرفته است. در سال ۲۰۱۳ لو پنگفی^۱ و همکاران [۲۳] توسط دو رهیافت محاسباتی، ۱- نظریه تابعی چگالی توسط شبه پتانسیل موج تخت^۲ با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)^۳ که تابعی تبادلی-همبستگی^۴ آن توسط PW91 [۲۴] ارائه شده بود و توسط ۲- کد محاسباتی VASP^۵ [۲۵] انجام گرفت. نتایج به دست آمده از این تحقیق نشان داد که با افزایش در قطر نانوسیم^۶ اندازه گاف نواری کاهش پیدا می‌کند [۲۳]. لازم به ذکر است که تاکنون گزارشی از بررسی خواص مغناطیسی نانولوله‌های GaAs با رهیافت نظریه تابع چگالی DFT، با تقریب LDA در حضور آرایش عناصر واسطه ارائه نشده است و در این پایان نامه قصد داریم که نتایج اولیه‌ای را از بررسی مغناطیسی نانولوله‌های GaAs ارائه دهیم.

^۱. Lu Pengfei

^۲. plane-wave pseudopotential

^۳. generalized gradient approximation

^۴. Exchange-correlation

^۵. Vienna ab initio simulation package

^۶. NanoWire

فصل دوم

اسپینترونیک و نیم رساناهای معناطیسی رفیق شده

(DMSs)

سؤالات گوناگون گرایشهای وسیعی را در علم نانو بوجود آورده‌اند: آیا امکان پیشرفت بیشتر در زمینه فناوری اطلاعات و ارتباطات از طریق کوچک سازی ترانزیستورها، میکروپردازشگرها و سلولهای حافظه در دیسکهای مغناطیسی و نوری وجود دارد؟ چطور به منظور صرفه جویی انرژی، زمان کار باتری را افزایش دهیم؟

امروزه با پیشرفت تکنولوژی، ذخیره سازی اطلاعات و سرعت انتقال آنها و همچنین صنعت IC بر پایه سیلیکون اهمیت زیادی یافته است. در مدارات IC نقش اصلی در ترابرد الکتریکی را حاملهای بار (الکترون و حفره) بر عهده دارند. از مشخصات IC داشتن قدرت پردازشگری با سرعت بالا است اما المانهای حافظه فرارند یعنی با خاموش شدن منبع، اطلاعات از بین خواهد رفت، اما با استفاده از تکنولوژی حافظه مغناطیسی این مشکل حل خواهد شد. در اینجا پارامتر اصلی اسپین الکترون است زیرا اسپین دارای ممان مغناطیسی ذاتی است و برای ذخیره اطلاعات بسیار مناسب می باشد. بنابراین استفاده از اسپین حاملهای بار در نیمرساناها شاخه جدیدی به نام اسپین الکترونیک یا اسپینترونیک^۱ را ایجاد کرده است. منشأ استفاده از اسپینترونیک، بر این پایه استوار است که چون تک قطبی های مغناطیسی وجود ندارند، میدان مغناطیسی تصادفی به طور قابل توجهی ضعیف تر از میدان های الکتریکی تصادفی هستند. به این دلیل حافظه های مغناطیسی غیر فرار هستند، در حالی که حافظه ها بر مبنای بار الکتریکی تجمع یافته یا (DRAM)، نیاز به بازسازی مداوم دارند، اسپینترونیک به مطالعه نقش اسپینترونیک، حفره و حتی هسته و نیز مطالعه دستگاههایی که از خواص اسپینی و درجه آزادی اسپین علاوه بر خواص و درجه آزادی ذرات باردار استفاده می کنند می پردازد، و اگر بتوان تزریق، انتقال و تشخیص اسپین را در دمای بالا در نیمرسانا (دمای اتاق) کنترل کرد می توان ترکیبی از خواص فوتونی، الکترونیک و مغناطیسی

^۱ . Spintronics

را داشت. مسئله مهم دیگر توسعه روشهایی برای تزریق حاملهای قطبیده اسپینی به نیمرساناهاست. اما نیمرساناهایی که برای صنعت اسپینترونیک استفاده می‌شوند باید اولاً دارای دمای گذار فرومغناطیسی (دمای کوری) در حدود دمای اتاق باشند و ثانیاً تکنولوژی مورد نیاز در بکارگیری این نیمرسانا وجود داشته باشد. بیشترین تحقیقات در گذشته بر روی $(\text{Ga,Mn})\text{As}$ و $(\text{In,Mn})\text{As}$ صورت گرفته است که بالاترین دماهای کوری گزارش شده برای این ترکیبات به ترتیب 173K و 35K بوده است که تلاش می‌شود این دما را بالا ببرند. امروزه محققین در تلاشند با تزریق یک فلز واسطه در نیمرساناهایی با گاف نواری بزرگ (ZnO , GaN , AlN) نیمرسانای مغناطیسی رقیق^۱ با دمای گذار فرومغناطیسی بالا بسازند.

بسیاری از کشورها و دولت‌ها در حال تأمین بودجه لازم برای میان برنامه‌هایی با هدف تضمین مشارکت فعال در توسعه آینده نانو فناوری، می‌باشند. در بین طرحهای پژوهشی با هدف توسعه نانو فناوری، رشته اسپینترونیک یعنی الکترونیک اسپینی نقش مهمی را ایفا می‌کند.

۲-۲ اسپینترونیک

امروزه در گستره‌ی مرزهای علم و فناوری، یکی از زمینه‌هایی که بیشتر مورد علاقه وسیع محققان قرار گرفته است، استفاده از ترکیباتی با خواص مغناطیسی به منظور حصول کارایی بهتر و کاربری متنوع‌تر در ساخت قطعات و ابزارهای الکترونیکی و فوتونیک‌ی مانند لیزرها، ترانزیستورهای اسپینی توان پایین، قطعات الکتریکی و مغناطیسی مجتمع (تراشه) و سنسورهای مغناطیسی می‌باشد. این گونه فعالیت‌ها از چند دهه‌ی قبل تاکنون تحت نام مغناطو الکترونیک شناخته می‌شوند. امروزه نام جدیدتر اسپینترونیک، که از ترکیب اسپین و الکترونیک تشکیل شده، که به دلیل دارا بودن منشأ اصلی مغناطش در موارد مطرح در این شاخه از علم است، برای آن بکار می‌رود.

^۱. Diluted magnetic semiconductor

اسپین یک کمیت کاملاً کوانتومی است که به الکترون درجه آزادی اضافی‌ای برای برهمکنش با میدان مغناطیسی می‌دهد. بنابراین اضافه کردن درجه آزادی اسپینی به الکترونیک نیم‌رساناهای معمولی که بر پایه‌ی بار الکتریکی عمل می‌کنند، قابلیت و عملکرد بیشتری می‌دهد. اشترن و گِراخ در سال ۱۹۹۲، با طرح آزمایشی تجربی شواهد وجود اسپین و طبیعت کوانتیده بودن اسپین الکترون ($S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$) را نشان داده‌اند.

در اینجا کلمه اسپین به دو مفهوم به کار می‌رود:

۱. گشتاور مغناطیسی ذاتی تک الکترون که دارای مقدار کوانتومی $-g\mu_B\hbar/2$ است (μ_B ثابت مغناطش بوهر و g ضریب ژیرومغناطیس الکترون است).

۲. مغناطش متوسط یک مجموعه‌ی الکترونی (نظیر یک جریان الکتریکی).

در عمل به کارگیری هر دوی این وجوه و کنترل آنها از اهداف صنعت اسپینترونیک بشمار می‌رود.

بطور خلاصه می‌توان گفت که اسپینترونیک یا اسپین-الکترونیک به مطالعه و نقش اسپین الکترون، حفره و حتی هسته در فیزیک حالت جامد بر می‌گردد، و دستگاه‌های احتمالی مشخصاً از خواص اسپینی علاوه بر بار الکتریکی استفاده می‌کنند. ترابرد اسپینی^۱ و واهلش اسپینی^۲ در فلزات و در نیم‌رساناها کاربرد فراوانی در تکنولوژی الکترونیک دارند. پیشرفت در صنعت الکترونیک آنچنان است که در هر ۱۸ ماه تعداد تراشه‌های مورد استفاده در کامپیوترها دو برابر می‌شوند. که این مستلزم پیشرفت علم است. عقیده بر این است که دستگاه‌های بر پایه‌ی اسپینترونیک که از انتقال اطلاعات بر اساس درجه‌ی اسپینی بهره می‌گیرند. در مقابل الکترونیک معمولی، دارای مصرف انرژی کمتر و سرعت بالاتری هستند.

^۱ . Spin transport

^۲ . Spin relaxation

۳-۲ نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده

برخی از نیمرساناها به طور طبیعی از خود خواص مغناطیسی نشان می‌دهند. به عنوان مثال با استفاده از اتمهای مغناطیسی خاکی کمیاب مثل (Eu,Gd,Er) نیمرساناهای مغناطیسی از جمله ($T_c = 77\text{ K}$) EuO (= EuS ($T_c = 16/5\text{ K}$)) تولید می‌شوند. همچنین در منگنیت‌ها $(\text{La,X})\text{MnO}_3$ حالت فرومغناطیس مشاهده شده است. اما به دلیل این که رشد آنها دشوار می‌باشد در صنعت کاربرد چندانی ندارند. البته نیمرساناهایی که بیشتر مورد توجه می‌باشند معمولاً خاصیت مغناطیسی ندارند. امروزه محققان با روشهایی توانسته‌اند نیمرساناهایی تولید کنند که دارای خواص مغناطیسی باشند [۲۶]. در این فصل به توضیح این روشها و نیمرساناهای مغناطیسی تولید شده می‌پردازیم.

۴-۲ تزریق یک عنصر مغناطیسی به نیمرسانا

همانطور که می‌دانیم تزریق یک ناخالصی باردار یا یک یون مغناطیسی به نیمرسانا را در اصطلاح آلایش نیمرسانا می‌گویند. به عنوان مثال وقتی در GaAs به جای اتمهای سه ظرفیتی Ga اتمهای چهار ظرفیتی Si جانشین می‌شوند، در واقع اتمهای Si دهنده الکترون هستند و اگر اتمهای Ga را با اتمهای دو ظرفیتی Zn جایگزین کنیم در آن صورت اتمهای Zn تولید کننده حفره بوده و به آن پذیرنده الکترون گفته می‌شود.

یک ماده نیمرسانای غیر مغناطیسی در حالت عادی خنثی است، یعنی تعداد اسپین‌های بالا و پایین آن برابر است و بنابراین در آنها مغناطش وجود ندارد اما با آلایش یونهای مغناطیسی که دارای یک اسپین خالص هستند در واقع یک اسپین خالص به ماده تزریق کرده و ماده از نظر اسپینی قطبیده می‌شود و این بدین معنی است که یک جهت خاص اسپینی به جهت‌های دیگر برتری پیدا می‌کند.

بنابراین یونهای مغناطیسی روی تعداد حاملها اثر نمی‌گذارند و تنها باعث به وجود آمدن یک اسپین خالص جایگزیده در ماده نیمرسانا می‌شوند که این اساس صنعت اسپینترونیک^۱ می‌باشد.

۲-۵ نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده

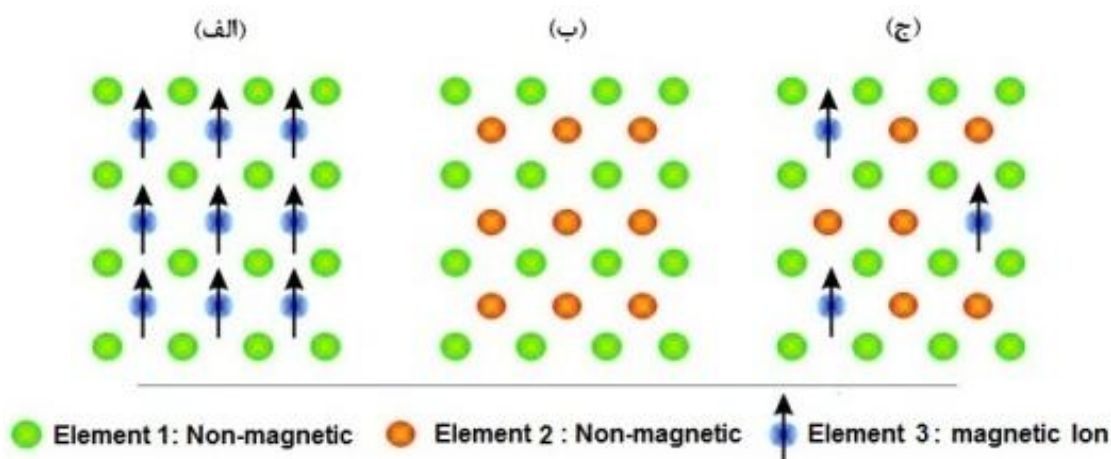
طیف وسیعی از مواد نیمرسانا با آرایش عناصر واسطه (اتمهای مغناطیسی) وجود دارند، که این مواد را عموماً بعنوان نیمرساناهای مغناطیسی رقیق DMS^۲ یا SMSC^۳ می‌شناسند. از زمان آغاز مطالعات در زمینه DMS ها در ترکیبات نیمرسانای گروه II-VI مانند CdSe بیش از دو دهه گذشته است و از معایب این گروه نداشتن خاصیت مغناطیسی و مرتبه فرومغناطیسی شدن در دماهای بالا دانست که به همین دلیل کاربردی در صنعت پیدا نکردند [۲۷]. از سوی دیگر DMS های حاصل از ترکیبات نیمرسانای گروه III-V از قبیل (Ga,Mn)As و (In,Mn)As که بعلاوه امکان کاربرد آنها در اسپینترونیک، توجه بسیاری از محققین را به خود جذب کرده است. اثبات بارز این ادعا، وجود انواع مقالات تحقیقاتی در مورد خواص فیزیکی این نوع نیمرساناها از جمله خواص الکتریکی، مغناطیسی و اپتیکی است که در مجلات جهانی (حتی در مجلات عمومی) به چاپ رسیده است. این تحقیقات نه تنها در برگیرنده موضوعات تجربی و تئوری در مورد منشأ DMS ها است. بلکه همچنین در برگیرنده چگونگی کاربرد آنها در اسپینترونیک است [۲۸]. آلیاژ ترکیبی DMS به شکل سه گانه $A_{1-x}TM_xB$ یا چهار گانه $A_{1-x-y}C_yTM_xB$ است. برای ماده میزبان از گروه II-VI (III-V)، A و C از گروه III و B از گروه VI (V) است. TM^۴ یک آلیاژ از گروه عناصر واسطه است. X و Y کسر مولی آلیاژ را نشان می‌دهد، آرایش اتمی در DMS در شکل (۲)-۱ نشان داده است.

^۱. Spintronics

^۲. Diluted Magnetic Semiconductors (DMS)

^۳. Semi-Magnetic Semi-Conductors (SMSC)

^۴. Transition Metal (TM)



شکل ۱-۲: آرایش اتمی برای آلیاژ سه گانه. الف) فلز رسانا. ب) نیمرسانای غیر مغناطیسی. ج) نیمرسانای مغناطیسی رقیق شده (DMS) [۲].

محققین فراوانی روی بهبود و افزایش کارایی GMR^۱ فعالیت دارند تا جریانهای اسپینی را در جهت کاربردی کردن و کنترل کردن، بهینه کنند. این امر محقق نمی‌شود مگر این که دانش کافی دربارهٔ ترابرد اسپینی در نیمرساناها داشته باشیم. تلاش می‌شود که جریانهای اسپینی را که پایهٔ علم اسپینترونیک است، در نیمرساناها نیز ایجاد کنند. برای تولید دستگاههای اسپینی بر پایهٔ نیمرسانا بجای فلزات، تحقیقات فراوانی در حال انجام است. با توجه به تکنولوژی پیشرفته تولید نیمرساناها، تلاش می‌شود که همزمان کارایی الکتریکی، نوری و مغناطیسی آنها را افزایش دهند. اگر چه مزایای فراوانی برای استفادهٔ 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 غیر مغناطیسی هستند. به همین دلیل ایجاد جریان اسپینی در این مواد مشکل می‌باشد. محققین، برای حل این مشکل از ترکیب مواد نیمرسانا با آلیاژ مواد مغناطیسی یعنی همان DMS ها استفاده می‌کنند. DMS ها را می‌توان به صورت بلور حجیم، پودری (نانو ذرات یا دانه‌ای) و لایه‌های نازک در حد نانو فیلم (تک لایه‌ای یا چند لایه‌ای) رشد داد. نانو لایه‌های چند لایه‌ای که کاربرد فراوانی در ساختار کوانتومی از قبیل (چاه

^۱. Giant magnetoresistance

کوانتومی، سیم‌های کوانتومی و نقطه‌های کوانتومی صورت یک، دو و صفر بعدی) و ابر شبکه‌ها را می‌توان به صورت همگون و یا ناهمگون رشد داد. خواص فیزیکی، ساختاری، تراپردی، نوری، مغناطیسی، فوتونی و ترمودینامیکی منحصر به فرد DMS باعث شده است که بسیار مورد توجه فیزیکدانان قرار گیرند. برای دسته‌بندی DMS ها روشهای مختلفی وجود دارد. یکی از این روشها، دسته‌بندی بر اساس ماده میزبان است. اگر نیمرسانای میزبان از نوع گروه II-VI و III-V باشد، DMS را به صورت همان گروه بترتیب گروه III-V و II-VI می‌نامند. DMS های هر گروه با توجه به گاف نواری به DMS های با گاف نواری بزرگ یا کوچک تقسیم می‌شوند. روش دیگر، عکس روش اول است یعنی DMS ها را بر حسب گاف نواری بزرگ و کوچک تقسیم می‌کنند و سپس در گروه مربوطه ماده میزبان قرار می‌دهند.

خیلی از پدیده‌های فیزیکی از جمله آلیاژ کردن، ساختن ساختار ناهمگون، کرنش و دما می‌توانند خواص الکترونی ماده را تغییر دهند. محاسبه ساختار نواری آلیاژها کار آسانی نیست در اصل مواد آلیاژی بلورهای کاملی نیستند حتی اگر شبکه کاملی داشته باشد زیرا آلیاژ اتمها به طور تصادفی در شبکه قرار می‌گیرند که ممکن است تقارن انتقالی شبکه را از بین ببرند. برای محاسبه ساختار نواری مواد آلیاژی می‌توان از روشهای VCA^۱، CPA^۲ و غیره استفاده کرد [۲۸]. روش VCA بعلاوه ویژگیهایی که دارد هم برای مواد آلیاژی دارای ساختار زینک بلند و هم ورتسایت چه در حالت سه گانه و چه در حالت چهار گانه مورد استفاده قرار می‌گیرد. وقتی عناصر واسطه TM به نیمرسانا اضافه شود، در اطراف خود هم میدان الکتریکی (اگر یونیزه شوند) و هم میدان مغناطیسی بوجود می‌آورد که هر یک خواص ماده را تحت تاثیر قرار می‌دهد. مطالعات نشان می‌دهند که آلیاژ عناصر TM در اتم میزبان به صورت یون مثبت است [۲۸].

^۱. Virtual Crystal Approximation (VCA)

^۲. Coherent Potential Approximation (CPA)

۲-۶ DMS های بر پایه ترکیبات گروه III-V

آلایش ترکیبات گروه III-V با یونهای مغناطیسی نیز از موضوعات قابل توجه در مطالعات محققان در زمینه DMS هاست. همان طور که می دانیم این ترکیبات به دلیل ویژگیهای منحصر به فرد آنها از محبوبیت زیادی در ساخت قطعات اپتوالکترونیکی برخوردار هستند. بنابراین معرفی نیمرساناهای مغناطیسی گروه III-V آلایش یافته با عناصر مغناطیسی برای استفاده از پدیدههای مغناطیسی که در نیمرساناهای غیرمغناطیسی وجود ندارد را فراهم می آورد که امکان استفاده از این ترکیبات را در صنایع اپتوالکترونیک و اسپینترونیک میسر می سازد. مانع اصلی در ساخت نیمرساناهای مغناطیسی بر پایه ترکیبات گروه III-V، حلالیت پذیری پایین عناصر مغناطیسی مثل Mn در این ترکیبات است. بنابراین اثرات مغناطیسی تقریباً متناسب با غلظت یونهای مغناطیسی است. اگر قابلیت حل یونهای مغناطیسی از مرتبه 10^{18} cm^{-3} یا کمتر باشد نباید انتظار یک تغییر اساسی در ویژگیهای ماده میزبان را داشت. استفاده از روش رو آراستی پرتو مولکولی^۱ (MBE) برای تولید یک فیلم نازک^۲ از این ترکیبات در خلأ راه مناسبی برای داشتن نمونه هایی با کیفیت بسیار خوب برای این بررسی است [۲۹].

۲-۷ مدل های نظری برای توصیف رفتار فرومغناطیس ها در DMS ها

با توجه به این که مکانیزم های رفتار فرو مغناطیسی در نیمرساناهای مغناطیسی به طور کامل مشخص نشده است، مهمترین مدل ها و مکانیزم های برهم کنش ارائه شده در این حوزه را معرفی می کنیم. به دلیل این که رفتار مغناطیسی شدن در مواد مرتبط به برهم کنش اسپین ها و مدل های تبادلی می باشد، ابتدا به صورت کلی تعریفی از برهم کنش های تبادلی^۳ و سپس به توصیف مکانیزم های متفاوت برهم کنش های تبادلی می پردازیم. در جامدات، اوربیتال های الکترونی اتم های همسایه با یکدیگر

^۱ . Molecular Beam Epitaxy

^۲ . Thin Film

^۳ . Exchange interactions

همپوشانی می‌کنند که از همبستگی الکترونی^۱ ناشی می‌شود. این ویژگی بر هم‌کنش‌های تبادلی داخل اتمی است که انرژی کل بلور را وابسته به آرایش نسبی اسپین‌های جایگزیده اتم‌های همسایه می‌کند. بزرگترین برهم‌کنش مغناطیسی در جامدات ($\approx 1\text{eV}$) برهم‌کنش تبادلی می‌باشد که مسئول نظم‌های اسپینی موازی (فرومغناطیس) یا پاد موازی (آنتی فرومغناطیس) می‌باشد. برهم‌کنش‌های تبادلی بسته به نوع ماده و سیستم مورد نظر می‌تواند با مکانیزم‌های متفاوت ایجاد شود.

۱-۷-۲ مدل تبادلی دوگانه^۲

بر هم‌کنش تبادلی دوگانه توسط پرش^۳ الکترون‌ها بین دو یون همسایه عناصر واسطه (TM) توضیح داده می‌شود. در DMS ها، ترازهای $3d$ یون‌های TM توسط میدان بلوری^۴، به ترازهای دوگانه (e_g) با انرژی پایین‌تر و ترازهای سه گانه (t_{2g}) با انرژی بالاتر شکافته می‌شود. حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین نیز توسط شکافتگی تبادلی^۵ شکافته می‌شود [۳۰].

۲-۷-۲ مدل زنر^۶

مدل بیان شده توسط زنر، که برهم‌کنش ابرتبادلی مستقیم بین الکترون‌های پوسته^d، که در کاتیون‌ها به صورت بخشی پر شده‌اند و الکترون‌های پوسته^p، که به صورت کامل در آنیون‌ها پر شده‌اند، به خاصیت پادفرومغناطیس منجر می‌شود و بنا به اصل طرد پائولی، اسپین‌های مربوط به دو کاتیون مطابق شکل (۲-۲) باید در جهت مخالف هم باشند [۳۱، ۳۲].

^۲. Electron correlation

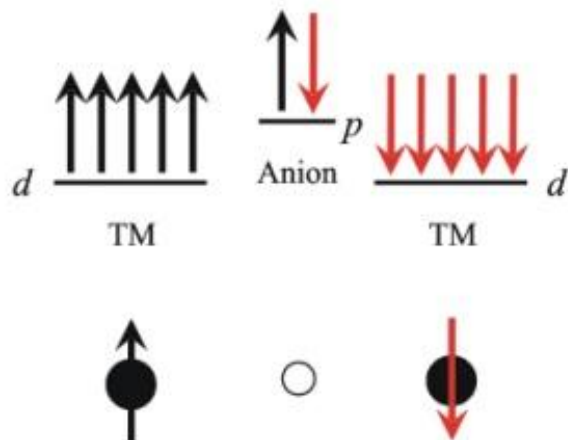
^۳. Double exchanged

^۴. Hopping

^۵. Crystal field

^۱. Exchange splitting

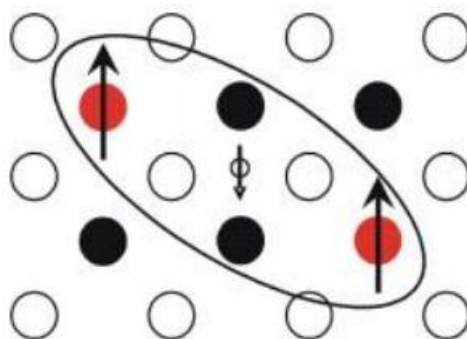
^۱. The Zener model



شکل ۲-۲: برهم‌کنش ابرتبادلی مستقیم: جفت‌شدگی دو یون TM مجاور هم به صورت آنتی‌فرومغناطیس توسط یک آنیون (یون مثبت) اشتراکی.

۳-۷-۲ مدل میدان میانگین^۱

در این مدل، بواسطه حفره‌های آزادی که در ماده وجود دارد و با برهم‌کنش بین دو اتم جایگزیده TM، بین اتم‌های TM یک آرایش فرومغناطیس حاصل می‌شود. به دلیل احتمال برهم‌کنش مستقیم ابرتبادلی بین دو اتم TM، همیشه بین برهم‌کنش فرومغناطیس و آنتی‌فرومغناطیس رقابتی وجود دارد (شکل ۲-۳).



شکل ۲-۳: مدل میدان میانگین: جفت‌شدگی فرومغناطیسی اسپین‌های جایگزیده TM بواسطه‌ی حفره‌های آزاد.

^۱. Mean field model

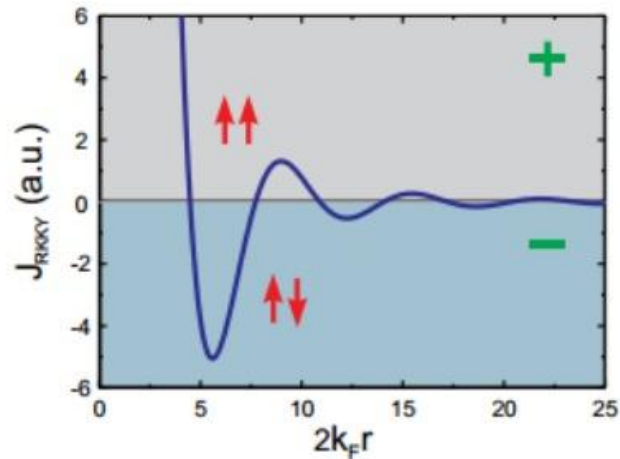
۴-۷-۲ مدل تبادل RKKY^۱

اگر بین توابع موج الکترونی هیچ همپوشانی مستقیمی وجود نداشته باشد، برهم‌کنش تبادل غیرمستقیم RKKY، مطرح می‌گردد. در این مدل تبادلی، برهم‌کنش بین دو گشتاور مغناطیسی در مکان i و j ، با قطبیدگی الکترون‌های رسانشی، امکان پذیر خواهد بود [۳۳]. برهم‌کنش RKKY، توصیف کننده برهم‌کنش مغناطیسی بین یک یون مغناطیسی موضعی یگانه با الکترون‌های رسانشی غیرموضعی^۲ می‌باشد. در این مدل، الکترون رسانشی نزدیک به یون مغناطیسی مغناطیده می‌گردد و به صورت میدان مؤثری عمل می‌کند تا قطبیدگی یون‌های مغناطیسی نزدیک به خود را، با روش خنثی شدن قطبیدگی به صورت نوسانی، تحت تأثیر قرار دهد. این واسطه‌گری نوسانی منجر به جفت شدگی تبادلی فرومغناطیسی و پادفرومغناطیسی می‌شود که وابسته به فاصله یون‌های مغناطیسی نسبت به یکدیگر می‌باشد. این مدل زمانی می‌تواند نظم مغناطیسی موجود در ماده را توضیح دهد که غلظت بالایی از حامل‌های بار غیرموضعی وجود داشته باشد [۳۴]. شاخصه اصلی برای این مدل جفت‌شدگی، رفتار نوسانی انتگرال تبادلی J می‌باشد که در شکل (۲-۴)، نمایش داده شده است و علامت آن به صورت تابعی از فاصله بین گشتاورهای جایگزیده تغییر می‌کنند. در مقایسه با برهم‌کنش تبادل مستقیم، این نوع برهم‌کنش، بلند برد می‌باشد [۳۴]، رابطه کلی RKKY بصورت حاصلضرب $J(r)$ در اثرات اسپین اول و دوم می‌باشد که رابطه $J(r)$ بصورت زیر تعریف می‌شود:

$$J(r) = \frac{2smk_F^4 J_0^2 \cos(2k_F r)}{\pi^3 \hbar^2 (2k_F r)^3} \quad (1-2)$$

^۱. Rudermann, Kittel, Kasuuya and Yoshida

^۲. Delocalized



شکل ۲-۴: انتگرال تبادلی J_{RKKY} بر حسب پارامتر $2K_F r$ ، انرژی تبادلی RKKY، وابسته به حاصل ضرب فاصله بین اتمی r و شعاع فرمی K_F می‌باشد [۳۴].

۵-۷-۲ مدل تبادل مستقیم

هر گاه دو اتم در مجاورت یکدیگر قرار داشته باشد، الکترون‌های مربوط به این دو اتم، قابل تشخیص نمی‌باشند، مفهوم جمله فوق آنست که اگر الکترون (۱)، مختص به اتم (۱) باشد و الکترون (۲)، مختص به اتم (۲) باشد، این دو الکترون می‌توانند تبادل مکانی داشته باشند. در این حالت، انرژی تبادلی به عنوان بخشی از انرژی کل دستگاه می‌باشد. اگر اتم‌های i و j ، تکانه زاویه‌ای اسپینی $\vec{S}_i h / 2\pi$ و

داشته باشند، انرژی تبادلی بین این دو اتم، دارای مقدار زیر خواهد بود:

$$E_{ex} = -2J_{ex} S_i S_j \cos \phi \quad (۲-۲)$$

که در این رابطه J_{ex} انتگرال تبادل^۱ نامیده می‌شود و ϕ زاویه بین اسپین‌ها می‌باشد. اگر J_{ex} مثبت باشد،

^۱. Exchange integral

انرژی کمینه دستگاه، از حالت موازی بودن اسپین‌ها و اگر J_{ex} منفی باشد، انرژی کمینه دستگاه، از حالت پاد موازی بودن اسپین‌ها، نتیجه‌گیری می‌شود [۳۵]. تبادل مستقیم، یک برهم‌کنش کوتاه برد است که از همپوشانی مستقیم توابع موج الکترونی مربوط به اتم‌های همسایه و از اصل طرد پائولی منشأ می‌گیرد [۳۳].

فصل سوم

نظریہ تابعی چگالی (DFT)

به مجموعه‌ای از الکترون‌ها و یون‌ها که به صورت‌های مختلف مانند اتم و بلور کنار یکدیگر جمع شده‌اند، سیستم بس ذره‌ای گفته می‌شود. خواص مختلف این سیستم‌ها را با روش‌های کوانتومی و کلاسیکی می‌توان بررسی کرد. برای سیستم‌های شامل چند ذره، تنها سیستم‌های دو ذره‌ای دارای حل دقیق هستند و برای سیستم‌های دارای ذرات بیشتر باید از مدل‌ها و تقریب‌ها استفاده کرد. روش‌های مختلف و متنوع بسیاری برای بررسی سیستم‌های بس-ذره‌ای توسعه پیدا کرده است، که در هر یک با توجه به مسائل و خواص مورد مطالعه از تقریب‌ها و مدل‌های نظری مختلفی استفاده می‌شود.

خوشبختانه علی‌رغم تقریبی بودن روش‌های بس ذره‌ای، این روش‌ها موفقیت عملی فوق‌العاده‌ای را از خود نشان داده‌اند. البته همه‌ی روش‌های تقریبی گستره‌ی اعتباری خاصی را شامل می‌شوند و هنوز روشی پیدا نشده است که بتواند همه‌ی حیطه‌های نظری و تجربی را پوشش دهد. بنابراین در مواردی که پیچیدگی‌های ناشی از آثار برهمکنش الکترون‌ها در رفتار نهایی سیستم مؤثرند، باید در حد امکان و با روش‌های تقریبی مختلف، حداکثر آثار بس ذره‌ای را در محاسبات دخالت داد. در بین روش‌های مختلفی که از مقوله‌ی علم بس ذره‌ای هستند، یکی از متداول‌ترین روش‌ها، نظریه تابعی چگالی^۱ (DFT) است، که به صورت گسترده برای محاسبات عددی خواص ساختار نواری جامدات از آن استفاده می‌شود. البته این نظریه برای محاسبه ساختار اتم‌ها، مولکول‌ها و مجموعه‌های اتمی نیز به کار گرفته می‌شود.

^۱ . Density Functional Theory (DFT)

در این فصل ابتدا به بررسی کوانتومی یک سیستم بس ذره‌ای^۱ و کاربرد نظریه‌ی تابعی چگالی در ساده‌سازی این سیستم می‌پردازیم و در ادامه با معرفی رهیافت کوهن-شم^۲ هامیلتونی تک‌ذره‌ی مربوط را استخراج می‌کنیم.

۲-۴ مطالعه‌ی کوانتومی بلور

بلورها سیستم‌های بس ذره‌ای هستند که از تعداد زیادی (بیش از سه ذره) ذره برهمکنش‌کننده که شامل اعداد بسیار زیادی الکترون‌ها و یون‌های مختلفی هستند تشکیل شده است. اگر N یون داشته باشیم، در این صورت هامیلتونی بس ذره‌ای این سیستم به صورت زیر است:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\nabla_i^2}{m_e} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{I=1}^{N_{nuc}} \frac{\nabla_I^2}{M_I} - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{e^2 Z_I Z_J}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \quad (1-3)$$

که در آن m_e و M_I به ترتیب جرم الکترون و یون I ام بترتیب با بارهای e و $Z_I e$ هستند که در فاصله‌ی r_i و R_I از مبدأ واقع شده‌اند. جملات عملگر هامیلتونی به ترتیب توصیف‌کننده‌ی انرژی جنبشی مربوط به الکترون‌ها، انرژی جنبشی یون‌ها، برهم‌کنش کولنی بین الکترون‌ها-یون‌ها، الکترون‌ها-الکترون‌ها و هر یون با یون دیگر می‌باشد. در این هامیلتونی آثار نسبیتی وارد نشده است و میدان‌های خارجی نظیر میدان الکتریکی و میدان مغناطیسی نیز صفر در نظر گرفته شده‌اند [۳۶, ۳۸].

در حالت کلی هامیلتونی کل را می‌توان به صورت مجموعی از هامیلتونی اجزاء توصیف‌کننده‌ی سیستم نوشت:

$$\hat{H} = \hat{H}_{ke}^e + \hat{H}_{ke}^I + \hat{H}^{e-I} + \hat{H}^{e-e} + \hat{H}^{I-I} \quad (2-3)$$

معادله‌ی شرودینگر کل بلور عبارت است از:

^۱ . Many body systems

^۲ . Kohn - Shame scheme

$$\hat{H}\psi(\{r_i\}, \{R_I\}) = E\psi(\{r_i\}, \{R_I\}) \quad (3-3)$$

حل چنین معادله‌ای به صورت دقیق غیر ممکن است لذا برای حل آن باید به تقریب‌های مختلفی متوسل شد.

۳-۴ تقریب بورن - اپنهايمر^۱ (آدياباتيك)

این تقریب مقدمه‌ای برای تمام تقریب‌ها و روش‌هایی است که برای ساده‌سازی معادله شرودینگر فوق استفاده می‌شود و حجم محاسبات را به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌دهد. از آنجایی که هسته‌ها بسیار سنگین‌تر و لذا کندتر از الکترون‌ها هستند، بنابراین ما می‌توانیم هسته‌ها را در مکان‌های موضعی خود بطور لحظه‌ای ساکن در نظر گرفته و فرض کنیم که الکترون‌ها در تعادل آنی با آنها هستند. به این ترتیب تنها با یک مسأله بس الکترونی مواجه خواهیم بود و هسته‌ها تنها نقش یک چشمه خارجی از بار مثبت را برای ابر الکترونی بر عهده دارند. بعد از بکار بردن این تقریب ما با یک مجموعه شامل NZ ذره منفی بر هم‌کنش‌کننده و متحرک در پتانسیل ساکن هسته‌ها روبرو هستیم. تقریب بورن - اپنهايمر به لحاظ نظری دارای اثبات دقیقی نمی‌باشد اما تاثیر بسزایی در کاهش حجم محاسبات دارد [۳۷]. نتیجه تقریب بورن - اپنهايمر بر روی هامیلتونی (۳-۱) این است که چون در این تقریب هسته‌ها حرکتی ندارند، لذا انرژی جنبشی آنها صفر و جمله اول حذف می‌شود. از طرفی جمله آخر نیز به یک مقدار ثابت کاهش می‌یابد و تنها جملات مربوط به انرژی جنبشی گاز الکترونی، انرژی پتانسیل ناشی از بر هم‌کنش الکترون - الکترون و انرژی پتانسیل الکترون‌ها در پتانسیل (خارجی) هسته‌ها باقی می‌ماند و در نتیجه به عبارت (۳-۴) کاهش می‌یابد:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{\vec{r}_i}^2}{m_e} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} = T + W + V_{ext} \quad (4-3)$$

^۱. Born Oppenheimer

در رابطه بالا \vec{r}_i متغیر و \vec{R}_I پارامتر است، "T"، عملگر انرژی جنبشی مربوط به الکترون‌ها، دومین جمله "W"، پتانسیل برهمکنش الکترون با الکترون و سومین جمله "V_{ext}"، پتانسیل خارجی می‌باشد که ناشی از برهمکنش بین الکترون‌ها و هسته‌ها است. انرژی کل "E"، که از هامیلتونی "H"، نتیجه می‌گردد، از معادله (۵-۳)، به دست می‌آید:

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle = T + W + \int d^3r V_{ext}(\vec{r}) n(\vec{r}) \quad (5-3)$$

تابع موج کل دستگاه بس ذره‌ای در این تقریب با معادله (۶-۳) بیان می‌گردد:

$$\psi_{tot}(\{r_i\}, \{R_I\}) = \psi_{electron}(\{r_i\}) \psi_{nuclei}(\{R_I\}) \quad (6-3)$$

اینجا ذکر این نکته جالب توجه است که در تقریب بورن - اپنهایمر چون سیستم بس الکترونی مستقل از سیستم بس یونی است لذا بر هم‌کنش الکترون - فونون وجود نخواهد داشت، چون سیستم بس الکترونی مستقل از سیستم بس یونی رفتار می‌کند [۳۶, ۳۸]. حل مسأله‌ی بس ذره‌ای برای سیستم‌هایی با بیش از یک الکترون کار دشواری است. بنابراین برای ساده شدن مسأله، فرض می‌شود هر الکترون در یک میدان متوسط ناشی از دیگر الکترون‌ها حرکت می‌کند. به این ترتیب معادله‌ی شرودینگر بس الکترونی به یک دسته معادلات تک ذره‌ای تبدیل می‌شود. بنابراین حل سیستم N الکترونی به حل N سیستم تک الکترونی تبدیل می‌شود که به این، تقریب الکترون مستقل گفته می‌شود.

۴-۴ تقریب الکترون مستقل^۱

یکی از روش‌های مهم برای حل مشکلات ناشی از حضور جمله‌ی ناشی از همبستگی در هامیلتونی بس الکترونی، جایگزینی آن با جمله‌هایی از نوع برهم‌کنش الکترون با پتانسیل خارجی است. در این روش فرض می‌شود هر الکترون با پتانسیل مؤثر ناشی از بقیه‌ی الکترون‌ها برهم‌کنش می‌کند. اولین مدل در

^۱. Independent (noninteracting) electron approximation

چارچوب روش پتانسیل مؤثر را، هارتری^۱ در سال ۱۹۲۸ ارائه کرد که در آن، برهم کنش الکترون - الکترون را با معادل آن در الکترومغناطیس کلاسیک، که پتانسیل هارتری (V_H) نامیده می شود، جایگزین نمود:

$$\hat{H} = \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_i V_{ext}(\vec{r}_i) + \sum_i V_H(\vec{r}_i) \quad (۷-۳)$$

$$V_H(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}' \frac{e n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (۸-۳)$$

که در رابطه بالا $n(\vec{r}')$ چگالی الکترونی و $V_{ext}(r_i)$ پتانسیل خارجی سیستم است. هامیلتونی به دست آمده جداپذیر است و به بخش های تک الکترونی تفکیک می شود. به همین دلیل به این تقریب، تقریب الکترون مستقل (و یا الکترون غیر برهم کنشی) گفته می شود که به دلیل حذف برهم کنش الکترون - الکترون در سیستم بس الکترونی است. هامیلتونی هارتری با توجه به حذف برهم کنش الکترون - الکترون قادر به تولید تابع موج حقیقی سیستم نیست، اما با قبول این فرض که پتانسیل هارتری قسمت بزرگی از پتانسیل برهم کنش الکترون - الکترون را شامل می شود، انتظار می رود که انرژی کل و چگالی الکترونی به دست آمده در تقریب هارتری فاصله کمی با مقدار حقیقی داشته باشد. هامیلتونی کامل تری که در چارچوب تقریب الکترون مستقل ارائه شده و امروزه مبنای بسیاری از کارهای نظری و محاسباتی شده است، هامیلتونی کوهن^۲ - شم^۲ است [۳۶].

۵-۴ تقریب هارتری

در سیستم های بس ذره ای، الکترون ها مستقل از هم نیستند؛ به عبارت دیگر با یکدیگر اندرکنش دارند. بنابراین برای حل چنین سیستمی از معادله ی شرودینگر برای همه الکترون ها، دستگاهی شامل 10^{23}

^۱. Hartree

^۲. Hohenberg - Kohn theorems

معادله‌ی مختلف را باید هم‌زمان حل کرد، که مسلماً چنین محاسباتی پیچیده است. در تقریب هارتری تابع موج سیستم را به صورت حاصلضرب توابع موج تک‌ذره‌ای در نظر می‌گیرند. برای به دست آوردن خواص حالت پایه‌ی سیستم، انرژی را نسبت به توابع موج تک ذره وردش داده و سپس با اعمال قید بهنجار بودن، توابع موج تک‌ذره به دسته معادلات تک‌ذره تبدیل می‌شوند. در این روش تابع موج سیستم متغیر اساسی است.

