



دانشکده فیزیک

گرایش نانوفیزیک

پایاننامه کارشناسی ارشد

بررسی خواص الکترونی و ترابردی نانو روبانهایGaN

توسط رهیافت نظریه تابعی چگالی

محمد افضلى

اساتيد راهنما

دكتر طيبه مولاروى

دکتر سعید حسامی پیله رود

شهريور ۱۳۹۴

همچون

آن پیرزنی ک**ه**

برای خرید یوسف

کلاف نخی آورده بود تا

جز خريداران يوسف باشد؛

بتقريم بد

الجت مقدح ماجب الزماني (جج)

•

نائب برحق ايشان

نشكر و قدردانى :

با تشکر فراوان از استادگرامی سرکار خانم دکتر مولاروی بخاطر تمام کمکهایی که در انجام این پایان نامه به اینجانب نمودند و تقدیر و سپاس از زحمات و دلسوزیهای بیدریغ پدر و مادرم و همینطور همسرم که دلسردیهایم را با دلگرمیهایش فراموش کردم و از دوست خوبم احمدکاوه که اگر خاطرهای در این شهر دور از ذهنم نرود، خاطره ی اوست و دوست بزرگوارم مصطفی شعبانی که همیشه حضور و کلامش راهگشایم بود و فرشید عنایتی، رضا فتحی و تمامی دوستان و همدورهای ها و دوره های بعد که به آنما زحمت داده و از صبر و تحملشان بمره بردهام کمال تشکر را دارم.

تعهد نامه

اینجانب محمد افضلی دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته نانوفناوری دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه بررسی خواص الکترونی، ترابردی نانو روبانهای GaN توسط رهیافت نظریه تابعی چگالی تحت راهنمائی سرکار خانم دکتر طیبه مولاروی و جناب آقای دکتر سعید حسامی پیله رود متعهد میشوم.

- 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 صنعتی شاهرود » و یا «
 Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایح اصلی پایان نامه تأثیر گذار بودهاند 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.

تاريخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نش*ر*

- 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.

چکیدہ

اسپین ترونیک یکی از موضوعات محبوب در فیزیک ماده چگال، شیمی مواد و صنعت الکترونیک است. از دلایل محبوبیت این فن آوری مبتنی بر اسپین الکترون می توان به داشتن یک درجه آزادی بیشتر نسبت به سیستمهای مشابه الکترونیکی، طولانی بودن همدوسی یا زمان واهلش اسپین نسبت به بار اشاره کرد. در این پژوهش از بین نیمرساناهای گروه V–III، گالیوم نیترید بدلیل داشتن دمای کوری بالای دمای اتاق و گاف نواری بزرگ به عنوان ماده مورد بررسی انتخاب گردید. سعی ما در این پژوهش یافتن ساختارهایی با ویژگی مناسب برای استفاده در مطالعات ترابردی بوده است.

در قسمت اول خواص الکترونی، مغناطیسی نانو روبان خالص، دارای نقص و آلایش یافته GaN با عناصر واسطه (Cr, Mn, Fe, Ni)، با استفاده از رهیافت نظریه تابعی چگالی قطبیده اسپینی و تقریب شیب تعمیم یافته GGA توسط کد محاسباتی SIESTA مطالعه شده است و در قسمت دوم خواص ترابردی نانو روبان خالص با استفاده از رهیافت تابع گرین غیر تعادلی و تقریب شیب تعمیم یافته GGA توسط کـ محاسباتی TRANSIESTA بررسی شده است. نتایج بررسیهای مغناطیسی و الکتریکی حاصل نشان میدهد که حضور پیوندهای آویزان درون ساختار GaN بسته به محل پیونـدهای آویـزان و نظـم لـههای ساختار موجب بروز خاصیت نیم فلزی ذاتی، فلز مغناطیسی و نیمرسانای مغناطیسی می گردد. و مطالعه خواص ترابردی نشان میدهد که بیشترین جریان مربوط به اسپین پایین در نانوساختارهای زیگزاگ و بطور مشخص در قطعه نوع یک برای ولتاژ ۵۷/۰ با جریان ۲۷ میکروآمپر بوده و بهتـرین فیلترینـگ مربـوط بـه قطعهی نوع پنج و شش با فیلترینگ ۱۰۰٪ در ولتاژ ۵۲/۰ ولت میباشد. در قطعات نوع یک، چهار، پـنج و شش پدیده مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR) مشاهده گردید، که بهترین NDR مربوط به قطعه نوع یک و میار و موا یک و مول شش میباشد.

براساس نتایج این پژوهش، امکان دست یابی به جریان میکروآمپری و ۱۰۰٪ قطبیده اسپینی از ساختار نانوروبان گالیوم نیترید خالص بدون به کارگیری آلایش مغناطیسی یا اعمال ولتاژ گیت وجود دارد. کلمات کلیدی: نانو روبان GaN، نظریه تابعی چگالی، کد SIESTA، رهیافت تابع گرین غیر تعادلی(NEGF)، پیوند آویزان.

مقالات مستخرج از پایان نامه

- *I.* M. Afzali, T. Movlarooy, S. Hessami Pilehrood, (2014) "Effect of edge states and quantum confinement on the electronic and magnetic propertie of GaN nanosheets and nanoribbons", the 17th Iranian physical chemistry, Tehran, Iran
- II. M. Afzali, T. Movlarooy, S. Hessami Pilehrood, (2014) "Transition metal doped armchair (w=6) GaN nanoribbon; a diluted magnetic semiconductor", the 17th Iranian physical chemistry, Tehran, Iran

فهرست

فصل اول

۲	۱-۱خواص نیمرساناهای گروه III-N و کاربردهای آنها
۲	۱–۲گاليوم نيتريد
۶	۱ –۲ – ۱ مزایای گالیوم نیترید
۶	۱–۳نانو ساختارها
۷	۱ –۳ –۱ نانو کمربند (نانو روبان)
λ	۱ –۳ –۲ سنتز نانو روبان گالیوم نیترید
λ	۱ –۳ –۳ انواع نانو روبان
۹	۱–۴پارامترهای ساختاری نانو روبانها
۱۰	۵-۱ طول پیوند

فصل دوم

١٢	۲ – ۱ مقدمه
۱۳	۲-۱چشم انداز اسپین ترونیک
۱۶(GN	۲-۱-۱ چند لایههای مغناطیسی مبتنی بر فلز (قطعه ۱ R
۱۸	۲-۱-۲ مقاومت تونلی (TMR)
۱۸	۲–۱–۳اسپین–LED و لیزر
۱۹	۲-۱-۴ قطعات نیمرسانای مبتنی بر اسپین جانبی
۲۱	۲-۲ اسپین ترونیک
۲۲	۲-۲-۱ مواد تزریق کنندهی جریان قطبیده اسپینی

74	۲-۱-۱ فرومغناطیسهای فلزی (TM)
۲۵	۲-۱-۲ نیمرساناهای رقیق شده مغناطیسی (DMS)
۲۷	۲−۱−۲ نیمفلزها (HM)
۲۸	۲-۳پیوند آویزان و اثر آن در ساختار نانو روبان گالیوم نیترید

فصل سوم

۳۲	۳–۱مقدمه
۳۲	۳-۲ نظریه تابعی چگالی
۳۳	۳-۲-۲ مسئله بس ذره ای
٣۴	۳-۲-۲ نظریه هوهنبرگ -کوهن
٣۶	۳-۲-۳ معادلات کوهن ـ شم
٣٩	۳-۲-۳ تقریب چگالی موضعی (LDA)
٣٩	۳-۲-۳ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)
۴۰	۳-۲-۶ شمای کلی نظریه ی تابعی چگالی
۴۱	۳-۲-۳ نظریه تابعی چگالی قطبیده اسپینی (SDFT)
۴۳	۳–۲–۳ SIESTA ککد ۲–۳
۴۴	۳-۳مقدمه بر تابع گرین غیر تعادلی(NEGF)
۴۵	۳-۳-۱ مدل ساده برای ترابرد غیرتعادلی
۴۹	۳–۳–۲ روش نظری در کد TRANSIESTA
۵۰	۳–۳–۳ برپایی سیستم
۵۲	۳-۳-۴ محاسبه جريان