ایرادی که به این تقریب می‌توانیم بگیریم این است که برای الکترون‌ها (که فرمیون‌اند)، اسپین در نظر گرفته نشده است و از برهم‌کنش الکترون-الکترون نیز چشم‌پوشی شده است و تنها پتانسیل مؤثر برای الکترون‌ها به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود:

$$U_{eff}(r) = e^2 \int dr' \frac{n(r')}{|r-r'|} \quad (9-3)$$

مهم‌ترین مشکل استفاده از این تقریب مربوط به تابع موج کل است. اولاً طبق اصل طرد پائولی بیش از دو الکترون نمی‌توانند در یک حالت اربیتال‌ی یکسان قرار گیرند. چنین زوجی باید دارای اسپین‌هایی در جهت مخالف باشند. ثانیاً، الکترون‌ها از نظر فیزیکی غیر قابل تمیز از هم‌اند و در نتیجه، تابع موج $\Psi(r_1, r_2, \dots)$ نسبت به تغییر هر دو مجموعه‌ی I_j و I_i باید پادمتقارن باشد. در حالی که تابع موج مطرح شده توسط هارتری متقارن است. به عبارت دیگر اصل طرد پائولی در نظریه‌ی هارتری صدق نمی‌کند. این نقص‌ها بعداً توسط فوک و اسلیتر^۱ اصلاح شد.

^۱. Fock and Slater

۴-۶ تقریب هارتری-فوک^۱

این تقریب مشابه تقریب هارتری است، با این تفاوت که فرمیون بودن ذرات را وارد می‌کنند یعنی اصل طرد پائولی و اسپین الکترون‌ها در نظر گرفته شده است؛ در نتیجه تابع موج سیستم به صورت دترمینان اسلیتر، تابعی از مکان الکترون‌ها r_i و اسپین آنها s_i در نظر گرفته می‌شود [۳۹]:

$$\psi(r_1s_1, r_2s_2, \dots, r_ns_n) = \begin{bmatrix} \psi_1(r_1s_1) & \cdots & \psi_1(r_1s_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_n(r_ns_1) & \cdots & \psi_n(r_ns_n) \end{bmatrix} \quad (۱۰-۳)$$

همچنین در معادله‌ی هارتری-فوک در وردش علاوه بر اعمال قید بهنجار بودن توابع موج تک‌ذره در تقریب هارتری، تعامد آن‌ها را نیز در نظر می‌گیرند و همچنین به آن یک جمله‌ی تبادلی، که ناشی از برهم‌کنش اسپین الکترون‌هاست، اضافه شده است. بنابراین مقدار انتظاری انرژی کل هارتری فوک با رابطه زیر داده می‌شود [۳۹]:

$$E_{HF} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i - V_H + V_{nuct-nuct} - E_x \quad (۱۱-۳)$$

که در آن انرژی تبادلی با نماد E_x نشان داده شده و با رابطه زیر تعیین می‌شود:

$$E_x = - \sum_i \int d^3r \frac{e^2}{|r-r'|} \psi_j^*(r') \psi_i(r') \psi_j(r) \delta_{\sigma_i \sigma_j} \quad (۱۲-۳)$$

با در نظر گرفتن تبادلی، انرژی‌های تک ذره‌ای کاهش پیدا می‌کند و پهنای نوار حالت‌های الکترونی اشغال شده در تقریب هارتری-فوک نسبت به تقریب هارتری افزایش می‌یابد. علی‌رغم پیچیدگی محاسبات، روش هارتری-فوک به برخی نتایج غیرفیزیکی منجر می‌شود که باید با استفاده از نظریه‌ی

^۱. Hartree Fock approximation

استتار^۱ این نارسائی‌ها را برطرف کرد [۳۹]. کوشش برای دستیابی به یک معادله‌ی تک‌ذره‌ای که آثار بس‌ذره‌ای را به بهترین وجه شامل شود، در دیدگاه‌های مختلف ادامه پیدا کرد.

۴-۷ نظریه‌ی توماس - فرمی

این نظریه، مقدمه‌ای بر نظریه‌ی تابعی چگالی است؛ زیرا در این نظریه چگالی الکترون به عنوان متغیر اساسی استفاده می‌شود. توماس در سال ۱۹۲۷ و فرمی در سال ۱۹۲۸ به مطالعه‌ی بررسی سیستم‌های بس‌الکترونی پرداختند و چگالی را به جای تابع موج قرار دادند. استفاده از این جابجایی دو مزیت دارد:

۱. چگالی در آزمایشگاه تعیین می‌شود، در حالی که تابع موج قابل تعیین نیست.
۲. چگالی فقط تابع یک متغیر r است، در حالی که تابع موج تابع N متغیر r_1, r_2, \dots, r_N است، و با در نظر گرفتن اسپین، r متغیر مکانی (مکان - اسپین) است.

۴-۸ نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT)

یکی از نظریه‌های مهم و پایه برای سیستم‌های بس‌ذره‌ای نظریه‌ی تابعی چگالی است. این نظریه یک روش منحصربه‌فرد است؛ زیرا همبستگی الکترون را به حساب می‌آورد و حجم محاسباتی آن هم‌مرتبه با ساده‌ترین روش‌های رایج مانند هارتری-فوک است. نکته‌ی دیگر این است که مشتقات جزئی آن در سطح نظریه‌ی تابعی چگالی امروزه روش‌های تابعی موج رایج متشکل از وردشی و یا اختلال را می‌توان جهت دستیابی به نتایج با دقت بالا برای سیستم‌های کوچک به کار برد، که این خود مزیتی برای توسعه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی است و برای سیستم‌های بزرگ‌تر نیز قابل استفاده می‌باشد. اما باید بدانیم نظریه‌ی تابعی چگالی فقط به عنوان روش دیگری برای حل معادله شرودینگر نمی‌باشد و همچنین روشی جهت

^۱. Screening Theory

پارامتری کردن نتایج تجربی نیست. نظریه‌ی تابعی چگالی روشی کاملاً متفاوت از هر یک از روش‌های مربوط به سیستم‌های دارای برهمکنش بوده که از طریق فرض مسئله‌ی ساده‌تر سیستم‌های بدون برهمکنش و تعمیم آن به سیستم‌هایی با برهمکنش استوار می‌باشد. این روش در شاخه‌های متنوعی از مسائل مختلف که مربوط به ساختار الکترونی حالت پایه بوده، استفاده می‌شود. در روش نظریه تابعی چگالی از بسط بس‌ذره‌ای اجتناب می‌شود. ولی در عوض انرژی حالت پایه را بر حسب تابعی از چگالی الکترونی فرمول‌بندی می‌کنند. کار مربوط به DFT قابل مقایسه با هارتری-فوک است، ولی مزیت آن در نظر گرفتن همبستگی الکترونی است. با این که نظریه تابعی چگالی از نظر آسانی محاسبات نسبت به روش‌های دیگر مزیت دارد، ولی عیب آن این است که نمی‌توان یک دسته از توابع را که نتایج صحیحی را پوشش می‌دهند، دسته‌بندی کرد. در حقیقت حتی فرم صحیح تابع نیز ناشناخته است.

۹-۴ قضایای هوهنبرگ - کوهن^۱

فرضیات بنیادین که توسط هوهنبرگ و کوهن مطرح شده است، اساس نظریه‌ی تابعی چگالی را تشکیل می‌دهد. رهیافت هوهنبرگ و کوهن که برای فرمول‌بندی دقیق نظریه تابعی چگالی استفاده می‌شود، برای هر سیستم متشکل از ذرات برهم‌کنش کننده در یک پتانسیل خارجی $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ و چگالی الکترونی حالت پایه $n(\mathbf{r})$ بکار می‌رود. نظریه تابعی چگالی بر اساس دو قضیه هوهنبرگ و کوهن استوار است [۴۰].

قضیه اول: برای هر سیستم متشکل از ذرات برهم‌کنش کننده در پتانسیل خارجی $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ با استفاده از چگالی حالت پایه، $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ به صورت یکتایی مشخص می‌شود. بنابراین برطبق این قضیه می‌توان

^۱. Hohenberg Kohn Theory

هامیلتونی یک سیستم بس الکترونی را تعیین و به دنبال آن توابع موج برای تمامی حالات (پایه و برانگیخته) مشخص ساخت. لذا تمامی خواص سیستم از طریق چگالی حالت پایه قابل استخراج هستند.

قضیه دوم: برای هر سیستم بس الکترونی یک تابعی انرژی جهان شمول $E[n]$ بر حسب چگالی الکترونی $n(r)$ می توان بیان کرد که انرژی حالت پایه سیستم، مینیمم این تابعی است و چگالی الکترونی که این تابعی را مینیمم می کند چگالی حالت پایه $n_0(r)$ سیستم است. لذا بر طبق این قضیه، تابعی $E[n]$ به تنهایی برای تعیین چگالی و انرژی حالت پایه کافی است. این تابعی جهان شمول به شکل زیر است:

$$E[n] = T[n] + \int V_{ext}(r)n(r)d^3(r) + E_{int}[n] \quad (۱۳-۳)$$

که در آن جمله اول انرژی جنبشی، جمله دوم برهم کنش الکترون و میدان خارجی و جمله آخر برهم کنش الکترون- الکترون است. نکته ای که می بایست در اینجا توجه کرد آن است که این تابعی تنها خواص حالت پایه سیستم را مشخص می کند و برای تعیین خواص سیستم در حالت برانگیخته بکار نمی رود.

۴-۱۰ رهیافت کوهن - شم^۱

معادلات کوهن و شم که در سال ۱۹۶۵ منتشر شد، نظریه تابعی چگالی را به یک ابزار عملی تبدیل کرد. کوهن و شم در واقع یک شیوه عملی برای بکارگیری تابعی چگالی ارائه دادند [۴۱]. در روش کوهن - شم یک دستگاه فرضی در نظر گرفته می شود که در آن برهم کنش الکترون- الکترون صفر است (سیستم غیر برهم کنشی) و در یک پتانسیل خارجی به گونه ای قرار گرفته است که چگالی حالت پایه آن با چگالی حالت پایه دستگاه واقعی یکسان است.

^۱ . Kohn Sham Equation

چگالی دستگاه فرضی را به صورت زیر می‌نویسیم:

$$n(r) = \sum |\phi_i(r)|^2 \quad (۱۴-۳)$$

که $\phi_i(r)$ توابع موج تک‌ذره‌ای هستند که از معادله شرودینگر پیروی می‌کنند. هامیلتونی تک

ذره‌ای در این سیستم غیر برهم‌کنشی به صورت زیر است:

$$\hat{H}_{ps}\phi_i = \left(\frac{-1}{2}\nabla_i^2 + V_{eff}(\vec{r}_i) \right) \phi_i = (T_s + V_{eff})\phi_i = \varepsilon_i\phi_i \quad (۱۵-۳)$$

در رابطه فوق T_s انرژی جنبشی دستگاه غیر برهم‌کنشی است. همچنین پتانسیل مؤثر V_{eff} شامل

دو بخش: ۱- پتانسیل ناشی از اثرات هسته‌ها، ۲- پتانسیل میانگین ناشی از اثرات تمام الکترون‌های دیگر

است. اگر تابعی انرژی کل حالت پایه سیستم برهم‌کنشی $H[n]=E[n]$ به شکل زیر باشد:

$$E[n] = T[n] + V_{ee}[n] + V_{ext}[n] \quad (۱۶-۳)$$

$V_{ee}[n]$ را می‌توان به دو بخش برهم‌کنش کلاسیک هارتری $V_H[n]$ و بخش کوانتومی $V_{ee}[n] - V_H[n]$

تقسیم کرد، لذا داریم:

$$E[n] = T[n] + (V_{ee}[n] - V_H[n]) + V_H[n] + \int n(\vec{r})V_{ext} d\vec{r} \quad (۱۷-۳)$$

$$= T[n] + T_s[n] - T_s[n] + (V_{ee}[n] - V_h[n]) + V_H[n] + \int n(\vec{r})V_{ext} d\vec{r}$$

حال انرژی تبادلی - همبستگی^۱ E_{xc} را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$T[n] - T_s[n] + (V_{ee}[n] - V_H[n]) = E_{xc}[n] \quad (۱۸-۳)$$

به این ترتیب معادله (۱۷-۳) را به صورت زیر می‌توان نوشت:

^۱ . Exchange- Correlation Energy

$$E[n] = T_s[n] + V_H[n] + \int n(\vec{r}) V_{ext} d\vec{r} + E_{xc}[n] \quad (19-3)$$

که در آن $V_H[n]$ برهم کنش هارتری و به صورت زیر است:

$$V_H[n] = \frac{1}{2} \iint \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}d\vec{r}' \quad (20-3)$$

با جایگذاری $T_s[n]$ از رابطه (3-15)، تابعی انرژی در رابطه (3-19) به شکل زیر حاصل می‌شود:

$$E[n] = \sum \varepsilon_i \int V_{eff}(\vec{r}) n(\vec{r}) d\vec{r} + V_H[n] + \int V_{ext}(\vec{r}) n(\vec{r}) d\vec{r} + E_{xc}[n] \quad (21-3)$$

حال این تابع را تحت قید ثابت بودن تعداد ذرات نسبت به چگالی وردش می‌دهیم تا حداقل آن

بدست آید:

$$\delta \frac{[E - \mu(\int n(\vec{r}) d\vec{r} - N)]}{\delta n} = 0 \quad (22-3)$$

بنابراین داریم:

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{xc}(\vec{r}) + \mu \quad (23-3)$$

که μ پتانسیل شیمیایی است که می‌توان آن را صفر در نظر گرفت. در اینجا پتانسیل تبدالی-

همبستگی را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$V_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta(E_{xc}[n])}{\delta n(\vec{r})} \quad (24-3)$$

سپس با داشتن تابعی E_{xc} می‌توانیم V_{xc} را بدست آوریم. حال قضیه کوهن و شم را در ادامه

فرمول‌بندی می‌کنیم:

چگالی دقیق حالت پایه $n(\vec{r})$ یک سیستم N الکترونی به صورت زیر است:

$$n(\vec{r}) = \sum \phi_i(\vec{r})^* \phi_i(\vec{r}) \quad (25-3)$$

که در آن توابع موج تک-ذره $\phi_i(r)$ پاسخ‌های مربوط به حداقل انرژی در هامیلتونی کوهن-شم هستند:

$$\hat{H}_{ks} \phi_i = \varepsilon_i \phi_i \quad (26-3)$$

باید توجه داشت که توابع موج تک‌ذره‌ای ϕ_i توابع موج الکترونی واقعی نیستند و تنها شبه ذرات فرضی را توصیف می‌کنند. البته چگالی این شبه-ذرات برابر با چگالی الکترونی واقعی است.

عملگرهای هارتری V_H و تبادلی - همبستگی V_{xc} هر دو به چگالی $n(\vec{r})$ که خود به ϕ_i وابسته است بستگی دارند. این بدان معناست که ما با یک مسأله خود سازگار روبرو هستیم: هامیلتونی به ϕ_i بستگی دارد حال آنکه برای بدست آوردن ϕ_i ها بایستی هامیلتونی را در اختیار داشت. در اینجا برای خودسازگار بودن به یک شیوه تکرار شونده نیاز است. ابتدا چگالی اولیه n_0 حدس زده می‌شود و هامیلتونی H_{ks1} توسط آن ساخته می‌شود. سپس ویژه مقادیر آن بدست می‌آید و از نتایج به صورت مجموعه‌ای از ϕ_1 ها، برای بدست آوردن چگالی جدید n_1 استفاده می‌شود. اغلب اوقات n_0 متفاوت از n_1 است. حال از n_1 برای ساخت H_{ks2} استفاده می‌شود که از آن نیز ϕ_2 نتیجه می‌شوند و به همین ترتیب روند ادامه می‌یابد تا سیستم همگرا شود. در نهایت که همگرایی حاصل شد ϕ_f یک H_{ksf} را تولید می‌کند که این هامیلتونی مجدداً همان ϕ_f را نتیجه می‌دهد و لذا این چگالی نهایی سازگار با هامیلتونی است.

۴-۱۱ تقریب چگالی موضعی^۱ (LDA)

در تقریب چگالی موضعی که تقریب نسبتاً ساده، ولی کارآمدی است، از روابط مربوط به گاز الکترونی همگن به صورت موضعی استفاده می‌شود. استفاده از این تقریب زمانی مجاز است که تغییرات چگالی نسبت به مکان کم باشد. در این تقریب می‌توان نوشت:

$$E_{xc}^{LDA} = \int n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}^{homo}(n(\vec{r})) d\vec{r} \quad (27-3)$$

ε_{xc}^{homo} چگالی انرژی تبادلی همبستگی گاز الکترون همگن است که به صورت موضعی تنها وابسته به $n(r, \sigma)$ می‌باشد. معمولاً این انرژی را به صورت مجموع دو جمله انرژی تبادلی و انرژی همبستگی می‌نویسند:

$$\varepsilon_{xc}^{homo} = \varepsilon_x^{homo} + \varepsilon_c^{homo} \quad (28-3)$$

بخش تبادلی از انرژی تبادلی - همبستگی با حل دقیق گاز الکترون همگن در چارچوب نظریه هارتری - فوک فرمول بندی می‌شود که رابطه‌ی دقیق آن به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\varepsilon_x^{homo}(n) = \frac{-3}{4} \left[\frac{6}{\pi} n(\vec{r}) \right]^{\frac{1}{3}} \quad (29-3)$$

و بخش همبستگی آن با روش محاسباتی مونت کارلوی کوانتومی^۲ که روشی دقیق برای سیستم‌های بس ذره‌ای است، استخراج می‌شود. افراد مختلفی این انرژی را با این روش محاسبه کرده و نتیجه را با فرمول‌هایی برآزش داده‌اند که محاسبات آلدِر - کپرلی (CA)^۳ [۴۲] با روش مونت کارلو و

^۱ . Local density approximation (LDA)

^۲ . Quantum Monte Carlo

^۳ . Alder - Ceperley

برازش این محاسبات با یک تابعی توسط پردو - زونگر (PZ)^۱ [۴۳] از معروفترین آنهاست. رابطه‌ای که نهایتاً توسط آنها ارائه شد به شکل زیر است:

$$\varepsilon_c^{pz} = \begin{cases} -0.1423/(1 + 1.9529\sqrt{r_s} + 0.333r_s) & r_s \geq 1 \\ -0.0480 + 0.0311L_n r_s - 0.0116r_s + 0.0020r_s L_n r_s & r_s < 1 \end{cases} \quad (۳۰-۳)$$

که r_s شعاع کره‌ای می‌باشد که الکترون‌ها در آن جای گرفته‌اند. همچنین برای سیستم‌های مغناطیسی می‌توان از حالت کلی این تقریب، تقریب LSDA^۲ استفاده کرد که برای این تقریب به طور مشابه داریم:

$$E_{xc}^{LSDA}[n^\uparrow, n^\downarrow] = \int d^3r \cdot n(r) \varepsilon_{xc}^{homo}[n^\uparrow(r), n^\downarrow(r)] = \quad (۳۱-۳)$$

$$\int d^3r \cdot n(r) \left[\varepsilon_x^{homo}[n^\uparrow(r), n^\downarrow(r)] + \varepsilon_c^{homo}[n^\uparrow(r), n^\downarrow(r)] \right]$$

که در آن $n = n^\uparrow + n^\downarrow$ (مجموع ذرات با اسپین بالا و پایین) می‌باشد [۴۴]. در این جا محور قطبش اسپینی در تمام نقاط فضا در یک راستا در نظر گرفته شده است. البته حالت کلی آن را نیز می‌توان در نظر گرفت. منطق تقریب موضعی در جامدات بر این اساس است که تأثیر جملات همبستگی و تبادلی کوتاه برد باشد. از تقریب چگالی موضعی می‌توان برای محاسبه‌ی خواص ساختاری از قبیل مدول حجمی، ثابت شبکه و عامل ساختار کمک گرفت. همچنین انتظار می‌رود که این تقریب برای جامدات نزدیک به گاز همگن (مانند فلزات با الکترون تقریباً آزاد) مناسب و برای حالت‌های غیر همگن (مانند حالت‌های مشابه اتم که چگالی تا خارج از اتم به صورت پیوسته به سمت صفر می‌رود) نامناسب باشد.

^۱ . Perdew - Zunger

^۲ . Local spin density approximation (LSDA)

۱۲-۴ تقریب شیب تعمیم یافته^۱ (GGA)

تقریب کاربردی دیگری که روش تعمیم یافته و بهبود یافته‌ی LDA محسوب می‌شود، تقریب گرادیان تعمیم یافته GGA نام دارد. این رهیافت که پیچیده‌تر از روش LDA است، بیش‌ترین کاربرد را در نظریه‌ی تابعی چگالی دارد. تقریب شیب تعمیم یافته در سال ۱۹۹۲ توسط پردو- ونگ (PW91) [۴۵] ارائه و در سال ۱۹۹۶ توسط پردو- بورگ- ارنزهوف (PBE) [۴۶] با پارامترهای مختلف فرمولبندی شد. در این تقریب علاوه بر در نظر گرفتن چگالی الکترونی موضعی گرادیان چگالی نیز در نظر گرفته می‌شود. در واقع تغییرات چگالی در سلول‌های مجاور نیز در نظر گرفته می‌شود:

$$E_{xc}^{GGA}[n^\uparrow, n^\downarrow] = \int dr. n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[n^\uparrow, n^\downarrow, \vec{\nabla}n^\uparrow, \vec{\nabla}n^\downarrow] \quad (۳۲-۳)$$

$$\equiv \int d^3r. n(\vec{r}) \varepsilon_x^{homo}(n) F_{xc}(n, |\nabla n|)$$

که تابع F_{xc} یک تابع بدون بعد است که می‌توان نوشت:

$$F_{xc}(n, |\nabla n|) = F_{xc}(s) = F_x(s) + F_c(s) \quad , \quad s = \frac{|\vec{\nabla}n|}{2k_f n} \quad (۳۳-۳)$$

که در آن K_f اندازه‌ی بردار موج فرمی است که رابطه‌ی آن با چگالی به صورت زیر است:

$$k_f = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (۳۴-۳)$$

به دست آوردن سهم همبستگی به صورت یک تابعی مشکل‌تر از به دست آوردن سهم انرژی تبادلی است، ولی سهم آن در انرژی کل به مراتب کمتر از سهم انرژی تبادلی است. تقریبی از سهم همبستگی توسط ماو بروکنر^۲ ارائه شده است:

^۱ . Generalized Gradient Approximation (GGA)

^۲ . Ma and Brueckner

$$F_c = \varepsilon_x^{LDA} (1 - 0.219051.S^2 + \dots) \quad (35-3)$$

برای مقادیر بزرگ گرادیان چگالی میزان انرژی همبستگی کاهش می‌یابد و به ازای $S \rightarrow \infty$ صفر می‌شود. کاهش به این صورت قابل فهم است که گرادیان‌های بزرگ مربوط به پتانسیل‌های محصور کننده‌ی قوی است که فاصله‌ی بین ترازها را افزایش می‌دهد.

۴-۱۳ نظریه تابعی چگالی قطبیده اسپینی^۱ (SPDFT)

متغیرهای اساسی در نظریه تابعی چگالی قطبیده اسپینی خطی، چگالی الکترونی و چگالی مغناطیسی می‌باشند که به صورت زیر تعریف می‌شوند. چگالی الکترونی کل:

$$n(r) = n^+(r) + n^-(r) \quad (36-3)$$

و چگالی مغناطیسی برابر با تفاوت دو چگالی اسپینی است:

$$m(r) = n^+(r) - n^-(r) \quad (37-3)$$

چگالی‌های مجزای حامل‌های الکترونی اکثریت $n^+(r)$ و اقلیت $n^-(r)$ [۴۴, ۴۷] برابرند با:

$$n^\pm(r) = \sum_{i=1}^{N^\pm} \Psi_i^\pm(r) \Psi_i^\pm(r) \quad (38-3)$$

که \pm جهت اسپین را مشخص می‌کند. +، مربوط به حامل‌های اکثریت یا اسپین‌های بالا است و -، مربوط به حامل‌های اقلیت یا اسپین پایین است. N^\pm تعداد الکترون‌های با اسپین بالا و پایین را مشخص می‌کند که مجموع آن‌ها برابر است با تعداد کل الکترون‌ها $N_e = N^+ + N^-$. $\psi_i^\pm(r)$ ، توابع موج تک ذره‌ای مربوط به حامل‌های اکثریت و اقلیت می‌باشند که از حل معادلات کوهن-شم زیر به دست می‌آیند:

^۱. Spin polarized density functional theory

$$\left[-\frac{\nabla_i^2}{2} + V_{eff}^\pm(r)\right] \Psi_i^\pm(r) = \varepsilon_i^\pm \psi_i^\pm(r) \quad (39-3)$$

که پتانسیل مؤثر به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$V_{eff}^\pm(r) = V_{ext}^\pm(r) + V_H(r) + V_{xc}^\pm(r) \quad (40-3)$$

در اینجا $V_H(r) = \int \frac{n(r')}{|r-r'|} dr'$ به چگالی کل $n(r)$ بستگی دارد. پتانسیل خارجی $V_{ext}^\pm(r)$ که ناشی از پتانسیل الکترون-یون و میدان خارجی است، در حالت کلی برای اسپین بالا و پایین متفاوت است زیرا در حضور میدان مغناطیسی خارجی H ، پتانسیل خارجی $V_{ext}^\pm(r)$ شامل جمله $(\pm\mu_B H)$ می‌باشد که مقادیر متفاوتی برای اسپین اکثریت و اقلیت دارد. پتانسیل تبدالی-همبستگی $V_{ext}^\pm(r)$ به صورت مشتق تابعی انرژی تبدالی-همبستگی مطابق رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود:

$$V_{xc}^\pm = \frac{\delta_{xc}[n^+(r), n^-(r)]}{\delta n^\pm(r)} \quad (41-3)$$

که برای دو جهت اسپینی متفاوت، حتی در غیاب میدان مغناطیسی خارجی، مقادیر متفاوتی دارد.

۴-۱۴ روش حل معادلات تک ذره‌ای کوهن-شم

تنوع زیادی در کدهای ابتدا به ساکن که از روش DFT برای محاسبه ساختار الکترونی مواد استفاده می‌کنند، وجود دارد [۴۸-۵۵]. تفاوت اساسی بین کدها و روش‌های مختلف، عموماً مربوط به مجموعه پایه‌ای است که توابع موج کوهن-شم بر اساس آن بسط داده می‌شوند و همچنین تقریب‌های به کار گرفته شده در آنها که معمولاً یک موازنه بین دقت و سرعت در این کدها وجود دارد، که در این پایان‌نامه ما از روش پایه‌های جایگزیده استفاده کرده‌ایم که از جمله توابع Gaussian، مانند کد Gaussian [۵۴] و اوربیتال‌های اتمی نظیر کد SIESTA [۵۶] و ... می‌باشند که کد مورد استفاده در این پایان‌نامه SIESTA می‌باشد.

کد سیستا با روش بسط تابع موج کوهن-شم بر مبنای ترکیب خطی از اوربیتال‌های جایگزیده‌ی اتمی (LCAO) به عنوان پایه، و از تقریب شبه پتانسیل برای توصیف الکترون‌های مغزی و هسته استفاده می‌شود. در این قسمت از بین اوربیتال‌های چند گانه موجود در کد SIESTA فقط به اوربیتال‌های زتای دوگانه^۱ (DZ) که در محاسباتمان به عنوان یک پارامتر ورودی وارد شده است اشاره کرده‌ایم [۵۹-۴۸,۵۷].

۴-۱۶ اوربیتال‌های زتای دوگانه (DZ)

اوربیتال‌های زتای دوگانه (DZ) با توجه به ادامه‌ی روند شکافت مجموعه پایه‌ی Gaussian ساخته می‌شود. اوربیتال شکافت، توسط ساختن یک پایه‌ی اوربیتالی تحلیلی که به آرامی در شعاع r_{split} اوربیتال زتای اولیه را منطبق کند، به دست می‌آید. شکل تابع استفاده شده برای اوربیتال شکافت به صورت زیر می‌باشد.

$$R_l^{2\xi}(r) = \begin{cases} r^l(a_l - b_l r^2) & \text{if } r < r_l^{split} \\ R_l^{1\xi}(r) & \text{if } r \geq r_l^{split} \end{cases} \quad (۳-۴۲)$$

ثابت‌های a_l و b_l با استفاده از پیوستگی توابع موج و مشتقات آن‌ها در r_l^{split} تعیین می‌شود. تابع شعاعی دومین زتا ξ ، یعنی $R_l^{2\xi}(r)$ در $r \geq r_l^{split}$ دنباله‌ای مشابه اولین زتا ξ دارد. شعاع شکافت r_l^{split} ، توسط پارامتر نرم شکافت تعیین می‌شود. این پارامتر، شعاع انطباق (r_m) یک اوربیتال تحلیلی که اوربیتال زتای اولی را به پایه‌ی زتای دوگانه می‌شکافت، پیدا می‌کند. شعاع انطباق r_m ، با مشخص شدن این که روند شکافت اوربیتال، نسبت به روند اوربیتال زتای اولی باید دارای مقدار split-norm باشد، تعیین می‌شود. مقدار معتبر split-norm در بازه‌ی بین ۰ تا ۱ (به غیر از شامل شدن خود ۰ و ۱) قرار

^۱. Double zeta

دارند. r_c ، شعاع محدود کننده‌ی اوربیتال زتای اولی و r_m ، شعاع محدود کننده‌ی اوربیتال زتای دومی می‌باشد. مقدار r_c ، توسط انرژی برانگیختگی و مقدار r_m توسط پارامتر (Split-Norm) کنترل و تعیین می‌شود.

۴-۱۷ اوربیتال‌های قطبیده^۱

اوربیتال‌های قطبیده دارای تکانه‌ی زاویه‌ای بیشتری نسبت به اوربیتال‌های ظرفیت می‌باشند. این دسته از اوربیتال‌ها با اختلال اوربیتال‌های زتای یگانه توسط میدان الکتریکی تولید می‌شوند و $l + 1$ مولفه‌ی اوربیتال اختلالی از آن حاصل می‌شود. اوربیتال‌های قطبیده به این صورت که اوربیتال‌های p می‌توانند برای قطبیده کردن اوربیتال‌های s ، و اوربیتال‌های d برای قطبیده کردن اوربیتال‌های p ، مورد استفاده قرار بگیرند.

۴-۱۸ شبه پتانسیل^۲

برای تولید شبه پتانسیل ابتدا الکترونهای بلور را به دو دسته الکترونهای مغزی^۳ و والانس فضای اطراف هسته را نیز به دو ناحیه مغزی و بین جایگاهی تقسیم می‌کنند. منظور از ناحیه مغزی مناطقی اطراف هسته است که با کره‌های فرضی محدود می‌شود و ناحیه بین جایگاهی مناطق خارج از این کره‌ها است. توابع موج الکترونهای مغزی به ناحیه مغزی محدود هستند در حالی که توابع موج الکترونهای والانس هم در ناحیه مغزی و هم در ناحیه بین جایگاهی گسترش دارند. ضمناً توابع موج قرار گرفته در ناحیه مغزی تغییرات قابل ملاحظه‌ای دارند. این بدین دلیل است که انرژی پتانسیل الکترونها در نواحی مغزی بسیار کم (مقادیر منفی بزرگ) و در نتیجه انرژی جنبشی آنها زیاد است. چون انرژی جنبشی

^۱ . Polarized orbitals

^۲ . Pseudopotential

^۳ . Core electrons

متناسب با مشتق دوم تابع موج است لذا تغییرات تابع موج نیز زیاد است و بنابراین برای بسط تابع موج بر حسب امواج تخت به تعداد زیادی موج تخت نیاز است که حجم محاسبات را زیاد میکند. از طرفی ما میدانیم که خواص فیزیکی یک بلور به الکترونیهای والانس اتم در نواحی دور از هسته بسیار بیشتر از الکترونیهای مغزی وابسته است. بنابراین شبه پتانسیلها به گونه‌ای هستند که: (۱) از وجود الکترونیهای مغزی (الکترونیهایی که تابع موج آنها محدود به ناحیه مغزی است) صرفنظر می‌شود. (۲) از نوسانات سریع تابع موج الکترون‌های والانس در نزدیکی هسته که به مجموعه پایه بسیار بزرگ و پیچیده‌ای نیاز دارد، جلوگیری می‌کنند.

شبه پتانسیلهایی که در انجام این پایان نامه مورد استفاده قرار گرفته‌اند از نوع شبه پتانسیلهای فوق نرم هستند که با فرمت مناسب برای استفاده در کد siesta بر روی شبکه قرار گرفته‌اند امتیاز بسیار مهمی که در شبه پتانسیلهای فوق نرم وجود دارد این است که انرژی قطع مورد نیاز برای بسط توابع موج تقریباً نصف انرژی قطعی است که در شبه پتانسیلهای پایسته بهنجار استفاده می‌شود و لذا تعداد امواج تخت مورد نیاز برای بسط تقریباً $\frac{1}{3}$ کمتر است. در انتخاب شبه پتانسیل می‌بایست به این نکته توجه داشت که شبه پتانسیلهای بکار رفته برای اتمهای یک ترکیب دارای تقریب یکسانی در جمله تبدالی همبستگی (LDA) یا (GGA) باشند. از طرفی در صورت وجود انواع یکسانی از شبه پتانسیلها (فوق نرم، نرم پایسته، ...) برای اتمهای موجود در ترکیب، حتی الامکان از شبه پتانسیلهای مشابه استفاده شود. یک معیار برای انتخاب شبه پتانسیل مناسب این است که خواص فیزیکی محاسبه شده بر خواص تجربی منطبق باشد. مآخذ شبه پتانسیلهای بکار رفته در این پروژه پایگاه اینترنتی siesta است، که در کد siesta از شبه پتانسیلهای ترولیر-مارتین^۱ استفاده می‌شود [۶۰-۶۱].

^۱. Troullier-Martins pseudopotentials

فصل چهارم

نتایج:

بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله های گالیوم آرسناید

GaAs خالص و آلایش یافته با عناصر واسطه

ترکیب GaAs از اولین نیمرساناهای گروه III-V است که به منظور استفاده در DMS ها مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است. GaAs بعنوان یک نیمرسانای با گاف نواری کوچک استفاده‌های فراوانی در کاربردهای اپتوالکترونیکی داشته است و به همین دلیل محققین علاقمند بودند که با تزریق یک عنصر واسطه به این نیمرسانا بتوانند از خواص مگنتوالکترونیکی نیز در کنار خواص اپتوالکترونیکی آن استفاده کنند. با توجه به روند کوچک‌سازی^۱ قطعات الکترونیکی در صنعت نیمرساناها، توجهات به سمت ساختارهای ابعاد پایین به عنوان اجزای سازنده قطعات الکترونیکی سوق پیدا کرده است. ساختارهای یک بعدی و شبه یک بعدی همچون نانوسیم‌ها و نانولوله‌ها، به دلیل مد تراپردی بالستیک می‌توانند کاندیدای خوبی در صنعت الکترونیک پر سرعت قرار بگیرند. نانولوله‌ها نسبت به نانوسیم‌ها به دلیل داشتن فضای خالی بهتر، در حضور آلاینش انعطاف‌پذیری بیشتری به آن‌ها می‌دهد. با توجه به مطالبی که بیان گردید در این فصل از پایان‌نامه هدف ما بررسی خواص الکترونی نظیر ساختار نواری و چگالی حالت‌های جزئی و کلی، و خواص مغناطیسی ۱- نانولوله‌های خالص GaAs (دسته‌صندلی، زیگزاگ) و ۲- نانولوله‌های GaAs آلاینش یافته با عناصر واسطه‌ی فلزی خواهد بود. محاسبات ما در چارچوب نظریه‌ی تابع چگالی، با کد محاسباتی SIESTA [۴۸-۵۷-۵۹] بر پایه‌ی بسط تابع موج بر حسب ترکیب خطی اوربیتال‌های اتمی و تقریب شبه پتانسیل استوار است. انجام گردیده است. برای تابع همبستگی - تبادلی از تقریب چگالی موضعی (LDA) کپرلی، آلدرا (CA)^۲ استفاده شده است [۴۲].

^۱. Miniaturization

^۲. Ceperley and Alder

۲-۵ بهینه‌سازی پارامترها

ابتدا قبل از بررسی کارها و نتایج حاصل شده، لازم است که به معرفی تعدادی از پارامترها بپردازیم. دقت در انتخاب این پارامترها به منظور کاهش در زمان محاسبات، افزایش دقت و سرعت همگرایی است که بایستی پارامترهای مربوطه را بهینه کرد. این پارامترها شامل انرژی قطع^۱ و بردار شبکه‌بندی (که تعداد نقاط در فضای وارون را مشخص می‌کند) که به طور مختصر توضیحی ارائه خواهیم کرد.

۱-۲-۵ انرژی قطع

برای محاسبه چگالی بار، پتانسیل و انرژی در ساختارهای متناوب و دوره‌ای، همچنین تبدیل فوریه‌ی کمیت‌های فیزیکی از فضای وارون به حقیقی، و بالعکس بایستی انتگرالهایی را که در این فضا موجود می‌باشند را محاسبه کنیم. برای محاسبه این انتگرالها، ما این فضاها را شبکه‌بندی می‌کنیم. فاصله بین این نقاط در فضای شبکه‌بندی در فضای حقیقی را با Δx نشان می‌دهیم. و با انرژی قطع رابطه زیر را دارد:

$$k_c = \frac{\pi}{\Delta x} \longrightarrow E_{cut} = \frac{\hbar^2 k_c^2}{2m_e} \longrightarrow \text{if } m, \hbar = 1 \longrightarrow \Delta x = \frac{\pi}{\sqrt{2 E_{cut}}} \quad (1-4)$$

در رابطه (۱-۴)، k_c بردار موج تخت قطع و E_{cut} انرژی قطع می‌باشد. با زیاد شدن مقدار انرژی قطع فاصله‌ی نقاط در شبکه‌ی حقیقی کمتر و در نتیجه تعداد بیشتری از این نقاط در انتگرال‌گیری مشارکت می‌کنند. و همین امر باعث افزایش دقت انتگرال‌گیری در شبکه‌ی حقیقی می‌شود.

۲-۲-۵ بردار شبکه‌بندی و تعداد نقاط K در فضای وارون

به دلیل زیاد بودن تعداد اتم‌ها و نیز بالطبع تعداد الکترون‌ها در یک جامد تناوبی، و از آنجا که

^۱. Cutoff energy

توابع موج تک ذره‌ای روی همه جامد گسترده‌اند، باید برای محاسبه‌ی کمیت‌هایی مثل چگالی بار $n(\vec{r})$ در نقطه‌ی \vec{r} ، تعداد زیادی توابع موج که به صورت محدود در فضا گسترده شده‌اند، محاسبه شوند. با استفاده از قضیه بلوخ معادله (۲-۴)، می‌توانیم مساله‌ی محاسبه $10^{23} \sim N_e$ تعداد تابع موج تک ذره‌ای $\psi_i(\vec{r})$ را به مساله‌ی $\psi_{nk}(\vec{r})$ در منطقه اول بریلوئن و به ازای تعداد محدودی نوار کاهش دهیم.

$$\psi_n(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}) = \psi_n(\vec{k}, \vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad (2-4)$$

برای انتگرال‌گیری روی این نقاط و با فرض داشتن توابع موج در تعداد محدودی از این نقاط بایستی فضای وارون را شبکه‌بندی کنیم. روشی که در کد SIESTA برای ایجاد شبکه نقاط K ارائه شده روش منخارست پک^۱ می‌باشد [۶۲]. در راستاهای آزادی و دوره‌ای در حالت کلی شبکه‌بندی به صورت $N \times M \times K$ می‌باشد، که برای ساختارهای یک بعدی و شبه یک بعدی همانند نانولوله‌ها، نانو سیم‌ها و نانو ریبون‌ها با درجه آزادی در راستای \vec{c} به صورت $(1 \times 1 \times N)$ انجام می‌پذیرد.

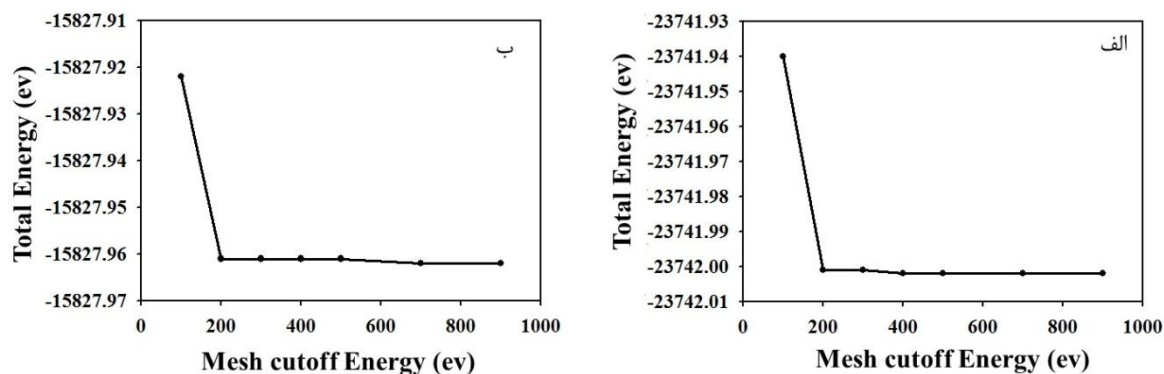
۳-۲-۵ تعیین پارامترهای ورودی نانولوله GaAs خالص و آرایش یافته

۱-۳-۲-۵ انرژی قطع

از بین نانولوله‌های زیگزاگ $(n, 0)$ و دسته‌صندلی (n, n) خالص GaAs، نانولوله‌ی زیگزاگ خالص $(6, 0)$ و یک نانولوله‌ی دسته‌صندلی خالص $(4, 4)$ تعیین کردیم که برای محاسبات دیگر نانولوله‌ها نیز از این مقادیر بهینه شده در حضور و عدم حضور ناخالصی استفاده کردیم. با انتخاب درست در پارامتر انرژی قطع، باعث افزایش سرعت همگرایی و کاهش خطا در امر محاسبات می‌شویم. به منظور یافتن انرژی قطع بهینه شده، به ازای تعداد نقاط K معین و همچنین دیگر پارامترها به غیر از انرژی قطع در فایل ورودی، پارامترهای ورودی دیگر را نیز دقیق و بالا در نظر گرفتیم تا خطایی در محاسبات صورت نگیرد، و با تغییر

^۱ . Monkhorst-Pack

دادن انرژی قطع در هر مرحله، به بررسی انرژی کل به ازای انرژی قطع‌های متفاوت پرداختیم. نتایج حاصل شده برای دو نوع نانولوله‌ی خالص، در جدول و شکل (۴-۱) گزارش شده است.



شکل ۵-۱: نمودار انرژی قطع بر حسب انرژی کل، الف) نانولوله خالص (۶،۰) ب) نانولوله خالص (۴،۴).

جدول ۵-۱: انرژی کل بر حسب انرژی قطع برای دو نانولوله خالص زیگزاگ (۶،۰) و دسته‌صندلی (۴،۴).

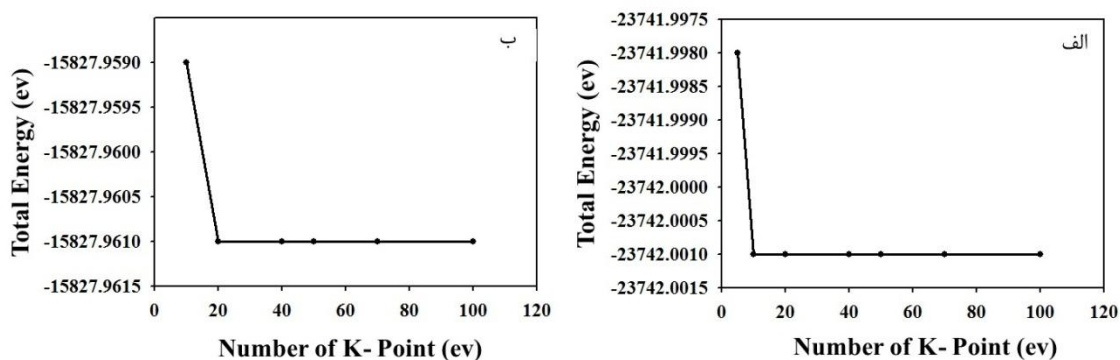
انرژی قطع (Ry)	۱۰۰	۲۰۰	۳۰۰	۴۰۰	۵۰۰	۷۰۰	۹۰۰
انرژی کل (eV) (۶،۰)	-۲۳۷۴۱/۹۴	-۲۳۷۴۲/۰۰۱	-۲۳۷۴۲/۰۰۱	-۲۳۷۴۲/۰۰۱	-۲۳۷۴۲/۰۰۱	-۲۳۷۴۲/۰۰۲	-۲۳۷۴۲/۰۰۲
انرژی کل (eV) (۴،۴)	-۱۵۸۲۷/۹۲۲	-۱۵۸۲۷/۹۶۰	-۱۵۸۲۷/۹۶۰	-۱۵۸۲۷/۹۶۱	-۱۵۸۲۷/۹۶۱	-۱۵۸۲۷/۹۶۲	-۱۵۸۲۷/۹۶۱

با توجه جدول بالا و نمودار شکل (۴-۱)، تغییرات انرژی کل بر حسب انرژی قطع برای هر دو نانولوله‌ی زیگزاگ و دسته‌صندلی GaAs، تقریباً از ۲۰۰ Ry به بعد مقادیر یکسانی داشته و برای داشتن دقت بیشتر جهت انجام محاسبات، مقدار ۵۰۰ Ry را برای انرژی قطع در تمام روند محاسبات به عنوان پارامتر بهینه انتخاب کردیم.

۵-۲-۳-۲ بردار شبکه‌بندی و تعداد نقاط K در فضای وارون

بعد از بهینه کردن انرژی قطع، گام آخر بهینه‌سازی تعداد نقاط K در هر راستا در فضای وارون به

منظور مش‌بندی این ناحیه است. مش‌بندی ناحیه بریلوئن در کد محاسباتی SIESTA توسط روش منخارست یک انجام شده است. از آنجا که ساختار مورد نظر نانولوله می‌باشد و یک بعدی است، شرایط مرزی به این صورت اعمال شده است که از سه راستای a ، b و c فقط در دو راستای a و b به اندازه کافی خلا منظور شده است تا از برهم‌کنش در این راستاها جلوگیری شود. در این مرحله نیز مشابه بهینه کردن در انرژی قطع ابتدا تمامی پارامترها و هم چنین خود انرژی قطع را که مقدار بهینه شده آن را پیدا کردیم در فایل ورودی وارد کرده و با در نظر گرفتن راستای c و تغییر دادن در هر مرحله از جایگذاری مقدار N در $(1 \times 1 \times N)$ صورت گرفت. لازم به ذکر است که به دلیل زیاد بودن ساختارهای مورد بررسی، امکان بهینه کردن هر دو پارامتر انرژی قطع و بردار مش‌بندی در فضای وارون K برای هر ساختار وجود نداشت و برای محاسبات دیگر در حضور و عدم حضور ناخالصی از آن بهره برده شد. نتایج حاصل شده برای دو نوع نانولوله‌ی خالص، در جدول و شکل (۲-۴) گزارش شده است.



شکل ۲-۵: بهینه‌ی تعداد نقاط K در هر راستا در فضای وارون، الف) نانولوله خالص (۶،۰) ب) نانولوله خالص (۴،۴).

جدول ۲-۵: انرژی کل بر حسب تعداد نقاط K، برای دو نانولوله خالص زیگزاگ (۶،۰) و دسته‌صندلی (۴،۴).

تعداد نقاط K	۵	۱۰	۲۰	۴۰	۵۰	۷۰	۱۰۰
انرژی کل eV (۶،۰)	-۲۳۷۴۱/۹۹۸	-۲۳۷۴۲/۰۰۱	-۲۳۷۴۲/۰۰۱	-۲۳۷۴۲/۰۰۱	-۲۳۷۴۲/۰۰۱	-۲۳۷۴۲/۰۰۱	-۲۳۷۴۲/۰۰۱
انرژی کل eV (۴،۴)	-	-۱۵۸۲۷/۹۵۹	-۱۵۸۲۷/۹۶۱	-۱۵۸۲۷/۹۶۱	-۱۵۸۲۷/۹۶۱	-۱۵۸۲۷/۹۶۱	-۱۵۸۲۷/۹۶۱

با توجه به جدول بالا و نمودار شکل (۲-۴)، تغییرات انرژی کل بر حسب تعداد نقاط K برای هر دو نانولوله‌ی GaAs، از مقدار ۲۰ به بعد مقادیر ثابتی را برای انرژی کل مشاهده می‌کنیم. ولی به دلیل دقیق بودن در محاسبات، مقدار N در کلیه فایل‌های ورودی برای تمامی ساختارها مقدار ۱۰۰ اختیار شد تا از صحت و دقت آن در نتایج محاسبات اطمینان حاصل شود و در نمونه‌های آرایش یافته نیز همین مقدار در نظر گرفته شده است.

۲-۳-۵ مجموعه پایه‌ها

کد محاسباتی SIESTA توابع موج تک ذره‌ای کوهن-شم را بر حسب ترکیب خطی از پایه‌های اوربیتال‌های اتمی بسط می‌دهد. که اوربیتال‌های اتمی را می‌توان به صورت حاصل ضرب تابع شعاعی در هماهنگ‌های کروی در نظر گرفت. در انجام محاسبات از حالت زتای دوگانه قطبیده^۱ (DZP) که عموماً جوابی با کیفیت بالا با هزینه محاسباتی کم (زمان) فراهم می‌کند، استفاده شده است.

۳-۵ بررسی خواص الکترونی نانولوله‌های خالص GaAs (زیگزاگ و دسته‌صندلی)

۱-۳-۵ بهینه‌سازی ساختار

مهمترین پارامترهایی که برای محاسبات نانولوله‌های خالص (دسته‌صندلی، زیگزاگ) در فایل

^۱. double zeta polarized

ورودی بایستی در نظر گرفته شود در جدول (۳-۴) آورده شده است.

جدول ۳-۵: پارامترهای ورودی محاسبات، برای نانولوله‌های (دسته‌صندلی-زیگزاگ) GaAs خالص.

تقریب کد	⇒	شبه پتانسیل	⇒	آرایش لایه ظرفیت اتم Ga	$3d^{10}4s^2 4p^1$
تابعی همبستگی-تبادلی	⇒	LDA(CA)	⇒	آرایش لایه ظرفیت اتم As	$4s^2 4p^3$
بردار شبکه بندی فضای K	⇒	$1 \times 1 \times 100$	⇒	روش دینامیک مولکولی (MD)	شیب همیوگ (CG)
انرژی قطع	⇒	500 Ry	⇒	همگرایی نیرو	$\leq 0.05 \frac{\text{eV}}{\text{\AA}}$
همگرایی چگالی بار	⇒	10^{-5}	⇒	مجموعه پایه‌ها	دوگانه قطبیده (DZP)

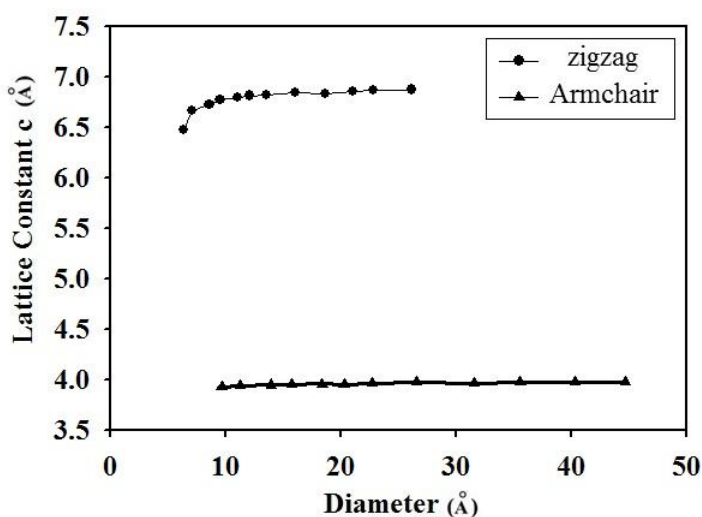
۵-۳-۱-۱ ثابت شبکه

نانولوله‌های زیگزاگ و دسته‌صندلی GaAs به دلیل داشتن ساختار یک بعدی در تمامی نانولوله‌های بررسی شده و این که در دو راستای غیر دوره‌ای a و b حدود 10 آنگستروم خلاء داده شده و راستای محوری نانولوله (c) راستای دوره‌ای در نظر گرفته شد. از آنجا که در دو راستا خلاء در نظر گرفته شد، تنها پارامتر شبکه قابل بررسی می‌باشد، پارامتر محوری شبکه c می‌باشد. مجموعه نانولوله‌هایی که در این پایان نامه مورد بررسی قرار گرفته‌اند، شامل 12 نانولوله‌ی زیگزاگ $(4,0)$ ، $(5,0)$ ، $(6,0)$ ، $(7,0)$ ، $(8,0)$ ، $(9,0)$ ، $(10,0)$ ، $(12,0)$ ، $(14,0)$ ، $(16,0)$ ، $(18,0)$ ، $(20,0)$ و 12 نانولوله‌ی دسته‌صندلی $(4,4)$ ، $(5,5)$ ، $(6,6)$ ، $(7,7)$ ، $(8,8)$ ، $(9,9)$ ، $(10,10)$ ، $(12,12)$ ، $(14,14)$ ، $(16,16)$ ، $(18,18)$ ، $(20,20)$ می‌باشد. نانولوله‌های زیگزاگ $(n,0)$ ، نسبت به دسته‌صندلی (n,m) با n یکسان، دارای قطر کوچکتر با طول محوری c بزرگتر می‌باشند. در شکل (۳-۴) همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش قطر نانولوله‌ها نمودار روند ثابت تری را به خود گرفته و تغییرات زیادی را شاهد نیستیم، و از یک قطر خاصی به بعد تقریباً نمودار ثابت می‌شود. از آنجا که قطر نانولوله‌های دسته‌صندلی نسبت به زیگزاگ بزرگتر بوده، در نمونه دسته‌صندلی تغییرات پارامتر شبکه تقریباً ثابت و حدود $3/97$ آنگستروم می‌باشد. در حالی که در نوع زیگزاگ تغییرات بیشتر، و بعد از یک قطر معین، ثابت شده و به حدود $6/85$ آنگستروم همگرا می‌شود، در

جدول (۴-۴) نیز برای مقایسه‌ی پارامتر شبکه‌ی C از هر نمونه‌ی دسته‌صندلی و زیگزاگ، ۱۲ نانولوله برای مقایسه آورده شده است.

جدول ۴-۵: پارامتر ثابت شبکه در راستای محوری c (طول نانولوله) و قطر نانولوله‌های خالص GaAs.

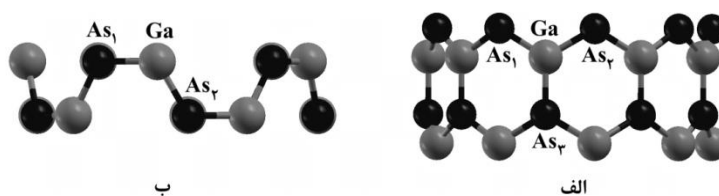
تعداد اتم در سلول واحد	نانولوله دسته‌صندلی	قطر تقریبی (Å)	پارامتر c (Å)	نانولوله زیگزاگ	قطر تقریبی (Å)	پارامتر c (Å)
۱۶	(۴.۴)	۹/۰۹۰۹	۳/۹۳۳	(۴.۰)	۵/۵۴۱۸	۶/۴۷۹
۲۰	(۵.۵)	۱۱/۲۰۳۲	۳/۹۴۰۴	(۵.۰)	۷/۰۳۷۳	۶/۶۶۶
۲۴	(۶.۶)	۱۳/۹۷۴۱	۳/۹۵	(۶.۰)	۸/۵۷۵۴	۶/۷۲۹
۲۸	(۷.۷)	۱۵/۷۵۲۱	۳/۹۵۳۵	(۷.۰)	۹/۵۲۹	۶/۷۷۲
۳۲	(۸.۸)	۱۸/۳۷۴۱	۳/۹۵۸۵	(۸.۰)	۱۰/۹۹۰۲	۶/۸۰۲
۳۶	(۹.۹)	۲۰/۲۶۶۷	۳/۹۵۲۸	(۹.۰)	۱۲/۰۵۹۷	۶/۸۱۵
۴۰	(۱۰.۱۰)	۲۲/۷۳۲۱	۳/۹۶۶۵	(۱۰.۰)	۱۳/۵۰۰۱	۶/۸۲۴
۴۸	(۱۲.۱۲)	۲۶/۵۸۴۸	۳/۹۷۹۸	(۱۲.۰)	۱۶/۰۳۱۲	۶/۸۴۱
۵۶	(۱۴.۱۴)	۳۱/۵۳۷۷	۳/۹۶۶۶	(۱۴.۰)	۱۸/۵۹۱۳	۶/۸۳۶
۶۴	(۱۶.۱۶)	۳۵/۵۶۳۱	۳/۹۷۶	(۱۶.۰)	۲۱/۰۶	۶/۸۵۷
۷۲	(۱۸.۱۸)	۴۰/۲۹۶۱	۳/۹۷۸۳	(۱۸.۰)	۲۲/۸۳۶۰	۶/۸۶۵
۸۰	(۲۰.۲۰)	۴۴/۶۹۳۱	۳/۹۷۹۸	(۲۰.۰)	۲۶/۱۲۴۹	۶/۸۷۵



شکل ۳-۵: نمودار تغییرات ثابت شبکه در راستای محوری در نانولوله‌های GaAs بر حسب قطر.

۵-۳-۱-۲ طول پیوند

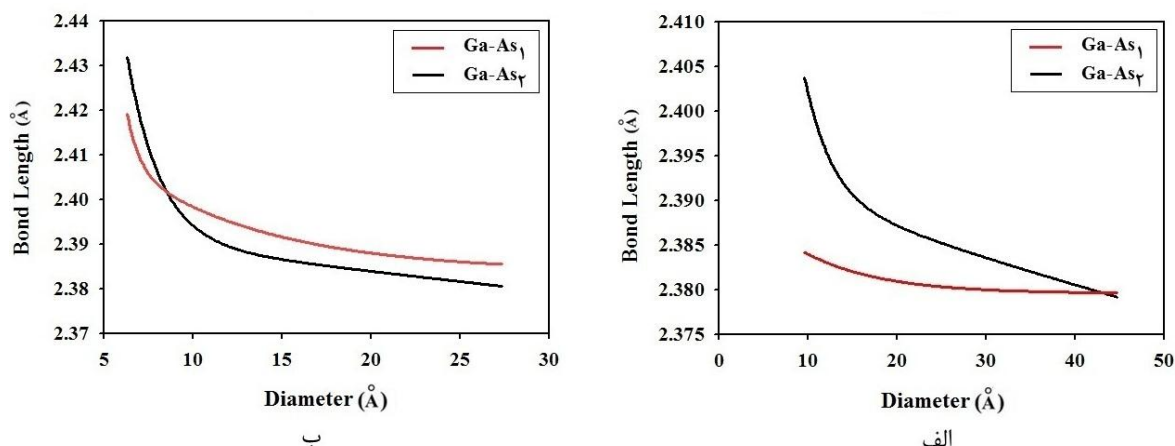
طول پیوند تعادلی بین Ga و As (Ga-As)، برای نانولوله‌های (زیگزاگ، دسته‌صندلی) GaAs در جدول (۵-۴) گزارش شده است شکل (۴-۴)، الف) ساختار (۹,۰) از یک نانولوله زیگزاگ و ب) ساختار (۵,۵) از یک نانولوله دسته‌صندلی را نشان می‌دهد و مطابق شکل برای زیگزاگ هر اتم Ga با سه اتم As و برای نمونه دسته‌صندلی هر اتم Ga با دو اتم As اطراف خود پیوند برقرار می‌کند. که در نمونه زیگزاگ با دو اتم As اطراف خود طول پیوندی مشابه و با دیگری، طول پیوندی متفاوت برقرار می‌کند. در شکل (۵-۴) نمودار تغییر طول پیوند بین Ga و As در نانولوله‌ها، به ازای تغییر قطر آن‌ها رسم شده است.



شکل ۴-۵: سلول واحد الف) ساختار (۹,۰) از نانولوله زیگزاگ، ب) ساختار (۵,۵) از نانولوله دسته‌صندلی.

جدول ۵-۵: طول پیوند بین Ga-As در نانولوله‌های خالص GaAs بر حسب Å.

نانولوله دسته‌صندلی	Ga-As ₂	Ga-As ₁	نانولوله زیگزاگ	Ga-As ₂	Ga-As ₁
(۴,۴)	۲/۴۰۴۷	۲/۳۸۵۱	(۴,۰)	۲/۴۳۱۵	۲/۴۱۹۲
(۵,۵)	۲/۳۹۷۰	۲/۳۸۲۷	(۵,۰)	۲/۴۱۱۱	۲/۴۱۰۷
(۶,۶)	۲/۳۹۴۲	۲/۳۸۳۶	(۶,۰)	۲/۴	۲/۴۰۹۸
(۷,۷)	۲/۳۸۷۹	۲/۳۸۱۹	(۷,۰)	۲/۳۹۵۹	۲/۴۰۰۸
(۸,۸)	۲/۳۸۹۶	۲/۳۸۲۸	(۸,۰)	۲/۳۹۰۷	۲/۳۹۸۶
(۹,۹)	۲/۳۸۶۷	۲/۳۸۳۴	(۹,۰)	۲/۳۸۸۷	۲/۳۹۶۲
(۱۰,۱۰)	۲/۳۸۸۰	۲/۳۷۹۹	(۱۰,۰)	۲/۳۸۷۷	۲/۳۹۴۷
(۱۲,۱۲)	۲/۳۸۵۳	۲/۳۸۰۷	(۱۲,۰)	۲/۳۸۵۷	۲/۳۸۹۱
(۱۴,۱۴)	۲/۳۸۲۶	۲/۳۷۸۵	(۱۴,۰)	۲/۳۸۳۲	۲/۳۸۸۷
(۱۶,۱۶)	۲/۳۸۲۱	۲/۳۸۲۸	(۱۶,۰)	۲/۳۸۱۳	۲/۳۸۱۳
(۱۸,۱۸)	۲/۳۸۱۶	۲/۳۷۹۸	(۱۸,۰)	۲/۳۸۲۵	۲/۳۸۸۵
(۲۰,۲۰)	۲/۳۷۹۴	۲/۳۸۰۶	(۲۰,۰)	۲/۳۸۲۴	۲/۳۸۴۷



شکل ۵-۵: روند تغییر طول پیوند Ga با As های همسایه‌اش بر حسب قطر در نانولوله‌های خالص الف) دسته‌صندلی (ب) زیگزاگ.

تغییرات طول پیوند بین Ga و دو As همسایه‌اش ($Ga-As_2$) نسبت به As همسایه‌ی دیگر ($Ga-As_1$) با افزایش قطر در نانولوله‌های زیگزاگ، بیشتر از دسته‌صندلی می‌باشد و از حدود ۲/۳۷ آنگستروم در قطرهای پایین‌تر تا ۲/۴ آنگستروم در قطرهای بزرگتر متغیر می‌باشد. مطابق شکل (۴-۵)، با افزایش قطر، شاهد کاهش طول پیوند ($Ga-As$) برای دو نوع نانولوله می‌باشیم. در قطرهای کوچکتر روند کاهش با افزایش قطر، به خصوص برای نانولوله‌های زیگزاگ بیشتر، و در قطرهای بزرگتر، تغییرات کاهشی بسیار کوچک اتفاق می‌افتد. می‌توان طول پیوند تعادلی برای هر دو نانولوله را در قطرهای متوسط و بالا حدود ۲/۳۸ آنگستروم در نظر گرفت که نسبت به نمونه حجمی خود که ۲/۵ آنگستروم است، ۰/۱۲ آنگستروم کمتر می‌باشد [۶۳].

۲-۳-۵ جدایی خمشی^۱

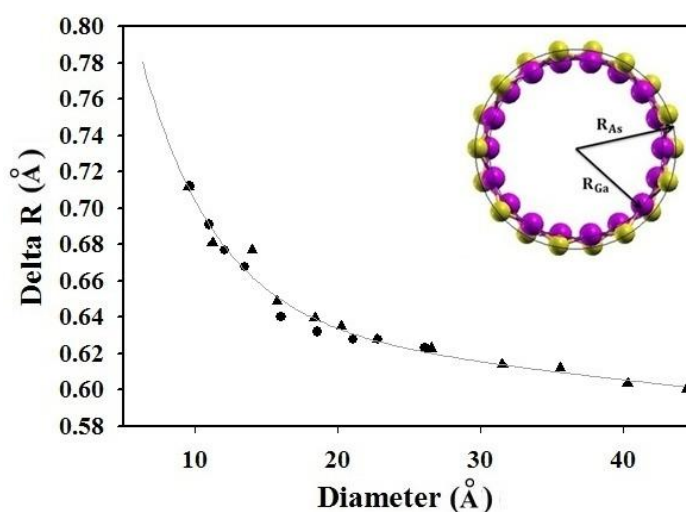
نتایج ما نشان داد که همانند نانولوله‌های BN و $[GaN]_{64}$ ، اتم‌های Ga با تمایل به حرکت به سمت خارج، و اتم‌های As با تمایل به حرکت به سمت داخل نانولوله تشکیل دو استوانه لوله‌ای شکل هم

^۱. Buckling

مرکز با شعاع‌های متفاوت را می‌دهند. اختلاف فاصله‌ی بین شعاع‌های دو استوانه، همان جدایی خمشی نامیده می‌شود. در جدول (۴-۶) و شکل (۴-۶) نحوه تغییر این جدایی بر حسب افزایش قطر نانولوله‌های مورد بررسی آورده شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش قطر نانولوله‌ها این جدایی کاهش می‌یابد.

جدول ۵-۶: نوع، زاویه کایرالیته، قطر تقریبی، جدایی خمشی ($\Delta R(\text{\AA})$)، برای نانولوله‌های خالص GaAs.

نانولوله دسته‌سندلی	زاویه کایرالیته	قطر تقریبی (\AA)	$\Delta R(\text{\AA})$	نانولوله زیگزاگ	زاویه کایرالیته	قطر تقریبی (\AA)	$\Delta R(\text{\AA})$
(۴،۴)	۳۰	۹/۶۳۰۸	۰/۷۱۲	(۴،۰)	۰	۶/۳۱۸۷	۰/۷۷۶۱
(۵،۵)	۳۰	۱۱/۲۰۳۲	۰/۶۸۱	(۵،۰)	۰	۷/۰۳۷۳	۰/۷۶۵۲
(۶،۶)	۳۰	۱۳/۹۷۴۱	۰/۶۶۷	(۶،۰)	۰	۸/۵۷۵۴	۰/۷۳
(۷،۷)	۳۰	۱۵/۷۵۲۱	۰/۶۴۹	(۷،۰)	۰	۹/۵۲۹	۰/۷۱۲
(۸،۸)	۳۰	۱۸/۳۷۴۱	۰/۶۴	(۸،۰)	۰	۱۰/۹۹۰۲	۰/۶۹۱
(۹،۹)	۳۰	۲۰/۲۶۶۷	۰/۶۳۵	(۹،۰)	۰	۱۲/۰۵۹۷	۰/۶۷۷
(۱۰،۱۰)	۳۰	۲۲/۷۳۲۱	۰/۶۲۸	(۱۰،۰)	۰	۱۳/۵۰۰۱	۰/۶۶۸
(۱۲،۱۲)	۳۰	۲۶/۵۸۴۸	۰/۶۲۳	(۱۲،۰)	۰	۱۶/۰۳۱۲	۰/۶۴
(۱۴،۱۴)	۳۰	۳۱/۵۳۷۷	۰/۶۱۴	(۱۴،۰)	۰	۱۸/۵۹۱۳	۰/۶۳۲
(۱۶،۱۶)	۳۰	۳۵/۵۶۳۱	۰/۶۱۲	(۱۶،۰)	۰	۲۱/۰۶	۰/۶۲۸
(۱۸،۱۸)	۳۰	۴۰/۲۹۶۱	۰/۶۰۴	(۱۸،۰)	۰	۲۲/۸۳۶۰	۰/۶۲۸
(۲۰،۲۰)	۳۰	۴۴/۶۹۳۱	۰/۶	(۲۰،۰)	۰	۲۶/۱۲۴۹	۰/۶۲۳



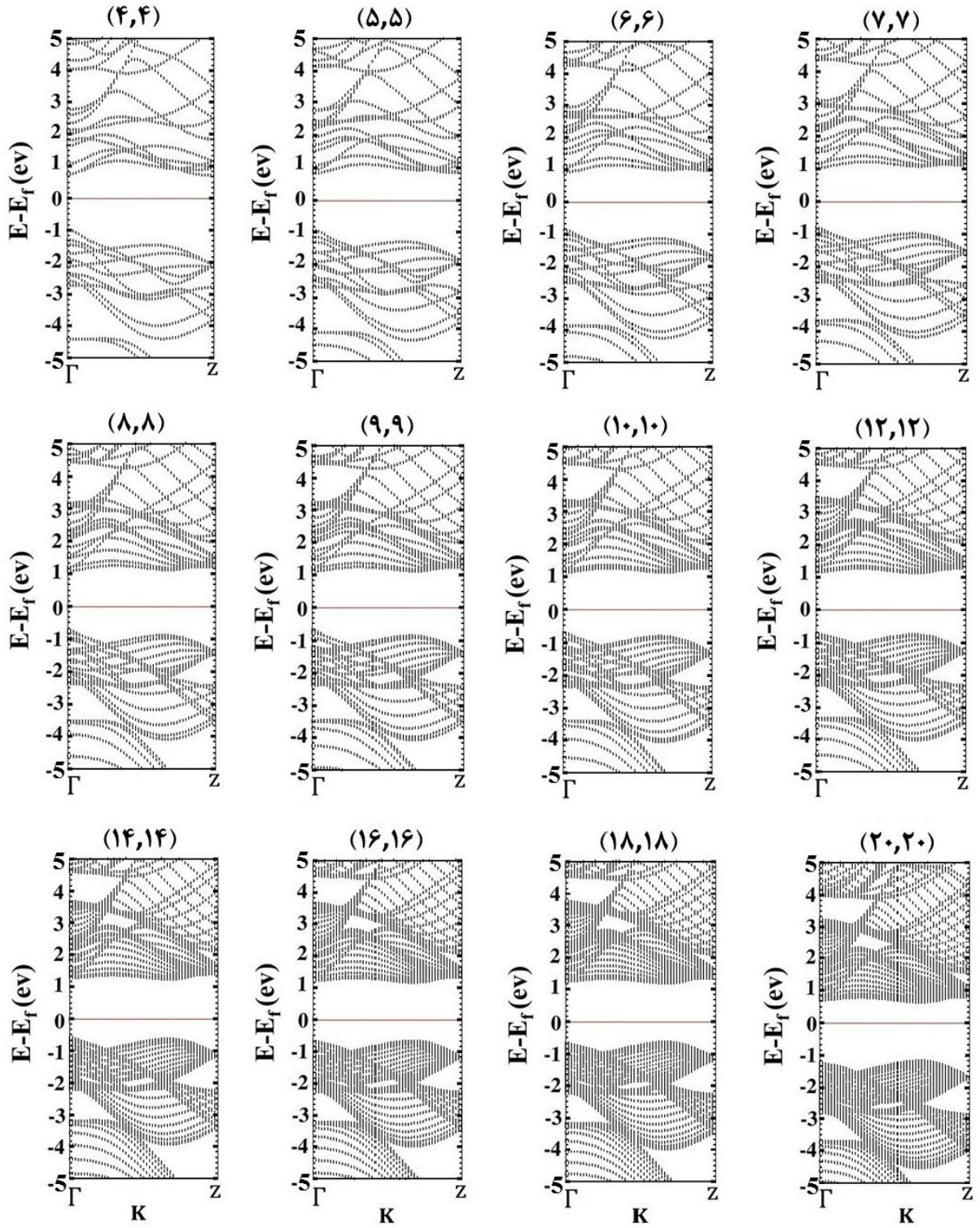
شکل ۵-۶: جدایی خمشی نانولوله‌های GaAs بر حسب قطر. دایره‌ها و مثلث‌ها بترتیب بیانگر نانولوله‌های زیگزاگ و دسته‌سندلی است. کره‌های تیره و روشن نیز به ترتیب بیانگر اتم‌های As و Ga می‌باشد $\Delta R = R_{As} - R_{Ga}$.

۳-۳-۵ خواص الکترونی نانولوله‌های (زیگزاگ و دسته‌صندلی) خالص GaAs

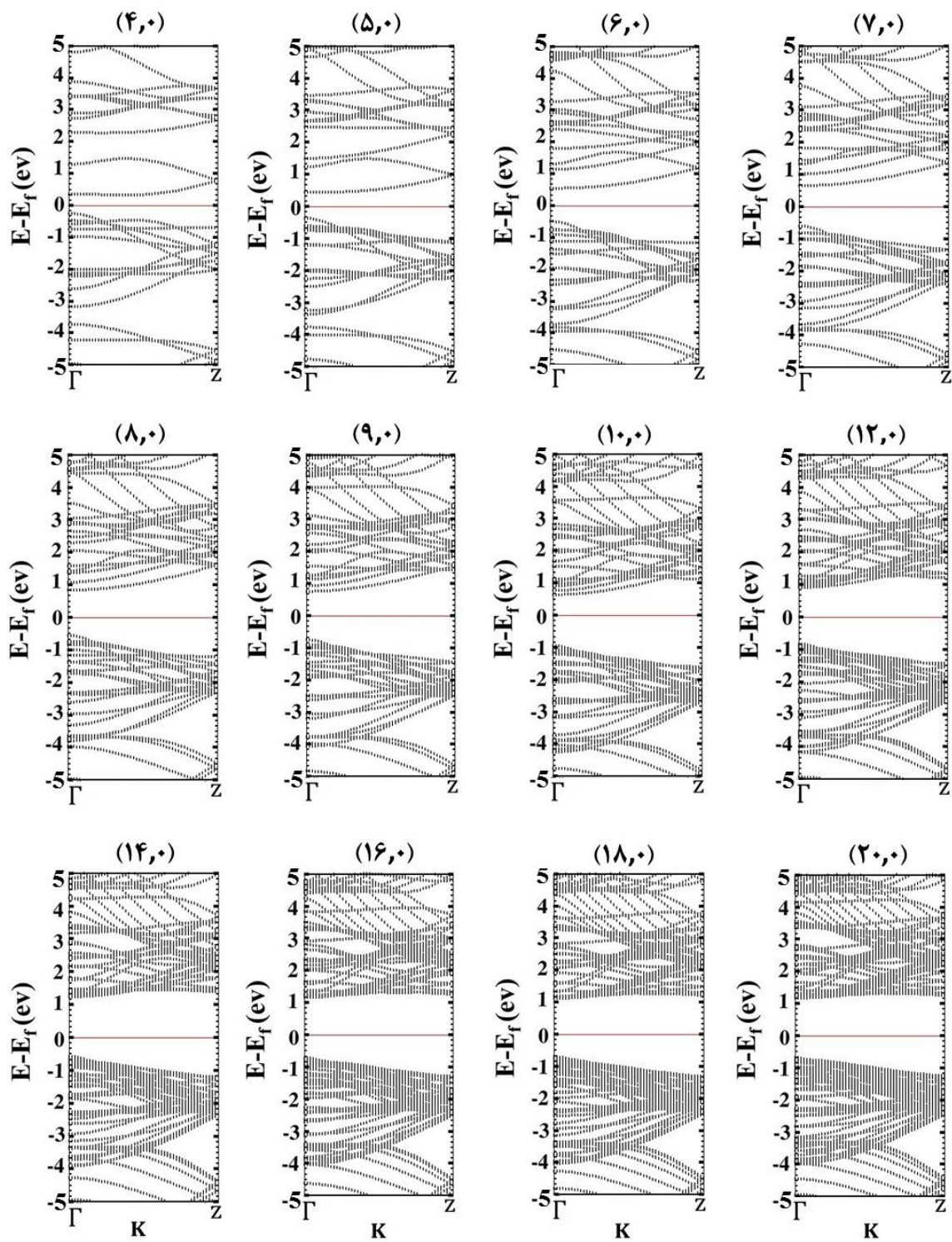
در این قسمت به مطالعه‌ی خواص فیزیکی، همچون خاصیت الکترونی ساختارها می‌پردازیم. در این بخش به مطالعه‌ی ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی (DOS) و جزئی (PDOS) نانولوله‌های زیگزاگ و دسته‌صندلی خالص می‌پردازیم.

۱-۳-۳-۵ بررسی ساختار نواری

برای یافتن مقدار گاف نواری مستقیم یا غیرمستقیم و روند تغییرات آن، نیاز است که ساختار نواری را بررسی کنیم. ساختارهای نواری بررسی شده برای نانولوله‌های دسته‌صندلی، در شکل (۴-۷) و برای نانولوله‌های زیگزاگ در شکل (۴-۸) رسم شده‌اند. با توجه به روند تغییرات در ساختار نواری، نانولوله‌های زیگزاگ و دسته‌صندلی GaAs دارای گاف نواری مستقیم می‌باشند و مقدار گاف نواری با افزایش قطر نانولوله‌ها در هر دو نوع نانولوله، روندی افزایشی دارد و در قطرهای بالاتر روند آن کندتر و تقریباً ثابت می‌گردد. روند تغییرات گاف بر حسب قطر نانولوله با داده‌های گزارش شده از دیگر ساختارهای گروه III-V در تطابق می‌باشد [۱۸]. در تمامی نمودارهایی که برای ساختار نواری رسم شده است، خط افقی مستقیمی که در نمودارهای ساختار نواری رسم شده است بیانگر موقعیت تراز فرمی می‌باشد. در نیمرساناهای ذاتی که چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها با هم برابرند، تراز فرمی در وسط گاف نواری بین نوار ظرفیت و نوار رسانش قرار می‌گیرد. در نیمرسانای نوع n که چگالی الکترون‌ها بیشتر از حفره‌ها می‌باشد، تراز فرمی به نوار رسانش و در نیمرساناهای نوع p که چگالی حفره‌ها بیشتر از الکترون‌ها می‌باشد، تراز فرمی به نوار ظرفیت نزدیک‌تر می‌گردد.



شکل ۵-۷: ساختار نواری نانولوله‌های خالص دسته‌بندی شده GaAs.



شکل ۵-۸: ساختار نواری نانولوله‌های خالص زیگزاگ GaAs.

با بررسی ساختار نواری نانولوله‌های زیگزاگ و دسته‌صندلی، در اکثر نانولوله‌ها نوارهای ظرفیت نزدیک به تراز فرمی می‌باشند که شاهد رفتار نوع p می‌باشیم و این رفتار حاکی از آن است که در این نوع از نیم‌رساناها (نوع p) چگالی حفره‌ها بیشتر از الکترون‌ها می‌باشد، و نیز برای نوارهای رسانش که نزدیک به تراز فرمی می‌باشند رفتار نوع n را شاهد هستیم که این رفتار نیز بیانگر این است که در نیم‌رساناها (نوع n) چگالی حفره‌ها بیشتر از الکترون‌ها می‌باشد، که این رفتارها می‌تواند به دلیل اثر قطر و انحنا نانولوله و همچنین تاثیر آن در هیبریداسیون اوربیتالی باشد [۶۴].

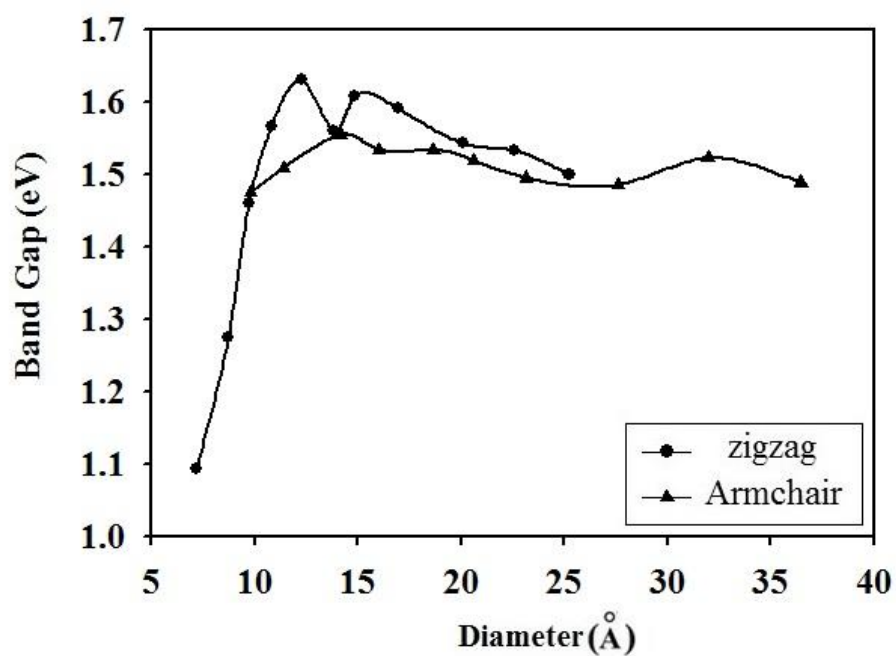
با پیدا کردن اختلاف سطح انرژی کمینه‌ی نوار رسانش نسبت به تراز فرمی $(E_c - E_F)$ ، و بیشینه‌ی نوار ظرفیت نسبت به تراز فرمی $(E_v - E_F)$ ، اندازه‌ی گاف نواری و نوع آن (مستقیم، غیرمستقیم)، برای نانولوله‌های دسته‌صندلی و زیگزاگ محاسبه و در جدول‌های (۷-۴) و (۸-۴) گزارش شده‌اند. در دو جدول اشاره شده شاهد تغییرات سطح انرژی تراز فرمی در نانولوله‌های دسته‌صندلی و زیگزاگ GaAs می‌باشیم. در این پژوهش تقریب بکار رفته، LDA می‌باشد و روند تغییرات گاف نواری با افزایش قطر برای تقریب GGA نیز در شکل (۹-۴) رسم شده است، به دلیل زیاد نبودن تغییرات چگالی الکترونی بین دو اتم و نیز منطقی‌تر بودن روند تغییرات گاف در شکل (۱۰-۴)، در این پایان نامه تقریب LDA را برای انجام محاسبات برگزیدیم. با توجه به نمودار شکل (۱۰-۴) که تغییرات گاف نواری بر حسب افزایش قطر نانولوله‌های GaAs را نشان می‌دهد، تغییرات گاف نواری در نانولوله‌های GaAs با افزایش قطر نانولوله روندی افزایشی دارد. در قطرهای پایین‌تر تغییرات گاف نواری بیشتر، در حالی که این تغییرات در قطرهای بالاتر کمتر است. نانولوله‌های زیگزاگ نسبت به نوع دسته‌صندلی تغییرات گاف نواری بیشتری را دارند. تراز فرمی در نانولوله‌های میانی به سمت انرژی‌های منفی‌تر انتقال می‌یابد، در نتیجه به نوارهای ظرفیت نزدیک‌تر (رفتار نوع p) می‌گردد.

جدول ۵-۷: گاف نواری نانولوله‌های خالص دسته‌سندلی GaAs و موقعیت تراز فرمی آن‌ها نسبت به نوارهای انرژی.