فصل چهارم

۵۶۴ مقدمه.
۲-۴ بهینهسازی پارامترها
۴-۲-۴ انرژی قطع
۴-۲-۲ بردار شبکهبندی و تعداد نقاط K در فضای وارون۳۰۰ ۲۰
۴-۲-۳ تعیین پارامترهای ورودی نانو روبان گالیوم نیترید خالص و آلایشیافته۵۹
۴-۲-۴ بهینهسازی ساختار
۴-۳خواص الکترونی نانو روبان های خالص گالیوم نیترید (دسته صندلی، زیگزاگ)
۴–۳–۱ ساختار نواری
۴–۳–۲ بررسی اثر تهی جای در نانو ساختارهای نانو روبان گالیوم نیترید۶۸
۴-۴بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانو روبان آلایشیافته گالیوم نیترید ۷۰
۴-۴-۱ بررسی نانو روبانهای محدود شده توسط هیدورژن
۴-۴-۲ بررسی روی نانو روبانهای محدود نشده
۴-۴-۳ بررسی حالتهای نیمه محدود شده۸۰
۴-۴-۴ بررسی اعمال محدودیت توسط سایر عناصر روی نانوساختارهای GaN
۴–۵جمع بندی

فصل پنجم

λλ	۵–۱مقدمه
λλ	۵-۲ فیلترینگ
λλ	۵-۳ مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR)
٨٩	۵-۴ انواع قطعات مورد بررسی

مراجع	ა
۵-۶ پیشنهاد برای ادامه کار	
۵-۵ جمع بندی	
۵-۴-۷ بررسی جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه نوع هفت ۱۱۲	
۵-۴-۶ بررسی جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه نوع شش ۱۰۳	
۵-۴-۵بررسی جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه نوع پنج ۱۰۲	
۵-۴-۴ بررسی جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه نوع چهار ۹۹	
۵-۴-۳بررسی جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه نوع سه۹۸	
۵-۴-۲ بررسی جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه نوع دو۹۶	
۵-۴-۱ بررسی جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه نوع یک۹۱	

فهرست اشكال

۳	شکل ۱-۱: سرعت رانش الکترون در دمای ۳۰۰K در GaAs و GaAs با
۳	شکل ۱-۲: (الف) بازنمایی سلول واحد ورتسایت با پارامترهای a و c از یک ترکیب III-N
۷	شکل ۱-۳: نانومیله ZnO که در نانو روبانش نفوذ کرده[۸]
ی دهنده	شکل ۱-۴ : (الف) نمای بزرگ شده از ساختار GaN که به شکل کمربند است (ب)تصویر SEM نشان
۸[چگالی بالای نانو روبانهای GaN رشد داده شده برروی ناحیه ای گسترده ای از زیرلایه سیلیکون [۹
٩	شکل ۱-۵ : شکل شماتیک انواع نانو روبانها (الف) نانو روبان زیگزاگ (ب) نانو روبان دستهصندلی
۹	شکل ۱-۶: (راست) نانو روبان دستهصندلی با پهنای ۶ اتم (چپ) نانو روبان زیگزاگ با پهنای ۶ اتم
۱۲	شکل ۲-۱٪ : نمودار روند توسعهی تعداد ترازیستورها بر مبنای قانون مور
۱۴	شکل ۲-۲ : طرح شماتیک آزمایش اشترن –گرلاخ
۱۴	شکل ۲-۳ : نمایشی از حوزههای مطالعاتی اسپینترونیک[۷]
قاومت	شکل ۲-۴ : شمایی از دو پیکربندی متفاوت شیر اسپینی GMR مقاومت حداکثر(سـمت راسـت) م
۱۷	حداقل(سمت چپ) [۷]
و لايــه	شکل ۲-۵: چگالی حالتهای متفاوت برای پیکربندی موازی (چـپ) و پـاد مـوازی (راسـت) بـرای د
۱۷	فرومغناطيس[٧]
۲۰	شکل ۲-۶: شکل شماتیک یک شیر اسپینی عمودی(راست)و جانبی (چپ)
۲۱	شکل ۲-۲: شکل شماتیک یک ترازیستور اثر میدانی اسپینی (Spin-FET)
ز فرمی،	شکل ۲-۸: نمودار چگالی حالت یک فلز فرومغناطیس. به ازای هر دو حالت اسپین بالا و پایین در ترا
۲۴	شاهد چگالی حالت غیر صفر و نامتقارن هستیم [۲۷]
يسى ۲۶	شکل ۲-۹: الف)نمونهای از یک نیمرسانای مغناطیسی ب)نمایش چگالی حالت یک نیمرسانای مغناط
۲۷	شکل ۲-۱۰: نمودار چگالی حالت برای نیمفلز

شکل ۲-۱۱: (الف) گسترش تراز انرژی مولکولی به نوار و جایگاه تراز پیوند آویزان (ب) تصویر STM پیوند
آویزان در یک صفحه ۰۰۱ سیلیسیوم-هیدروژن که به با غلظت بالا آلایش نوع n شده
شکل ۳-۱:الف) شکل طرحواره دو پراب جریان/ ولتاژ که از طریق یک سیستم تک تراز انرژی ٤ به هم متصل
شده اندμ2 < ε < μ۱. ب) تراز انرژی ε در اثر جفت شدگی با الکترودها طبق اصل عدم قطعیت به اندازه γ
بهن مىشود
شکل ۳-۲:مدلی برای ترابرد الکترونی برای یک مولکول یا یک نانو سیم کوتاه {پایان نامه ترکی}
شکل ۳-۳: طرح واره ای از خود انرژی های به جای الکترودهای نامتناهی در ترابرد الکترونی در یک مولکول ۵۲
شکل ۳-۴: طرح شماتیک روش خودسازگار برای مدل NEGF+DFT
شکل ۴-۱: فضای حقیقی شبکه بندی شده
شکل ۴-۲: بهینه انرژی قطع برای نانو روبانهای زیگزاگ (الف) محدود شده (ب) محدود نشده۵۹
شکل ۴-۳: بهینه انرژی قطع برای نانو روبانهای دستهصندلی (الف) محدود شده (ب) محدود نشده ۶۰
شکل ۴-۴: بهینه تعداد نقاط K برای نانو روبانهای GaN محدودشده (الف) دستهصندلی (ب) زیگزاگ ۶۰
شکل ۴-۵:(ردیف بالا)ساختار نواری نانو روبانهای دسته صندلی خالص محدود نشده GaN (ردیف پایین)
ساختار نواری نانو روبانهای دستهصندلی خالص محدود شده GaNGan وروبانهای دسته صندلی
شکل ۴-۶ : (ردیف بالا) ساختار نواری نانوروبان های زیگزاگ محدود نشده GaN (ردیـف پـایین) سـاختار
تواری نانوروبانهای زیگزاگ خالص محدود شده GaNGaN
شکل ۴-۷ : (الف)پیوندهای آویزان محدود نشده (ب)پیوند آویزان محدود شده با هیـدروژن (در نـانو روبـان
دستەصندلى)
شکل ۴-۸ : چگالی حالتهای کلی ترکیب برای ساختار زیگزاگ GaN محدود نشده
شکل ۴-۹ : ساختار نواری (الف) تهی جای N در موقعیت لبه (ب) تهی جای N در موقعیت مرکز(ج)تهـی
جای Ga در موقعیت لبه (د) تهی جای Ga در موقعیت مرکز ۶۹
شکل ۴-۱۰: آلایش در مرکز (راست) لبه (چپ) ابر سلول نانو روبان دسته صندلی GaN کاملا محدود