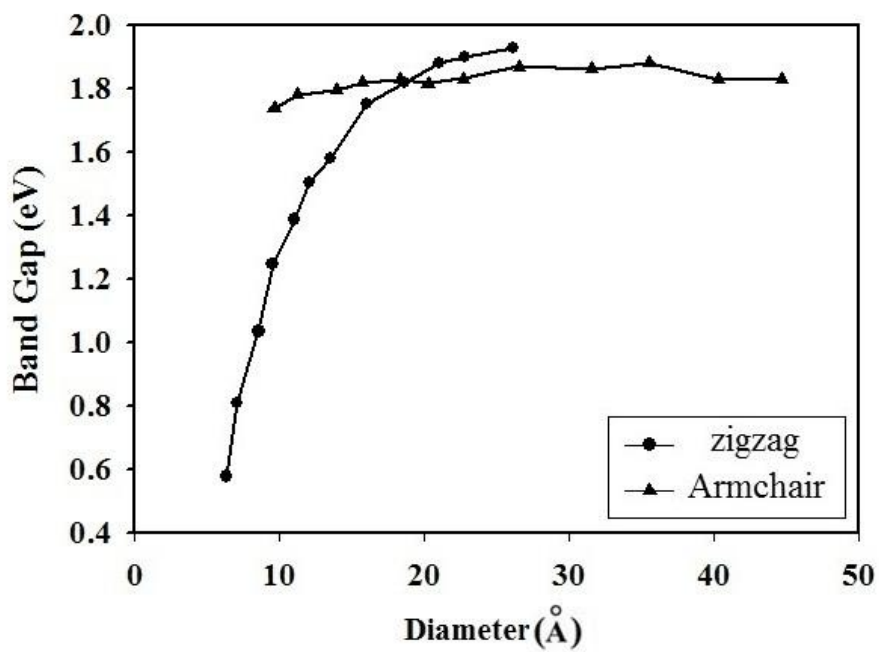
نانولوله دسته‌سندلی	موقعیت تراز فرمی (eV)	$E_c - E_F (eV)$	$E_F - E_v (eV)$	گاف نواری (eV)
(۴،۴)	-۳/۵۱۰۷	۰/۷۲۷	۱/۰۱۳	(n-type) ،۱/۷۴۰
(۵،۵)	-۳/۶۳۵۵	۰/۸۳۱	۰/۹۶۴	(n-type) ،۱/۷۹۷
(۶،۶)	-۳/۷۸۰۲	۰/۹۱	۰/۸۸۸	(p-type) ،۱/۷۹۸
(۷،۷)	-۳/۹۰۶۹	۱/۰۰۹	۰/۸۱۲	(p-type) ،۱/۸۲۱
(۸،۸)	-۳/۹۹۶۴	۱/۰۷۶	۰/۷۵۵	(p-type) ،۱/۸۳۱
(۹،۹)	-۴/۰۲۸۳	۱/۱۰۶	۰/۷۱۱	(p-type) ،۱/۸۱۷
(۱۰،۱۰)	-۴/۰۶۷۰	۱/۱۱۸	۰/۷۱۶	(p-type) ،۱/۸۳۴
(۱۲،۱۲)	-۴/۱۰۶۲	۱/۱۴۴	۰/۷۲۶	(p-type) ،۱/۸۷۰
(۱۴،۱۴)	-۴/۲۱۹۳	۱/۲۶۱	۰/۶۰۳	(p-type) ،۱/۸۶۴
(۱۶،۱۶)	-۴/۱۷۵۴	۱/۲۰۶	۰/۶۷۵	(p-type) ،۱/۸۸۱
(۱۸،۱۸)	-۴/۲۰۰۵	۱/۱۷۲	۰/۶۵۸	(p-type) ،۱/۸۳۰
(۲۰،۲۰)	-۳/۶۵۶۱	۰/۶۴۳	۱/۱۸۷	(n-type) ،۱/۸۳۰

جدول ۵-۸: گاف نواری نانولوله‌های خالص زیگزاگ GaAs و موقعیت تراز فرمی آن‌ها نسبت به نوارهای انرژی.

نانولوله زیگزاگ	موقعیت تراز فرمی (eV)	$E_c - E_F (eV)$	$E_F - E_v (eV)$	گاف نواری (eV)
(۴،۰)	-۴/۴۳۸۴	۰/۳۱۱	۰/۲۷۲	(p-type) ، ۰/۵۸
(۵،۰)	-۴/۲۶۶۱	۰/۴۲۳	۰/۳۸۹	(p-type) ، ۰/۸۱۲
(۶،۰)	-۴/۱۱۵۵	۰/۵۳۲	۰/۵۰۳	(p-type) ،۱/۰۳۵
(۷،۰)	-۴/۰۴۹۰	۰/۶۴	۰/۶۱۳	(p-type) ،۱/۲۵۳
(۸،۰)	-۴/۱۱۶۰	۰/۸۲۱	۰/۵۷۳	(p-type) ،۱/۳۹۴
(۹،۰)	-۳/۹۳۹۴	۰/۷۴۲	۰/۷۶۹	(p-type) ،۱/۵۱۱
(۱۰،۰)	-۳/۷۵۱۰	۰/۶۱۷	۰/۹۶۵	(n-type) ،۱/۵۸۲
(۱۲،۰)	-۳/۹۲۲۰	۰/۸۹۷	۰/۸۵۵	(p-type) ،۱/۷۵۲
(۱۴،۰)	-۴/۱۷۰۱	۱/۲۲	۰/۵۹۹	(p-type) ،۱/۸۱۹
(۱۶،۰)	-۴/۰۷۲۰	۱/۱۴۷	۰/۷۳۳	(p-type) ،۱/۸۸۱
(۱۸،۰)	-۴/۰۶۴۷	۱/۰۹۹	۰/۸	(p-type) ،۱/۸۹۹
(۲۰،۰)	-۴/۱۲۲۲	۰/۶۸۳	۱/۲۴۷	(n-type) ،۱/۹۳۱



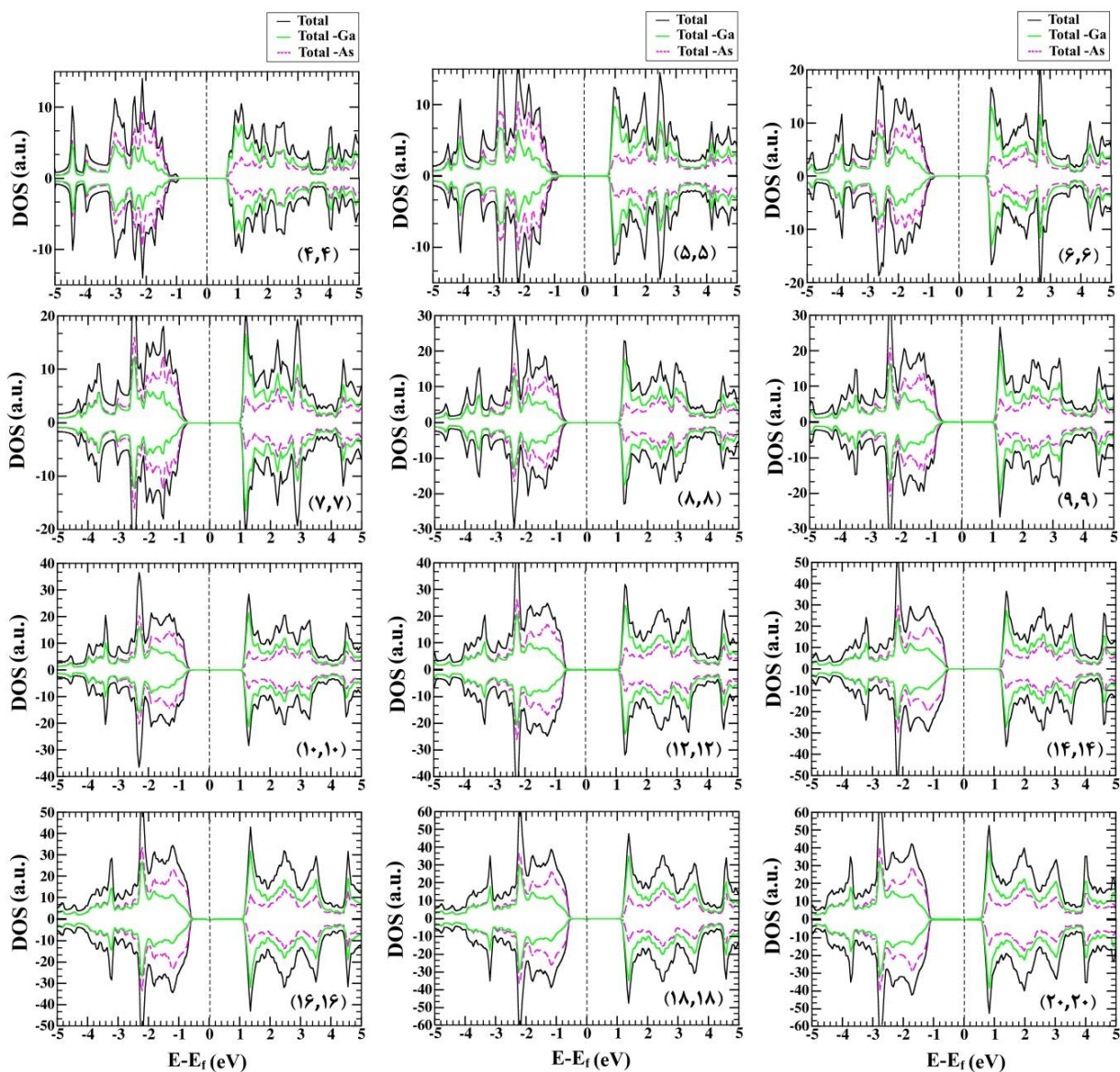
شکل ۵-۹: نمودار تغییرات گاف نواری در نانولوله‌های خالص GaAs بر حسب قطر در تقریب GGA.



شکل ۵-۱۰: نمودار تغییرات گاف نواری در نانولوله‌های خالص GaAs بر حسب قطر در تقریب LDA.

۵-۳-۲ محاسبه‌ی چگالی حالت‌های کلی (DOS) و جزئی (PDOS)

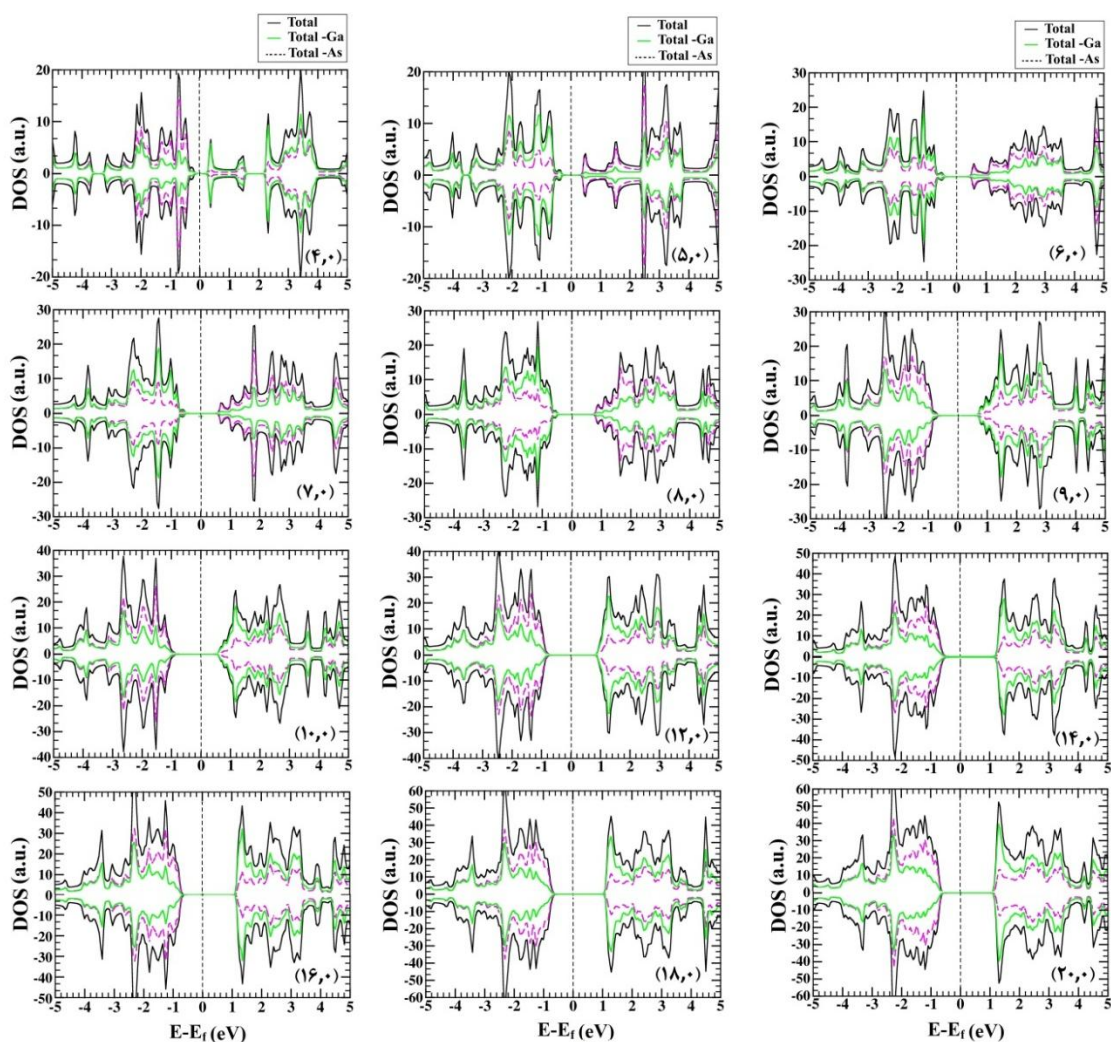
یکی دیگر از کمیت‌های محاسبه شده در این تحقیق چگالی حالت‌های جزئی و کلی برای دو نیم‌رسانای مورد نظر در حالت خالص و آرایش یافته با عناصر واسطه می‌باشد. منظور از چگالی حالت‌های یک سیستم تعداد حالت‌های الکترونی در دسترس در واحد حجم در واحد انرژی است که در اطراف یک انرژی می‌تواند وجود داشته باشد [۶۵]. در فلزات چگالی حالات برای ترازهای مجاز در نوار رسانش به طور جزئی پر است ولی در نیمه فلزات به طور جزئی خالی است و همچنین با چگالی حالت ترازهای بالاتر همپوشانی دارد. در عایقها و نیم‌رساناها، چگالی حالت‌ها مجاز نوار ظرفیت و رسانش با انرژی گاف از هم جدا شده و در دمای صفر درجه کلون نوار رسانش و ظرفیت به ترتیب کاملاً خالی و پر است. به این دلیل، نیم‌رساناها در دمای صفر درجه کلون کاملاً عایق هستند. تفاوت عمده بین عایق و نیم‌رسانا در گاف انرژی آنهاست. گاف انرژی در عایقها بزرگتر از نیم‌رساناست. متقارن بودن چگالی حالت‌های کلی یک سیستم برای اسپین بالا و پایین در تمام انرژی‌ها به این معنی می‌باشد که سیستم دارای هیچ قطبش اسپینی نمی‌باشد و سیستم هیچ خصالت مغناطیسی از خود نشان نمی‌دهد. از روی آنالیز چگالی حالت‌های کلی اتم‌ها و مقایسه آن با چگالی حالت کلی ترکیب می‌توان فهمید که کدام اتم‌ها نقش بیشتری در شکل‌گیری نوارهای انرژی (نوار ظرفیت و نوار رسانش) داشته‌اند با بررسی چگالی حالت‌های جزئی اتم‌ها حتی می‌توان سهم اوربیتالی آن‌ها در شکل‌گیری نوارهای انرژی را مشخص نمود. شکل (۴-۱۱) و شکل (۴-۱۲) بترتیب نمودار چگالی حالت‌های کلی نانولوله‌های دسته‌صندلی و زیگزاگ را نشان می‌دهد. موقعیت تراز فرمی در همه‌ی نمودارها دارای سطح انرژی صفر می‌باشد که با خط چین عمودی نشان داده شده است.



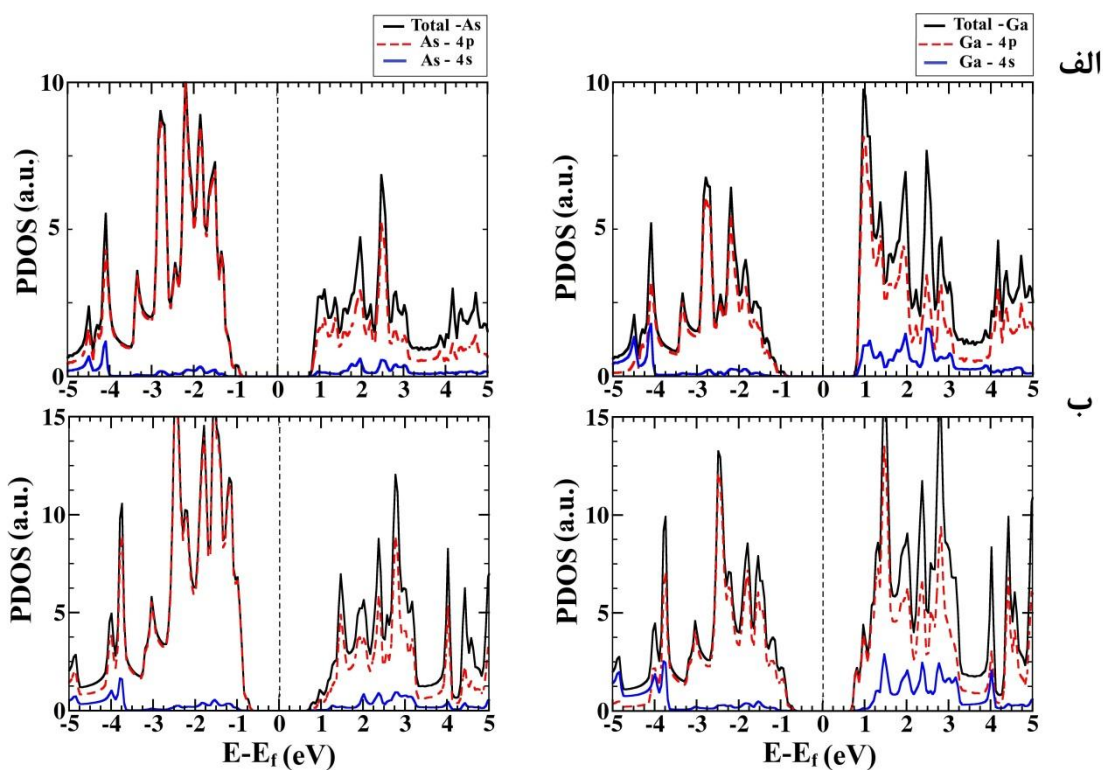
شکل ۵-۱۱: نمودار چگالی حالت‌های کل در نانولوله‌های خالص دسته‌بندی GaAs.

با توجه به دو شکل (۴-۱۱) و (۴-۱۲)، در همه نانولوله‌های دسته‌بندی و زیگزاگ، نمودار چگالی حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین کاملاً متقارن بوده و نتیجه‌ای که از رفتار چگالی حالت‌ها گرفته می‌شود این است که هیچ قطبش اسپینی مشاهده نمی‌شود و نانولوله‌های مذکور هیچ خصلت مغناطیسی از خود نشان نمی‌دهند. در نمودار چگالی حالت‌ها، اسپین بالا و اسپین پایین به ترتیب در قسمت‌های مثبت و منفی نمودار نمایش داده می‌شود. با بررسی نمودارها برای هر دو نوع نانولوله، مشخص

شد که در نوار ظرفیت سهم اتمهای As (خط نقطه چین روشن) و در نوار رسانش سهم اتمهای Ga (خط پر روشن) در چگالی حالت‌های ایجاد شده بیشتر است. چگالی حالت‌های ایجاد شده در دو نوار ناشی از هیبریداسیون اوربیتالی بین اتمهای Ga و As است. در شکل (۴-۱۳)، سهم اوربیتالی تک تک اتم‌ها برای دو اتم Ga و As برای یک نانولوله‌ی دسته‌صندلی (۵,۵) و یک نانولوله‌ی زیگزاگ (۹,۰) رسم شده است. می‌توان نتیجه گرفت که سهم اوربیتالی آن‌ها در تمام نانولوله‌ها به یک صورت می‌باشد.



شکل ۵-۱۲: نمودار چگالی حالت‌های کل در نانولوله‌های خالص زیگزاگ GaAs.



شکل ۵-۱۳: نمودار چگالی حالت‌های جزئی اتم‌های Ga و As در نانولوله‌های خالص الف) دسته‌سندلی (۵,۵) ب) زیگزاگ GaAs (۹,۰)

از نمودار شکل (۴-۱۳)، برای هر دو نانولوله دسته‌سندلی (۵,۵) و زیگزاگ (۹,۰) مشاهده می‌شود که اوربیتال‌های ۴p اتم Ga، و ۴p اتم As بیشترین سهم در چگالی حالت‌ها در نوار ظرفیت را دارند. در حالت کلی حالت‌های اطراف تراز فرمی در هر دو نوار رسانش و ظرفیت ناشی از هیبریداسیون اوربیتالی بین Ga-۴p و As-۴p می‌باشند. به دلیل تقارن در چگالی حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین در نانولوله‌های خالص GaAs فقط چگالی حالت‌های جزئی به ازای اسپین بالا رسم شده‌اند.

۴-۵ بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله‌های GaAs آرایش یافته با عناصر واسطه فلزی

از نانوساختارهای GaAs، آرایش عناصر واسطه بیشتر بر روی نانوسیم‌های GaAs صورت گرفته است [۲۳]، با توجه به ویژگی ساختاری، خواص جالب نانولوله‌ها قصد داریم به بررسی خواص الکترونی و

مغناطیسی آن در حضور عناصر واسطه‌ی مغناطیسی است. لازم به ذکر است که تا کنون گزارشی مبنی بر شبیه‌سازی نانولوله GaAs خالص و آلاینده شده با استفاده از نظریه تابعی چگالی ارائه نشده است.. نانولوله‌ی مورد بررسی در این بخش از پایان نامه: نانولوله‌های زیگزاگ (۵,۰) و (۹,۰) و نانولوله‌های دسته‌صندلی (۳,۳) و (۵,۵) می‌باشند. از بین نانولوله‌های مورد بررسی، (۳,۳) و (۵,۰) دارای قطر تقریباً یکسان در قطرهای پایین و نانولوله‌های (۵,۵) و (۹,۰) نیز دارای همین ویژگی یکسان در قطرهای بالاتر می‌باشد. در جدول (۴-۹) برای نمونه‌های آلاینش یافته نیز، جهت دقت کافی در محاسبات، پارامترهای ورودی مناسب را تعیین کرده‌ایم.

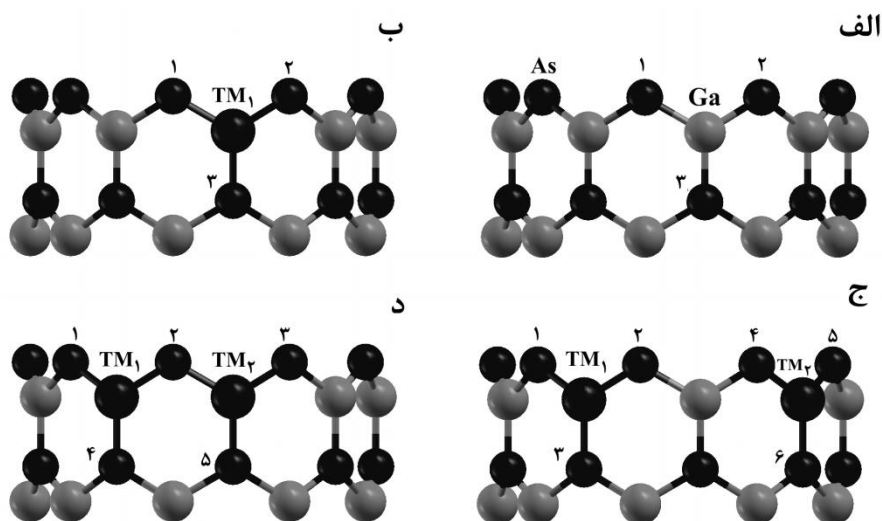
جدول ۵-۹: پارامترهای ورودی جهت محاسبات.

تقریب کد	⇒	شبه پتانسیل	⇒	آرایش لایه ظرفیت اتم As	⇒	$4s^2 4p^3$
تابعی همبستگی-تبادلی	⇒	LDA(CA)	⇒	آرایش لایه ظرفیت اتم Sc	⇒	$3d^1 4s^2$
بردار شبکه بندی فضای K	⇒	$1 \times 1 \times 100$	⇒	آرایش لایه ظرفیت اتم Ti	⇒	$3d^2 4s^2$
انرژی قطع	⇒	50.0 Ry	⇒	آرایش لایه ظرفیت اتم V	⇒	$3d^3 4s^2$
همگرایی نیرو	⇒	$\leq 0.005 \frac{eV}{\text{\AA}}$	⇒	آرایش لایه ظرفیت اتم Cr	⇒	$3d^5 4s^1$
روش دینامیک مولکولی (MD)	⇒	شیب همیوگ (CG)	⇒	آرایش لایه ظرفیت اتم Mn	⇒	$3d^5 4s^2$
مجموعه پایه‌ها	⇒	۲گانه قطبیده (DZP)	⇒	آرایش لایه ظرفیت اتم Fe	⇒	$3d^6 4s^2$
همگرایی چگالی بار	⇒	10^{-5}	⇒	آرایش لایه ظرفیت اتم Co	⇒	$3d^7 4s^2$
آرایش لایه ظرفیت اتم Ga	⇒	$3d^10 4s^2 4p^1$	⇒	آرایش لایه ظرفیت اتم Ni	⇒	$3d^8 4s^2$

۱-۴-۵ محاسبات نانولوله‌ی آلاینش یافته GaAs (۹,۰) با عناصر واسطه

برای آلاینش نانولوله‌ی GaAs (۹,۰)، از یک سلول واحد شامل ۳۶ اتم (۱۸ اتم Ga و ۱۸ اتم As) استفاده شده که بوسیله عناصر واسطه مغناطیسی (Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) آلاینش داده شدند. در این پژوهش عناصر واسطه جایگزین اتم‌های Ga شده است. آلاینش صورت گرفته با غلظت‌های ۵/۵۵٪ و ۱۱/۱۱٪ در سلول می‌باشد که با جایگزینی یک و دو اتم صورت گرفته است. آلاینش ۵/۵۵٪ و ۱۱/۱۱٪ در حضور اتم‌های Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni در دو فاز فرومغناطیس و آنتی

فرومغناطیس در دو وضعیت متفاوت (۱) و (۲) انجام گرفت. ساختار سلول خالص، نمونه‌های آرایش یافته با غلظت‌های ۵۵/۵٪ و ۱۱/۱٪ در دو وضعیت دور و نزدیک بترتیب (۱) و (۲)، در شکل (۴-۱۴) نمایش داده شده است. موقعیت اتم‌های مغناطیسی با TM_1 و TM_2 و موقعیت آرسناید‌های اطراف آن‌ها با اعداد مشخص گردیده‌اند.



شکل ۱۴-۵: الف) سلول خالص، ب) آرایش یافته ۵۵/۵٪، ج) آرایش یافته ۱۱/۱٪ وضعیت دور (۱)، د) آرایش یافته ۱۱/۱٪ وضعیت نزدیک (۲).

۱-۴-۵ بررسی پارامترهای ساختاری نانولوله‌های آرایش یافته GaAs (۹,۰)

پس از تعیین پارامترهای ورودی مناسب جهت انجام محاسبات، ابتدا باید ساختار مورد نظر را بهینه کرد و مقدار بهینه شده‌ی پارامترهای ساختاری از جمله ثابت‌های شبکه و طول پیوندها را بدست آورد. در جدول (۴-۱۰) تا (۴-۱۳) مقادیر بهینه شده‌ی ثابت شبکه‌ی محوری C و طول پیوندهای عناصر واسطه مغناطیسی (TM) و As های اطرافش به ازای غلظت ۵۵/۵٪، همچنین طول پیوند بین دو اتم TM در سلول واحد نانولوله‌ی آرایش یافته در جدول (۴-۱۱) و (۴-۱۲) با غلظت ۱۱/۱٪ به ترتیب برای دو

وضعیت (۱) و (۲) گزارش شده‌اند، در جدول (۴-۱۳) نیز مقادیر بهینه‌شده‌ی شبکه‌ی محوری C و طول پیوند Ga و As های اطرافش در سلول نانولوله‌ی خالص گزارش شده است. با مقایسه‌ی ثابت شبکه‌های محوری (C) نانولوله‌های آرایش یافته، شاهد کاهش این پارامتر نسبت به نمونه‌ی خالص می‌باشیم.

جدول ۵-۱۰: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs (۹,۰) با غلظت ۵/۵٪.

نمونه آرایش	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
پارامتر شبکه C (Å)	۶/۶۶۹	۶/۷۹۲	۶/۸۰۱	۶/۷۸۷	۶/۷۷۹	۶/۷۹۳	۶/۷۶۹	۶/۷۴۱
$d_{TM1-As1}$ (Å)	۲/۶۶۷	۲/۴۲۵	۲/۳۸۱	۲/۴۸۲	۲/۴۸۴	۲/۳۵۷	۲/۲۷۶	۲/۳۵۵
$d_{TM1-As2}$ (Å)	۲/۶۶۹	۲/۴۲۴	۲/۳۸	۲/۴۸۴	۲/۴۸۴	۲/۳۵۹	۲/۲۷۵	۲/۳۵۵
$d_{TM1-As3}$ (Å)	۲/۶۱۵	۲/۴۵۳	۲/۴۳۸	۲/۴۹۹	۲/۵۱۲	۲/۳۷۳	۲/۳۰۳	۲/۳

جدول ۵-۱۱: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs (۹,۰) با غلظت ۱۱/۱۱٪ در وضعیت دور (۱).

نمونه آرایش	پارامتر شبکه C (Å)	$d_{TM1-TM2}$ (Å)	$d_{TM1-As1}$ (Å)	$d_{TM1-As2}$ (Å)	$d_{TM1-As3}$ (Å)	$d_{TM2-As4}$ (Å)	$d_{TM2-As5}$ (Å)	$d_{TM2-As6}$ (Å)
Sc	۶/۵۳۷	۴/۳۰۴	۲/۶۵۲	۲/۶۶	۲/۶۱۲	۲/۶۵۱	۲/۶۶۲	۲/۶۱۲
Ti	۶/۵۹۱	۴/۳۱۹	۲/۴۷	۲/۵۰۷	۲/۴۵	۲/۴۷	۲/۵۰۶	۲/۴۵
V	۶/۶۰۷	۴/۱۵۷	-----	۲/۴۴۸	۲/۵	۲/۷۸۵	۲/۵۸۵	۲/۸۱۷
Cr	۶/۶۷۹	۴/۵۳۳	۲/۵۰۲	۲/۵۸۴	۲/۵۸۴	۲/۵۰۱	۲/۵۸۵	۲/۵۸۱
Mn	۶/۷۳۸	۶/۷۱۱	۲/۴۸۲	۲/۴۸۴	۲/۵۱۸	۲/۴۸۳	۲/۴۸۳	۲/۵۱۹
Fe	۶/۷۷۳	۶/۵۴۲	۲/۳۶	۲/۳۶۱	۲/۳۷۶	۲/۳۶۲	۲/۳۶۳	۲/۳۷۵
Co	۶/۷۱۷	۶/۶۶۶	۲/۲۷۲	۲/۲۷۲	۲/۲۸۳	۲/۲۷۲	۲/۲۷۲	۲/۲۸۴
Ni	۶/۳۸	۴/۱۹۴	۲/۵۲۶	۲/۴۳۶	۲/۳۴۸	۲/۴۴۹	۲/۴۴	۲/۳۵۲

جدول ۵-۱۲: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۹,۰) با غلظت ۱۱/۱۱٪ در وضعیت نزدیک (۲).

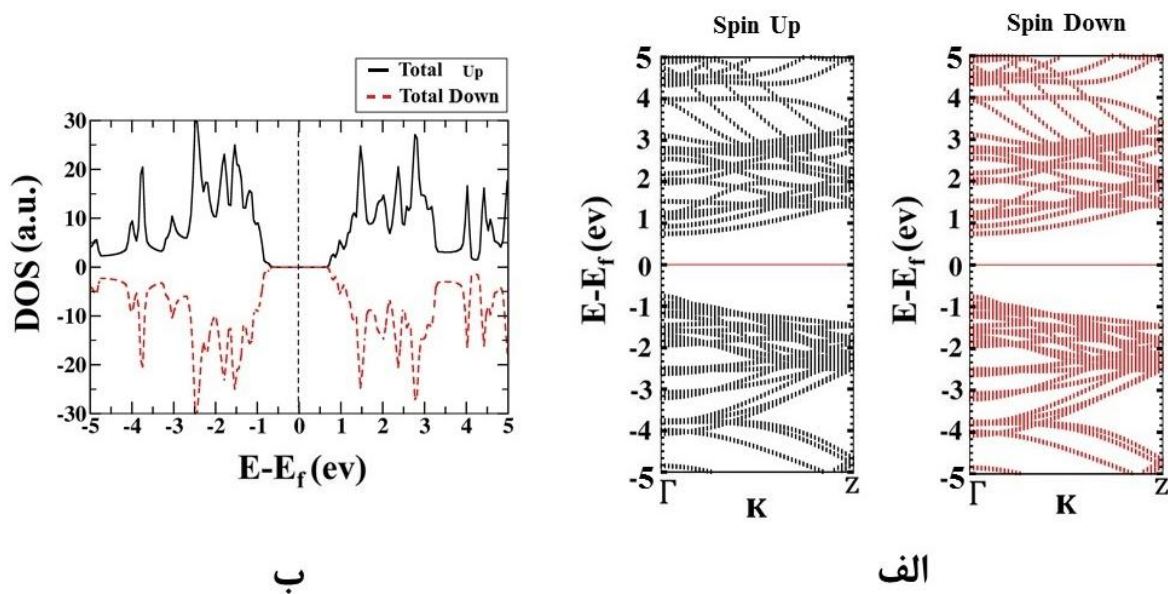
نمونه آلایش	پارامتر شبکه C (Å)	$d_{TM1-TM2}$ (Å)	$d_{TM1-As1}$ (Å)	$d_{TM1-As2}$ (Å)	$d_{TM1-As3}$ (Å)	$d_{TM2-As4}$ (Å)	$d_{TM2-As5}$ (Å)
Sc	۶/۴۸۹	۳/۷۵۶	۲/۶۱	۲/۶۱	۲/۶	۲/۶۰۸	۲/۶۱۵
Ti	۶/۷۳۴	۳/۹۳۲	۲/۵۰۶	۲/۴۲۷	۲/۳۸۵	۲/۵۰۶	۲/۴۲۳
V	۶/۷۵۷	۳/۹۲۹	۲/۴۸۶	۲/۴۰۴	۲/۳۹۶	۲/۴۸۶	۲/۴۰۴
Cr	۶/۷۵۱	۳/۵۳	۲/۵۲	۲/۴۶۹	۲/۴۹۶	۲/۵۲	۲/۴۶
Mn	۶/۸۱۲	۲/۹۹۲	۲/۴۷	۲/۶۲۱	۲/۴۶۱	۲/۴۶۹	۲/۶۲۲
Fe	۶/۷۵۸	۲/۷۳	۲/۳۶۵	۲/۳۶۹	۲/۳۷۳	۲/۳۶۷	۲/۳۶۸
Co	۶/۷۴۴	۳/۱۶۴	۲/۳۰۲	۲/۲۲۵	۲/۱۶۷	۲/۳۰۱	۲/۲۲۵
Ni	۶/۷۱۶	۲/۶۷۹	۲/۳۴۸	-----	-----	۲/۴۰۵	۲/۶۵۸

جدول ۵-۱۳: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌ی خالص GaAs (۹,۰).

سلول خالص (۹,۰)	پارامتر شبکه C (Å)	d_{Ga-As1} (Å)	d_{Ga-As2} (Å)	d_{Ga-As3} (Å)
	۶/۸۱۵	۲/۳۸۸	۲/۳۸۸	۲/۳۹۶

۵-۴-۱-۲ بررسی خواص الکترونی نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۹,۰)

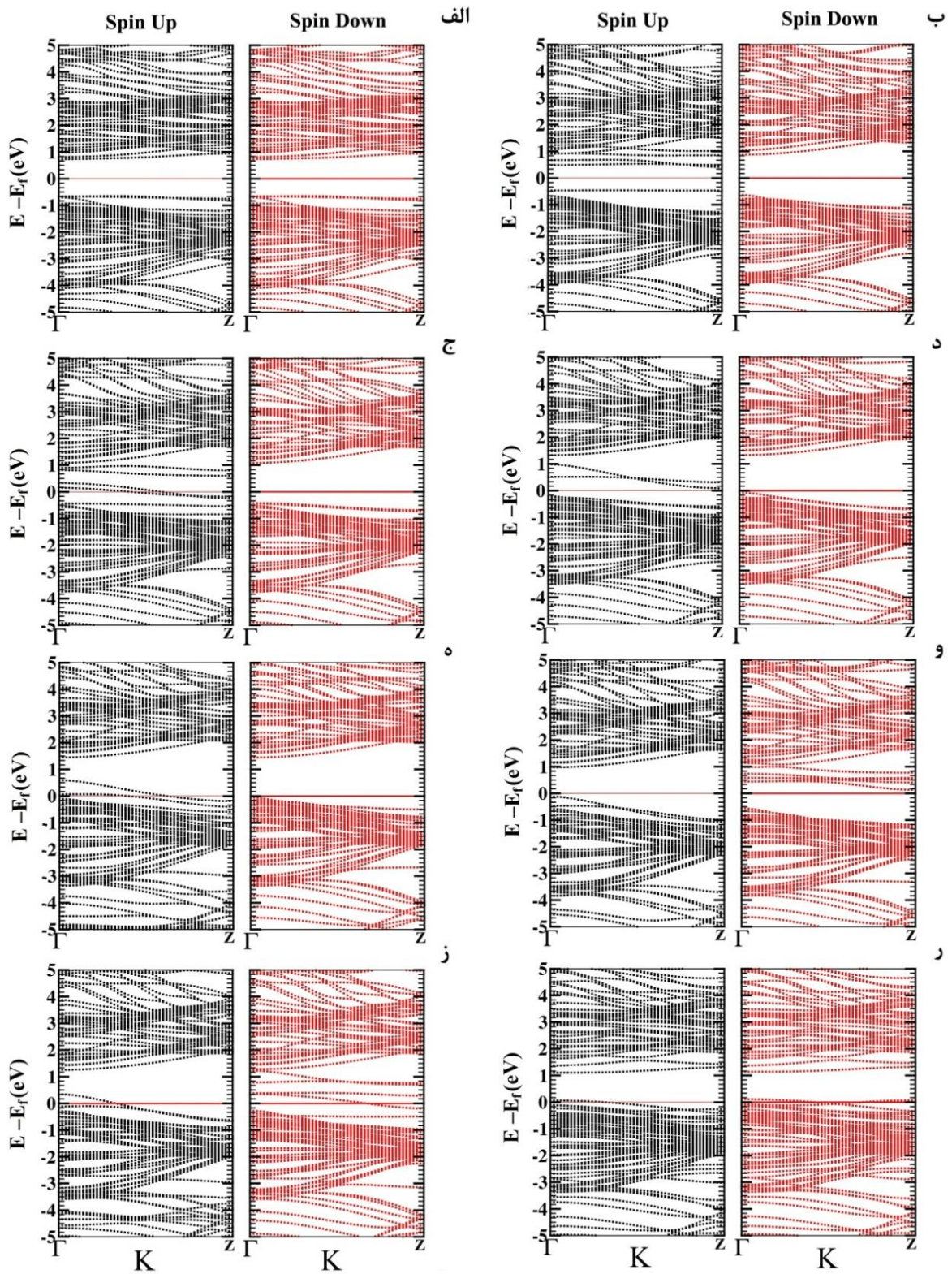
در این قسمت به بررسی خواص الکترونی شامل ساختار نواری و چگالی حالت‌های نانولوله‌ی (۹,۰) آلایش یافته پرداخته شده است. در شکل (۴-۱۵)، با توجه به ساختار نواری، اندازه گاف انرژی برای نمونه خالص به ازای هر دو اسپین بالا و پایین برابر $eV 1/5$ به صورت مستقیم به دست آمد، موقعیت تراز فرمی برای نمونه خالص این نانولوله در انرژی $eV 3/9394$ بدست آمد. همچنین با توجه به متقارن بودن چگالی حالت‌ها و گشتاور مغناطیسی (صفر) بدست آمده می‌توان نتیجه گرفت نانولوله‌ی خالص (۹,۰) دارای خاصیت مغناطیسی نمی‌باشد.



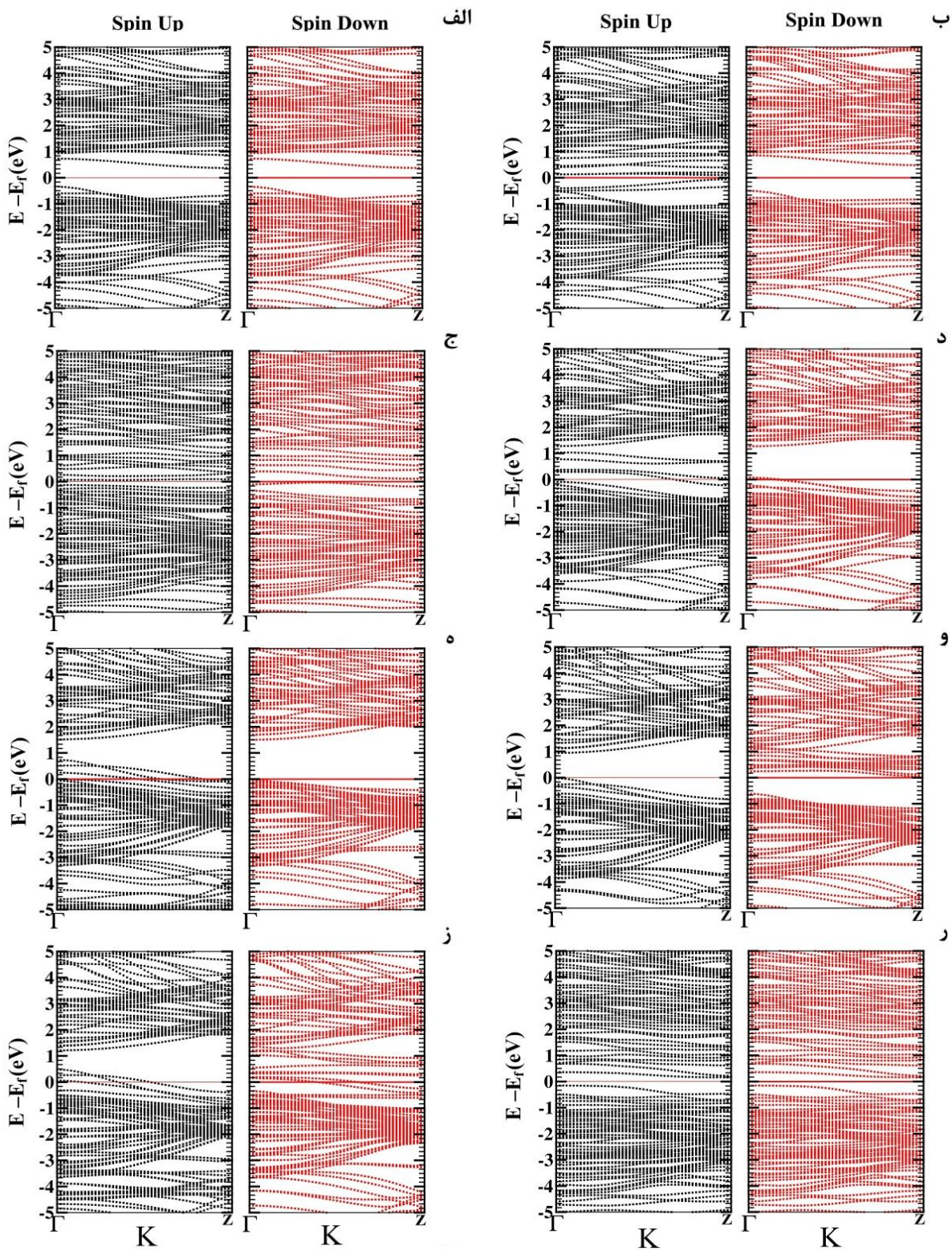
شکل ۵-۱۵: نمودار الف) ساختار نواری و ب) چگالی حالت نانولوله‌ی خالص (۹۰۰).

۵-۴-۱-۲-۱-۴-۵ ساختار نواری نانولوله‌ی GaAs (۹,۰) آرایش یافته

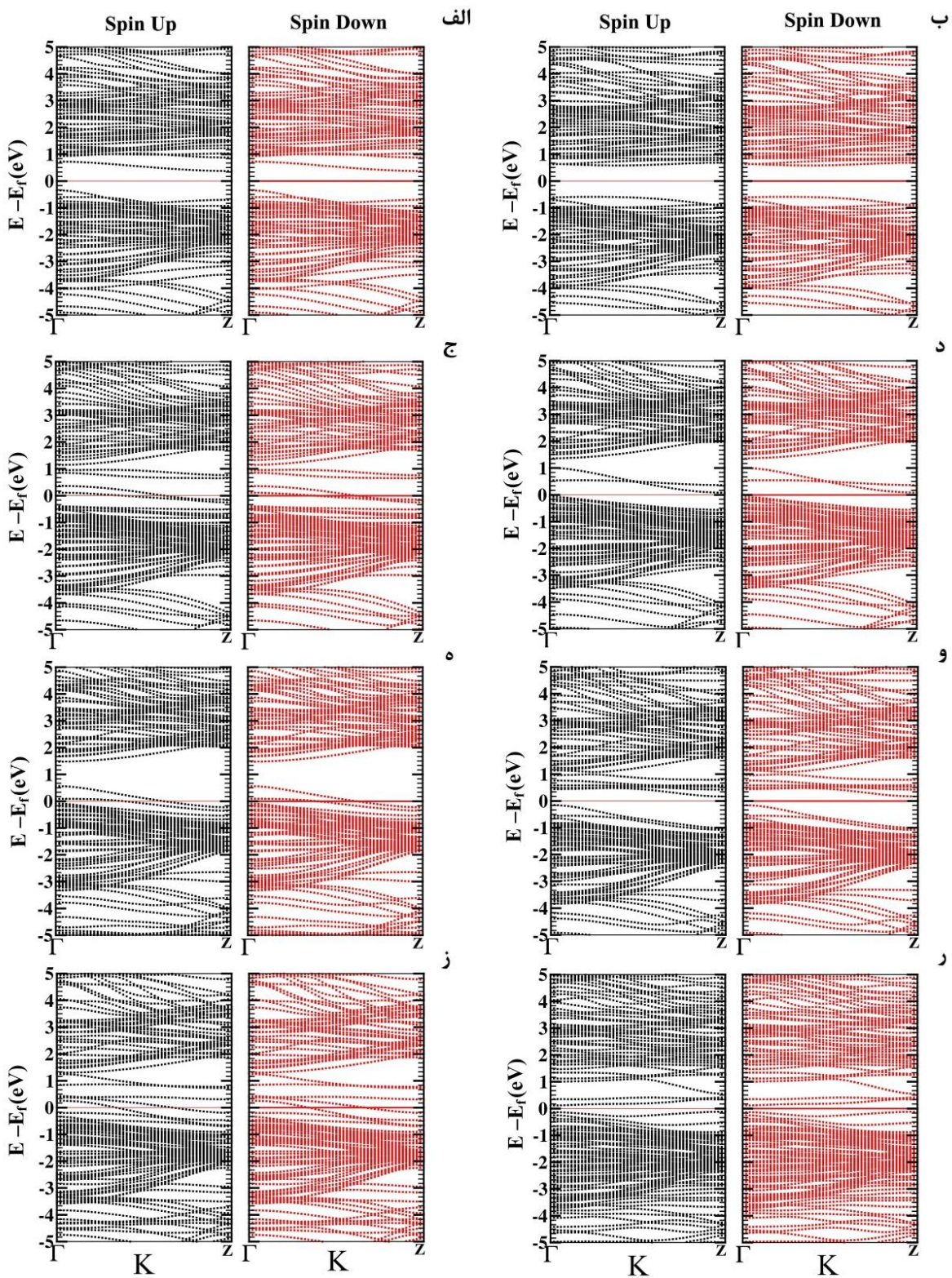
در شکل‌های (۴-۱۶) نمودار ساختار نواری نمونه‌های آرایش یافته با غلظت ۵/۵۵٪، (۴-۱۷) (۱۱/۱۱٪ در فاز فرومغناطیس-وضعیت (۱))، (۴-۱۸) (۱۱/۱۱٪ در فاز آنتی فرومغناطیس-وضعیت (۱))، (۴-۱۹) (۱۱/۱۱٪ در فاز فرومغناطیس-وضعیت (۲))، (۴-۲۰) (۱۱/۱۱٪ در فاز آنتی فرومغناطیس-وضعیت (۲)) نمایش داده شده‌اند. برای ساختار با آرایش ۱۱/۱۱٪ به دلیل این که تعداد آلاینده‌ها زوج بود محاسبات را در دو فاز فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس انجام دادیم.



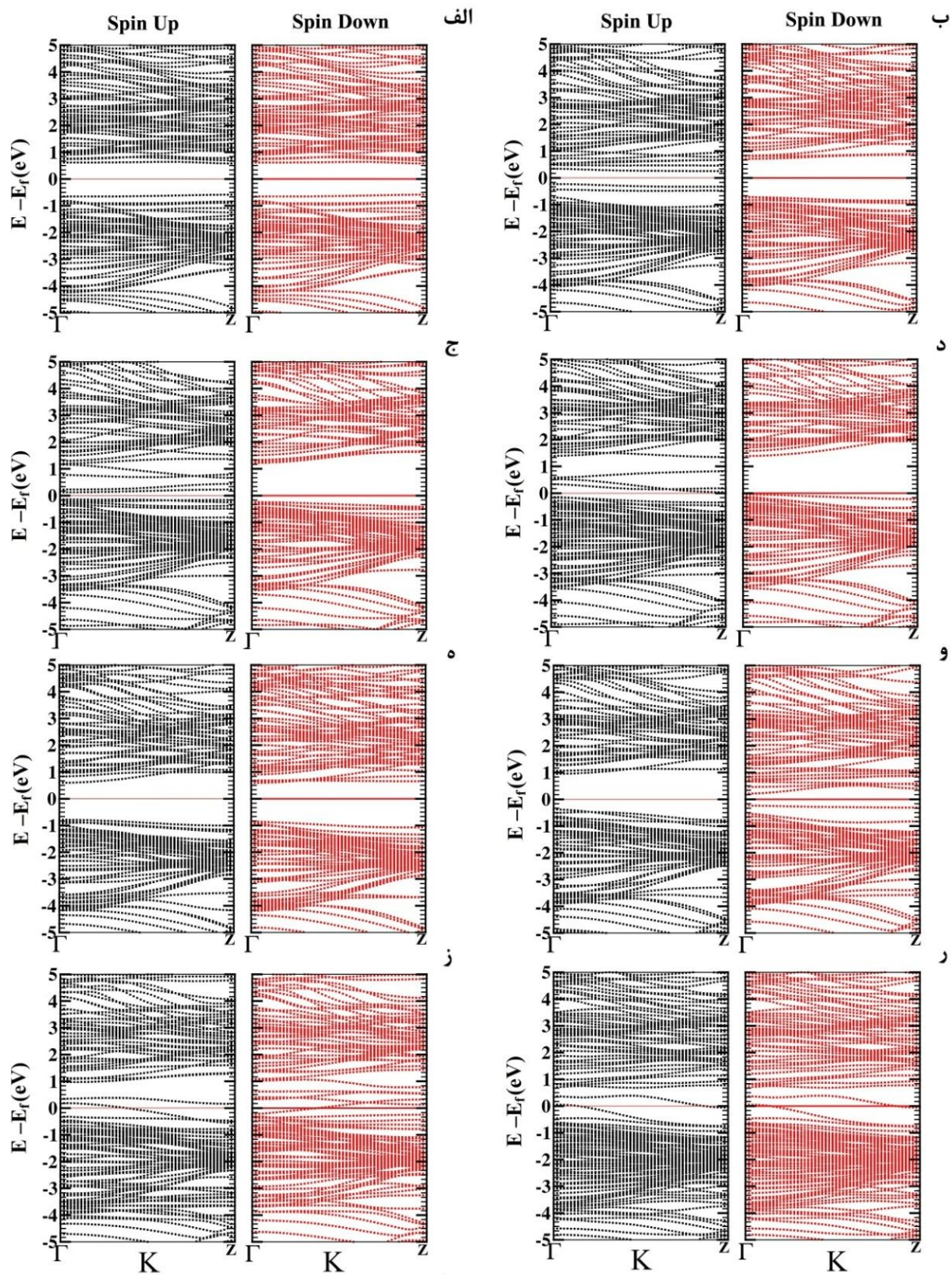
شکل ۵-۱۶: ساختار نواری آلیش ۵/۵٪ الف) آلیش Sc ب) آلیش Ti ج) آلیش V د) آلیش Cr ه) آلیش Mn و) آلیش Ni ز) آلیش Co ح) آلیش Fe



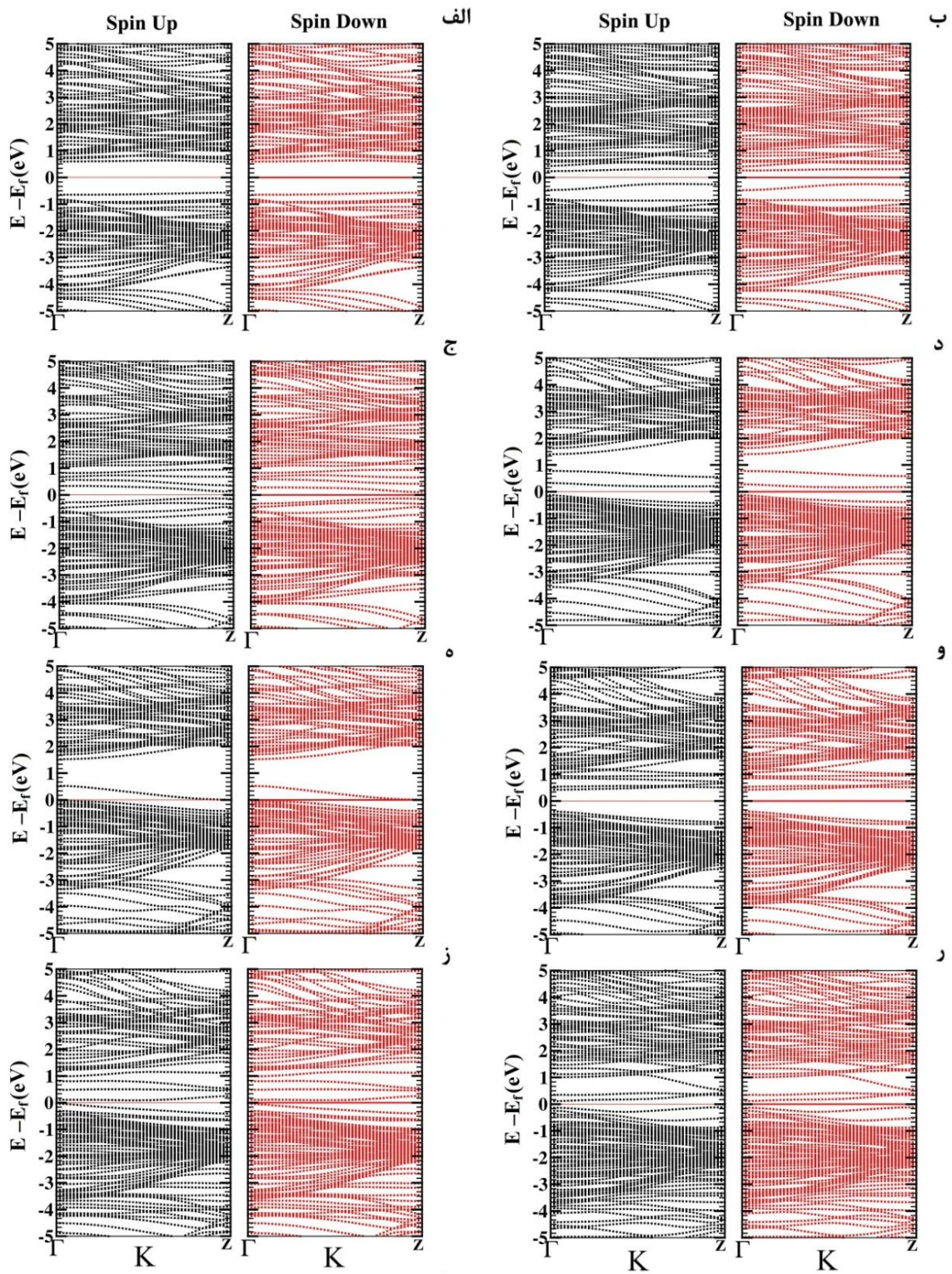
شکل ۵-۱۷: ساختار نواری آلیش ۱۱/۱۱٪ فاز فرومغناطیس-وضعیت دور (الف) آلیش Sc (ب) آلیش Ti (ج) آلیش V (د) آلیش Cr (ه) آلیش Mn (و) آلیش Fe (ز) آلیش Co (ح) آلیش Ni



شکل ۵-۱۸: ساختار نواری آلیش ۱۱/۱۱٪ فاز آنتی فرومغناطیس-وضعیت دور (۱) الف) آلیش Sc (ب) آلیش Ti (ج) آلیش V (د) آلیش Cr (ه) آلیش Mn (و) آلیش Fe (ز) آلیش Co (ر) آلیش Ni



شکل ۵-۱۹: ساختار نواری آلیش ۱۱/۱۱٪ فاز فرومغناطیس-وضعیت نزدیک (۲) الف) آلیش Sc (ب) آلیش Ti (ج) آلیش V (د) آلیش Cr (ه) آلیش Mn (و) آلیش Fe (ز) آلیش Co (ح) آلیش Ni.



شکل ۵-۲۰: ساختار نواری آلیش ۱۱/۱۱٪ فاز آنتی فرومغناطیس-وضعیت نزدیک (۲) الف) آلیش Sc ب) آلیش Ti ج) آلیش V د) آلیش Cr ه) آلیش Mn و) آلیش Fe ز) آلیش Co ح) آلیش Ni

با آلیش نانولوله‌ی (۹,۰) نسبت به نمونه خالص نانولوله شاهد تغییراتی در ساختار نواری می‌باشیم، تغییر شکل در ساختار نواری و اندازه گاف انرژی آن به ازای هر دو اسپین بالا و پایین از عمده این تغییرات هستند. مقدار و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین، موقعیت تراز فرمی و رفتار الکترونیکی در نمونه‌های آلیش یافته در جداول (۴-۱۴) تا (۴-۱۸) گزارش شده‌اند. در جداول مربوطه (م = گاف نواری مستقیم، غ = م: گاف نواری غیرمستقیم) و (DMS = نیم‌رسانای مغناطیسی رقیق شده، HM = نیم‌فلز، MM = فلز مغناطیسی، NMM = فلز غیرمغناطیسی، NMS = نیم‌رسانای غیرمغناطیسی) اشاره دارند.

جدول ۵-۱۴: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله (۹,۰) آلیش یافته با غلظت ۵۵/۵٪ بر حسب (eV).

نمونه آلیش	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
گاف اسپین بالا	۰	۰/۸۷ غ م	۰	۰/۳ م	۰	۱/۰۹ م	۰	۰
گاف اسپین پایین	۰	۱/۵ م	۱/۵ م	۱/۳۹ م	۱/۵ م	۰/۶۹ غ م	۰	۰
موقعیت تراز فرمی	-۳/۹۷	-۴/۶۸۰	-۴/۲۳۳	-۴/۴۹۸	-۴/۶۳۱	-۴/۱۴۸	-۴/۴۲۳	-۴/۵۴۳
رفتار الکترونیکی	NMS	DMS	HM	DMS	HM	DMS	MM	MM

جدول ۵-۱۵: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله (۹,۰) آلیش یافته با غلظت ۱۱/۱٪ فاز فرومغناطیس - وضعیت دور (۱) بر حسب (eV).

نمونه آلیش	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
گاف اسپین بالا	۰/۷۱ غ م	۰/۱۵ غ م	۰	۰	۰	۰/۷۷۹ م	۰	۰/۳۱ غ م
گاف اسپین پایین	۰/۷۱ غ م	۰/۹۷ غ م	۰	۰	۱/۴۹ م	۰/۶۶ غ م	۰	۰/۳ غ م
موقعیت تراز فرمی	-۴/۱۰۱	-۳/۹۷۳	-۳/۸۲۱	-۴/۳۴۷	-۴/۶۵۱	-۴/۱	-۴/۳۵۴	-۳/۷۷۷
رفتار الکترونیکی	NMS	DMS	MM	MM	HM	DMS	MM	NMS

جدول ۵-۱۶: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله (۹۰۰) آرایش یافته با غلظت ۱۱/۱۱٪ فاز آنتی فرومغناطیس- وضعیت دور (۱) بر حسب (eV).

نمونه آرایش	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
گاف اسپین بالا	۰/۷۱ غ م	۱/۱۶ م	۰	۰/۱۶ غ م	۰	۰/۳ غ م	۰	۰
گاف اسپین پایین	۰/۷۱ غ م	۱/۱۶ م	۰	۰/۱۶ غ م	۰	۰/۳ غ م	۰	۰
موقعیت تراز فرمی	-۴/۰۹۵	-۳/۹۶۲	-۴/۲۳۳	-۴/۵۰۸	-۴/۶۱۹	-۴/۱۱	-۴/۴۰۸	-۴/۳۲۸
رفتار الکترونیکی	NMS	NMS	NMM	NMS	NMM	NMS	NMM	NMM

جدول ۵-۱۷: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله (۹۰۰) آرایش یافته با غلظت ۱۱/۱۱٪ فاز فرومغناطیس- وضعیت نزدیک (۲) بر حسب (eV).

نمونه آرایش	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
گاف اسپین بالا	۱/۱۵۳ م	۰/۴۸ م	۰/۲۵ م	۰	۱/۳۷ م	۱/۳۳ م	۰	۰
گاف اسپین پایین	۱/۱۵ م	۱/۴ م	۱/۴۶۸ م	۱/۴۲۶ م	۱/۴۴ م	۰/۴۴ م	۰	۰
موقعیت تراز فرمی	-۳/۸۰۷	-۴/۰۲۲	-۴/۴۷	-۴/۵۳۲	-۳/۷۴۳	-۴/۰۹۲	-۴/۲۴	-۴/۰۰۳
رفتار الکترونیکی	NMS	DMS	DMS	HM	DMS	DMS	MM	NMM

جدول ۵-۱۸: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله (۹۰۰) آرایش یافته با غلظت ۱۱/۱۱٪ فاز آنتی فرومغناطیس- وضعیت نزدیک (۲) بر حسب (eV).

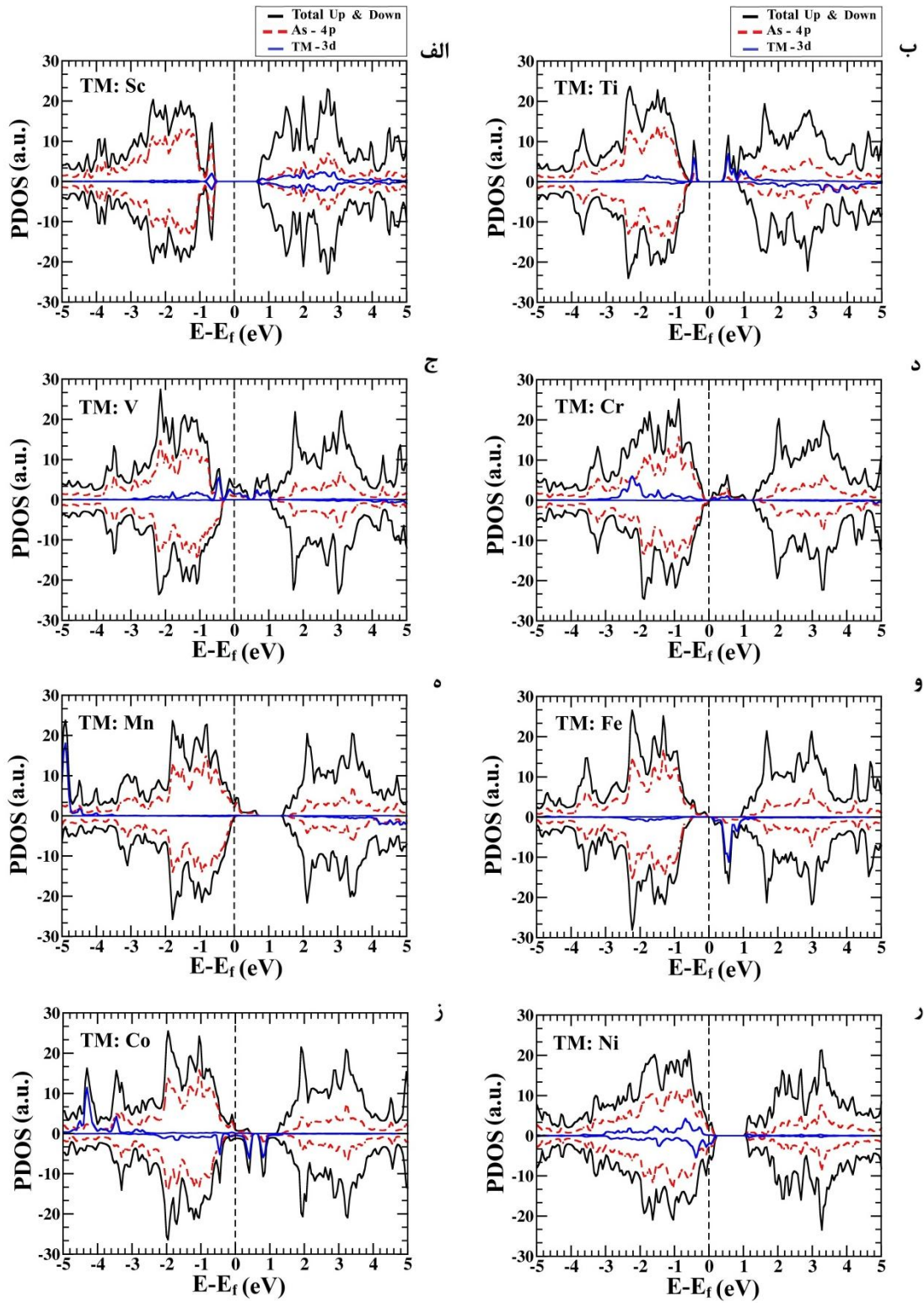
نمونه آرایش	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
گاف اسپین بالا	۱/۱۵۳ م	۰/۴۷ غ م	۰/۲۶۳ م	۰/۳۲ غ م	۰	۰/۸ م	۰/۱۲ م	۰/۲۲ م
گاف اسپین پایین	۱/۱۵ م	۰/۴۷ غ م	۰/۲۴ م	۰/۳۲ غ م	۰	۰/۸ م	۰/۱۴ م	۰/۲۲ م
موقعیت تراز فرمی	-۳/۷۹۴	-۳/۸۲۹	-۳/۹۸۸	-۴/۵۱۷	-۴/۶۲	-۴/۱۶۲	-۴/۳۵۷	-۴/۱۵۹
رفتار الکترونیکی	NMS	NMS	NMS	NMS	NMM	NMS	NMS	NMS

تفاوت در اندازه‌ی گاف انرژی بین نوار اسپین بالا و اسپین پایین ناشی از شکافتگی اسپینی تبدیلی می‌باشد. اختلاف گاف نواری بین دو حالت اسپین بالا و اسپین پایین اطراف تراز فرمی، همچنین گشتاور مغناطیسی غیر صفر باعث ایجاد یک قطبش اسپینی می‌گردد که نشان دهنده‌ی سهم متفاوت

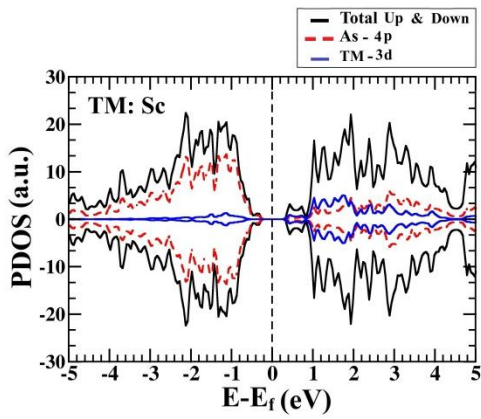
الکترون‌های با اسپین بالا و اسپین پایین در خواص تراپردی است. حالت نیم فلزی با قطبش اسپینی ۱۰۰٪ به ازای آلایش‌های V و Mn ۵۵/۵٪ و همچنین ۱۱/۱۱٪ Mn در وضعیت دور (۱) و ۱۱/۱۱٪ Cr در وضعیت نزدیک (۲) با آرایش اسپینی به صورت فرومغناطیسی مشاهده شد.

۵-۴-۱-۲-۲ بررسی چگالی حالت‌های نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۹,۰)

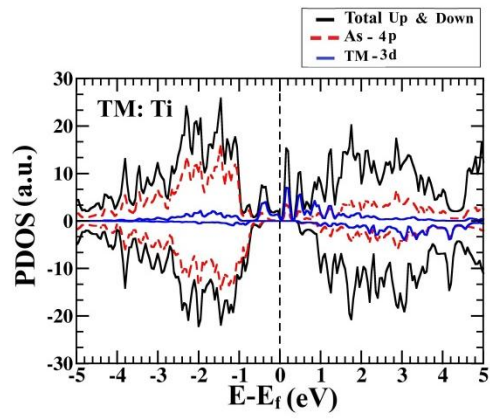
در این قسمت به بررسی چگالی حالت‌های نمونه‌های آلایش یافته می‌پردازیم. بررسی‌ها نشان می‌دهد که حالت‌های ایجاد شده اطراف تراز فرمی که باعث قطبش اسپینی می‌گردد ناشی از هیبریداسیون بین حالت‌های اوربیتالی $TM-3d$ و $As-4p$ های اطراف آن می‌باشد. برای بررسی دقیقتر چگالی حالت‌های کلی و جزئی نمونه‌های آلاییده شده ۵۵/۵٪ (شکل ۴-۲۱)، ۱۱/۱۱٪ فاز فرومغناطیس-وضعیت دور (۱) (شکل ۴-۲۲)، ۱۱/۱۱٪ فاز آنتی‌فرومغناطیس-وضعیت دور (۱) (شکل ۴-۲۳)، ۱۱/۱۱٪ فاز فرومغناطیس-وضعیت نزدیک (۲) (شکل ۴-۲۴) و ۱۱/۱۱٪ فاز آنتی‌فرومغناطیس-وضعیت نزدیک (۲) (شکل ۴-۲۵) رسم شده است. چگالی حالت‌های جزئی رسم شده شامل حالت‌های اوربیتالی $TM-3d$ و $As-4p$ ها در آلایش ۵۵/۵٪ و ۱۱/۱۱٪ (در دو وضعیت فرومغناطیسی) می‌باشند که بیشترین سهم را حالت‌های اطراف تراز فرمی ایجاد کرده‌اند.



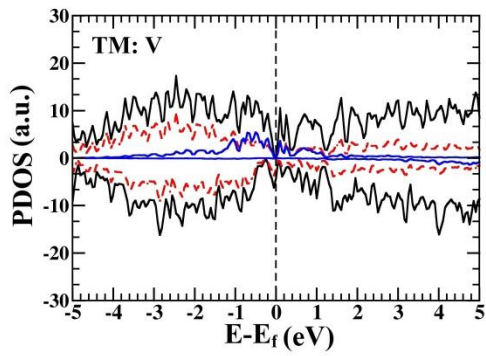
شکل ۵-۲۱: چگالی حالت‌های کلی و جزئی (۳d-TM و ۴p-As) آرایش یافته ۵۵/۵٪ الف) Sc (ب) Ti (ج) V (د) Cr (ه) Mn (و) Fe (ز) Co (ح) Ni.



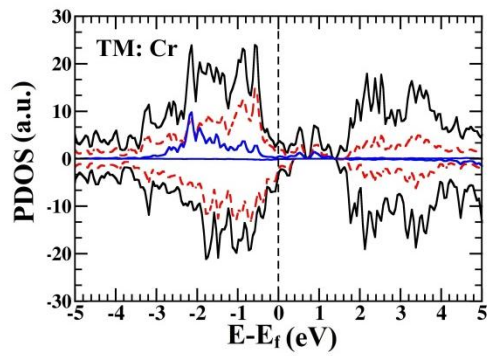
الف



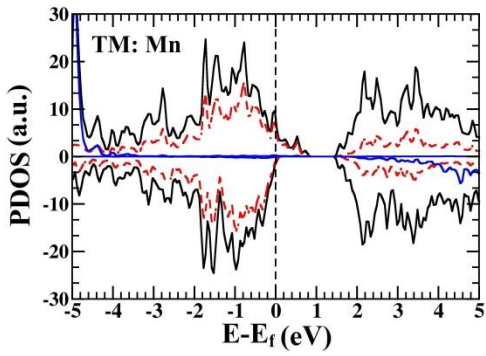
ب



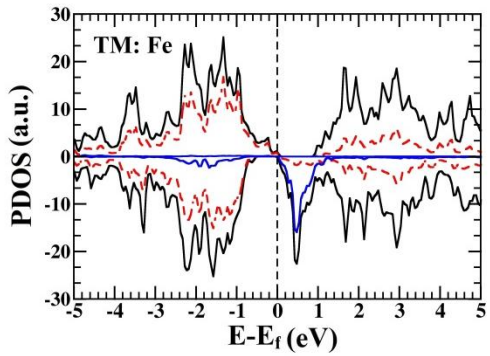
ج



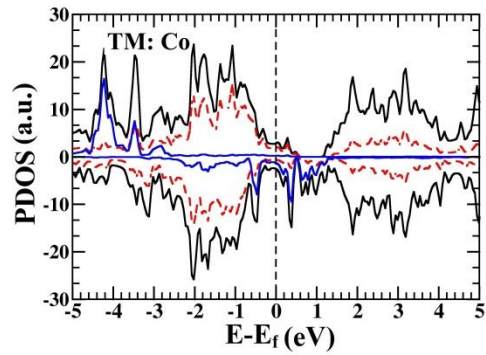
د



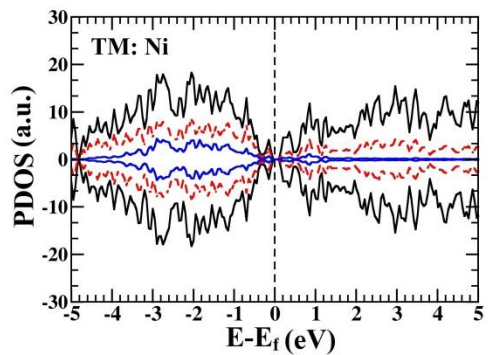
ه



و

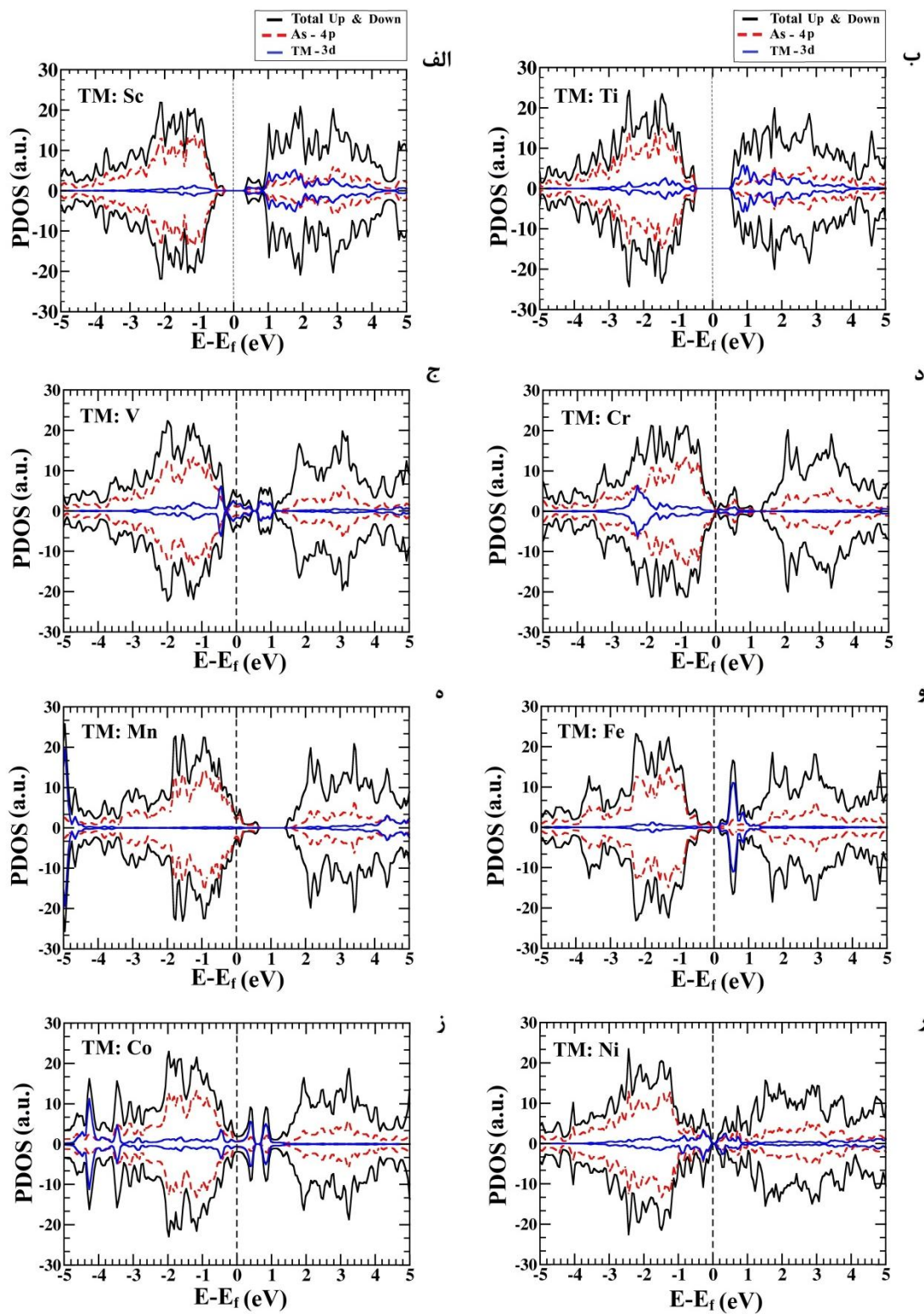


ز

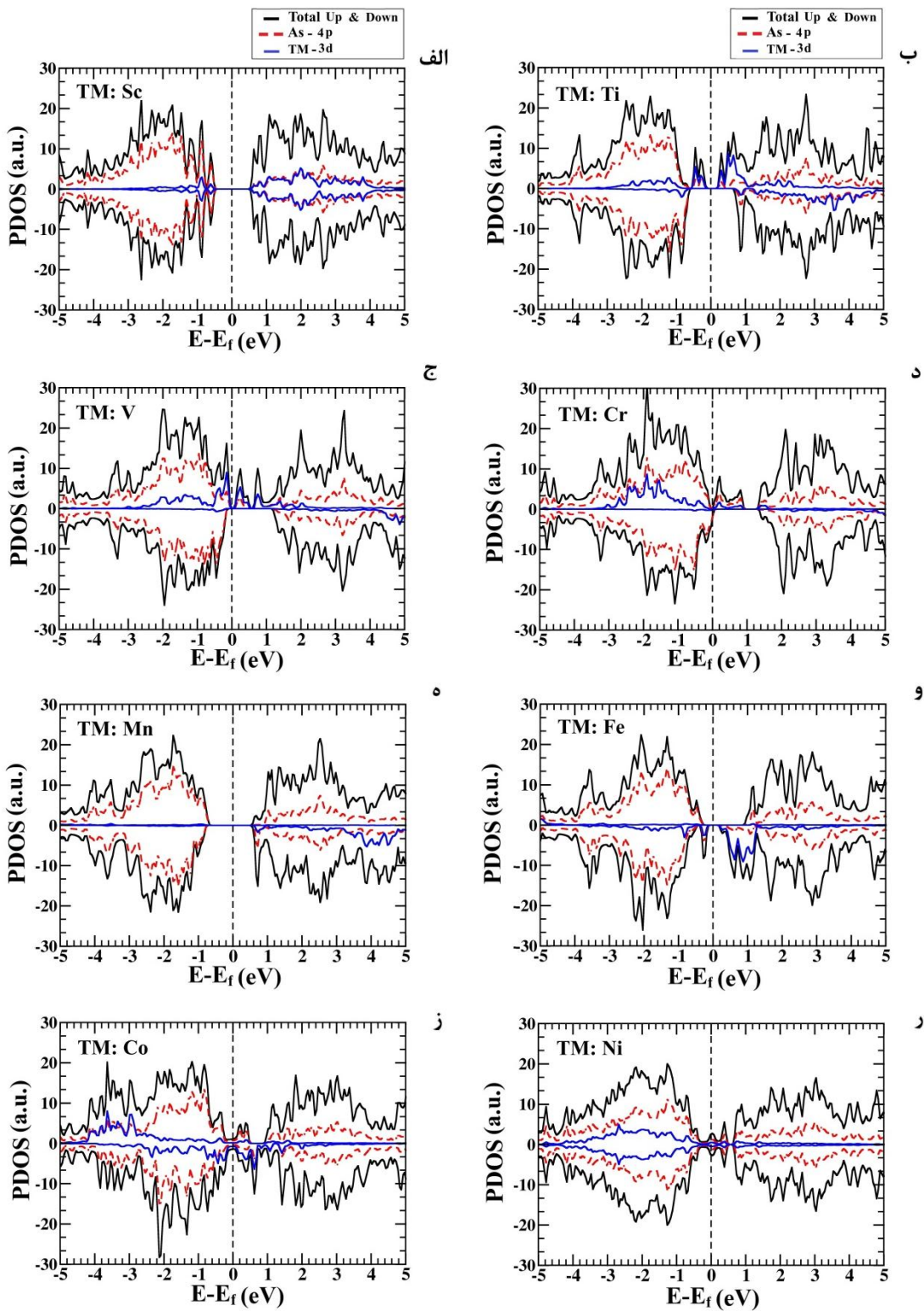


ح

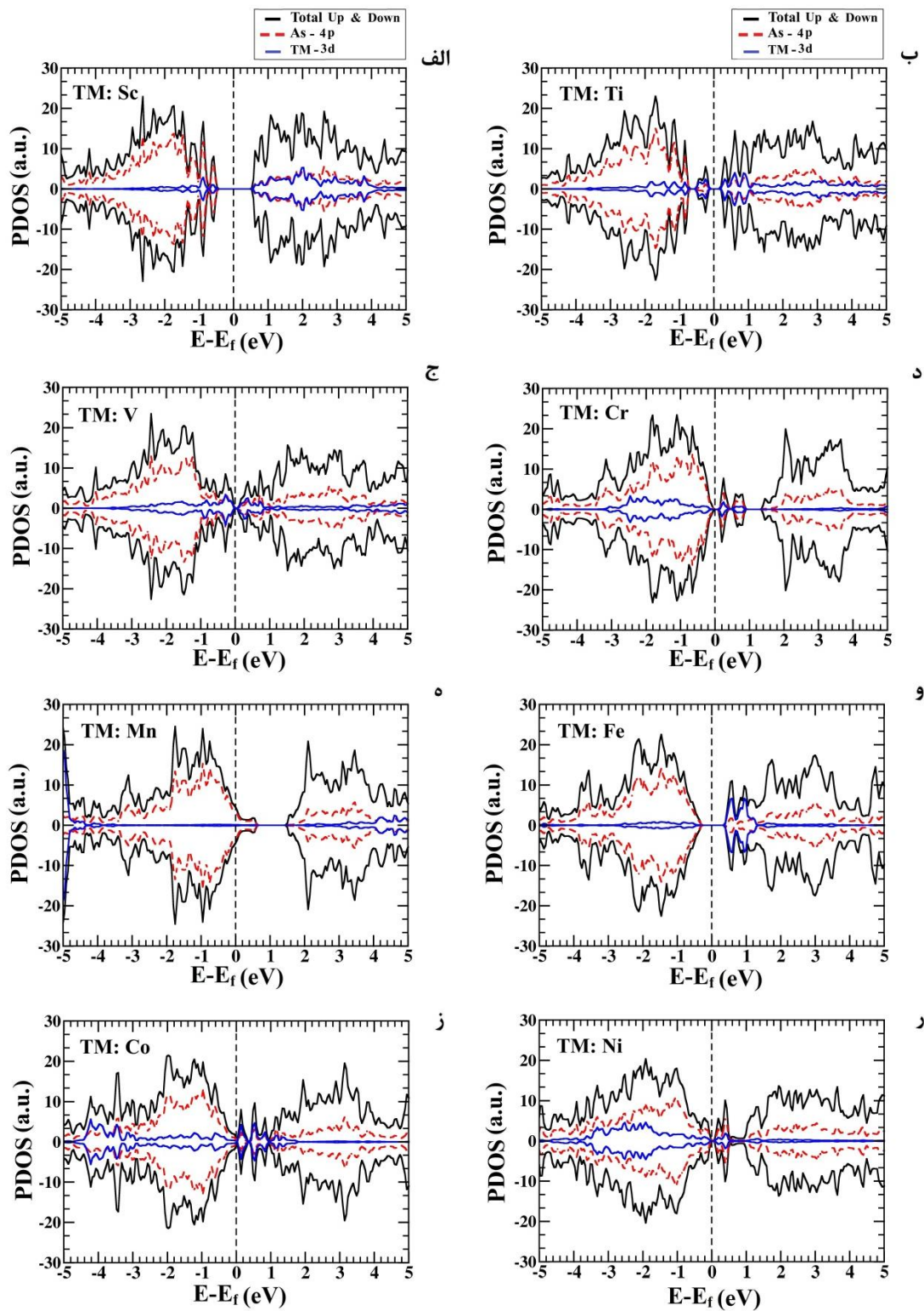
شکل ۵-۲۲: چگالی حالت‌های کلی و جزئی آرایش ۱۱/۱۱٪ فرو مغناطیس-وضعیت دور (الف) Sc (ب) Ti (ج) V (د) Cr (ه) Mn (و) Fe (ز) Co (ح) Ni



شکل ۵-۲۳: چگالی حالت‌های کلی و جزئی آرایش ۱/۱/۱ آنتی فرومغناطیس - وضعیت دور (الف Sc (ب) Ti (ج) V (د) Cr (ه) Mn (و) Fe (ز) Co (ح) Ni.