شکل ۴-۱۱: ساختار نواری نانو روبانهای دستهصندلی در حضور آلایش در مرکز ساختار۷۱
شکل ۴-۱۲: ساختار نواری نانو روبانهای دستهصندلی در حضور آلایش در لبه ساختار۷۲
شکل ۴-۱۳: آلایش در لبه (راست) مرکز (چپ) ابر سلول نانو روبان زیگزاگ GaN کاملا محدود شده۷۳
شکل ۴-۱۴: ساختار نواری نانو روبانهای زیگزاگ در حضور آلایش در مرکز ساختار
شکل ۴-۱۵: ساختار نواری نانو روبانهای زیگزاگ در حضور آلایش در لبه ساختار۷۴
شکل ۴-۱۶: ساختار نواری نانو روبانهای دستهصندلی در حضور آلایش در مرکز ساختار۷۶
شکل ۴-۱۷: ساختار نواری نانو روبانهای دستهصندلی در حضور آلایش در لبه ساختار۷۷
شکل ۴-۱۸: ساختار نواری نانو روبانهای زیگزاگ در حضور آلایش در مرکز ساختار۷۸
شکل ۴-۱۹: ساختار نواری نانو روبانهای زیگزاگ در حضور آلایش در لبه ساختار
شـــــکل ۴-۲۰: ســـــاختار دســـــتهصــــندلی بـــــا Ga محــــدود شــــده (راســــت)
ساختار زیگزاگ با Ga محدود شده(چپ)
شکل ۴-۲۱: ساختار GaN (الف) دسته صندلی محدود شده با هیدورژن (ب) دسته صندلی Ga محدود شده
(ج) زیگزاگ محدود شده با هیدورژن (د) زیگزگ Ga محدود شده
شــکل ۴-۲۲: چگـالی حالــتهـای کلــی ترکيـب؛ ســاختار زیگــزاگ Ga محــدود شــده (راســت)
دستهصندلی Ga محدود شده (چپ)
شکل ۴-۲۳: ساختار GaN (الف) دسته صندلی محدود شده با هیدورژن (ب) دسته صندلی N محدود شـده
(ج) زیگزاگ محدود شده با هیدورژن (د) زیگزگ N محدود شده
شــکل ۴-۲۴ :چگــالی حالــتهــای کلــی ترکيــب؛ (راســت) ســاختار زیگــزاگ N محــدود شــده؛
(چپ) ساختار دستهصندلی N محدود شده
شکل ۴-۲۵: ساختارهای نواری حاصل از اعمال محدودیت Ga با استفاده از عناصر مختلف، در دو سـاختار
زیگزاگ (سمت چپ) و دسته صندلی (سمت راست)

٨٩	شکل ۵-۱: شکل شماتیک جریان-ولتاژ برای مقاومت دیفرانسیلی منفی
طعه نوع	شکل ۵-۲ : الکترودها و ناحیه پراکندگی هردو دارای پیوندهای آویزان محدود نشده دستهصندلی-ق
۹١	يک
٩٢	شکل ۵-۳: نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی برای ولتاژهای مختلف قطعه نوع یک-دستهصندلی
٩٢	شکل ۵-۴: نمودار جریان-ولتاژ برای قطعه نوع یک – دستهصندلی
۹۳	شکل ۵-۵ : نمودار چگالی حالتها برای ناحیه پراکندگی برای قطعه نوع یک – دستهصندلی
ع یک ۹۳	شکل ۵-۶: الکترودها وناحیه پراکندگی هردو دارای پیوندهای آویزان محدود نشده زیگزاگ-قطعه نوع
٩۴	شكل ۵-۷:نمودار جريان-ولتاژ براي نانوساختار زيگزاگ قطعه نوع يک
۹۵	شکل ۵-۸ : نمودار ساختار نواری و چگالی حالتها الکترود های قطعه نوع یک- زیگزاگ
٩۶	شکل ۵-۹: نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی برای ولتاژهای مختلف قطعه نوع یک-زیگزاگ
.لى (ب)	شکل ۵-۱۰: الکترودها و ناحیه پراکندگی هردو دارای پیوندهای آویزان محدود شده (الف)دستهصند
٩٧	زیگزاگ
لى (ب)	شکل ۵-۱۱:الکترودها و ناحیه پراکندگی هردو دارای پیوندهای آویزان محدود شده (الف)دستهصند
٩٧	زیگزاگ
ن محدود	شکل ۵-۱۲: الکترود دارای پیوندهای آویزان محدود نشده و ناحیه پراکندگی دارای پیوندهای آویزان
٩٨	شده
٩٩	شكل ۵-۱۳:نمودار جريان-ولتاژ قطعه نوع سه
ن نيمــه	شکل ۵-۱۴: الکترود دارای پیوندهای آویزان محدود نشده ناحیه پراکندگی دارای پیونـدهای آویـزا
٩٩	محدود شده
۱۰۱	شکل ۵-۱۵: نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی برای ولتاژهای مختلف قطعه چهار
۱۰۱	شکل ۵-۱۶: نمودار جریان-ولتاژ برای قطعه چهار
آويزان	شکل ۵-۱۷: الکترود دارای پیوندهای آویزان نیمه محدود شده ناحیـه پراکنـدگی دارای پیونـدهای

مودار جریان-ولتاژ برای قطعه پنج	شکل ۵-۱۸: ن
مودار ضریب عبور بر حسب انرژی برای ولتاژهای مختلف قطعه پنج	شکل ۵-۱۹: نړ
الکترودها دارای پیوندهای آویزان نیمه محدود شده ناحیه پراکندگی دارای پیوندهای آویـزان	شکل ۵-۲۰ :
ىدە (الف) دىستەصندلى (ب) زيگزاگ (قطعە نوع شش)	نيمه محدود ث
ررسی اثر یان-تلر روی ساختار زیگزاگ Ga محدود شده	شکل ۵-۲۱: بر
ساختار نانو روبانزیگزاگ ۸ سلول واحدی؛ پس از انجام فرآیند واهلش۸ سلول واحدی؛ پس از انجام فرآیند واهلش	شکل ۵-۲۲: س
ساختار نواری نانو روبان زیگزاگ؛ (راست) ۸ سلول واحدی (چپ) ۹ سلول واحدی	شکل ۵-۲۳: ى
اختار نواری نانو روبان دستهصندلی ۵ سلول واحدی	شکل ۵-۲۴:س
مودارضریب عبور برحسب انرژی برای قطعه نوع۶(دستهصندلی) بهازای ولتاژ اعمالی متفاوت ۱۰۸	شکل ۵-۲۵: ن
مودار جریان-ولتاژ برای قطعه نوع ۶ دستهصندلی	شکل ۵-۲۶: نه
نمودار ضریب عبور در نانو روبان زیگزاگ (۹ سلول واحدی) به ازای ولتاژ اعمالی متفاوت۱۰۹	شکل ۵-۲۷ : :
مودار جریان-ولتاژ برای قطعه نوع ۶ زیگزاگ (۹ سلول واحدی)	شکل ۵-۲۸: ن
لکترودها و ناحیه پراکندگی دارای پیوندهای آویزان نیمه محـدود شـده (Ga محـدود شـده)	شکل ۵-۲۹: اا
۱۱۰	(قطعه نوع شث
نمودار جریان-ولتاژ برای نمونه زیگزاگ ۸ سلول واحدی قطعه نوع ۶	شکل ۵-۳۰ : :
مودار ضریب عبور در نانو روبان زیگزاگ (۸ سلول واحدی)به ازای ولتاژ اعمالی متفاوت۱۱۱	شکل ۵-۳۱: ن
لکترودها دارای پیوندهای آویزان نیمه محدود شده ناحیه پراکندگی دارای پیونـدهای آویـزان	شکل ۵-۳۲: اا
فطعه نوع هفت)	محدود شده (ف
مودار ضریب عبور در قطعه نوع ۲- به ازای ولتاژ اعمالی متفاوت	شکل ۵-۳۳: ن
مودار جریان ولتاژ برای قطعه نوع ۷	شکل ۵-۳۴: ن
ررسی نمودار جریان ولتاژ تمامی قطعات	شکل ۵-۳۵: بر