شکل ۵-۲۴: چگالی حالت‌های کلی و جزئی آلایش ۱۱/۱۱٪ فرومگناطیس - وضعیت نزدیک (۲ الف) Sc (ب) Ti (ج) V (د) Ni, Co (ز) Fe (و) Mn (هـ) Cr



شکل ۵-۲۵: چگالی حالت‌های کلی و جزئی آرایش ۱/۱/۱ آنتی فرومغناطیس - وضعیت نزدیک (الف Sc (ب Ti (ج Ni, Co (د Cr (ه Mn (و Fe (ز Co (ح Ni

با بررسی نمودار چگالی حالت‌های نمونه‌های آلیش یافته با غلظت ۵۵/۵٪ و نیز در دو وضعیت (۱) و (۲) با غلظت ۱۱/۱۱٪ به صورت فرومغناطیسی چگالی حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین در اطراف تراز فرمی برای عناصر (Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) به جز عناصر واسطه Sc, Ni را به صورت نامتقارن مشاهده کردیم. این عدم تقارن با توجه به گشتاورهای ایجاد شده، بیانگر ایجاد یک قطبش اسپینی می‌باشد. این حالت‌های قطبشی در آلیش Ti, V و Cr به ازای هر دو نوار ظرفیت و رسانش در حالت‌های اسپینی بالا و در آلیش Mn, Fe و Co نیز به ازای هر دو نوار ظرفیت و رسانش در حالت‌های اسپینی پایین ایجاد شده است. با بررسی نمودار چگالی حالت‌های جزئی این نمونه‌ها کاملاً مشخص است که بیشترین سهم در حالت‌های قطبشی ایجاد شده ناشی از هیبریداسیون اوربیتالی بین $TM-3d$ و $As-4p$ اطراف آن‌ها می‌باشد. سهم این هیبریداسیون در آلیش‌های عناصر مختلف، متفاوت است. مشاهده می‌کنیم که بیشترین سهم اوربیتالی در نوار ظرفیت و انرژی‌های پایین‌تر در نانولوله‌های GaAs را حالت‌های $As-4p$ تشکیل می‌دهند. با بررسی نمودارهای چگالی حالت‌های کلی در آلیش ۱۱/۱۱٪ فاز آنتی‌فرومغناطیس در دو وضعیت (۱) و (۲) شاهد عدم تقارن کامل در چگالی حالت‌های اسپینی بالا و پایین هستیم.

۳-۱-۴-۵ بررسی خواص مغناطیسی نانولوله‌ی آلیش یافته GaAs (۹,۰)

در این قسمت خواص مغناطیسی ساختار مورد نظر که شامل شناسایی فاز پایدار مغناطیسی و محاسبه‌ی گشتاورهای مغناطیسی در حضور ناخالصی‌ها می‌باشد، بررسی خواهد شد.

۱-۳-۱-۴-۵ شناسایی فاز پایدار مغناطیسی نانولوله‌ی آلیش یافته GaAs (۹,۰)

مقادیر انرژی کل حالت‌های آلیش شده را به منظور شناسایی فاز پایدار مغناطیسی، محاسبه و مقایسه کردیم. جداول (۴-۱۹) تا (۴-۲۱)، مقادیر انرژی‌ها شامل نانولوله‌ی آلیش یافته با دو درصد

۵۵/۵٪ و ۱۱/۱۱٪ بترتیب در دو وضعیت دور و نزدیک می‌باشد. آرایش ۱۱/۱۱٪ در دو وضعیت (۱) و (۲) به صورت فاز فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیس و آرایش ۵/۵٪ در فاز فرومغناطیس بررسی شد. مقایسه انرژی حالت‌های آرایش یافته با انرژی نمونه‌ی خالص (eV ۳۵۶۱۲/۳۳۳۹-) بیانگر این است که در حضور آرایش، انرژی کل افزایش و در نتیجه میزان پایداری آن کاهش می‌یابد. با آرایش دادن عناصر واسطه و نیز با بالا بردن درصد آرایش برای دو وضعیت (۱) و (۲)، شاهد افزایش انرژی کل با افزایش غلظت می‌باشیم. اختلاف انرژی محاسبه شده در جداول (۴-۱۹) تا (۴-۲۱) اختلاف انرژی فازهای فرومغناطیسی و آنتی فرو مغناطیس می‌باشد که به صورت $E_{\text{فرو}} - E_{\text{آنتی فرو}} = \Delta E$ تعریف شده است. اختلاف انرژی مثبت بیانگر فاز پایدار فرومغناطیسی و در غیر اینصورت آنتی فرومغناطیسی می‌باشد، این اختلاف انرژی برای دو وضعیت آرایش ۱۱/۱۱٪ محاسبه شده است.

جدول ۵-۱۹: انرژی فاز فرو (eV) در نانولوله‌های GaAs (۹,۰) آرایش یافته با غلظت ۵۵/۵٪.

ماده آلاینده	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
انرژی فرو (eV)	-۳۳۸۵۹/۱۵۱	-۳۳۹۰۰/۳۲۵	-۳۳۹۵۹/۲۰۶	-۳۴۰۵۵/۴۴	-۳۴۱۸۸/۵۱۸	-۳۴۳۴۰/۷۴۴	-۳۴۵۲۳/۷۳۷	-۳۴۷۵۰/۵۹۴

جدول ۵-۲۰: انرژی فاز فرومغناطیس، آنتی فرومغناطیس و اختلاف انرژی بین دو فاز و شناسایی فاز پایدار در نانولوله‌های GaAs (۹,۰) آرایش یافته با غلظت ۱۱/۱۱٪ در وضعیت دور (۱).

ماده آلاینده	انرژی فرو (eV)	انرژی آنتی فرو (eV)	$\Delta E = E_{\text{فرو}} - E_{\text{آنتی فرو}}$	فاز پایدار
Sc	-۳۲۱۲۶/۱۴۷۷۷۷	-۳۲۱۲۶/۱۴۶۹۷۸	۰/۰۰۰۸	فرو مغناطیس
Ti	-۳۲۱۹۰/۱۲۷۴۳۸	-۳۲۱۹۰/۸۷۱۴۴۷	-۰/۷۴۴۰۱	آنتی فرو مغناطیس
V	-۳۲۳۴۳/۲۰۵۹۳۳	-۳۲۳۲۶/۴۱۸۰۱۶	۱۶/۸۰۳	فرو مغناطیس
Cr	-۳۲۵۱۹/۴۳۹۰۱۷	-۳۲۵۱۸/۹۹۵۱۱۰	۰/۴۴۵۸۸	فرو مغناطیس
Mn	-۳۲۷۶۵/۴۳۰۹۷	-۳۲۷۶۵/۴۱۱۱۱۴	۰/۰۳۴۱۷	فرو مغناطیس
Fe	-۳۳۰۶۹/۴۳۹۵۱۵	-۳۳۰۶۹/۵۳۱۳۲۷	-۰/۰۹۱۶۸	آنتی فرو مغناطیس
Co	-۳۳۴۳۵/۵۳۸۴۷۹	-۳۳۴۳۵/۵۶۲۶۴۹	-۰/۰۲۸۲	آنتی فرو مغناطیس
Ni	-۳۳۹۰۰/۵۹۰۴۷۱	-۳۳۹۰۰/۵۲۷۴۶۰	۰/۰۶۳	فرو مغناطیس

جدول ۵-۲۱: انرژی فاز فرومغناطیس، آنتی فرومغناطیس و اختلاف انرژی بین دو فاز و شناسایی فاز پایدار در نانولوله‌های GaAs (۹,۰) آرایش یافته با غلظت ۱۱/۱۱٪ در وضعیت نزدیک (۲).

میزان آرایش - آلاینده	انرژی فرو (eV)	انرژی آنتی فرو (eV)	$\Delta E = E_{\text{فرو}} - E_{\text{آنتی فرو}}$	فاز پایدار
Sc	-۳۲۱۲۵/۷۹۰۷۳۸	-۳۲۱۲۵/۷۷۹۵۰۷	۰/۰۱۱۲۳	فرو مغناطیس
Ti	-۳۲۱۸۸/۸۳۲۴۹۹	-۳۲۱۹۰/۳۳۵۷۹۶	-۱/۵۰۳۲۸	آنتی فرو مغناطیس
V	-۳۲۳۲۷/۵۸۹۹۳۸	-۳۲۳۲۸/۹۳۴۰۹۲	-۱/۳۴۲۱	آنتی فرو مغناطیس
Cr	-۳۲۵۱۹/۲۵۳۸۲۳	-۳۲۵۱۹/۲۰۶۷۵۹	۰/۰۴۲۱۹	فرو مغناطیس
Mn	-۳۲۷۶۶/۳۴۰۵۱۵	-۳۲۷۵۶/۱۶۱۸۱۹	۱/۱۷۸۷	فرو مغناطیس
Fe	-۳۳۰۶۹/۹۲۶۹۳۲	-۳۳۰۷۰/۱۱۶۴۶۹	-۰/۱۸۹۵۳	آنتی فرو مغناطیس
Co	-۳۳۴۳۶/۴۰۴۷۵۷	-۳۳۴۳۶/۴۷۱۳۴۸	-۰/۰۷۲۵	آنتی فرو مغناطیس
Ni	-۳۳۸۹۱/۹۹۳۴۶۴	-۳۳۸۹۱/۲۳۵۳۵۸	۰/۷۴۷۰۲	فرو مغناطیس

با توجه به جداول (۴-۱۹) تا (۴-۲۱)، با افزایش عدد اتمی از سمت Sc به Ni شاهد کاهش انرژی کل می‌باشیم و با توجه به اختلاف انرژی‌های بدست آمده، حالت پایدار مغناطیسی در ساختار مورد نظر به لحاظ انرژی در آرایش Sc, Cr, Mn و Ni به صورت فرومغناطیسی و در آرایش Ti, Fe, Co به صورت آنتی فرومغناطیسی به دست آمد. فاز پایدار مغناطیسی در آرایش عناصر یاد شده در دو وضعیت متفاوت (۱) و (۲) وابسته به فاصله TM ها از یکدیگر نبود و در هر دو وضعیت به یک صورت به دست آمد. اما در مورد آرایش V که در وضعیت (۱) به صورت فرومغناطیس و در وضعیت (۲) به صورت آنتی فرومغناطیس می‌باشد و این به دلیل فاصله‌ی آن‌ها از یکدیگر است که بر نوع فاز مغناطیسی ساختار اثر می‌گذارد، نظم مغناطیسی توسط جفت‌شدگی گشتاورهای مغناطیسی مربوط به یون‌های مغناطیسی تعیین می‌شود. در فلزات مغناطیسی (عناصر واسطه)، آرایش مغناطیسی و برهم‌کنش‌های تبادلی به صورت همپوشانی مستقیم بین اوربیتال‌های d آن‌ها رخ می‌دهد. اما در جامدات ترکیبی یونی، با توجه به کوتاه برد بودن و گستردگی فضایی کوچک برهم‌کنش تبادلی و همپوشانی اوربیتالی به صورت مستقیم این نوع برهم‌کنش رخ نمی‌دهد، بلکه نوعی دیگر از برهم‌کنش تبادلی رخ می‌دهد که برهم‌کنش ابرتبادلی نامیده می‌شود. در

برهم کنش ابر تبادلی، برهم کنش بین دو عنصر مغناطیسی، توسط یک محیط واسط (حامل‌های رسانش آزاد یا یون‌های غیر مغناطیسی) صورت می‌گیرد. برهم‌کنش ابر تبادلی مستقیم و غیر مستقیم به ترتیب مسئول رفتار آنتی‌فرومغناطیسی و فرومغناطیسی در مواد می‌باشد. در نتیجه رفتار فرومغناطیسی در حضور آلایش Ni و Sc, Cr, Mn می‌تواند توسط برهم‌کنش ابر تبادلی غیر مستقیم، و رفتار آنتی‌فرومغناطیسی در حضور آلایش Ti, Fe, Co توسط برهم‌کنش ابر تبادلی مستقیم توجیه شود. در آلایش V به دلیل این که فاز مغناطیسی، با توجه به فاصله و موقعیت اتم‌های V نسبت به هم تغییر کرده است، نوع برهم‌کنش در این مورد می‌تواند توسط مدل RKKY توجیه گردد.

۵-۴-۱-۲ بررسی گشتاورهای مغناطیسی در نانولوله GaAs (۹,۰) آلایش یافته

به منظور توصیف دقیق‌تر نظم مغناطیسی در ساختارهای آلاییده شده، گشتاورهای کلی ایجاد شده در ساختار و سهم گشتاور TMها در آلایش‌ها و فازهای بررسی شده نشان داده شده است. با توجه به نتایج آلایش فلزات واسطه در فاز فرومغناطیسی، شاهد افزایش گشتاور کل در ساختار می‌باشیم. در تمام نمونه‌ها بیشترین گشتاور موضعی مربوط به اتم Mn می‌باشد. در فاز فرومغناطیسی بیشترین سهم در گشتاور کلی ایجاد شده در ساختار، ناشی از گشتاورهای موضعی TMها می‌باشد. گشتاورهای مغناطیسی کل و سهم گشتاورهای موضعی TMها و همچنین سهم گشتاورهای ایجاد شده از اتم‌های Ga و As در نانولوله آلایش شده (۹,۰) نیز بررسی شده است. مجموع گشتاورهای عناصر واسطه و اتم‌های Ga و As برابر با گشتاورهای مغناطیسی کل خواهد بود. نتایج حاصله برای نانولوله (۹,۰) با غلظت ۵/۵۵٪ و ۱۱/۱۱٪ در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی‌فرومغناطیسی با دو وضعیت دور (۱) و نزدیک (۲) در جداول (۴-۲۲) تا (۴-۲۶) گزارش شده است. روند تغییرات گشتاورهای کلی و موضعی TMهای ایجاد شده با آلایش ۵/۵۵٪ و ۱۱/۱۱٪ در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی‌فرومغناطیسی در دو وضعیت دور (۱) و نزدیک (۲) نسبت به افزایش عدد اتمی در در شکل‌های (۴-۲۶) تا (۴-۲۸) نشان داده شده است.

جدول ۵-۲۲: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولولهی آلایش یافته GaAs (۹,۰) با آلایش ۵/۵۵٪.

ماده آلاینده	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
$\mu_{Ga} (\mu_B)$	۰	-۰/۱۱۱	-۰/۲۰۴	-۰/۱۹	-۰/۰۰۶	۰/۳۴۱	۰/۳۰۹	۰/۰۰۹
$\mu_{As} (\mu_B)$	۰	-۰/۵۶۸	-۱/۰۰۷	-۱/۱۵۶	-۰/۷۹۲	۰/۷۲۱	۰/۶۶۵	۰/۱۳۵
$\mu_{TM1} (\mu_B)$	۰	۱/۶۷۸	۳/۲۱۳	۴/۳۵۱	۴/۸۱	۳/۹۳۳	۲/۳۸۴	۰/۲۸
$\mu_{tot} (\mu_B)$	۰	۰/۹۹۹	۲/۰۰۲	۳/۰۰۵	۴/۰۱۲	۴/۹۹۵	۳/۳۵۸	۰/۴۲۴

جدول ۵-۲۳: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولولهی آلایش یافته GaAs (۹,۰) با آلایش ۱۱/۱۱٪ فرومغناطیس- وضعیت دور(۱).

ماده آلاینده	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
$\mu_{Ga} (\mu_B)$	۰	۰/۰۲۵	۰/۱۱۹	-۰/۳۲	۰/۰۱۵	۰/۶۵۴	۰/۴۵۲	۰
$\mu_{As} (\mu_B)$	۰	-۱/۰۳	-۰/۴۷۲	-۱/۹۰۵	-۱/۵۶۷	۱/۴۲۹	۰/۸۹۲	۰
$\mu_{TM1} (\mu_B)$	۰	۱/۵۰۵	۳/۲۶۳	۴/۴۴	۴/۸۱	۳/۹۴۲	۲/۳۱۶	۰
$\mu_{TM2} (\mu_B)$	۰	۱/۵۰۲	۳/۲۰۶	۴/۴۳۵	۴/۸۱	۳/۹۴۳	۲/۳۱۸	۰
$\mu_{tot} (\mu_B)$	۰	۱/۹۹۹	۶/۱۱۶	۶/۶۵۱	۸/۰۶۵	۹/۹۶۵	۵/۹۷۸	۰

جدول ۵-۲۴: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولولهی آلایش یافته GaAs (۹,۰) با آلایش ۱۱/۱۱٪ آنتی فرومغناطیس- وضعیت دور(۱).

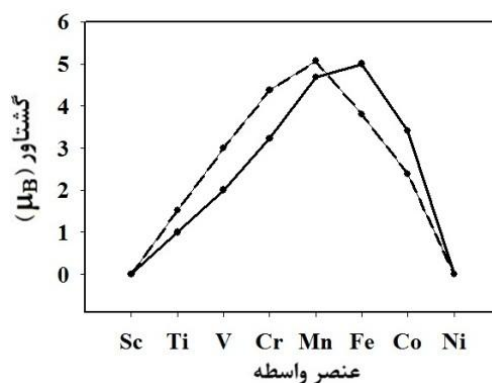
ماده آلاینده	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
$\mu_{Ga} (\mu_B)$	۰	۰	-۰/۰۰۲	-۰/۰۰۱	-۰/۰۰۱	۰	۰	۰
$\mu_{As} (\mu_B)$	۰	۰	-۰/۰۰۷	۰	۰/۰۰۵	۰	-۰/۰۰۱	۰
$\mu_{TM1} (\mu_B)$	۰	۰	-۳/۲۶۳	-۴/۴۴	-۴/۴۸۱	-۳/۹۴۲	-۲/۳۱۶	۰
$\mu_{TM2} (\mu_B)$	۰	۰	۳/۲۰۶	۴/۴۳۵	۴/۸۱	۳/۹۴۳	۲/۳۱۸	۰
$\mu_{tot} (\mu_B)$	۰	۰	-۰/۰۰۷	۰	۰/۰۰۴۶	۰	-۰/۰۰۱	۰

جدول ۵-۲۵: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۹,۰) با آلایش ۱۱/۱۱٪ فرومغناطیس- وضعیت نزدیک (۲).

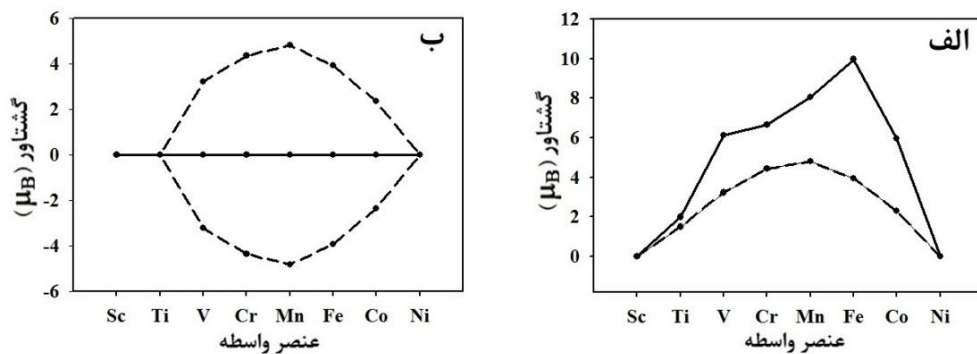
ماده آلاینده	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
$\mu_{Ga} (\mu_B)$	۰	۰/۰۵۵	۰/۰۹۲	-۰/۲۲۲	۰/۱۲۴	۰/۲۵۸	۰/۰۴۹	۰
$\mu_{As} (\mu_B)$	۰	-۱/۰۰۸	-۱/۹۹۴	-۲/۴۵۴	۰/۰۹۸	۰/۳۷	۰/۰۵۳	۰
$\mu_{TM1} (\mu_B)$	۰	۱/۴۷۶	۳/۰۴۵	۴/۳۶۸	۴/۸۹۱	۳/۶۸۶	۱/۵۷۳	۰
$\mu_{TM2} (\mu_B)$	۰	۱/۴۷۶	۳/۰۴۳	۴/۳۶۷	۴/۸۹	۳/۶۸۸	۱/۵۷۲	۰
$\mu_{tot} (\mu_B)$	۰	۱/۹۹۹	۴/۰۰۲	۶/۰۵۹	۱۰/۰۰۳	۸/۰۰۲	۳/۲۴۷	۰

جدول ۵-۲۶: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۹,۰) با آلایش ۱۱/۱۱٪ آنتی فرومغناطیس- وضعیت نزدیک (۲).

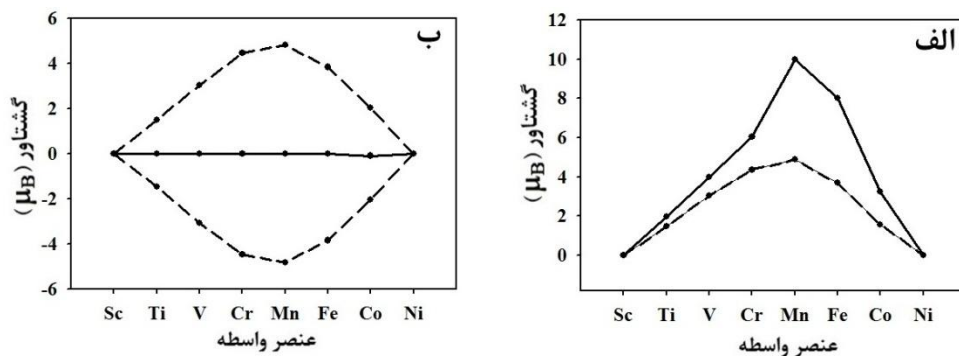
ماده آلاینده	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
$\mu_{Ga} (\mu_B)$	۰	-۰/۰۱۵	۰/۰۱۴	-۰/۰۰۵	-۰/۰۰۱	۰/۰۰۱	-۰/۰۰۹	۰
$\mu_{As} (\mu_B)$	۰	-۰/۰۲۱	۰/۰۰۹	۰/۰۰۵	-۰/۰۰۱	-۰/۰۰۲	۰/۰۰۱	۰
$\mu_{TM1} (\mu_B)$	۰	-۱/۴۷۵	-۳/۰۷۳	-۴/۴۶۸	-۴/۸۳	-۳/۸۴۲	-۲/۰۳۳	۰
$\mu_{TM2} (\mu_B)$	۰	۱/۵۰۷	۳/۰۴۶	۴/۴۶	۴/۸۳	۳/۸۴	۲/۰۳۳	۰/۰۰۱
$\mu_{tot} (\mu_B)$	۰	-۰/۰۰۴	-۰/۰۰۴	۰	-۰/۰۰۲	-۰/۰۰۱	-۰/۰۸۹	۰/۰۰۱



شکل ۵-۲۶: گشتاور کل ایجاد شده (خطوط توپر) و سهم گشتاورهای موضعی فلزات واسطه (خطوط خط چین) در نانولوله‌های GaAs (۹,۰) آلایش یافته با غلظت ۵/۵۵٪.



شکل ۵-۲۷: گشتاور کل ایجاد شده (خطوط توپر) و سهم گشتاورهای موضعی فلزات واسطه (خطوط خط چین) در نانولوله‌های GaAs (۹,۰) آرایش یافته با غلظت ۱۱/۱۱٪ در دو حالت الف) فرومغناطیس (ب) آنتی فرو مغناطیس در وضعیت دور (۱).

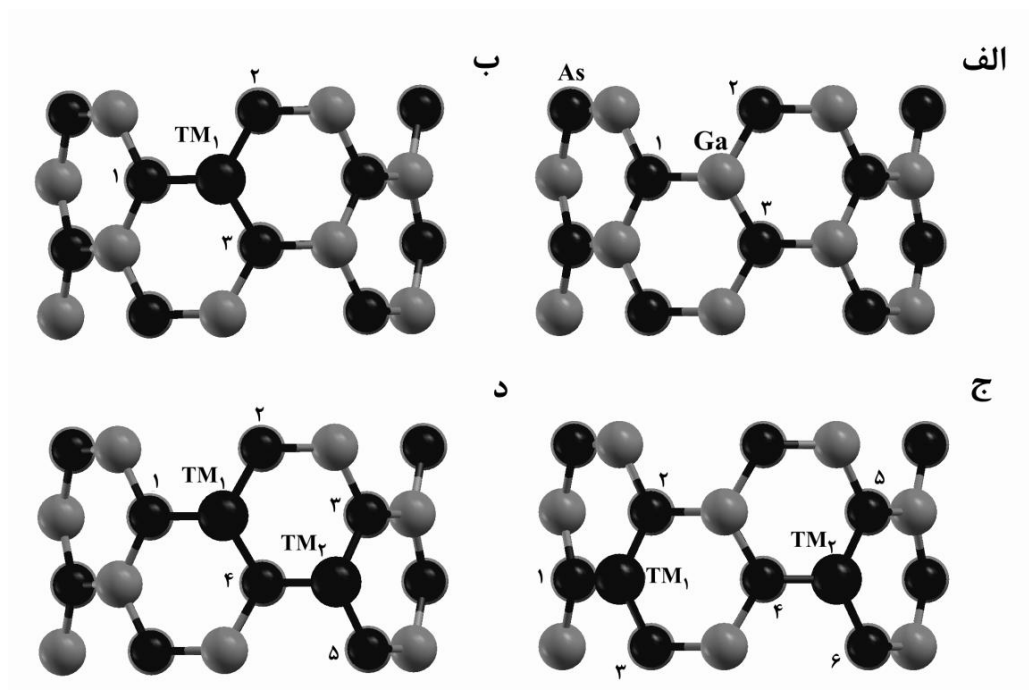


شکل ۵-۲۸: گشتاور کل ایجاد شده (خطوط توپر) و سهم گشتاورهای موضعی فلزات واسطه (خطوط خط چین) در نانولوله‌های GaAs (۹,۰) آرایش یافته با غلظت ۱۱/۱۱٪ در دو حالت الف) فرومغناطیس (ب) آنتی فرو مغناطیس در وضعیت نزدیک (۲).

در فاز فرومغناطیس برای وضعیت دور بیشترین گشتاور کل ایجاد شده است و هم چنین بیشترین گشتاور TM بترتیب برای Fe و Mn می‌باشد. در وضعیت فرومغناطیس نزدیک (۲) نیز Mn بیشترین سهم را در گشتاور موضعی و کل دارد. در مدل برهمکنش ابرتبادلی نیز جفت‌شدگی گشتاور محیط واسط (Asها) با TMها به صورت آنتی فرو (فرو) طبق اصل طرد پائولی باعث تمایل جفت‌شدگی فرو (آنتی فرو) بین TMها می‌گردد.

۵-۴-۲ محاسبات نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۵,۵)

جهت بررسی خواص مغناطیسی نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۵,۵)، ابر سلول $2 \times 1 \times 1$ خالص شامل ۲۰ اتم Ga و ۲۰ اتم As، مورد استفاده قرار گرفته است. در هنگام جانشین‌سازی یک یا دو اتم از عنصر واسطه در ابر سلول بترتیب منجر به آلایش‌های ۵٪ و ۱۰٪ گردید. آلایش ۱۰٪ در دو فاز فرومغناطیس و آنتی‌فرومغناطیس در دو وضعیت و جایگاه‌های متفاوت (۱) و (۲) بررسی شده است. در شکل (۴-۲۹) ساختار ابر سلول خالص، آلایش یافته با غلظت‌های ۵٪ و ۱۰٪ در دو وضعیت (۱) و (۲) نمایش داده شده است، از لحاظ ساختاری نیز این ساختار مشابه (۰,۹) است که در آن هر اتم مغناطیسی جایگزین شده با سه آرسناید اطراف خود پیوند برقرار کرده که موقعیت جایگاه آن‌ها در ساختار مشخص شده است.



شکل ۲۹-۵: الف) ابر سلول خالص، ب) آلایش یافته ۵٪، ج) آلایش یافته ۱۰٪، د) آلایش یافته ۱۰٪، وضعیت نزدیک (۲).

۵-۴-۲-۱ بررسی پارامترهای ساختاری نانولولهی آلایش یافته GaAs (۵,۵)

مقادیر بهینه شدهی ثابت شبکهی محوری C که بیانگر طول نانولوله است و طول پیوندهای عناصر واسطه مغناطیسی (TM) و Asهای اطرافش همچنین طول پیوند بین دو اتم TM در ابر سلول نانولولهی آلایش یافته به ازای غلظت‌های ۵٪ و ۱۰٪ (در دو وضعیت دور و نزدیک) در جداول (۴-۲۷) تا (۴-۲۹) مقادیر بهینه شدهی ثابت شبکهی محوری C و طول پیوند Ga و Asهای اطرافش در ابر سلول نانولولهی خالص در جدول (۴-۳۰) گزارش شده است.

جدول ۵-۲۷: پارامترهای ساختاری بهینه شدهی نانولولهی آلایش یافته GaAs (۵,۵) با غلظت ۵٪.

نمونه آلایش	پارامتر شبکه C (Å)	$d_{TM1-As1}$ (Å)	$d_{TM1-As2}$ (Å)	$d_{TM1-As3}$ (Å)
V	۷/۸۵۱	۲/۳۸۴	۲/۵۰۵	۲/۵۰۴
Mn	۷/۸۲۰	۲/۵	۲/۵۵۶	۲/۵۵۷
Fe	۷/۸۳۲	۲/۳۷۱	۲/۴۴۷	۲/۴۴۹

جدول ۵-۲۸: پارامترهای ساختاری بهینه شدهی نانولولهی آلایش یافته GaAs (۵,۵) با غلظت ۱۰٪ در وضعیت دور (۱).

نمونه آلایش	پارامتر شبکه C (Å)	$d_{TM1-TM2}$ (Å)	$d_{TM1-As1}$ (Å)	$d_{TM1-As2}$ (Å)	$d_{TM1-As3}$ (Å)	$d_{TM2-As4}$ (Å)	$d_{TM2-As5}$ (Å)	$d_{TM2-As6}$ (Å)
V	۷/۸	۴/۸۶۵	۲/۳۹۲	۲/۴۸۳	۲/۴۸۳	۲/۴۲۹	۲/۴۸۱	۲/۴۸۱
Mn	۷/۷۷۲	۶/۱۸۱	۲/۵۰۴	۲/۵۵۹	۲/۵۵۹	۲/۴۹۳	۲/۵۵۳	۲/۵۵۲
Fe	۷/۸۴۵	۵/۶۸۹	۲/۳۵۷	۲/۳۷۶	۲/۳۷۶	۲/۳۴۹	۲/۳۷۷	۲/۳۷۶

جدول ۵-۲۹: پارامترهای ساختاری بهینه شدهی نانولولهی آلایش یافته GaAs (۵,۵) با غلظت ۱۰٪ در وضعیت نزدیک (۲).

نمونه آلایش	پارامتر شبکه C (Å)	$d_{TM1-TM2}$ (Å)	$d_{TM1-As1}$ (Å)	$d_{TM1-As2}$ (Å)	$d_{TM1-As3}$ (Å)	$d_{TM2-As4}$ (Å)	$d_{TM2-As5}$ (Å)	$d_{TM2-As6}$ (Å)
V	۷/۷۸۱	۳/۱۷	۲/۴۷۳	۲/۵۵۷	۲/۶۶۲	۲/۳۹۷	۲/۵۲۳	۲/۴۰۸
Mn	۷/۸۳۶	۳/۵۰۲	۲/۴۸۷	۲/۴۹۸	۲/۵۰۶	۲/۵۰۴	۲/۵۳۴	۲/۵۴۳
Fe	۷/۸۴۰	۳/۹۰۹	۲/۳۴۴	۲/۳۶۹	۲/۳۶۴	۲/۳۳	۲/۳۷۲	۲/۳۹۱

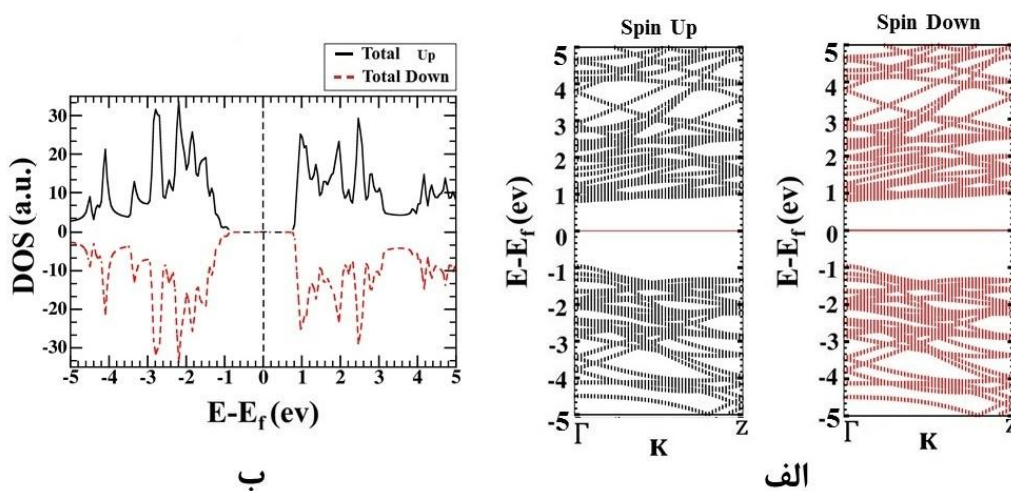
جدول ۵-۳۰: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌ی ابرسلول نانولوله‌ی GaAs (۵,۵) خالص.

ابر سلول خالص (۵,۵)	پارامتر شبکه ابرسلول C (Å)	d_{Ga-As_1} (Å)	d_{Ga-As_2} (Å)	d_{Ga-As_3} (Å)
	۷/۸۸۱	۲/۳۸۳	۲/۳۹۷	۲/۳۹۷

با مقایسه جداول (۴-۲۷) تا (۴-۳۰) مشاهده می‌شود که ثابت شبکه‌ی محوری در نانولوله‌ی آرایش یافته نسبت به نمونه‌ی خالص کاهش یافته است.

۵-۴-۲-۲ بررسی خواص الکترونی نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs (۵,۵)

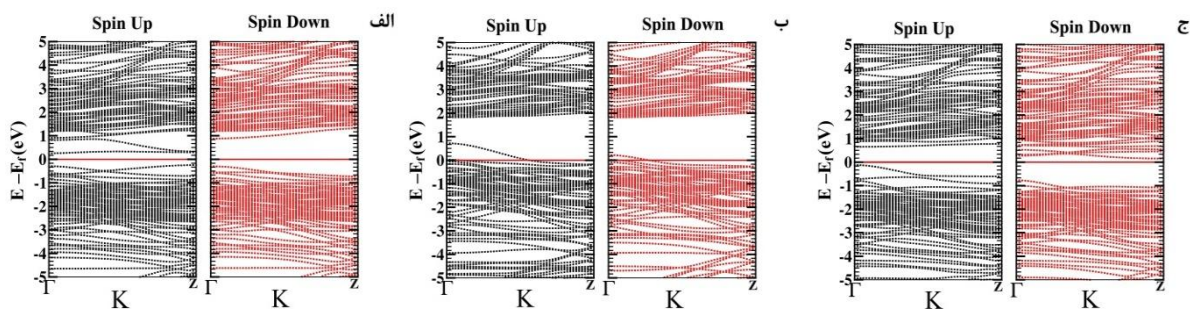
ساختار نواری و چگالی حالت‌ها برای نانولوله‌ی GaAs (۵,۵) آرایش یافته با عناصر واسطه مورد بررسی قرار گرفته است. ساختار نواری ابرسلول نانولوله‌ی خالص GaAs (۵,۵) در شکل (۴-۳۰) نشان می‌دهد که این ساختار یک نیم‌رسانا با گاف نواری مستقیم دارای مقدار انرژی $1/78 \text{ eV}$ به ازای هر دو حالت اسپینی بالا و پایین می‌باشد. موقعیت تراز فرمی برای نمونه خالص این نانولوله در انرژی $3/6377 \text{ eV}$ بدست آمده. تقارن نمودار چگالی حالت‌های اسپینی بالا و پایین همچنین گشتاور کل بدست آمده صفر است که حاکی از غیرمغناطیسی بودن نمونه خالص ساختار می‌باشد.



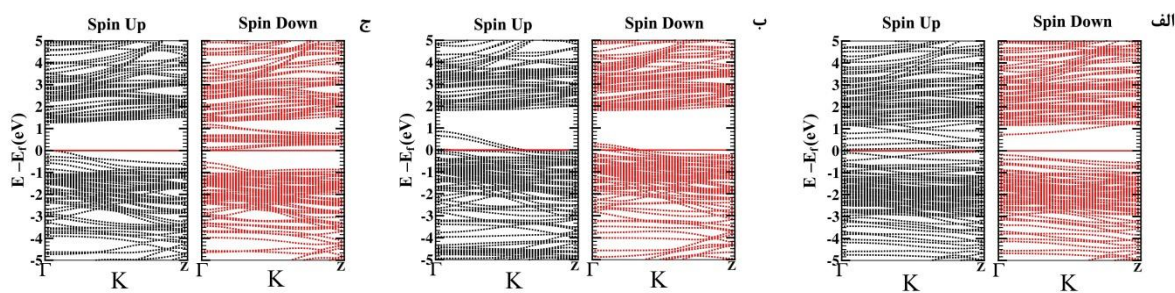
شکل ۵-۳۰: نمودار الف) ساختار نواری و ب) چگالی حالت ابرسلول نانولوله‌ی خالص (۵,۵).

۵-۴-۲-۱ ساختار نواری نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۵,۵)

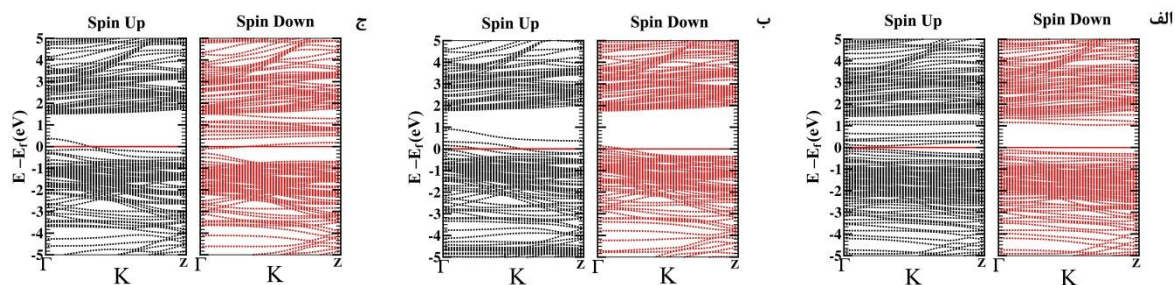
ساختار نواری نانولوله‌های آلایش‌یافته‌ی GaAs (۵,۵) با آلایش ۵٪ در شکل (۴-۳۱) و آلایش ۱۰٪ در دو وضعیت (۱) و (۲) در فاز فرومغناطیس به‌ترتیب در شکل‌های (۴-۳۲) و (۴-۳۳) و آنتی‌فرومغناطیس به‌ترتیب در شکل‌های (۴-۳۴) و (۴-۳۵) رسم شده است.



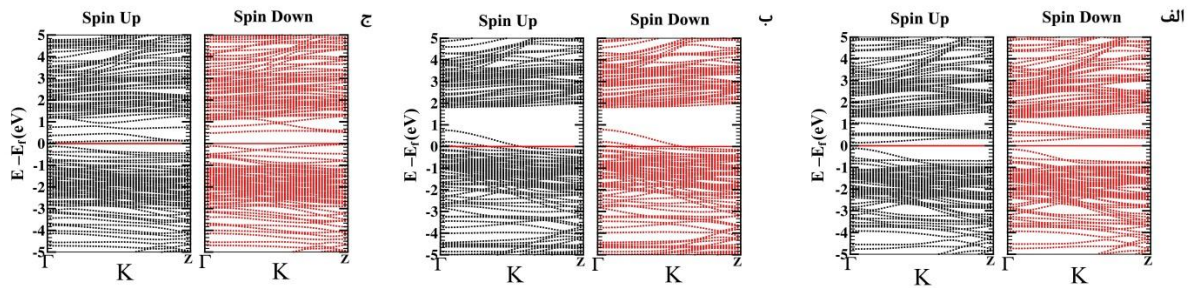
شکل ۵-۳۱: ساختار نواری آلایش ۵٪ (الف) آلایش V (ب) آلایش Mn (ج) آلایش Fe



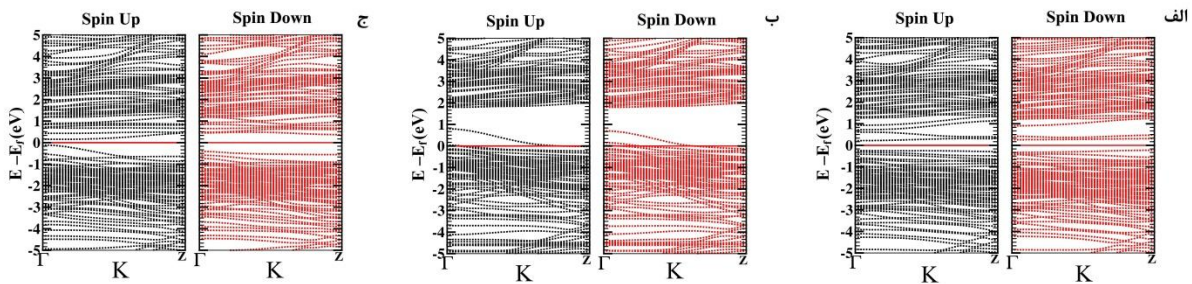
شکل ۵-۳۲: ساختار نواری آلایش ۱۰٪ فاز فرومغناطیس-وضعیت دور (۱) آلایش V (ب) آلایش Mn (ج) آلایش Fe



شکل ۵-۳۳: ساختار نواری آلایش ۱۰٪ فاز فرومغناطیس-وضعیت نزدیک (۲) آلایش V (ب) آلایش Mn (ج) آلایش Fe



شکل ۵-۳۴: ساختار نواری آلایش ۱۰٪ فاز آنتی فرومغناطیس-وضعیت دور (الف) آلایش V (ب) آلایش Mn (ج) آلایش Fe



شکل ۵-۳۵: ساختار نواری آلایش ۱۰٪ فاز آنتی فرومغناطیس-وضعیت نزدیک (الف) آلایش V (ب) آلایش Mn (ج) آلایش Fe

با بررسی ساختار نواری نمونه‌های آلایش یافته، شاهد تغییرات ساختار نواری همچنين گاف انرژی نسبت به نمونه‌ی خالص می‌باشیم. با مقایسه‌ی ساختار نواری نمونه‌ی خالص و آلایش یافته‌ی نانولوله‌ی GaAs (۵,۵) مشاهده می‌شود که همانند نانولوله‌ی (۹,۰)، آلایش ۵٪ و ۱۰٪ در فاز فرومغناطیس Mn V, Fe, باعث ایجاد نوارهایی در میان گاف نواری اسپین بالا و تغییر ساختار نواری آن می‌گردد در حالی که در نوارهای اسپین پایین تغییراتی مشاهده نمی‌شود. مقدار و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نمونه‌های آلایش یافته‌ی نانولوله‌ی GaAs (۵,۵) در جداول (۴-۳۱) تا (۲-۳۳) گزارش شده‌اند.

جدول ۵-۳۱: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله‌ی آلایش یافته (۵،۵) با غلظت ۰.۵٪.

رفتار الکترونیکی	موقعیت تراز فرمی (eV)	گاف اسپین پایین (eV)	گاف اسپین بالا (eV)	ماده آلاینده
DMS	-۴/۰۶۹۴	۱/۱۷۲ م	۰/۵ غ م	V
MM	-۴/۶۵۷	.	.	Mn
DMS	-۳/۸۱۱	۰/۹۲۳ غ م	۰/۷۷۳ م	Fe

جدول ۵-۳۲: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله‌ی آلایش یافته (۵،۵) با غلظت ۰.۱۰٪ با دو حالت فرو و آنتی فرومغناطیس در وضعیت دور (۱).

رفتار الکترونیکی	موقعیت تراز فرمی (eV)	گاف اسپین پایین (eV)	گاف اسپین بالا (eV)	میزان آلایش آلاینده
DMS	-۴/۰۶۰۶	۰/۹۳ م	۰/۱۰۸ غ م	V - فرو مغناطیس
DMS	-۴/۰۷۸	۰/۵۲ غ م	۰/۱۷۷ م	V - آنتی فرومغناطیس
MM	-۴/۶۵۷۷	.	.	Mn - فرو مغناطیس
NMM	-۴/۶۵۵۲	.	.	Mn - آنتی فرومغناطیس
DMS	-۴/۰۹۴۲	۰/۵۶۴ م	۱/۲۶۶ م	Fe - فرو مغناطیس
DMS	-۴/۰۹۸۹	۰/۳۳۹ م	۰/۲۴۱ م	Fe - آنتی فرومغناطیس

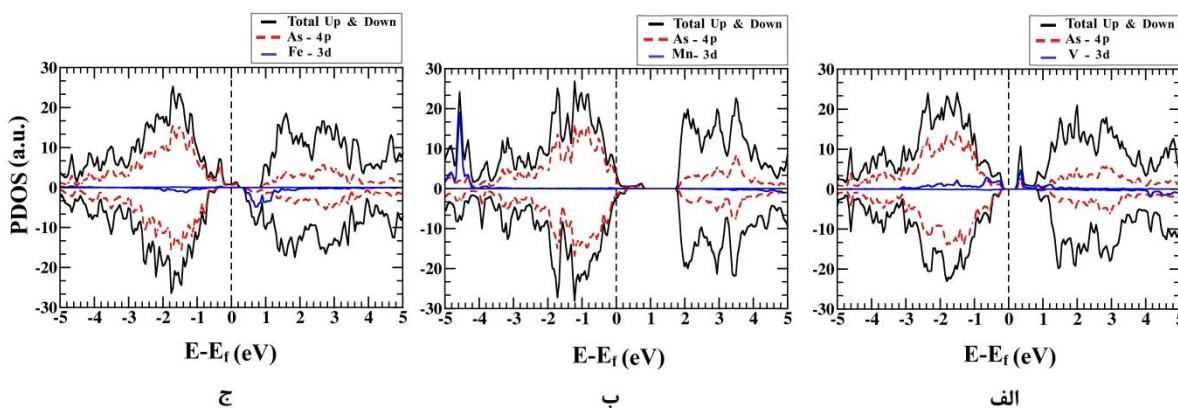
جدول ۵-۳۳: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله‌ی آلایش یافته (۵،۵) با غلظت ۰.۱۰٪ با دو حالت فرو و آنتی فرومغناطیس در وضعیت نزدیک (۲).

رفتار الکترونیکی	موقعیت تراز فرمی (eV)	گاف اسپین پایین (eV)	گاف اسپین بالا (eV)	میزان آلایش آلاینده
DMS	-۴/۲۷۶	۱/۱۵ غ م	۰/۱۴۲ غ م	V - فرو مغناطیس
DMS	-۴/۱۵	۰/۴۸ غ م	۰/۴۵۶ م	V - آنتی فرو مغناطیس
MM	-۴/۶۰۷۹	.	.	Mn - فرو مغناطیس
NMM	-۴/۶۳۶	.	.	Mn - آنتی فرو مغناطیس
MM	-۴/۳۰۰۴	.	.	Fe - فرو مغناطیس
DMS	-۳/۹۸۳۸	۰/۷۷ غ م	۰/۲۷۱ م	Fe - آنتی فرو مغناطیس

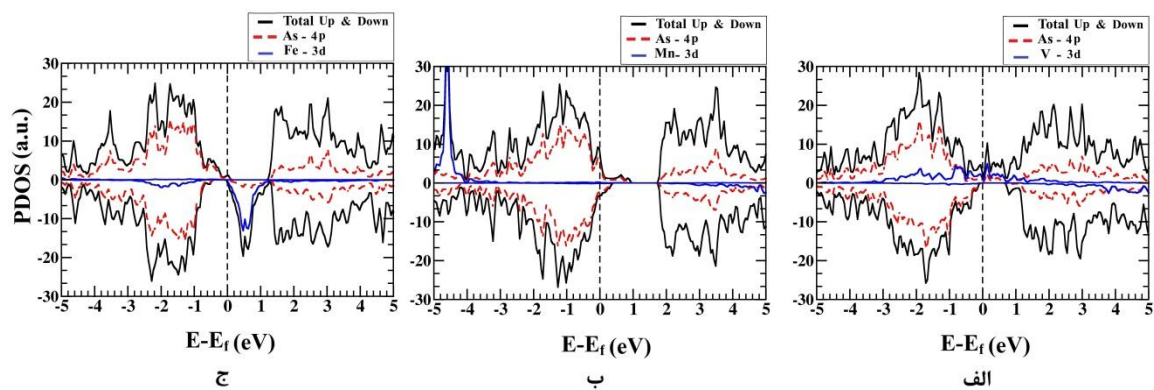
برای حالت آرایش با Mn، شاهد تغییر عمده در گاف نواری هستیم که گاف نواری اسپین بالا و اسپین پایین به مقدار صفر کاهش می‌یابد و این نشان دهنده تبدیل نیمرسانا به فلز می‌باشد.

۵-۴-۲-۲-۲ بررسی چگالی حالت‌های نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs (۵,۵)

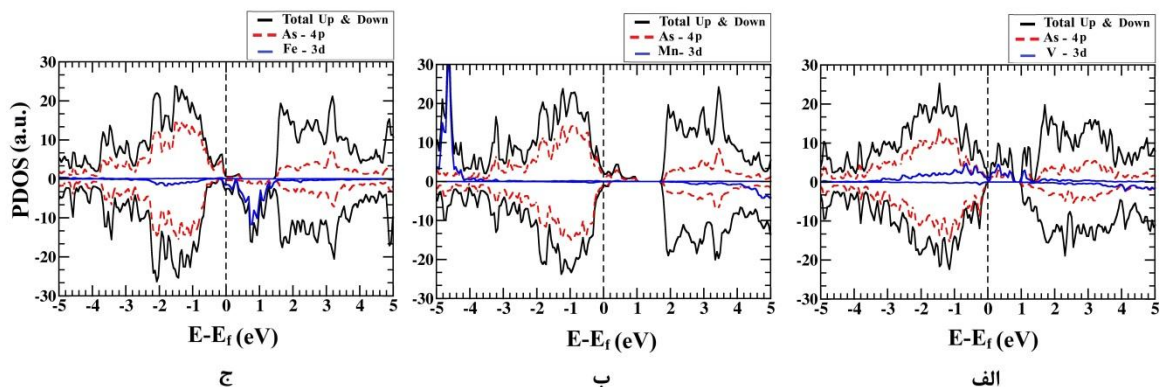
نمودار چگالی حالت‌های GaAs (۵,۵) آرایش یافته با عناصر واسطه بررسی شده است. برای نانولوله (۵,۵) نیز همانند نانولوله (۹,۰)، نتایج به دست آمده حاکی از سهم قابل ملاحظه‌ی هیبریداسیون اوربیتالی TM-۳d و As-۴p های همسایه آن، در ایجاد حالت‌های قطبشی اطراف تراز فرمی در آرایش ۵٪ و ۱۰٪ در دو وضعیت (۱) و (۲) در فاز فرو مغناطیسی می‌باشد. چگالی حالت‌های کلی و جزئی نمونه‌های آرایش یافته در فاز فرومغناطیسی در آرایش ۵٪ در شکل (۴-۳۶) و در آرایش ۱۰٪ در وضعیت (۱) و (۲) به ترتیب در شکل‌های (۴-۳۷) و (۴-۳۸) نشان داده شده است. در آرایش ۱۰٪ فاز آنتی فرومغناطیس، چگالی حالت‌های رسم شده فقط شامل چگالی حالت‌های کلی می‌شود که در وضعیت آایشی (۱) و (۲) به ترتیب در شکل‌های (۴-۳۹) و (۴-۴۰) نشان داده شده است. چگالی حالت‌های جزئی، با توجه به اهمیت سهم حالت‌های TM-۳d و As-۴p، شامل حالت‌های TM-۳d و As-۴p می‌باشند.



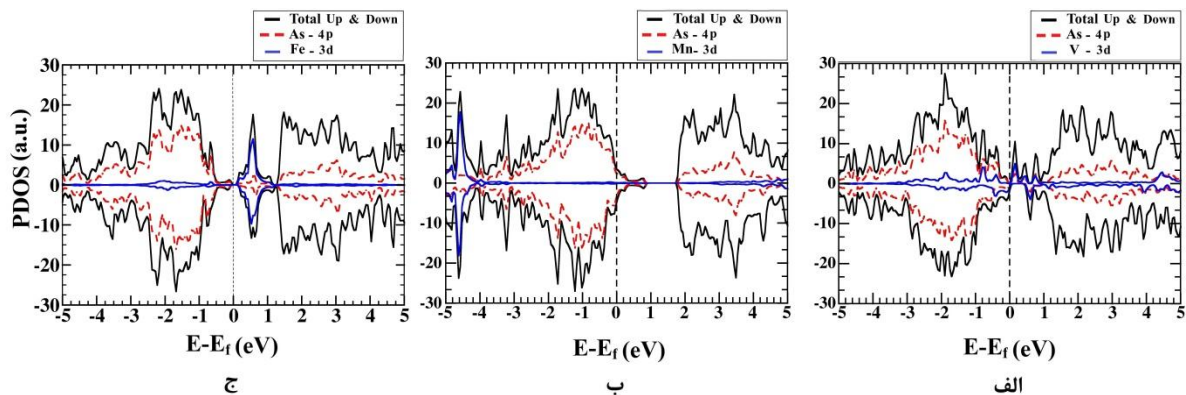
شکل ۵-۳۶- چگالی حالت‌های کلی و جزئی (TM-۳d و As-۴p) آرایش ۵٪ (الف) V (ب) Mn (ج) Fe



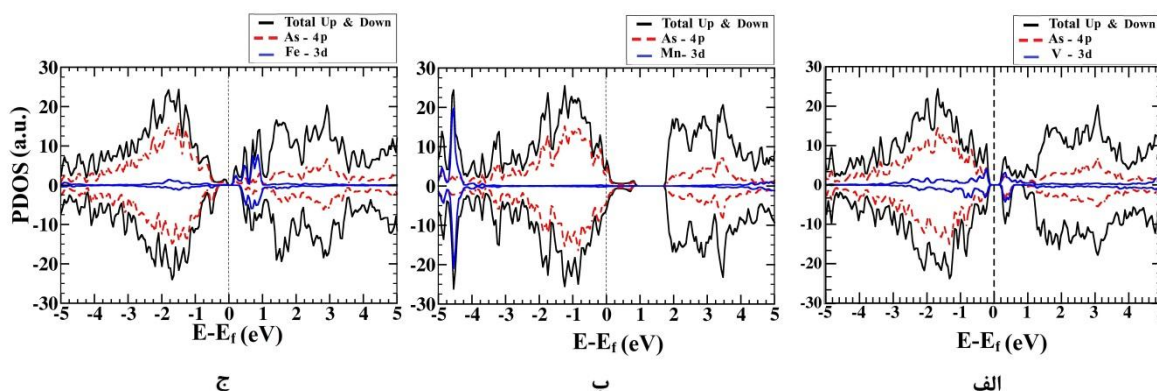
شکل ۵-۳۷: چگالی حالت‌های کلی و جزئی آرایش ۱۰٪ فرومغناطیس- وضعیت دور (الف) V (ب) Mn (ج) Fe



شکل ۵-۳۸: چگالی حالت‌های کلی و جزئی آرایش ۱۰٪ فرومغناطیس- وضعیت نزدیک (الف) V (ب) Mn (ج) Fe



شکل ۵-۳۹: چگالی حالت‌های کلی و جزئی آرایش ۱۰٪ آنتی فرومغناطیس- وضعیت دور (الف) V (ب) Mn (ج) Fe



شکل ۵-۴: چگالی حالت‌های کلی و جزئی آلیش ۱۰٪ آنتی فرومغناطیس- وضعیت نزدیک (الف) (۲) V (ب) Mn (ج) Fe با بررسی نمودار چگالی حالت‌ها مشاهده می‌شود که افزایش میزان آلیش TM در فاز فرومغناطیس باعث افزایش حالت‌ها در میان گاف نواری و کاهش میزان گاف آن می‌گردد. نمودار چگالی حالت‌های نمونه‌های آلیش یافته با غلظت ۵٪ و نیز در دو وضعیت (۱) و (۲) با غلظت ۱۰٪ به صورت فرومغناطیسی برای چگالی حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین در اطراف تراز فرمی برای عناصر (V, Mn, Fe) را به صورت نامتقارن مشاهده کردیم. این عدم تقارن با توجه به گشتاورهای کل مغناطیسی غیر صفر بدست آمد که بیانگر ایجاد یک قطبش اسپینی اطراف تراز فرمی می‌باشد. حالت‌های قطبشی در آلیش با V به ازای هر دو نوار ظرفیت و رسانش در حالت‌های اسپینی بالا و در آلیش با Mn و Fe نیز به ازای هر دو نوار ظرفیت و رسانش در حالت‌های اسپینی پایین در نزدیکی تراز فرمی ایجاد شده است. با بررسی نمودار چگالی حالت‌های جزئی این نمونه‌ها کاملاً مشخص است که بیشترین سهم در حالت‌های قطبشی ایجاد شده ناشی از هیبریداسیون اوربیتالی بین ۳d-TM و ۴p-As اطراف آن‌ها می‌باشد. سهم این هیبریداسیون در آلیش عناصرهای مختلف، متفاوت است. مشاهده می‌کنیم که بیشترین سهم اوربیتالی در نوار ظرفیت و انرژی‌های پایین‌تر در نانولوله‌های GaAs را حالت‌های ۴p-As تشکیل می‌دهند.

۵-۴-۲-۳ بررسی خواص مغناطیسی نانولوله‌ی GaAs (۵,۵) آلیش یافته

در این بخش نیز مطابق نانولوله‌ی (۹,۰) به مطالعه‌ی بررسی شناسایی فاز پایدار مغناطیسی و

محاسبه‌ی گشتاورهای مغناطیسی در نمونه‌ها می‌پردازیم.

۵-۴-۲-۳-۱ شناسایی فاز پایدار مغناطیسی نانولوله‌ی GaAs (۵,۵) آرایش یافته

در حضور آلاینده‌های V, Mn و Fe در نانولوله‌ی GaAs (۵,۵)، انرژی کل فاز فرومغناطیسی در آرایش ۵٪ و ۱۰٪ و فاز آنتی فرومغناطیسی در آرایش ۱۰٪ و هم چنین اختلاف انرژی بین این دو فاز و شناسایی فاز پایدار به لحاظ مغناطیسی محاسبه گردید و نتایج آن در جدول (۴-۳۴) گزارش شده است. انرژی کل ابر سلول نانولوله‌ی GaAs (۵,۵) خالص برابر با $39569/381068 \text{ eV}$ بدست آمد.

جدول ۵-۳۴: انرژی فاز فرو، آنتی فرو و اختلاف انرژی بین دو فاز و شناسایی فاز پایدار در نانولوله‌ی آرایش یافته GaAs.

میزان آرایش - آلاینده	انرژی فرو (eV)	انرژی آنتی فرو (eV)	$\Delta E = E_{\text{فرو}} - E_{\text{آنتی فرو}}$	فاز پایدار
V - ۵٪	-۳۷۹۲۷/۲۷۷۹۲۲
Mn - ۵٪	-۳۸۱۴۶/۵۴۷۰۶۱
Fe - ۵٪	-۳۸۲۹۸/۲۴۵۹۶۴
(۱) - V - ۱۰٪	-۳۶۲۸۵/۷۸۸۹۵۳	-۳۶۲۸۵/۸۰۶۶۳۹	-۰/۰۱۷۷	آنتی فرومغناطیس
(۱) - Mn - ۱۰٪	-۳۶۷۲۴/۱۰۵۷۵۹	-۳۶۷۲۴/۰۸۱۹۹۷	۰/۰۰۰۴۱	فرومغناطیس
(۱) - Fe - ۱۰٪	-۳۷۰۲۶/۴۷۴۳۲۳	-۳۷۰۲۶/۵۳۸۷۴۸	-۰/۰۶۹۵	آنتی فرومغناطیس
(۲) - V - ۱۰٪	-۳۶۲۸۵/۷۷۵۵۵۵	-۳۶۲۸۵/۶۳۹۲۳۶	۰/۱۳۶	فرومغناطیس
(۲) - Mn - ۱۰٪	-۳۶۷۲۴/۱۰۴۶۰۸	-۳۶۷۲۳/۹۶۵۲۲۹	۰/۱۴۶	فرومغناطیس
(۲) - Fe - ۱۰٪	-۳۷۰۲۶/۳۲۸۸۳۸	-۳۷۰۲۷/۵۸۳۰۶۵	-۱/۲۵۵	آنتی فرومغناطیس

با توجه به انرژی‌های به دست آمده در نمونه‌های آرایش یافته و مقایسه‌ی آن با انرژی کل نمونه‌ی خالص، شاهد افزایش آن در نمونه‌های آرایش یافته می‌باشیم. افزایش درصد آرایش باعث افزایش بیشتر انرژی می‌گردد. در این ساختار آرایش V نسبت به Mn و Fe باعث افزایش انرژی بیشتری می‌گردد که می‌تواند منجر به پایداری بیشتر آرایش Fe و Mn نسبت به V در نانولوله‌های GaAs شود. فاز پایداری مغناطیسی با توجه به اختلاف انرژی‌ها در حضور آرایش عنصر Mn به صورت فرومغناطیسی بدست آمد. فاز پایدار مغناطیسی در آرایش عناصر یاد شده در دو وضعیت متفاوت (۱) و (۲) وابسته به فاصله TMها

از یکدیگر نبوده در نتیجه رفتار فرومغناطیسی در حضور آلیش Mn می‌تواند توسط برهم‌کنش ابرتبادلی غیر مستقیم توجیه شود.

۵-۴-۲-۳-۲ بررسی گشتاورهای مغناطیسی در نانولوله‌ی آلیش یافته GaAs (۵,۵)

گشتاور مغناطیسی نمونه‌های آلیش یافته با غلظت ۵٪ و ۱۰٪ در دو حالت فرو مغناطیس و آنتی فرو مغناطیس در دو وضعیت (۱) و (۲) برای نانولوله‌ی (۵,۵) در شکل‌های (۴-۴۱) تا (۴-۴۳) گزارش شده است. گشتاورهای گزارش شده شامل گشتاورهای کلی ایجاد شده در ساختار و گشتاور موضعی TMها می‌باشد. نتایج حاصله برای نانولوله (۵,۵) با غلظت ۵٪ و ۱۰٪ در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیسی با دو وضعیت دور (۱) و نزدیک (۲) در جدول (۴-۳۵) تا (۴-۳۹) گزارش شده است.

جدول ۴-۳۵: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتم‌های Ga و As در نانولوله‌ی آلیش یافته GaAs (۵,۵) با آلیش ۵٪.

ماده آلاینده	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
$\mu_{Ga} (\mu_B)$	۰	-۰/۰۵۷	-۰/۱۵۹	-۰/۱۳۸	-۰/۰۰۶	۰/۴۲۴	۰/۳۳	۰
$\mu_{As} (\mu_B)$	۰	-۰/۴۶۵	-۰/۸۳۲	-۱/۰۱۲	-۰/۳۷۹	۰/۷۷	۰/۶۹	۰
$\mu_{TM1} (\mu_B)$	۰/۰۰۱	۱/۵۲۲	۲/۹۹۴	۴/۳۷۷	۵/۰۶۸	۳/۸۰۹	۲/۳۹۹	۰
$\mu_{tot} (\mu_B)$	۰/۰۰۱	۱	۲/۰۰۳	۳/۲۲۷	۴/۶۸۳	۵/۰۰۳	۳/۴۱۱	۰

جدول ۴-۳۶: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتم‌های Ga و As در نانولوله‌ی آلیش یافته GaAs (۵,۵) با آلیش ۱۰٪ فرومغناطیس - وضعیت دور (۱).

ماده آلاینده	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
$\mu_{Ga} (\mu_B)$	۰	۰/۱۱۵	-۰/۲۲۳	-۰/۲۳۴	-۰/۰۲۳	۰/۶۶۸	۰/۱۲۴	۰
$\mu_{As} (\mu_B)$	۰	-۰/۲۹۶	-۱/۶۵۵	-۱/۹۶۲	-۰/۸۱۹	۱/۳۶۷	۰/۰۷۶	۰
$\mu_{TM1} (\mu_B)$	۰	۰/۲۱۸	۲/۹۱۵	۴/۳۶۷	۵/۰۷۲	۳/۹۳۶	۲/۰۱	۰
$\mu_{TM2} (\mu_B)$	۰	۱/۹۵۶	۲/۹۶۲	۴/۳۷۲	۵/۰۶۳	۳/۹۳۵	۲/۱۲	۰
$\mu_{tot} (\mu_B)$	۰	۱/۹۹۹	۴	۶/۵۴۱	۹/۲۸۹	۹/۹۰۲	۴/۳۳	۰

جدول ۵-۳۷: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولولهی آلایش یافته GaAs(۵,۵) با آلایش ۱۰٪ آنتی فرومغناطیس- وضعیت دور(۱).

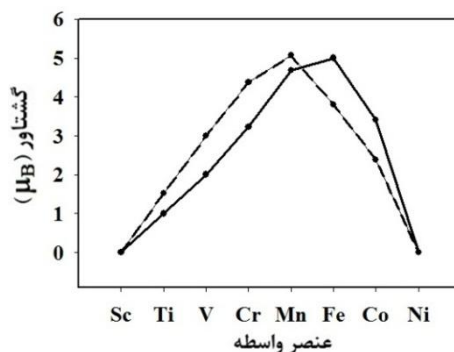
ماده آلاینده	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
$\mu_{Ga} (\mu_B)$	۰	۰/۱۱۲	۰	۰/۰۴	۰/۰۰۲	۰/۰۰۳	-۰/۰۰۷	۰
$\mu_{As} (\mu_B)$	۰	-۰/۳۰۳	۰/۰۲	۰/۰۲۶	-۰/۰۱۱	-۰/۰۰۱	-۰/۰۸۳	۰
$\mu_{TM1} (\mu_B)$	۰	۰/۲۲۹	-۲/۹۷۸	-۴/۳۹۶	-۵/۰۸	-۳/۹۲۳	-۲/۳۵۹	۰
$\mu_{TM2} (\mu_B)$	۰	۱/۹۵۶	۳/۰۰۳	۴/۳۹۸	۵/۰۷۵	۳/۹۲۶	۲/۳۴۳	۰
$\mu_{tot} (\mu_B)$	۰	۱/۹۹۹	۰/۰۴۴	۰/۰۶۹	-۰/۰۱۸	۰	-۰/۱۱۲	۰

جدول ۵-۳۸: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولولهی آلایش یافته GaAs(۵,۵) با آلایش ۱۰٪ فرومغناطیس- وضعیت نزدیک(۲).

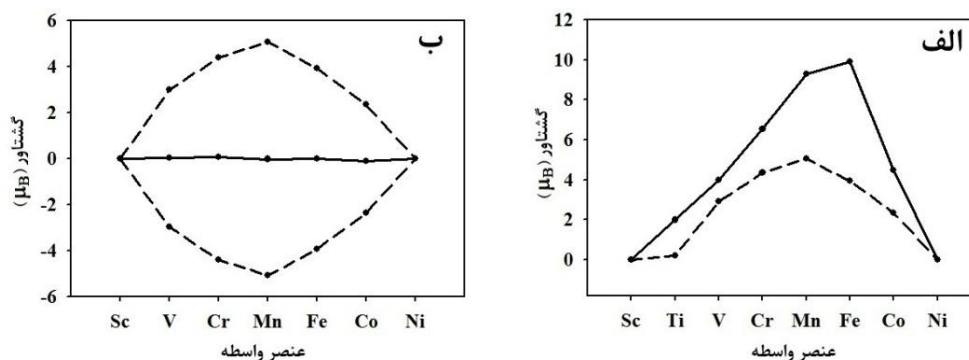
ماده آلاینده	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
$\mu_{Ga} (\mu_B)$	۰	۰/۳۲	-۰/۲۲۸	-۰/۰۰۵	-۰/۰۸۸	۰/۴۷۷	۰	۰
$\mu_{As} (\mu_B)$	۰	-۱/۱۲	-۱/۷۸۳	-۱/۱۶۷	-۰/۰۳۳	۱/۰۵۸	۰	۰
$\mu_{TM1} (\mu_B)$	۰	۱/۳۲	۳/۱۰۳	۴/۵۸۱	۴/۹۶۵	۳/۹۰۱	۰	۰
$\mu_{TM2} (\mu_B)$	۰	۱/۵۲	۲/۹۱۳	۴/۵۹۴	۵/۰۱۲	۳/۹۱۶	۰	۰
$\mu_{tot} (\mu_B)$	۰	۲/۰۴	۴/۰۰۲	۸/۰۰۳	۹/۸۵۶	۹/۳۵۵	۰	۰

جدول ۵-۳۹: گشتاور کل ایجاد شده و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولولهی آلایش یافته GaAs(۵,۵) با آلایش ۱۰٪ آنتی فرومغناطیس- وضعیت نزدیک(۲).

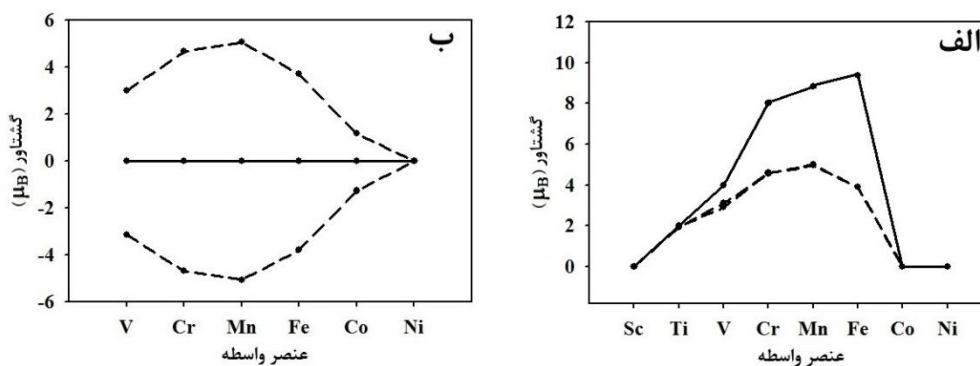
ماده آلاینده	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
$\mu_{Ga} (\mu_B)$	۰/۰۸۷	۰/۰۰۳	۰/۰۱۸	۰/۰۷۹	۰/۰۹۸	۰
$\mu_{As} (\mu_B)$	۰/۰۷	-۰/۰۳۹	-۰/۰۱۶	۰/۰۱۲	۰	۰
$\mu_{TM1} (\mu_B)$	-۳/۱۵۷	-۴/۶۹۱	-۵/۰۶۷	-۳/۷۹۴	-۱/۲۷	۰
$\mu_{TM2} (\mu_B)$	۲/۹۹۹	۴/۶۶۵	۵/۰۶۴	۳/۷۰۵	۱/۱۶۸	۰
$\mu_{tot} (\mu_B)$	۰	۰	۰	۰	-۰/۰۰۴	۰



شکل ۵-۴۱: گشتاور کل ایجاد شده (خطوط توپر) و سهم گشتاورهای موضعی فلزات واسطه (خطوط خط چین) در نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۵,۵) با غلظت ۵٪.



شکل ۵-۴۲: گشتاور کل ایجاد شده (خطوط توپر) و سهم گشتاورهای موضعی فلزات واسطه (خطوط خط چین) در نانولوله‌های GaAs (۵,۵) آلایش یافته با غلظت ۱۰٪ در دو حالت الف) فرومغناطیس ب) آنتی فرو مغناطیس در وضعیت دور (۱).



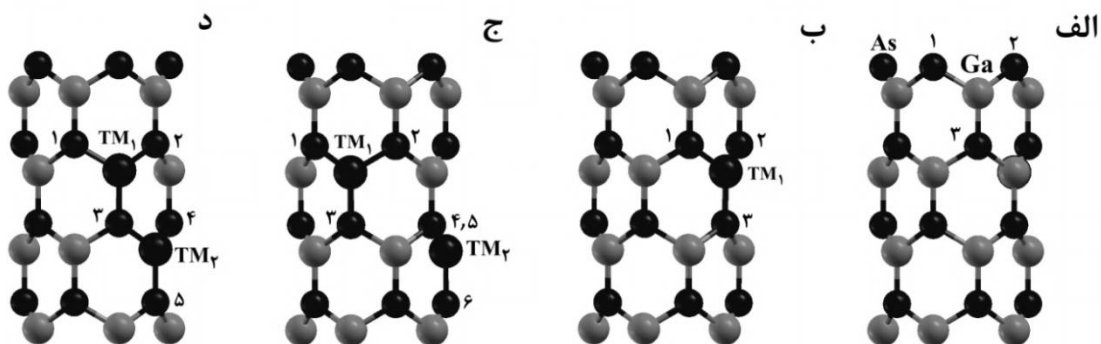
شکل ۵-۴۳: گشتاور کل ایجاد شده (خطوط توپر) و سهم گشتاورهای موضعی فلزات واسطه (خطوط خط چین) در نانولوله‌های GaAs (۵,۵) آلایش یافته با غلظت ۱۰٪ در دو حالت الف) فرومغناطیس ب) آنتی فرو مغناطیس در وضعیت نزدیک (۲).

با توجه به شکل‌های (۴-۴۱) الی (۴-۴۳) افزایش آرایش در فاز فرومغناطیس، باعث افزایش گشتاور کل در ساختار می‌گردد. بیشترین سهم در ایجاد گشتاور کل، ناشی از گشتاور موضعی TMها می‌باشد. کاهش گشتاور کل نسبت به جمع کلی گشتاورهای موضعی TMها ناشی از گشتاورهای منفی Asهای اطراف آنها می‌باشد که بیانگر جفت‌شدگی Asها به TMها به صورت آنتی فرومغناطیسی در آرایش فلزات واسطه است. بیشترین گشتاور مغناطیسی موضعی و کل به ترتیب به ازای Mn و Fe در دو وضعیت (۱) مشاهده گردید و برای وضعیت (۲) مطابق نانولوله (۹,۰) فقط Mn بیشترین گشتاور مغناطیسی موضعی و کل را نسبت به دیگر فلزات واسطه دارد.

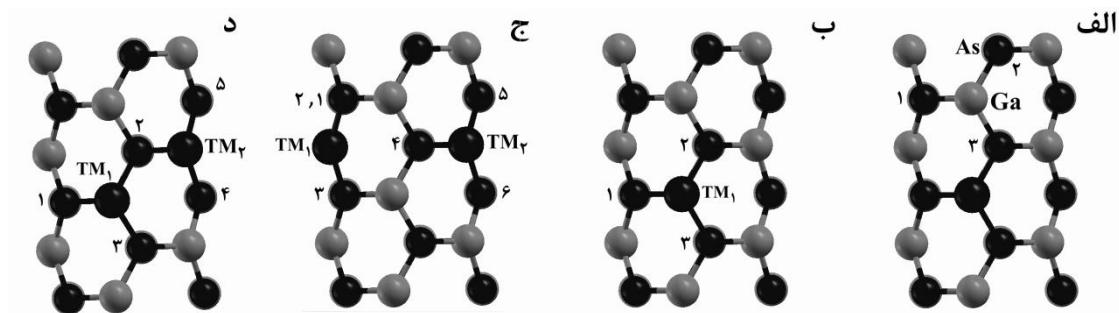
۳-۴-۵ محاسبات نانولوله‌های آرایش یافته GaAs (۵,۰) و (۳,۳)

مطالعه‌ی خواص نانولوله‌های آرایش یافته‌ی GaAs با عناصر واسطه، بر روی دو نانولوله‌ی زیگزاگ و دسته‌صندلی با قطر کوچکتر نیز انجام گرفت که به نتایج به دست آمده در این نانولوله‌ها اشاره‌ای مختصر می‌کنیم. عناصر مورد آرایش شامل V, Mn, و Fe می‌باشند. روش کار در این قسمت نیز مطابق آرایش عناصر واسطه در نانولوله‌های قبلی می‌باشد که جانشین‌سازی عناصر واسطه مغناطیسی به جای اتم‌های Ga صورت گرفته است. در بررسی آرایش عناصر واسطه در نانولوله‌ی (۵,۰) ابر سلول $1 \times 1 \times 2$ شامل ۴۰ اتم که شامل ۲۰ اتم Ga و ۲۰ اتم As در نظر گرفته شد. که با جانشینی یک و دو عنصر مغناطیسی در آن، به ترتیب منجر به آرایش ۵٪ و ۱۰٪ می‌شود. در نانولوله‌ی (۳,۳) ابر سلول در نظر گرفته شده به صورت $1 \times 1 \times 3$ شامل ۱۸ اتم Ga و ۱۸ اتم As می‌باشد که جانشینی یک و دو عنصر مغناطیسی در آن به ترتیب منجر به آرایش ۵۵٪ و ۱۱۱٪ می‌شود. ساختارهای خالص و آرایش یافته‌ی این نانولوله‌ها و موقعیت اتم‌های آلاینده در آنها برای نانولوله‌ی (۵,۰) در شکل (۴-۴۴) و برای نانولوله‌ی (۳,۳) در شکل (۴-۴۵) نشان داده شده‌اند. آرایش ۱۱۱٪ در نانولوله‌ی (۵,۰) و ۱۰٪ در نانولوله‌ی (۳,۳) در یک وضعیت آرایشی در دو فاز فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیسی صورت گرفته

است. مطابق نانولوله‌های قبل در این نانولوله‌ها نیز هر اتم Ga با TM با سه As اطراف خود پیوند برقرار می‌کند.



شکل ۴۴-۵: الف) ابر سلول خالص ب) آلایش یافته ۵٪ و ۱۰٪ نانولوله‌ی (۵,۰) ج) وضعیت دور (۱) د) وضعیت نزدیک (۲).



شکل ۴۵-۵: الف) ابر سلول خالص ب) آلایش یافته ۵۵/۵٪، آلایش یافته ۱۱/۱۱٪ نانولوله‌ی (۳,۳) ج) وضعیت دور (۱) د) وضعیت نزدیک (۲).

۱-۳-۴-۵ پارامترهای ساختاری نانولوله‌های GaAs (۳,۳) و (۵,۰) آلایش یافته

پارامترهای ساختاری شامل ثابت شبکه‌ی محوری، طول پیوندهای بهینه شده بین TMها و As اطرافشان، و طول پیوند بین TMها در نانولوله‌های GaAs (۳,۳) و (۵,۰) آلایش یافته به ترتیب در جداول (۴-۴۰) و (۴-۴۱) آورده شده‌اند. مقادیر بهینه‌شده‌ی ثابت شبکه‌ی محوری C و طول پیوند بین Ga و As اطرافش در نمونه‌های خالص این دو نانولوله نیز در جدول (۴-۴۲) آورده شده است.

جدول ۵-۴۰: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۵,۰).

میزان آلایش آلاینده	پارامتر شبکه C (Å)	$d_{TM1-TM2}$ (Å)	$d_{TM1-As1}$ (Å)	$d_{TM1-As2}$ (Å)	$d_{TM1-As3}$ (Å)	$d_{TM2-As4}$ (Å)	$d_{TM2-As5}$ (Å)	$d_{TM2-As6}$ (Å)
V - % ۵	۱۳/۳۳۲	۲/۴۳۶	۲/۴۳۸	۲/۴۹
Mn - % ۵	۱۳/۲۲۳	۲/۵۱۸	۲/۵۱۸	۲/۵۷۸
Fe - % ۵	۱۳/۳۰۲	۲/۳۸۲	۲/۳۸۲	۲/۴۰۳
(۱) V - % ۱۰	۱۲/۷۸۸	۴/۶۵۸	۲/۶۴۸	۲/۴۹	۲/۴۸۸	۲/۶۱۲	۲/۷۹۲	۲/۵۸۳
(۱) Mn - % ۱۰	۱۳/۱۳	۵/۵۲۹	۲/۵۰۴	۲/۵۰۶	۲/۵۶۲	۲/۵۰۶	۲/۵۱۲	۲/۵۶۴
(۱) Fe - % ۱۰	۱۳/۲۷۵	۵/۳۲۲	۲/۳۸۵	۲/۳۷۶	۲/۳۹۸	۲/۳۸۸	۲/۳۸۷	۲/۳۹۹
(۲) V - % ۱۰	۱۲/۴	۳/۲۹۸	۲/۶۹۱	۲/۶۶۹	۲/۸۵۸	۲/۵۴۵	۲/۵۱۹
(۲) Mn - % ۱۰	۱۳/۲۰۶	۳/۸۷۵	۲/۵۰۶	۲/۵۰۹	۲/۵۴۱	۲/۵۱۶	۲/۵۲۲
(۲) Fe - % ۱۰	۱۳/۱۷۵	۳/۴۰۷	۲/۳۶۴	۲/۳۶۳	۲/۴۱۸	۲/۳۷۲	۲/۳۷۸

جدول ۵-۴۱: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌ی آلایش یافته GaAs (۳,۳).

میزان آلایش آلاینده	پارامتر شبکه C (Å)	$d_{TM1-TM2}$ (Å)	$d_{TM1-As1}$ (Å)	$d_{TM1-As2}$ (Å)	$d_{TM1-As3}$ (Å)	$d_{TM2-As4}$ (Å)	$d_{TM2-As5}$ (Å)	$d_{TM2-As6}$ (Å)
V - % ۵/۵۵	۱۱/۹۰۷	۲/۴۵۱	۲/۴۸۶	۲/۴۷۱
Mn - % ۵/۵۵	۱۱/۶۲۳	۲/۵۲۲	۲/۵۵۹	۲/۵۵۹
Fe - % ۵/۵۵	۱۱/۸۸۲	۲/۴	۲/۴۳۶	۲/۴۳۷
(۱) V - % ۱۱/۱۱	۱۱/۶۶۸	۳/۱۲۴	۲/۵۴۶	۲/۶۲۵	۲/۶۴۴	۲/۸۹۲	۲/۸۰۹	۲/۷۰۸
(۱) Mn - % ۱۱/۱۱	۱۱/۵۱۱	۵/۱۹۸	۲/۵۱۱	۲/۵۶۱	۲/۵۶۲	۲/۵۲	۲/۵۶۱	۲/۵۶۲
(۱) Fe - % ۱۱/۱۱	۱۱/۶۴۱	۶/۵۱۹	۲/۴۰۷	۲/۴۳۲	۲/۴۳۱	۲/۳۷۶	۲/۳۸۳	۲/۳۸۴
(۲) V - % ۱۱/۱۱	۱۱/۶۹۲	۳/۰۰۷	۲/۷۹	۲/۶۷۶	۲/۸۹۸	۲/۸۹۵	۲/۶۸۱
(۲) Mn - % ۱۱/۱۱	۱۱/۵۲۷	۳/۶۵۲	۲/۵۱۳	۲/۵۴۹	۲/۵۵۳	۲/۵۰۱	۲/۵۵۴
(۲) Fe - % ۱۱/۱۱	۱۱/۳۶۳	۴/۴۲۸	۲/۴۶۱	۲/۴۴۶	۲/۴۴۳	۲/۴۰۱	۲/۴۱۷

جدول ۵-۴۲: پارامترهای ساختاری بهینه شده‌ی نانولوله‌های خالص GaAs (۳,۳) و (۵,۰).