فهرست جداول

	۱-۱ : خواص گالیوم نیترید با ساختار ورتسایت[۴]۵	جدول
	۴-۱: پارامترهای ورودی برای انجام محاسبات ساختاری، خواص الکترونی و مغناطیسی	جدول
	۴-۲: بررسی گاف نواری برای سلول واحد نانو روبانهای GaNGaN قان بارسی گاف نواری برای سلول واحد نانو	جدول
	۴-۴: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و خواص الکترونی ناشی از تهـی جـایهـای	جدول
	۶۹	مختلف
	۴-۴ : اثر آلایش در مرکز نانو روبانهای دسته صندلی، که بطور کامل توسط اتمهای هیدوژن محدود	جدول
	Y 1	شدەاند.
	۴-۵: اثر آلایش در لبه نانو روبانهای دستهصندلی، که بطور کامل توسط اتمهای هیـدوژن محـدود	جدول
	۷۲	شدەاند.
	۴-۶ :اثر آلایش در مرکز نانو روبانهای زیگزاگ، که بطور کامل توسط اتمهای هیدوژن محدود شده۷۳	جدول
	۴-۷: اثر آلایش در لبه نانو روبانهای زیگزاگ، که بطور کامل توسط اتمهای هیدوژن محدود شدهاند۷۵	جدول
	۴-۸: بررسی اثر پیوند آویزان بر انرژی کل(برحسب(eV))۷۵	جدول
	۴-۹: اثر آلایش در مرکز نانو روبانهای دستهصندلی محدود نشده	جدول
	۴-۱۰: اثر آلایش در لبه نانو روبانهای دستهصندلی محدود نشده	جدول
	۲۹-۱۱ : اثر آلایش در مرکز نانو روبانهای زیگزاگ محدود نشده	جدول
	۴-۱۲:اثر آلایش در لبه نانو روبانهای زیگزاگ محدود نشده	جدول
)	۴-۱۳: بررسی انرژی کل برحسب (<i>eV</i>) برای سه حالت کاملا محدود شده، محدود نشده نیمه محدود ۱۰	جدول
	۱۴-۴: نتایج اعمال محدودیت Ga با استفاده از عناصر مختلف، در دو ساختار زیگزاگ و دسته صندلی۸۴	جدول
	۵-۱: جریان- ولتاژ برای ساختار دستهصندلی (قطعه نوع یک)۹۱	جدول ا
	۵-۲: جریان – ولتاژ برای نانوساختار زیگزاگ قطعه نوع یک۹۴	جدول

جدول ۵-۳:جریان – ولتاژ برای ساختار دسته صندلی (قطعه نوع دو)
جدول ۵-۴ : جریان – ولتاژ برای ساختار زیگزاگ (قطعه نوع دو)
جدول ۵-۵: جریان – ولتاژ برای ساختار زیگزاگ (قطعه نوع سه)
جدول ۵-۶ : مقادیر جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه چهار
جدول ۵-۷: بررسی جریان – ولتاژ و فیلترینگ برای قطعه نوع پنج
جدول ۵-۸:جریان – ولتاژ و فیلترینگ برای نمونه دسته صندلی (قطعه نوع شش)
جدول ۵-۹: جریان – ولتاژ و فیلترینگ برای نمونه زیگزاک ۹ سلول واحدی (قطعه نوع شش)
جدول ۵-۱۰: مقادیر جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه زیگزاگ (۸ سلول واحدی) نوع
11.
جدول ۵-۱۱:جریان-ولتاژ و فیلترینگ برای قطعه نوع هفت

فصل اول

مقدمهای بر گالیوم نیترید (GaN)، نانوساختارها، کاربردها و خواص آن

۱-۱ خواص نیمرساناهای گروه III-N و کاربردهای آنها

خانواده نیتروژن در گروه III/V عبارتست از AIN, GaN, InN که این آلیاژها همگی موادی با گاف نواری پهن هستند و میتوانند در هر دو ساختار ورتسایت و زینک بلند متبلور شوند. ورتسایت AIN, GaN, InN در دمای اتاق به ترتیب دارای گافهای نواری مستقیم Y/۴ eV، ۱/۹ eV و ۶/۲ eV است[۱]. این مواد همچنین کاربردهایی، در حوزه الکترونیک توان بالا^۱، سیستمهای میکروموج^۲، ارتباطات بی سیم^۳ و ماهواره ها نیز دارند. حوزه کاربردی دیگر این گروه از ترکیبات، شامل سیستم های آشکارساز و سنسورهای بیولوژیکی^۴ و حوزه جدیدی از علم الکترونیک به نام اسپین ترونیک می باشد. از دیگر مزیتهای ترکیبات گروه NII میتوان به پایداری حرارتی و مکانیکی بالا، همچنین ثابت پیزوالکتریکی^۵ بزرگ آنها اشاره کرد[۲].

۲-۱ گالیوم نیترید ۲

گالیوم نیترید (GaN) یک نیمرسانا از ترکیب دوتایی گروههای III/V که به طور معمول از سال ۱۹۹۰ میلادی برای تولید دیودهای نوری مورد استفاده قرار می گیرد. این ترکیب به لحاظ مکانیکی سخت است. گاف نواری پهن eV ۳/۴ این ماده، امکان استفاده برای کاربردهای اپتوالکترونیکی فراهم آورده است[۳]. یکی دیگر از خواص مورد توجه برای گروه III/V دمای بالا و توان بالای الکتریکی آنهاست. گاف نواری پهن موادی همچون GaN و SiC این امید را ایجاد می کند که می توان از آنها در دماهای بالا استفاده نمود. همچنین خاصیت ترابرد الکترونی عالی گالیوم نیترید شامل انحرکپذیری و سرعت رانش اشباع بالا که در شکل ۱–۱ آمده است. این مزیت برای عموم کاربردهای الکترونیکی مانند یکسو کنندههای مایکروویو، به طور خاص مناسب می باشد.

¹ High power electronics

² Microwave systems

³ Wireless communication

⁴ Biological detection and sensors

⁵ Piezoelectric

⁶ Gallium nitride



شکل ۱-۱: سرعت رانش الکترون در دمای ۳۰۰K در GaAs و GaAs با استفاده از تکنیک محاسباتی

مونتكارلو



.III-N شکل ۲-۱: (الف) بازنمایی سلول واحد ورتسایت با پارامترهای a و c از یک ترکیب

(ب) رسم دنباله ای از ترتیب ورتسایت

ساختار ورتسایت شامل دو زیر شبکه شش گوشه با پارامترهای a و c که نسبت به یک دیگر به مقدار u_c مقدار u_c در امتداد [۰۰۰۱] (در جهت محور c) جابه جا شدهاند؛ u پارامتر داخلی نامیده می شود. همچنان که در شکل ۱-۲ (الف) نشان داده شده است، آرایش اتمهای حاصل به گونهای است که هر یک از اتمهای زیر شبکه اول با اتمهای زیر شبکه دوم پیوند چهاروجهی برقرار می کند و مسیری با ترتیب ...ABAB در جهت محور C را بوجود می آورد، همانطور که در شکل ۲-۱ (ب) نشان داده شده. فاصله بین یک اتم و نزدیک ترین همسایگان خاص خود در جمله زیر بدست می آید:

$$d_z = uc, \qquad d_p = \sqrt{\frac{a^2}{3} + (\frac{1}{2} - u)^2 c^2}$$
 (1-1)

که در آن d_z فاصله پیوند در امتداد محور c ، و d_p فاصله پیوند اتم با نزدیک ترین همسایگان خود در سطح پایه است [۴].

^۲ طبیعت پیوندها اغلب کووالانسی ^۲ میباشد اما بدلیل اختلاف زیادی که بین الکترون خواهی ^۲ دو عنصر سازندهی ترکیب وجود دارد، پیوند دو عنصر شامل پیوند یونی ^۳ نیز محسوب میشود. در حالت تعادلی به لحاظ ترمودینامیکی فاز پایدار GaN (فاز α) ورتسایت، و فاز دیگر آن که دارای پایداری کمتری ⁴ است (فاز β) و تحت شرایط روآرایی رشد خاصی ⁶ بر روی زیر لایه ² پایدار می گردد، زینک –بلند میباشد[۲].

ساختار ورتسایت GaN در دمای اتاق یافت می شود. این ساختار بطور معمول در راستای محور C رشد می کند. گالیوم نیترید نوعا برای تمام دستگاههای چند لایه که نیاز به ترابرد سریع حامل ها با ولتاژ شکست بالا دارند و همچنین به عنوان ماده کانال در ترازیستورهای میدانی به کار می رود. قالب اتصالات اهمی لایه ها در هر دستگاهی از مشارکت دوتایی آلایش n و آلایش m و آلایش gaN برخی از خواص گالیوم نیترید ورتسایت در جدول ۱-۱ آمده است.