نانولوله	پارامتر شبکه ابر سلول C (Å)	d_{Ga-As1} (Å)	d_{Ga-As2} (Å)	d_{Ga-As3} (Å)
خالص (۵,۰)	۱۳/۳۱۸	۲/۴۱۳	۲/۴۱۲	۲/۴۱۲
خالص (۳,۳)	۱۱/۷۰۹	۲/۳۹۱	۲/۴۱۴	۲/۴۱۴

با مقایسه پارامترهای ساختاری نانولوله‌های آلایش‌یافته مشاهده می‌شود در هر دو نانولوله، ثابت شبکه محوری نسبت به نانولوله‌های خالص با غلظت ۵٪ و ۵۵/۵٪ در نمونه‌های آلایش‌یافته با V، افزایش و در نمونه‌های آلایش‌یافته با Mn و Fe کاهش می‌یابد، با غلظت ۱۰٪ و ۱۱/۱۱٪ در نمونه‌های آلایش‌یافته با V، Mn، Fe کاهش می‌یابد. بیشترین طول پیوند TM‌ها با As‌های اطرافشان در دو نانولوله‌ی آلایش‌یافته، به ازای آلایش Mn دیده شد.

۵-۴-۳-۲ خواص الکترونی نانولوله‌های آلایش یافته GaAs (۵,۰) و (۳,۳)

خواص الکترونی نانولوله‌های خالص و آلایش یافته GaAs (۵,۰) و (۳,۳) بررسی شده است. نمونه‌ی خالص (۵,۰) و (۳,۳) هر دو نیم‌رسانایی با گاف نواری مستقیم، بترتیب دارای مقادیر گاف 0.812 eV و 1.74 eV به ازای هر دو حالت اسپینی بالا و پایین می‌باشند. موقعیت تراز فرمی این دو نانولوله خالص برای (۵,۰) و (۳,۳) بترتیب در انرژی 4.2616 eV و 3.7409 eV بدست آمد. برای نانولوله خالص (۵,۰) و (۳,۳)، چگالی حالت‌های بدست آمده به ازای همه‌ی انرژی‌ها در هر دو حالت اسپینی بالا و پایین گشتاورهای بدست آمده بترتیب دارای مقادیر $(-0.000393\ \mu_B)$ و $(0.000116\ \mu_B)$ که نشان‌دهنده غیرمغناطیسی بودن نمونه‌ی خالص این دو نانولوله می‌باشد. با آلایش در این ساختارها، باعث تغییر شکل ساختار نواری و اندازه‌ی گاف آن نسبت به نمونه‌ی خالص آن‌ها می‌شود. مقدار و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی بر حسب (eV) در نمونه‌های آلایش یافته‌ی نانولوله‌ی GaAs (۵,۰) در جدول (۴-۴۳) و برای (۳,۳) در جدول (۴-۴۴) گزارش شده‌اند. بیشینه اختلاف بین دو گاف نواری اسپین بالا و اسپین پایین در هر دو نانولوله به ازای آلایش Mn مشاهده شد. در جدول (۴-۴۴)، با آلایش Fe ۱۱/۱۱٪ در وضعیت نزدیک (۲) نانولوله‌ی (۳,۳) با فاز فرومغناطیسی، حالت نیم‌فلزی با قطبش اسپینی ۱۰٪ در تراز فرمی مشاهده شد.

جدول ۵-۴۳: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله‌ی (۵,۰) آرایش یافته.

میزان آرایش - آلاینده	گاف اسپین بالا	گاف اسپین پایین	موقعیت تراز فرمی	رفتار
V - % ۵	م ۰/۳۸۸	م ۰/۷۱۴	-۴/۳۶۳۳	DMS
Mn - % ۵	م غ ۰/۳۰۲	م ۰/۸۳۵	-۴/۳۵۵۶	DMS
Fe - % ۵	م ۰/۵۱۸	م ۰/۸۱۵	-۴/۱۵۹۳	DMS
V - % ۱۰ - فرومغناطیس (۱)	م ۰/۳۳۹	م غ ۰/۶۸۹	-۴/۱۰۶۳	DMS
V - % ۱۰ - آنتی فرومغناطیس (۱)	م غ ۰/۵۴۸	م غ ۰/۵۸۱	-۳/۹۹۲۶	NMS
Mn - % ۱۰ - فرومغناطیس (۱)	م ۰/۳۱۹	م ۰/۸۸۹	-۴/۵۰۳۵	DMS
Mn - % ۱۰ - آنتی فرومغناطیس (۱)	م غ ۰/۳۳۴	م غ ۰/۳۴۹	-۴/۵۱	NMS
Fe - % ۱۰ - فرومغناطیس (۱)	م ۰/۴۲	م ۰/۸۵۵	-۴/۱۲۶۳	DMS
Fe - % ۱۰ - آنتی فرومغناطیس (۱)	م ۰/۵۲	م ۰/۵۳۹	-۴/۱۶۹۹	NMS
V - % ۱۰ - فرومغناطیس (۲)	م ۰/۲۲	م ۰/۷۹۹	-۴/۱۳۹۵	DMS
V - % ۱۰ - آنتی فرومغناطیس (۲)	م غ ۰/۶۷	م ۰/۴۲۴	-۴/۱۷۷۴	NMS
Mn - % ۱۰ - فرومغناطیس (۲)	م ۰/۲۱۴	م ۰/۸۷	-۴/۵۶۳۹	DMS
Mn - % ۱۰ - آنتی فرومغناطیس (۲)	م ۰/۸۵۷	م ۰/۷۸۴	-۴/۰۷۹۷	NMS
Fe - % ۱۰ - فرومغناطیس (۲)	م غ ۰/۲۹۱	م ۰/۴۴۴	-۴/۲۶۱۲	DMS
Fe - % ۱۰ - آنتی فرومغناطیس (۲)	م ۰/۶۹۶	م ۰/۵۷۸	-۴/۲۵۰۶	NMS

جدول ۵-۴۴: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی در نانولوله‌ی (۳,۳) آرایش یافته.

میزان آرایش - آلاینده	گاف اسپین بالا	گاف اسپین پایین	موقعیت تراز فرمی	رفتار
V - % ۵/۵۵	م ۰/۳۹	م ۰/۷۱۳	-۳/۸۷۲۳	DMS
Mn - % ۵/۵۵	م ۰/۸۸۶	م ۱/۲۲۲	-۴/۵۲۶۵	MM
Fe - % ۵/۵۵	م ۰/۶۰۵	م ۰/۸۱۶	-۳/۶۹۶۷	DMS
V - % ۱۱/۱۱ - فرومغناطیس (۱)	م ۰/۴۰۱	م ۰/۵۰۲	-۳/۹۰۶۸	DMS
V - % ۱۱/۱۱ - آنتی فرومغناطیس (۱)	م غ ۰/۷	م غ ۰/۵۶۲	-۳/۸۰۴۹	NMS
Mn - % ۱۱/۱۱ - فرومغناطیس (۱)	.	.	-۴/۵۷۱۸	NMM
Mn - % ۱۱/۱۱ - آنتی فرومغناطیس (۱)	.	.	-۴/۵۶۵۳	NMM
Fe - % ۱۱/۱۱ - فرومغناطیس (۱)	م ۱/۰۰۱	م غ ۰/۶۲۶	-۳/۹۵۸۱	NMM
Fe - % ۱۱/۱۱ - آنتی فرومغناطیس (۱)	م غ ۰/۱۶۳	م غ ۰/۴۵	-۳/۹۹۵۶	NMS
V - % ۱۱/۱۱ - فرومغناطیس (۲)	م ۰/۲۵۱	م ۱/۰۱۲	-۴/۲۵	DMS
V - % ۱۱/۱۱ - آنتی فرومغناطیس (۲)	م ۰/۵۹۸	م غ ۰/۶۴۳	-۴/۰۸۴۳	NMS
Mn - % ۱۱/۱۱ - فرومغناطیس (۲)	.	.	-۴/۵۳۶۱	MM
Mn - % ۱۱/۱۱ - آنتی فرومغناطیس (۲)	.	.	-۴/۵۴۸	NMM
Fe - % ۱۱/۱۱ - فرومغناطیس (۲)	.	م غ ۰/۷۳	-۴/۱۷۱۱	HM
Fe - % ۱۱/۱۱ - آنتی فرومغناطیس (۲)	م غ ۰/۳۷۹	م غ ۰/۷۳۶	-۴/۰۱۴۶	NMS

۵-۴-۳ خواص مغناطیسی نانولوله‌های آلایش یافته GaAs (۵,۰) و (۳,۳)

برای نانولوله‌های (۵,۰) و (۳,۳) نیز مطابق نانولوله‌های (۹,۰) و (۵,۵) مقادیر انرژی کل حالت‌های آلایش شده را به منظور شناسایی فاز پایدار مغناطیسی، محاسبه و مقایسه کردیم. انرژی فازهای فرومغناطیسی و آنتی‌فرومغناطیسی برای نانولوله‌های GaAs آلایش یافته با سه عنصر واسطه V، Fe، Mn و همچنین اختلاف انرژی فازهای فرومغناطیسی و آنتی‌فرومغناطیس در جداول (۴-۴) و (۴-۴) بترتیب برای نانولوله‌های (۵,۰) و (۳,۳) گزارش شده است. با افزایش عدد اتمی از v به Fe شاهد کاهش انرژی با آلایش ۵٪ و ۱۰٪ در دو حالت فرومغناطیس و آنتی‌فرومغناطیس با دو وضعیت دور (۱) و نزدیک (۲) می‌باشیم که نشان دهنده پایداری در نمونه می‌باشد.

جدول ۵-۴: انرژی فاز فرومغناطیس، آنتی‌فرومغناطیس و اختلاف انرژی بین دو فاز و شناسایی فاز پایدار در نانولوله‌ی آلایش‌یافته GaAs (۵,۰).

میزان آلایش - آلاینده	انرژی فرومغناطیس (eV)	انرژی آنتی فرومغناطیس (eV)	$\Delta E = E_{\text{آنتی فرو}} - E_{\text{فرو}}$	فاز پایدار
V - ۵٪	-۳۷۹۲۷/۶۷۹۶
Mn - ۵٪	-۳۸۰۲۳/۳۰۵
Fe - ۵٪	-۳۸۱۴۷/۴۰۸۹
(۱) V - ۱۰٪	-۳۶۲۸۸/۹۴۶۶	-۳۶۲۹۰/۳۳۱۱	-۱/۳۸۴	آنتی فرومغناطیس
(۱) Mn - ۱۰٪	-۳۶۷۲۵/۱۲۹	-۳۶۷۲۵/۱۳۴۵	-۰/۰۰۰۵۵	آنتی فرومغناطیس
(۱) Fe - ۱۰٪	-۳۷۰۲۷/۶۸۴۷	-۳۷۰۲۷/۷۴۶۸	-۰/۰۶۲۱	آنتی فرومغناطیس
(۲) V - ۱۰٪	-۳۶۲۸۸/۸۷۸۲	-۳۶۲۸۸/۱۷۱۶	۰/۷۰۶۶	فرومغناطیس
(۲) Mn - ۱۰٪	-۳۶۷۲۵/۱۰۵۴	-۳۶۷۲۶/۷۱۷۲	-۱/۶۱۱۸	آنتی فرومغناطیس
(۲) Fe - ۱۰٪	-۳۷۰۲۷/۷۳۴۹	-۳۷۰۲۸/۰۰۴	-۰/۲۶۹۱	آنتی فرومغناطیس

جدول ۵-۴۶: انرژی فاز فرومغناطیس، آنتی فرومغناطیس و اختلاف انرژی بین دو فاز و شناسایی فاز پایدار در نانولوله‌ی آلایش یافته (۳,۳)GaAs.

میزان آلایش - آلایش یافته	انرژی فرو (eV)	انرژی آنتی فرو (eV)	$\Delta E = E_{\text{فرو آنتی}} - E_{\text{فرو}}$	فاز پایدار
V - % ۵/۵	-۳۳۹۷۸/۳۸۴۲
Mn - % ۵/۵	-۳۴۱۹۰/۹۲۲۹
Fe - % ۵/۵	-۳۴۳۴۹/۱۹۱۱
(۱) V - % ۱۱/۱۱	-۳۲۳۳۲/۹۳۷۶	-۳۲۳۳۳/۳۰۷۸	-۰/۳۷۰۲	آنتی فرومغناطیس
(۱) Mn - % ۱۱/۱۱	-۳۲۷۶۸/۵۸۶۴	-۳۲۷۶۸/۵۸۲۹	۰/۰۰۰۳۵	فرومغناطیس
(۱) Fe - % ۱۱/۱۱	-۳۳۰۷۴/۷۶۳۲	-۳۳۰۷۴/۷۹۸۱	-۰/۰۳۴۹	آنتی فرومغناطیس
(۲) V - % ۱۱/۱۱	-۳۲۳۳۳/۱۵۸۸	-۳۲۳۳۲/۰۳۵۱	-۰/۸۷۶۳	آنتی فرومغناطیس
(۲) Mn - % ۱۱/۱۱	-۳۲۷۶۸/۴۷۳۶	-۳۲۷۶۸/۴۵۳	۰/۰۲۰۶	فرومغناطیس
(۲) Fe - % ۱۱/۱۱	-۳۳۰۷۳/۳۴۰۸	-۳۳۰۷۳/۸۴۲۱	-۰/۵۰۱۳	آنتی فرومغناطیس

انرژی‌های کل این دو نانولوله برای نانولوله‌ی خالص (۵,۰) برابر با $39569/7399 \text{ eV}$ و برای (۳,۳) $35587/3923 \text{ eV}$ بدست آمد که با مقایسه با انرژی نانولوله‌های آلایش یافته، شاهد افزایش انرژی در حضور آلایش هستیم. مطابق نانولوله‌های قبل، در هر دو نانولوله آلایش V نسبت به Mn و Fe باعث افزایش انرژی بیشتری می‌گردد که می‌تواند منجر به پایداری بیشتر آلایش Fe و Mn نسبت به V در نانولوله‌های GaAs شود. به منظور بررسی فاز پایدار مغناطیسی در نمونه‌های آلایش یافته، اختلاف این دو فاز مغناطیسی نیز محاسبه و در جدول‌های ذکر شده گزارش گردیده است. گشتاورهای مغناطیسی کل و سهم گشتاورهای موضعی TMها و همچنین سهم گشتاورهای ایجاد شده از اتم‌های Ga و As در نانولوله‌های آلایش شده‌ی (۵,۰) و (۳,۳) نیز بررسی شده است. مجموع گشتاورهای عناصر واسطه و اتم‌های Ga و As برابر با گشتاورهای مغناطیسی کل خواهد بود. نتایج حاصله برای نانولوله (۵,۰) در جدول (۴-۴۷) و برای (۳,۳) در جدول (۴-۴۸) گزارش شده است.

جدول ۵-۴۷: گشتاور کل و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولوله‌ی آلایش‌یافته GaAs (۰,۵).

میزان آلایش - آلاینده	$\mu_{Ga} (\mu_B)$	$\mu_{As} (\mu_B)$	$\mu_{TM1} (\mu_B)$	$\mu_{TM2} (\mu_B)$	$\mu_{tot} (\mu_B)$
V - % ۵	۰/۰۰۱	-۱/۰۵۷	۳/۰۵۵	۲
Mn - % ۵	-۰/۱۰۶	-۰/۶۸۲	۴/۹۷۷	۴
Fe - % ۵	۰/۳۳۳	۰/۷۶۹	۳/۹۰۱	۴/۹۹۹
V - % ۱۰ - فرومغناطیس (۱)	-۰/۱۴۸	-۱/۶۳۲	۳/۰۰۸	۲/۷۸۸	۴
V - % ۱۰ - آنتی فرومغناطیس (۱)	۰/۱۰۳	-۰/۱۲۸	-۳/۱۶	۳/۱۸۶	۰
Mn - % ۱۰ - فرومغناطیس (۱)	-۰/۱۹۵	-۱/۷۲۳	۴/۹۵۸	۴/۹۶۹	۸/۰۰۵
Mn - % ۱۰ - آنتی فرومغناطیس (۱)	-۰/۰۰۵	-۰/۰۱۴	-۴/۹۶۶	۴/۹۷۸	۰
Fe - % ۱۰ - فرومغناطیس (۱)	۰/۶۶۴	۱/۵۴	۳/۸۹۹	۳/۸۹۵	۹/۹۹۹
Fe - % ۱۰ - آنتی فرومغناطیس (۱)	-۰/۰۰۸	۰/۰۰۵	-۳/۸۷۲	۳/۸۷۳	۰
V - % ۱۰ - فرومغناطیس (۲)	۰/۳۵۱	-۰/۷۲	۳/۲۶۲	۳/۱۰۵	۶
V - % ۱۰ - آنتی فرومغناطیس (۲)	-۰/۱۱۷	-۰/۰۴۱	-۳/۱۹۵	۳/۳۵۳	۰
Mn - % ۱۰ - فرومغناطیس (۲)	-۰/۱۵۱	-۱/۷۱۶	۴/۹۶۳	۴/۹۵۸	۸/۰۵۳
Mn - % ۱۰ - آنتی فرومغناطیس (۲)	۰/۱۲۲	۰/۰۲۹	-۵/۱۵۴	۵/۰۰۲	۰
Fe - % ۱۰ - فرومغناطیس (۲)	۰/۳۳۸	۰/۴۱۷	۳/۵۴۶	۳/۷۹۴	۷/۹۹۹
Fe - % ۱۰ - آنتی فرومغناطیس (۲)	۰/۰۰۲	-۰/۰۱۴	-۳/۷۶۱	۳/۷۷	۰

جدول ۵-۴۸: گشتاور کل و سهم گشتاورهای موضعی TMها و اتمهای Ga و As در نانولوله‌ی آلایش‌یافته GaAs (۳,۳).

میزان آلایش - آلاینده	$\mu_{Ga} (\mu_B)$	$\mu_{As} (\mu_B)$	$\mu_{TM1} (\mu_B)$	$\mu_{TM2} (\mu_B)$	$\mu_{tot} (\mu_B)$
V - % ۵/۵۵	-۰/۰۵۵	-۰/۸۹۳	۲/۹۴۵	۲
Mn - % ۵/۵۵	-۰/۰۰۳	-۰/۳۵۸	۵/۰۵۸	۴/۶۹۸
Fe - % ۵/۵۵	۰/۳۲۴	۰/۹۴۱	۳/۷۳۹	۵/۰۰۴
V - % ۱۱/۱۱ - فرومغناطیس (۱)	۰/۲۵۸	-۰/۵۵۵	۳/۱۹۶	۳/۱۰۲	۵/۹۹۹
V - % ۱۱/۱۱ - آنتی فرومغناطیس (۱)	-۰/۱	۰/۱۲۱	-۳/۲۱	۳/۲	۰
Mn - % ۱۱/۱۱ - فرومغناطیس (۱)	-۰/۰۲۴	-۰/۸۴۳	۵/۰۵۵	۵/۰۵۵	۹/۲۲۲
Mn - % ۱۱/۱۱ - آنتی فرومغناطیس (۱)	۰/۰۱۱	-۰/۰۴	-۵/۰۵۸	۵/۰۵۵	-۰/۰۵۴
Fe - % ۱۱/۱۱ - فرومغناطیس (۱)	۰/۶۸۲	۱/۷۳۳	۳/۷	۳/۸۳۴	۹/۹۴۸
Fe - % ۱۱/۱۱ - آنتی فرومغناطیس (۱)	-۰/۱۲۵	۰/۰۳۲	-۳/۶۷۷	۳/۷۷	۰
V - % ۱۱/۱۱ - فرومغناطیس (۲)	۰/۲۷۷	-۰/۷۶۳	۳/۲۱۴	۳/۲۷۲	۶
V - % ۱۱/۱۱ - آنتی فرومغناطیس (۲)	۰/۰۳۲	-۰/۱۰۹	-۳/۰۷۹	۳/۱۵۵	۰
Mn - % ۱۱/۱۱ - فرومغناطیس (۲)	-۰/۰۷۴	-۱/۱۶	۵/۰۰۷	۵/۰۳۵	۸/۸۰۹
Mn - % ۱۱/۱۱ - آنتی فرومغناطیس (۲)	۰/۰۰۳	۰/۰۶۶	-۵/۰۴۲	۵/۰۵۵	۰
Fe - % ۱۱/۱۱ - فرومغناطیس (۲)	۰/۴۳۸	۰/۴۶۳	۳/۵۲۴	۳/۵۷۵	۷/۹۹۹
Fe - % ۱۱/۱۱ - آنتی فرومغناطیس (۲)	-۰/۰۴۸	۰/۰۱۱	-۳/۴۸۳	۳/۵۲	۰

با توجه به جداول (۴۷-۴) و (۴۸-۴) مشاهده می‌شود که آرایش V, Mn, Fe در دو نانولوله‌ی (۵,۰) و (۳,۳) باعث ایجاد گشتاور مغناطیسی کل غیر صفر می‌گردد. همچون نانولوله‌های آرایش یافته‌ی قبلی بیشترین گشتاور مغناطیسی کل در هر دو نانولوله در حضور آرایش Fe مشاهده گردید. بیشترین سهم در ایجاد گشتاور مغناطیسی کل نیز ناشی از گشتاور موضعی TMها می‌باشد.

نتیجه گیری:

در این پژوهش خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی نانولوله‌های گالیوم آرسناید خالص برای نمونه‌های دسته‌صندلی (n,m) که $n= m= ۵,۴,۶,۷,۸,۹,۱۰,۱۲,۱۴,۱۶,۱۸,۲۰$ و نمونه‌های زیگزاگ $(n,۰)$ که $n= ۴,۵,۶,۷,۸,۹,۱۰,۱۲,۱۴,۱۶,۱۸,۲۰$ مورد بررسی قرار گرفت. سپس نانولوله‌های دسته‌صندلی $(۵,۵)$ و $(۳,۳)$ و زیگزاگ $(۹,۰)$ و $(۵,۰)$ با عناصر واسطه مغناطیسی مورد آرایش قرار گرفت. محاسبات خواص الکترونی و مغناطیسی با کمک نظریه تابعی چگالی و با کد محاسباتی *siesta* انجام شد. خواص ساختاری و الکترونی نانولوله‌های گالیوم آرسناید با تقریب LDA مورد بررسی قرار گرفت و مشخص شد که با افزایش قطر در نمونه‌های نانولوله خالص دسته‌صندلی و زیگزاگ گالیوم آرسناید شاهد ثابت شدن اندازه گاف نواری و همچنین طول پیوند بین اتم‌های گالیوم و آرسناید اطراف آن شدیم و جدایی خمشی برای نانولوله‌های ذکر شده محاسبه گردید که با افزایش قطر در ساختار، شاهد کاهش آن و رسیدن به یک مقدار مشخص بودیم. خواص الکترونی نانولوله‌های دسته‌صندلی و زیگزاگ گالیوم آرسناید خالص بررسی شد که با توجه به روند تغییرات در ساختار نواری، هر دو نانولوله دارای گاف نواری مستقیم شدند. با افزایش قطر برای هر دو نانولوله شاهد رسیدن مقدار گاف نواری به یک نظم مشخص شده و همچنین نانولوله‌های زیگزاگ نسبت به دسته‌صندلی تغییرات گاف نواری بیشتری داشتند. با رسم نمودار چگالی حالت‌های جزئی برای هر دو نانولوله و مقارن بودن حالت‌های اسپینی بالا و پایین شاهد نیم‌رسانای غیرمغناطیسی بودیم که سهم حالت‌های رسانش و ظرفیت نزدیک به تراز فرمی، به طور عمده بترتیب متشکل از حالت‌های $Ga-۴p$ و $As-۴p$ بوده و حالت‌های پیوندی از هیبریداسیون بین حالت‌های $Ga-۴p$ و $As-۴p$ و همچنین از هیبریداسیون بین حالت‌های $Ga-۴s$ و $As-۴p$ در نوارهای

رسانش و ظرفیت، تشکیل شده‌اند. با توجه به حجم سنگین محاسبات، خواص مغناطیسی نانولوله‌های دسته‌صندلی (۵،۵) و (۳،۳) و زیگزاگ (۵،۰) و (۰،۹) آرایش یافته با عناصر واسطه بررسی شد. آرایش این عناصر با جانشینی آن‌ها به جای اتم Ga صورت گرفت. خواص ساختاری، الکترونی، مغناطیسی نانولوله (۹،۰) آلائیده شده با فلزات واسطه (Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) با درصدهای آرایش ۵/۵۵٪ و ۱۱/۱۱٪ و برای نانولوله‌های (۵،۵) و (۵،۰) با درصد آرایش ۵٪ و ۱۱٪ و نانولوله (۳،۳) با درصد آرایش ۵/۵۵٪ و ۱۱/۱۱٪ با آرایش عناصر Fe, Mn, V مورد بررسی قرار گرفت. آرایش در نمونه‌ها منجر به کاهش گاف نواری نسبت به نمونه‌ی خالص و متفاوت بودن آن به ازای هر دو حالت اسپینی بالا و پایین شد که منجر به قطبش اسپینی گردید. با بررسی خواص مغناطیسی نمونه‌های آلائیده مشخص شد که افزایش غلظت آرایش، سبب افزایش ترازهای انرژی مربوط به اوربیتال‌های $3d$ یون مغناطیسی، نزدیک به تراز فرمی می‌شود. بررسی فاز پایدار مغناطیسی در نمونه‌های آلائیده (۹،۰) نشان داد که از بین دو فاز فرومغناطیس و آنتی‌فرومغناطیس، عناصر Sc, Mn, Cr و Ni به صورت فرومغناطیسی و در آرایش با عناصر Ti, Fe, Co به صورت آنتی‌فرومغناطیس به دست آمد ولی برای آرایش V در دو فاز متفاوت به دست آمد که به دلیل فاصله‌ی آن‌ها از یکدیگر است که بر نوع فاز مغناطیسی ساختار اثر گذاشته است. برای نانولوله‌های (۵،۵) و (۳،۳) در آرایش Mn فاز پایدار فرومغناطیس و آرایش Fe فاز آنتی‌فرومغناطیس بدست آمد، در حالی که برای نانولوله (۵،۰)، با آرایش Mn و Fe فاز پایدار فاز آنتی‌فرومغناطیس نتیجه شد. V متفاوت با کلیه حالات فوق عمل کرده و بسته به موقعیت آرایش به صورت آنتی‌فرومغناطیسی و در برخی موارد به صورت فرومغناطیسی مشاهده شد که این رفتار توسط مدل RKKY توجیه می‌شود. پایدارترین فاز فرومغناطیسی و بیشترین گشتاور موضعی مغناطیسی در هر دو نوع نانولوله در حضور آرایش Mn مشاهده شد.

با استفاده از ترکیبات GaAs، بسیاری از وسایل و قطعات الکترونیکی قادرند در بدترین و سخت‌ترین شرایط، به خوبی کار کنند. تحرک بسیار زیاد الکترون‌ها در این ماده، طراحی و ساخت ابر کامپیوترهای سریع‌تر و کارآمدتر را ممکن ساخته است. مطمئناً این ماده ویژگی‌هایی دارد که برای قطعات الکترونیکی امروزی مورد نیاز است. گالیوم آرسناید در ساخت ابزارهایی مانند: مدارهای میکروویو با فرکانس یکپارچه، دیودهای ساطع‌کننده نور مادون قرمز، دیودهای لیزری، سلول‌های خورشیدی و غیره به کار می‌رود. همچنین انعطاف‌پذیری نانولوله‌ها در حضور آلایش و مشاهده خاصیت فرومغناطیس نانولوله‌های آلایش یافته GaAs آلایش یافته با عناصر واسطه در دمای اتاق، کاربردهای متنوعی در اسپینترونیک نیمرساناها، فیلترهای جریان اسپینی و تزریق‌کننده‌های جریان اسپینی ایجاد کرده است.

پیشنهادات برای آینده

۱. بررسی خواص اپتیکی و تراپردی نانولوله‌های GaAs خالص و آلایش یافته با عناصر واسطه مغناطیسی.
۲. بررسی اثر طول، ولتاژ، الکترودهای فرومغناطیسی و دما، بر جریان الکتریکی و اسپینی نانولوله‌های GaAs خالص و آلایش یافته با عناصر واسطه.
۳. استفاده از نانولوله‌های GaAs آلایش یافته با عناصر واسطه بعنوان نیمرساناهای مغناطیسی به منظور تزریق جریان قطبیده اسپینی در کانال نیمرسانا و بررسی اثر مقاوت مغناطیسی تونلی.
۴. بررسی اثر فیلترکننده‌های جریان اسپینی در نانولوله‌های GaAs آلایش یافته با عناصر واسطه.

- [۱] J. S. Blakemore, (1982) "Semiconducting and other major properties of gallium arsenide" Oregon Graduate Center, Beaverton, Oregon 97006.
- [۲] S. J. Moss, and A.Ledwith, (1987) "The Chemistry of the Semiconductor Industry" Springer. ISBN 0-216-92005-1.
- [۳] Gallium arsenide, URL http://en.wikipedia.org/wiki/Gallium_arsenide.
- [۴] bandstr, URL <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/GaAs/bandstr.html>.
- [۵] node75, URL http://cmt.dur.ac.uk/sjc/thesis_dbj/node75.html.
- [۶] S. J.Pearton, C.R.Abernathy, G.T.Thaler, R.M.Frazier, et.al. (2004), J. Phys: Condens Matter 16R209, pp 245.
- [۷] B. D. Cullity, C. D. Graham, (2009), "Introduction to Magnetic Materials", Second edition, IEEE Magnetics Society.
- [۸] چارلز کیتل، (۱۳۸۸)، "آشنایی با فیزیک حالت جامد"، ویراست هشتم، ترجمه اعظم پور قاضی، مهدی صفا اصفهانی، جمشید عمیقیان؛ چاپ اول، مرکز نشر دانشگاهی.
- [۹] H. Li, X. Wang, (2013), "Tailoring spin-orbit torque in diluted magnetic semiconductors", 72.25.Dc,72.20.My, 75 pp50.
- [۱۰] S. Ohya, I. Muneta, P. N. Hai and M. Tanaka, (2010). Phys. Rev. Lett. 104, pp 167204 .
- [۱۱] K. W. Edmonds, K. Y. Wang, R. P. Campion, A. C. Neumann, C. T. Foxon, B. L. Gallagher and P. C. Main, (2002). Applied Physics Letters 81, pp 3010 .
- [۱۲] L. Chen, S. Yan, P. F. Xu, J. Lu, W. Z. Wang, J. J. Deng, X. Qian, Y. Ji and J. H. Zhao, (2009). Applied Physics Letters 95, pp 182505 .
- [۱۳] M. Missous, (1996) "properties of Gallium Arsenide", edited by M. R.Brozel and G. E. Stillman, 3rd ed INSPEC, London.

- [۱۴] L. M. Sandratslii, P. Bruno .Max-Planck Institut, (2003),arxiv: Cond-mat 0303172 V3.
- [۱۵] C.Ghosh, S. Pal, B.Goswami, and P.Sarkar(2007), J. Phys. Chem. C,111,12284, pp 12288.
- [۱۶] W. Sun, X.Wang, Z.Sun, Q. Lei. J. (2013) ,Phys: Superlattices and Microstructures 60 29, pp 39.
- [۱۷] A. Srivastava, S. Kumar Jain, (2014) ” Ab-initio study of structural, electronic and transport properties of zigzag GaP nanotubes “, J. Mol Model 20:21pp71.
- [۱۸] Chopra N G, Luyken R J, Cherrey K, Crespi V H, Cohen M L, Louie S G and Zettl A (1995) Science 269 ,pp 966.
- [۱۹] Zhao M, Xia Y, Zhang D and Mei L. (2003) “Theoretical Modeling of Inorganic Nanostructures” Phys. Rev. B 235415, pp 68.
- [۲۰] Goldberger J, He R, Zhang Y, Lee S, Yan H, Choi H. J and Yang P (2003)“ Rare Earth Nanotechnology” Nature 422 ,pp 599.
- [۲۱] S. M. Lee, Y. H. Lee, Y. G. Hwang, (1999) “Stability and electronic structure of GaN nanotubes from density-functional calculations”, Phys. Rev. B, 60, pp 7788.
- [۲۲] E. Durgun, (2005) ” A Theoretical Study on Silicon and III-V Compound Nanotubes “,Turk J Phys, 29, 307 -pp 318.
- [۲۳] L. Pengfei , et. Al (2013) ” Structural properties and energetics of GaAs nanowires “, Physica E 52 , 34, pp39 .
- [۲۴] J.P. Perdew, J.A. Chevary, S.H. Vosko, K.A. Jackson, M.R. Pederson, D.J. Singh, C. Fiolhais, (1992) “Functionals: Generalized Gradient Approximation“ Physical Review B 46, pp 6671.
- [۲۵] Q. Wang, Q. Sun, P. Jena, Y. Kawazoe, (2005) , Applied Physics Letters 162509 pp 87.
- [۲۶] I.Tsubokawa, (1960) “On the Magnetic Properties of a CrBr₃ Single Crystal” J. Phys. Soc. Jpn. 15, 1664, pp 1668 .

- [۲۷] N. B. Brandt, V. V. Moshchalkov, A. O. Orlov, L. Skrbek. (1983) "Investigation of electric and magnetic properties of the semimagnetic semiconductors $Hg_{1-x}Mn_xTe$ at low and infralow temperatures", Zh. Eksp. Teor. Fiz. 84, 1050, pp1074.
- [۲۸] Igor Zutic, Jaroslav Fabian, and S.Das Sarma. (2004) , Spintronics: Fundamentals and applications. Rev. Mod. Phys., 76, pp323.
- [۲۹] H. Li, X. Wang, (2013), "Tailoring spin-orbit torque in diluted magnetic semiconductors", 72.25.Dc,72.20.My,75, pp 50.
- [۳۰] K. Sato and H. K. Yoshida, (2002) "First principles materials design for semiconductor spintronics", Semi. Sci. Tech, 17, pp 367.
- [۳۱] C. Zener, (1951) "Interaction between the d-Shells in the Transition Metals. III. Calculation of the Weiss Factors in Fe, Co, and Ni", Phys. Rev, 83, pp 299.
- [۳۲] T. Dietl, H. Ohno, and F. Matsukura, (2001) "Hole-mediated ferromagnetism in tetrahedrally coordinated semiconductors", Phys. Rev. , 195205, pp 63.
- [۳۳] Oksana Gaier, (2009), "A study of exchange interaction, magnetic anisotropies, and ion beam induced effects in thin films of Co₂-based Heusler compounds", Datum der wissenschaftlichen Aussprache: 15.07.2009, pp 386.
- [۳۴] N Akdogan, (2008), "Origin of Ferromagnetism in Oxide-based Diluted Magnetic semiconductors", Ruhr-Universitat Bochum, Germany.
- [۳۵] B. D. Cullity, C. D. Graham, (2009), "Introduction to Magnetic Materials", Second edition, IEEE Magnetics Society, Sponsor; A John Wiley and Sons, Inc. Publication.
- [۳۶] R. M. Martin, (2004), Electronic Structure: Basic Theory and Methods, Cambridge University Press, Cambridge, U.K.
- [۳۷] سید جواد هاشمی فرد، (۱۲-۱۴ آذر ۸۷) "آشنایی با مطالعات مغناطیسی در چارچوب نظریه تابعی چگالی"، مدرسه‌ی پاییزه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان.
- [۳۸] R. M. Dreizler, and E.K.U.Gross, (1990) "Density Functional Theory", Springer Verlag, Berlin.

- [۳۹] M. D. Segall, (2002) "First principles methods using CASTEP" *J.Phys. Condens.Matter*, 2717-2744, pp14.
- [۴۰] P. Hohenberg and W. Kohn, (1964) "Inhomogeneous Electron Gas", *Phys. Rev. B*, 136, pp 864.
- [۴۱] W. Kohn and L. J. Sham, (1965) "Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects", *Phys. Rev*, 140, pp 1133.
- [۴۲] D. M. Ceperley and B. J. Alder, (1980), "Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method" *Phys. Rev. Lett.* 45,pp 566.
- [۴۳] J. P. Perdew and A.Zunger, (1981) "Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems", *Phys. Rev. B- Condensed Matter*, 5048, pp23.
- [۴۴] U. Von Barth and L. Hedin, (1972) "A local exchange-correlation potential for the spin polarized case", *J. Phys. C, Solid State Phys*, 5, pp 1629.
- [۴۵] J. P. Perdew and Y. Wang, (1992) "Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy", *Phys. Rev. B*, 45, pp13244.
- [۴۶] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, (1997) "Generalized Gradient Approximation Made Simple", *Phys. Rev. Lett*, 77, pp 3865.
- [۴۷] J. Grotendorst, S. Blugel, D. Marx, (2006), "Computational Nanoscience: Do It Yourself", Vol. 31, John von Neumann Institute for Computing, pp 159194.
- [۴۸] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. Garcia, J. Junquera, P. Ordejon, and D. Sanchez-Portal, (2002) "The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation", *J. Phys : Condens. Matter*, 14, pp 2745.
- [۴۹] X. Gonze, I. M. Beuken, R. Caracas, F. Detraux, M. Fuchs, G. M. Rignanese, L. Sindic, M. Verstraete, G. Zerah, F. Jollet, et al, (2002) "First-principles computation of material properties: the ABINIT software project", *Comput. Mat. Science*, 25, pp 478.
- [۵۰] Vienna ab-initio simulation package, URL <http://cms.mpi.llnivie.ac.at/vasp>.
- [۵۱] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz.Wienzk, URL <http://www.wien2k.at>.
- [۵۲] Quantumpresso, URL <http://www.quantum-espresso.org>.

[Δ٣] Openmx, URL <http://www.openmx-square.org>.

[Δ٤] Gaussian, URL <http://www.gaussian.com>.

[ΔΔ] Turbomole, URL <http://www.turbomole.com>.

[Δ٢] <http://departments.icmab.es/leem/siesta/Databases/Pseudopotentials/periodictable-intro.html>

[Δ٧] P. Ordejon, (1998) “Order-N tight-binding methods for electronic-structure and molecular dynamics”, *Comput. Mater. Sci*, 12, pp 157.

[Δ٨] P. Ordejon, E. Artacho, and J. Soler, (1996) “Self-consistent order-N densityfunctional calculations for very large systems”, *Phys. Rev. B*, 53, pp 10441.

[Δ٩] P. Ordejon, D. A. Drabold, M. P. Grumbach, and R.M. Martin, (1997), *Phys. Rev. B* 48, 65,pp 453.

[٢٠] N. Troullier and J. Martins, (1993), “Efficient pseudopotentials for p lane-wave calculations”, *Phys. Rev. B*, pp 43.

[٢١] N. Troullier and J. Martins, (1991), “Efficient pseudopotentials for plane -wave calculations. II. Operators for fast iterative diagonalization”, *Phys. Rev. B*, 43, pp 8861.

[٢٢] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, (1976) “Special points for Brillouin-zone integrations” *Phys. Rev. B* 13,pp 5188.

[٢٣] M. T. Hussein, M. A. Abdulsattar, H. A. Hameed, (2014) “Electronic and vibrational spectroscopic properties of GaAs diamondoids using Density Functional Theory”, *International Journal of Advance Industrial Engineering*.

[٢٤] Y. Guo, X. Yan, Y. Yang, (2009) “First -principles study of narrow single-walled GaN nanotubes”, *Phys. Lett. A*, 373, pp 367.

[٢Δ] J.Singh, (1995)“Semiconductor optoelectronics - physics and technology”, McGraw, USA, pp 6975 .

Abstract

There are a wide range of semiconductors doped with transition metals (magnetic atoms) which are known as diluted magnetic semiconductors, DMS. On the other hand DMSs produced from compounds of III-V semiconductors, groups due to their applications in spintronics, have attracted by most of researchers. Growth of demand for solid state electronic devices which to have more quality and speed in comparison to existing samples, caused great attention to GaAs compounds.

In this work the electronic and magnetic properties of pure and doped GaAs nanotubes with Transition Metals (V, Cr, Mn, Fe, Co, Sc, Ti, Ni) using spin polarized density function theory and localized density approximation (LDA) approach by SIESTA code. Have been studied Calculations has been done on pure armchair (4,4), (5,5), (6,6), (7,7), (8,8), (9,9), (10,10), (12,12), (14,14), (16,16), (18,18), (20,20) and zigzag (4,0), (5,0), (6,0), (7,0), (8,0), (9,0), (10,0), (12,0), (14,0), (16,0), (18,0), (20,0) nanotubes. The electronic calculations revealed that these GaAs nanotubes are semiconductors.

(3,3) and (5,5) armchair and (5,0) and (9,0) zigzag nanotubes have been doped by transition Metals. The results from this study can be used for future experimental studies on diluted magnetic semiconductors. Considering the obtained results from this study and flexibility of GaAs nano-tubes in presence of doping and having ferro-magnetic property in room temperature, GaAs nanotubes doped with transition metals are offered as good candidate to be applied in spintronic devices, spin current filters and spin current injectors.

Keywords: GaAs nanotubes, density function theory, SIESTA code, diluted magnetic semiconductor (DMS), transition Metals (TM), spintronic.



Shahrood University

Faculty of physics

Nano Physics

**Study of electronic and magnetic properties of
GaAs nanotubes by means of density functional
theory (DFT) approach**

Reza Fathi

Supervisor:

Dr. T. Movlarooy

September 2015