¹ Covalent

² Electronegativity

³ Ionic bond

⁴ Metastable

⁵ Hetero-epitaxial growth

⁶ Substrates

جدول ۱-۱ : خواص گالیوم نیترید با ساختار ورتسایت [۴]

مقدار	ویژگی مورد بررسی
۳۰۰ °K در ۲/۴۲	گاف نواری (eV)
۱۴۰۰~ تجربی	$(~{f cm}^2~{f V}^{-1}{f s}^{-1})$ تحرک پذیری الکترون
<*•	$({ m cm}^2{ m V}^1{ m s}^{-1})$ تحرک پذیری حفرہ (
۳/۱۷ ×۱۰ ^{-۶} ۵/۵۹ ×۱۰ ^{-۶}	ضریب انبساط حرارتی c-a (K ⁻¹)
$C_{6V}^4 - P6_3mc$	گروه تقارنی
۶/۱۵	چگالی(g cm ⁻³)
$\Lambda/9 \times 1^{rr}$	تعداد ات _م ها در ۱ <i>cm</i> ⁻³
در فشار۲bar -۱۷۰۰ <	نقطه ذوب(C°)
۵/۱۸۵ - ۳/۱۸۹	ثابت شبکه (برای بلور کپه ای) c-a (Å)

نانو ساختارهای گالیوم نیترید با موفقیت به روشهای مختلفی همانند روش واکنش محدود نانولولههای کربن^۱، تخلیه قوس الکتریکی^۲، کندوسوز لیزر^۳، تصعید^۴، تجزیه حرارتی^۵، رسوبدهی بخار شیمیایی^۶ [۵]، روش به رسوبدهی شیمیایی بخار آلی – فلز^۷ و لایه نشانی باریکه مولکولی^۸ رشد داده شده است[۶]. بطور کلی رشد گالیوم نیترید در دماهای بسیار بالاتر (بالاتر از ۵٬۰۰۰) از رشد MBE که به طور معمول در دمای ۵٬۰۰۷ انجام میشود. روش MBE قادر است فصل مشتر کها را با دقت بالا رشد دهد که این باعث بهبود خواص ترابردی میشود. البته این دو روش را میتوان با هم ترکیب کرد [۶].

- ⁴ sublimation
- ⁵ pyrolysis

¹ nanotube-confined reaction

 $^{^{2}}_{2}$ arc discharge

 $[\]frac{3}{4}$ laser ablation

⁶ chemical vapor deposition

⁷ metal organic chemical vapor deposition

⁸ molecular beam epitaxy

۱-۲-۱ مزایای گالیوم نیترید

گالیوم نیترید آلایش شده با Mn خواص نیمرسانای حتی در دمای بالاتر از دمای اتاق نشان می دهد که می تواند بدون مشکل عدم تطابق رسانایی برای تزریق اسپین در دماهای بالا در نیمرسانا استفاده شود یا به عبارتی دمای کوری^۱ آن بالای ۳۰۰ کلوین است و بدلیل پهنای بزرگ گاف نواری اثر اسپین – مدار در آن ضعیف است، طول عمر اسپین در دمای اتاق تقریبا بین ۳۵ – ۱۰۰ پیکوثانیه برای نمونه کپهای و برای نمونه نانوسیم رشد داده شده روی سیلیکون آن ۱۵۰ پیکوثانیه در دمای ۳۰۰ کلوین که با کاهش دما افزایش غیر خطی پیدا می کند[^۷].

۱-۳ نانو ساختارها

دانشمندان معاصر، مهندسان، و سرمایه گذاران پیش بینی میکنند که علم نانو مقیاس مسیری است به سوی میدانی وسیع اما در ابعاد کوچک، با فن آوری سریعتر و بهرموری بیشتر از انرژی که از طریق کوچکتر کردن ابعاد در دستگامهای میکروالکترونیک موفقیت آمیز بوده و توسعه در برش لبه ^۲. خواص منحصر به فرد کوچک سازی در حال حاضر مزایای خود را در ذخیره سازی اطلاعات، ذخیره سازی انرژی، ذخیره سازی مواد شیمیایی، در حسگرهای مواد شیمیایی و بیولوژیکی، و سراسر حوزمهای الکترونیک، فوتونیک و ارتباطات نمایان کرده است. محدودیت کوانتومی ^۳ الکترونها در نانو ساختارها میتواند ایزار قدرتمندی برای کنترل خواص الکترونیکی، نوری، مغناطیسی، ترموالکترونیکی این مواد پیشرفته باشد. چند نانو ساختار منحصر بفرد که در آزمایشگامها جهان سنتز شده عبارتند از : نانوکمربند[†] (نانو روبان)،نانولوله ^۵،نانو میله ^۲، نانوسیم ^۲، نانونقاط ^۸ [۸].

¹ Curie temperature

² Cutting-edge

³ Quantum confinement

⁴ Nanobelts

⁵ Nanotubes

⁶ Nanorods

⁷ Nanowires

⁸ Nanodots

۱-۳-۱ نانوکمربند (نانو روبان)

نانوکمربند یکی از مهمترین اعضای جدید خانواده نانومواد یک بعدی است، که ساختارش به خوبی تعریف شده و انتظار میرود که نامزد خوبی برای حسگر، مبدل ^۱ و تشدید کننده ^۲ نانو مقیاس یک بعدی باشد. از آنجا که برای اولین بار نانو کمربند توسط گروه ما (گروه ژودانگ^۳) در سال ۲۰۰۱ کشف شد، گاهی آن را نانو روبان مینامیم. علاقه بسیار زیاد به پژوهش روی نانو روبان ناشی از مورفولوژی^{*}، خواص فیزیکی، الکترونیکی و نوری منحصر به فرد این ساختار است. نانو روبان یک نانوساختار شبه یک بعدی است که نه تنها دارای یک جهت خاص رشد است بلکه بالا / پایین و سطوح جانبی نیز از جنبه کریستالوگرافی به خوبی تعریف شدهاند[۸]. در شکل ۱-۳ میتوانیم نمونه از نانو روبانها را مشاهده کنیم.



شکل ۱-۳: نانومیله ZnO که در نانو روبانش نفوذ کرده [۸]

همان طور که در شکل ۱-۳ می بینیم، اکسید فلزی (ZnO) سنتز شده، سطح مقطع مستطیل شکل،

- ¹ transducer
- ² resonator

³ Xudong Wang

⁴ morphologies

تک بلوری و به لحاظ ساختاری یکنواخت دارد. این ویژگیها مهم است، به خصوص هنگامی که ابعاد نزدیک به چند نانومتر است زیرا خواص این نانو ساختارها به شدت به شکل و ساختار وابسته است.

1-۳-۲ سنتز نانو روبان گالیوم نیترید

نانو روبان گالیوم نیترید به روشهای مختلفی سنتز شده که می توان به سنتز نانو روبان و حلقههای آن با استفاده از واکنش Ga و NH₃ و ذرات نقره به عنوان کاتالیزور توسط گروه چن و همكارانش اشاره كرد. همچنين سنتز با استفاده از واكنش كاتاليزوري كاليوم، كاليوم نيتريد، بور اکسید و نیز سنتز تک بلور نانو روبان گالیوم نیترید به روشی جدید از طریق CVD توسط گروه بی و همکاران انجام شده که حاصل آن را در شکل ۱-۴ میبینیم[۹].



شکل ۱-۴ : (الف) نمای بزرگ شده از ساختار GaN که به شکل کمربند است (ب) تصویر SEM نشان دهنده چگالی بالای نانو روبانهای GaN رشد داده شده برروی ناحیهای گستردهای از زیرلایه سیلیکون [۹]

1-۳-۳ انواع نانو روبان

نانو روبانها از نظر ساختار به دو گروه دسته صندلی ً و زیگزاگ ً تقسیم می شوند که در شکل ۱ –۵ نشان داده شده است.

¹ single crystalline ² Armchair

³ Zigzag



شكل ۱-۵ : شكل شماتيك انواع نانو روبانها (الف) نانو روبان زيگزاگ (ب) نانو روبان دستهصندلي

۴–۱ پارامترهای ساختاری نانو روبانها

بطور معمول برای معرفی نانولوله و نانو روبان از جفت اعداد طبیعی (n,m) که به بردار کاریرال معروف است استفاده می گردد. اما روش سادهتری نیز برای معرفی نانو روبانها وجود دارد که در آن از پنهای نانو روبان (می توان با تعداد اتمها N_a آن را نشان داد که غیر از پهنای راستای تکرار است) بهره می گیرند[۱۰].



شکل ۱-۶: (راست) نانو روبان دستهصندلی با پهنای ۶ اتم (چپ) نانو روبان زیگزاگ با پهنای ۶ اتم البته تفاوت عمدهای بین نانو روبانهای معرفی شده با با بردار کایرال و پهنای ساختار وجود دارد این تفاوت به این صورت است که نانو روبانی دستهصندلی معرفی شده توسط بردار کایرال نانو روبان زیگزاگ معرفی شده توسط پهنا است به عنوان مثال نانو روبان دستهصندلی (۳-۳) همان نانو روبان زیگزاگ پهنای ۱۲ اتم است. البته گاهی مردم همزمان از بردار کایرال و عبارت پهنا استفاده میکنند که در این صورت پهنای به معنا عرض بوده و واحد آن آنگستروم خواهد بود که نباید به این پهنا که به تعداد اتمها در یک راستای خاص اطلاق میگردد، اشتباه شود.

۱-۵ طول پیوند

طول پیوند Ga-N با اعمال محدودیت کوانتومی تغییر خواهد نمود بگونهای که برای نمونه کپهای حدود ۱/۹۴ آنگستروم[۱۱]، برای نمونه دوبعدی ۱/۹۳ آنگستروم[۱۲] و برای نمونه یک بعدی ۱/۸۷~ آنگستروم [۱۵،۱۴،۱۳] گزارش شده است. در این پژوهش نمونه یک بعدی GaN شبیه سازی شده بعد از انجام فرآیند واهلش طول پیوندی در حدود ۱/۸۸~ آنگستروم یافت که متناسب با مقالات بالا میباشد.

فصل دوم

اسپین ترونیک و نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده (DMSs)

۲-۱ مقدمه

امروزه استفاده از قطعات CMOS (نیمرسانا اکسید فلزی مکمل) در ابزارهای الکترونیکی امری کاملا متعارف است. در این قطعات از بار الکترونها (یا حفرهها) برای انجام عملیات منطقی و یا ذخیره سازی داده روی یک دستگاه حافظه دیجیتال استفاده میشود . در این نوع دستگاهها، یک الکترود گیت برای کنترل جریان در منطقه فعال وجود دارد که در نهایت مقاومت خروجی قطعه را تنظیم مینماید. پیشرفت CMOS اساسا متمرکز بر کوچک سازی است بطوریکه تعداد ترانزیستورهای مدارهای مجتمع هر دو سال تقریبا دو برابر میشود (این روند به قانون مور معروف است). این روند از نردیک متوقف شود همانطور که در شکل زیر نشان داده شده شرکتهای نیمرسانا با بهبود تکنیک های لیتوگرافی و ایجاد ترانزیستورهای کوچکتر و کوچکتر قادر به حفظ قانون مور همستان با بهبود تکنیک



شکل ۲-۱ : نمودار روند توسعهی تعداد ترازیستورها بر مبنای قانون مور

با این حال، به رغم این افزایش عظیم در چاپ و نوآوری در دستگاه مهندسی، قطعات CMOS

سرانجام به یک محدودیت فیزیکی دچار می گردند به این معنا که کوچک سازی بیشتر اساسا غیر ممکن خواهد بود . البته تغییر الگویی در معماری سختافزار و نرمافزار بوجود آمده است، مثلا رفتن از یک هسته به سوی استفاده از چندین هسته که موجب بهبود سرعت پردازش گردید ، اما واضح است که این تغییر تنها قادر به حفظ نرخ پیشرفت قدرت و سرعت پردازش برای مدت کوتاهی است.

نقشه راه بین المللی تکنولوژی نیمرسانا (ITRS) فناوریهای جایگزین متعددی را شناسایی کرده است که پتانسیل جایگزینی با فن آوری CMOS فعلی را داشته باشند. به طور خاص، یک نامزد امیدوار کننده برای این جایگزینی اسپین ترونیک است و این بدلیل انطباق آن با فن آوری کنونی است. اسپین ترونیک ظهور یک نظم و انضباط جدید است که هدف آن انقلاب در زمینه فناوری اطلاعات با استفاده از اسپین است، به گونه که اطلاعات توسط اسپین انتقال یابد. مقاصد اصلی اسپین ترونیک مشتمل بر تزریق، شناسایی، ترابرد، کنترل و دستکاری حامل قطبیده اسپین ^۲ درون یک محیط غیر مغناطیسی مانند یک نیمرسانا، عایق، یا فلز است. محاسبات نظری اولیه پیش بینی می کنند که قطعات اسپین ترونیکی بهینه سازی شده سریعتر، کم مصرف تر و متراکم تر (به لحاظ ابعاد) از وسایل

۲-۱ چشم انداز اسپین ترونیک

دو خصوصیت اساسی که با هر الکترون رسانش حمل می شوند، بار الکتریکی و مگنتون است که به اسپین کوانتومی ربط داده می شود. اسپین اولین بار در سال ۱۹۲۲ توسط اوت و اشترن^۳ و والترگرلاخ[†] بطور تجربی در آزمایش انحراف اتمها تحت میدان مغناطیسی غیر یکنواخت مشاهده گردید. آنها توانستند با شواهد تجربی وجود اسپین الکترون و طبیعت کوانتیده ($\frac{\hbar}{2} = S_z$) آن را نشان دهند. طبق آزمایش الکترونها به دو مولفه مجزا تجزیه می شوند این بدان معناست که اسپین

¹ International technology roadmap of semiconductor

² spin polarized carriers

³ Otto Stern

⁴ Walther Gerlach

تنها می تواند یکی از دو وضعیت بالا و یا پایین را بگیرد[۷].



شکل ۲-۲ : طرح شماتیک آزمایش اشترن-گرلاخ

اکتشاف اسپین، این متغییر کوانتومی ذاتی، منجر به مفهومی به نام اسپین ترونیک گردید، بطوریکه وضعیت اسپین الکترونها برای افزایش بازدهی فناوریهای موجود و همین طور ایجاد نوع جدیدی از دستگاهها استفاده می شود. مزیت اسپین الکترون نسبت به بار الکتریکی آن در این نکته نهفته است که، اسپین الکترون با یک میدان مغناطیسی خارجی به آسانی قابل کنترل و دستکاری است. اسپین ترونیک یک حوزه نسبتا گسترده است، که شامل دستگاههای الکتریکی مبتنی بر اسپین ⁽ (برای مواد فلزی و نیمرسانا) وسایل اپتوالکترونیک^۲ (لیزر و spin-LED) مغناطوالکتریکها^۳ (بهره برداری از خواص مغناطیسی مواد) که در شکل ۲-۳ مشاهده می شود.



شکل ۲-۳: نمایشی از حوزههای مطالعاتی اسپینترونیک[۷].

³ magnetoelectronics

¹ spin-based electrical devices

² optoelectronic devices

ویژگی بسیار ظریف و اساسی دیگر اسپین، طولانی بودن همدوسی یا زمان واهلش آن نسبت به بار است. یک پالس جریانی بار الکتریکی به راحتی در اثر پراکنـدگی یـا برخـورد بـا ناخالصـیهـا و ناکاملیها از بین میرود، در حالی که قطبش اسپینی جریان مدت بیشتری حفظ میشود. این بدان معنا است که در مقایسه با الکترون، اسپین حالت خود را دیرتر از دست میدهد بـه زبـان مکانیـک کوانتومی زمان واهلش عدد کوانتومی اسپینی (σ) بزرگتر از زمان واهلش بردار موج الکترون آمست. از آنجایی که مرتبه بر هم کنشهای الکتریکی بزرگتر از برهمکنشهای مغناطیسی است، بر هم کنشهای آنجایی که مرتبه بر هم کنشهای الکترون بسیار قـوی تـر از بـرهم کـنشهـای مغناطیسی است، بر هم کنشهای برهم کنش بین اسپین الکترونیا خواهد بود و بنابراین حالتهای اسپینی پایدارتر خواهند بود. از این رو عدد کوانتومی اسپین که تاکنون در اثرات ترابردی نادیده گرفته میشد، برای انتقال دادهها مناسبتر خواهد بود. نکتهای دیگر در مورد اسپین، واهلش اسپین^{*} است یعنی حاملهای اسپین قطبیده جهت نواهد بود. را که در ابتدا با آن در یک نیمرسانا تزریق شدهاند حفظ نمیکنند بلکه بعـد از مـدت معینی که به آن طول عمر اسپین(_۲

برای بکار گرفتن موفقیت آمیز اسپین حامل ها در تکنولوژی نیمرسانای فعلی، باید برای حل یک سری مسائل و مشکلات فنی همچون تزریق بهینه اسپین، ترابرد اسپین، کنترل و دست کاری^۳ اسپین و در نهایت آشکارسازی جریان قطبیده اسپینی چارهای اندیشید[۱۶]. هدف اسپین ترونیک فهم و درک برهم کنش اسپین و محیط حالت جامد اطرافش به منظور ساخت و طراحی قطعات مفید براساس این درک و دانش میباشد[۱۷]. برای این منظور میتوان اهداف زیر را در نظر گرفت:

۱-بارگذاری (کدگذاری) اطلاعات کوانتومی در اسپین الکترون بعنوان یک جهت گیری اسپینی خاص

¹ Spin Relaxation

² Spin-filp

³ Manipulation

در پایانه فرستنده .

۲- حفظ جهت گیری اسپینی اولیه طی انتقال و ترابرد اسپین ها برای یک بازه طولی و زمانی مشخص بدون از دست دادن حالت و فازشان توسط الکترون های متحرک.

۳-آشکارسازی حالتهای منتقل شده و اطلاعات تغییر نکرده^۲ در پایانه دریافت کننده^۳ اطلاعات.

از مزایای قطعات اسپینترونیکی نسبت به قطعات الکترونیکی میتوان به موارد زیر اشاره نمود:

۱ - سرعت پردازش و عملکرد بالا: بدلیل اینکه ذخیرهسازی و پردازش اطلاعات در قطعات اسپین ترونیکی تواما انجام می پذیرد و حافظه و عملیات منطقی روی یک تراشه واحد قرار می گیرد.

۲- مصرف انرژی فوق العاده پایین با بهره بالا: انرژی لازم برای چرخش اسپین حامل بار و جهت گیری آن به مراتب نسبت به تغییر جهت حرکت خود حامل بار به میزان قابل توجهی کمتر میباشد [۱۸].

۳-ذخیره کننده های بر مبنای اسپین حامل بار در گروه حافظه های غیرفرار^{[†] قرار می گیرند در حالیکه بر مبنای بار الکتریکی؛ با قطع ولتاژ اطلاعات از بین می رود.}

۴- طول عمر اسپینی (همچون طول همدوسی و طول واهلش) خصوصا در نیمرساناها نسبت به فلزات بالا است و اسپینها همدوسی خود را در زمانها و فواصل طولانی حفظ میکنند [۱۹].

حال به مرور دستگاههای الکتریکی مبتنی بر اسپین می پردازیم.

۲-۱-۱ چند لایههای مغناطیسی مبتنی بر فلز (قطعه GMR^۵)
 مغناطومقاومت بزرگ (GMR) یک قطعه فیزیکی مبتنی بر اسپین است که در دستهبندی
 اسپین ترونیکی به عنوان اسپین ترونیک مبتنی بر فلز (در سال ۲۰۰۷ جایزه نوبل فیزیک به آلبرت

¹ Sender terminal

² Undisturbed information

³ Receiver terminal

⁴ Non- volatile memory

⁵ giant magnetoresistance

فرت^۱ و پیتر گرونبرگ^۲ برای کشف مغناطومقاومت بزرگ GMR اعطا گردید) شناخته میشود و احتمالا موفق ترین فناوری است که همچنان به طور گستردهای در کاربردهای حافظه (درایوهای دیسک سخت) مورد استفاده قرار می گیرد. GMR اشاره به مقاومت دستگاههای دو پایانهای متشکل از لایههای متناوب غیر مغناطیسی و فرومغناطیسی فلزی دارد. GMR به صورت یک تغییر مقاومت الکتریکی قابل توجه، ناشی از مغناطیس شدگی لایههای مجاور فرومغناطیسی نسبت به هم بروز می کند. بالاترین مقاومت زمانی رخ میدهد که پیکربندی لایههای فرومغناطیسی پادموازی و کمترین مقاومت برای پیکربندی در حالت موازی است. نمایی از این قطعه را در شکل ۲-۴ می بینیم.



شکل ۲-۴ : شمایی از دو پیکربندی متفاوت شیر اسپینی^۳ GMR مقاومت حداکثر(سمت راست) مقاومت حداقل(سمت چپ) [۷].

مطابق شکل ۲-۵ جریان بالای حالت موازی بدلیل وجود حالتهای کافی در هردو لایه برای اسپین پایین است که موجب می شود جریان با استفاده از این حالتها به خوبی عبور نماید و کاهش



شکل ۲-۵: چگالی حالتهای متفاوت برای پیکربندی موازی (چپ) و پاد موازی (راست) برای دو لایه فرومغناطیس [۷].

¹ Albert Fert

² Peter Grünberg

³ GMR spin valve
جریان برای حالت پادموازی امری بدیهی است چرا که حالتهای کافی منطبق با الکترونها با اسپین پایین در لایه دوم فرومغناطیس وجود ندارد. بنابراین الکترونهای با اسپین پایین یا در لایه غیرمغناطیسی انباشت میگردند یا به طور قابل توجهی بدلیل تونلزنی کاهش مییابند (در بخش بعدی مورد بحث قرار میگیرد)[۷].

T-۱-۲ مقاومت تونلی (TMR^۱)

مقاومت تونلی (TMR) زیرمجموعهای از GMR است ، و ساختار آن شامل یک لایه نازک عایق (به جای یک فلز) است که بین دو لایه فرومغناطیس قرار می گیرد، این لایه معمولا بیش از چند نانومتر نیست. این عایق باید به اندازه کافی نازک باشد تا الکترونها بتوانند از یک لایه فرومغناطیس به لایه دیگری تونلزنی کنند. معمولا پاسخ TMR بزرگتر از پاسخهای GMR است و در فن آوری امروزه عمدتا از TMR استفاده می شود. اولین مطالعه تونلزنی اسپین قطبیده توسط مرسوی^۲ و تدور^۳ روی اتصال تونلی Fe/Al/Al2O3 گزارش شده و بعدا توسط جولیر¹ روی اتصال تونلی Fe/Ge/Co بررسی گردید. فیزیک دستگاههای TMR با فیزیک دستگاههای GMR که قبلا توضیح داده شد یکسان است.

۲−۱−۲ اسپین-LED و لیزر

دیودهای گسیل نور اسپینی اولین بار در سال ۱۹۹۹ به طور همزمان دو گروه تحقیقاتی فیدرلینگ⁶ و اوهنو⁷ و همکارانشان با بکارگیری تزریق اسپین از یک نیمرسانای مغناطیسی گروه II-VI (BeZnMnSe) درون (GaAs/AlGaAs) ارائه گردید و این اولین بار بود که تزریق اسپین درون یک نیمرسانا صورت می گرفت[۲۰].

¹ Tunneling magnetoresistance

² Mersevey

³ Tedrow

⁴ Julliere

⁵ Fiederling

⁶ Ohno

اسپین-LED و لیزرهای اسپینی بسیار مشابه LED یا لیزرها مرسوم هستند. تنها تفاوت آنها این است که در وسایل اپتوالکترونیک مبتنی بر اسپین ، الکترونها یا حفرههای قطبی از طریق تماس یک فرومغناطیسی در منطقه فعال تزریق میشوند. این حاملهای دو قطبی با حفرههای (یا الکترونها)غیر قطبیده برهم کنش انجام میدهند سپس از قاعده انتخاب نوری برای نور خروجی نور قطبی چپگرد یا راستگرد دایرهای (بحث در این مورد موضوع این پایان نامه نمیباشد) ساطع خواهد شد. بدلیل ارتباط مستقیم بین بازترکیب اسپینی و فوتونهای قطبیده خروجی وسایل اپتوالکترونیک مبتنی بر اسپین امکان تشخیص صریح بازده اسپین تزریقی و قطبش درون منطقه فعال نیمرسانا را دارند.

۲-۱-۴ قطعات نیمرسانای مبتنی بر اسپین جانبی^۱

قطعات مبتنی بر اسپین جانبی به طور کلی به دو دسته تقسیم می شوند : شیر اسپینی دو پایان های ^۲ و سه پایان های ^۳. شیر اسپینی دو پایان های رفتاری مشابه TMRو GMR دارد، بطوریک ه مقاومت بین دو اتصال فرومغناطیس زمانی بیشینه می شود که این دو لایه بصورت پادموازی و کمترین مقاومت زمانی رخ می دهد که این دو لایه بصورت موازی جهت گیری نمایند.

اگرچه این تغییر مقاومت وابسته به اسپین را میتوان به آسانی در تمام شیرهای اسپینی مبتنی بر فلز به تجربه مشاهده نمود اما در مواد نیمرسانا بدلیل عدم تطابق بین رسانایی فرومغناطیس فلزی و نیمرسانا، مشاهده چنین پاسخی کار آسانی نیست. از نتایج تمام آزمایشهای تجربی روشن میشود که یک مانع اساسی برای تزریق اسپین بصورت الکتریکی از طریق اتصال اهمی فلز فرومغناطیسی به درون یک نیمرسانا باید وجود داشته باشد. این مانع اساسی یا مشکل عدم تطابق رسانایی، تزریق اسپین درون نیمرساناها را برای بیش از یک دهه، از زمان آغاز ایده بکارگیری اسپین، در کاربردهای

¹ Semiconductor based lateral spin devices

² two-terminal

³ three-terminal

اسپین ترونیکی به تعویق انداخته است[۷].

۲-۱-۴-۱ شیر اسپینی'

تزریق حامل اسپین قطبی از یک فرومغناطیس درون یک محیط غیرمغناطیسی اولین بار توسط آرنو^۲ پیشنهاد شد و نمونه تجربی آن برای یک کانال فلزی توسط جانسون^۳ و سیلیسبی^۴ ارائه شد. اولین شیر اسپینی نیمرسانا در سال ۲۰۰۵ ارائه گردید که کانال نیمرسانای آن GaAs بود.

یک شیر اسپینی را میتوان یک شبه دیود تصور کرد، یعنی جایی مقاومت بالاست که پیکربندی دو لایه فرومغناطیس پادموازی و زمانی که پیکربندی موازی است مقاومت اندک است،



شکل ۲-۶: شکل شماتیک یک شیر اسپینی عمودی(راست)و جانبی (چپ) به این ترتیب همچون یک شیر قادر به قطع و وصل جریان خواهیم بود. این شیر دو ساختار کلی عمودی و جانبی دارد (شکل ۲-۶) که نمونه جانبی در مدارهای میکروالکتریک متداول، و بدلیل چیدمانش امکان اضافه نمودن گیت ولتاژ را دارا میباشد[۷].

(Spin-FET)⁶ ترانزیستور اثر میدانی اسپینی - 4 - 7 - 7

این ترانزیستور اولین بار توسط داتا^۶ و داس^۷ در سال ۱۹۹۰ ارائه گردید. این ترانزیستور رویایی است که تاکنون به حقیقت نپیوسته است که دلیل عمده آن را میتوان به ضریب تزریق اسپینی اندک

¹ Spin valve

² Aronov

³ Johnson

⁴ Silsbee

⁵ Spin field-effect transistor

⁶ Supriyo Datta

⁷ Biswajit Das

بدلیل مقاومت ناشی از عدم تطابق، واهلش اسپینی^۱ و افزایش زاویه حرکت تقدیمی اسپین دانست[۲۱]. وقتی یک الکترون در حضور میدان الکتریکی با سرعت بالا حرکت میکند یک میدان مغناطیسی مؤثر^۲ عمود بر صفحه میدان اعمالی را تجربه مینماید. برهم کنش این میدان مغناطیسی با اسپین الکترون، همان بر هم کنش بین اسپین یک الکترون و مدار آن است که برهم کنش اسپین – مدار^۳ نامیده می شود و می تواند جهت اسپین را عوض نماید، بنابراین با اعمال این میدان الکتریکی خارجی توسط ولتاژ گیت، می توان جهت اسپین را کنترل نمود که این بسیار سریعتر و با مصرف



شکل ۲-۲: شکل شماتیک یک ترازیستور اثر میدانی اسپینی (Spin-FET)

۲-۲ اسپین ترونیک

مقاومت مغناطیسی قطعات اسپینترونیکی الکتریکی مستقیما متناسب است با میزان اسپین قطبیده الکترونها که به الکترود شناساگر رسیده است. این امر نیز به نوبه خود به طور مستقیم وابسته به مکانیسمهای واهلش اسپین و در مواد نیمرسانا مختلف است. توانایی حفظ یک جریان اسپینی غیر تعادلی درون مواد نیمرسانا برای فواصل نسبتا طولانی (در مقایسه با فلزات)یک هدف است که رسیدن به آن راه گسترش وسایل اپتوالکترونیک میکرو الکترونیک امروزه است. علاقه محققان به مواد نیمرسانا دلایل متعددی دارد که میتوان به عنوان نمونه به این سه مورد اشاره نمود؛

¹ Spin relaxation

² effective magnetic field

³ Spin-Orbit interaction

اول طول عمر اسپینی در یک نیمرسانا بسیار بیشتر از یک فلز است. دوم, الکترود گیت میتواند به آسانی با تنظیم پتانسیل اعمالی، پتانسیل نیمرسانا را تغییر دهد، و به عبارتی اجازه کنترل الکتریکی . سوم, تطبیق پذیری با آلایش و همین طور مطابقت ساختار قطعات نیمرسانای مبتنی بر اسپین با قطعات نیمرسانای سنتی مبتنی بر بار الکتریکی که موجب میشود برای استفاده از قطعات مبتنی بر اسپین نیازی به تغییر کلی ساختار مدارهای الکترونیکی نداشته باشیم.

پایه ترین موارد برای ترابرد اسپینی در قطعات اسپین ترونیکی، ابتدا ایجاد یک جمعیت غیر تعادلی از حاملها است که دارای گشتاور اسپینی غیر صفر در داخل قطعات بوده، و سپس کنترل این جریان قطبیده اسپینی توسط ولتاژ گیت [۲۲] و در نهایت آشکارسازی آن می باشد. ایجاد کردن این چنین شرایط غیر تعادلی از جریان، با قطبش اسپینی غیر صفر، به صورت عمومی معروف به تزریق اسپین می باشد. روش های متنوعی به منظور ایجاد کردن این جمعیت غیر تعادلی از اسپینها، از قبیل روش های اپتیکی و پالس لیزری^۱، اعمال میدان خارجی مغناطیسی و الکتریکی وجود دارند [۲۳،۲۴] اما در روش میدان الکتریکی و تزریق اسپین از یک الکترود فرومغناطیس استفاده می گردد.

۲-۲-۱ مواد تزریق کنندهی جریان قطبیده اسپینی

در روش میدان الکتریکی برای تزریق جریان اسپینی قطبیده از الکترود فرومغناطیس به درون نیمرسانا که مبنای کار قطعات اسپینترونیکی است دچار مشکل عدم تطابق رسانایی^۲یا عدم تطابق ساختار نواری در محل اتصال با نیمرساناها هستیم. ولی راههای مختلفی برای حل این مشکل وجود دارد.

دانشمندان برای حل این مشکل از انواع گروه فرومغناطیسها که شامل فلزات، نیمرساناها، نیم فلزات استفاده نمودهاند. روش اول، توسط راشبا مطرح شد در این روش یک سد پتانسیل نازک بین

¹ Laser pulse

² Conductivity mismatch problem

فرومغناطیس و نیمرسانا وارد می شود (و یا یک سد شاتکی). روش دوم استفاده از یک نیمرسانای میشتر مغناطیسی رقیق شده (DMS) فرومغناطیس است، که رسانایی آن از مرتبه رسانایی بیشتر نیمرساناهاست. روش سوم استفاده از نیم فلزها بدلیل قطبش ۱۰۰٪ آنها است چرا که در آنها یکی از دو کانال عبور الکترون با اسپین پایین و بالا، کاملا مسدود و مانند سد عمل می کند و دیگری تمام جریان را حمل می نماید [۲۰،۲۵]. روش چهارم استفاده از فلز مغناطیسی است ولیی است ولی در این روش از دو کانل عبور الکترون با اسپین پایین و بالا، کاملا مسدود و مانند سد عمل می کند و دیگری تمام جریان را حمل می نماید [۲۰،۲۵]. روش چهارم استفاده از فلز مغناطیسی است ولی در این روش اسپین بطور مستقیم و بدون استفاده از ترابرد بار مواجه نخواهیم شد [۲۶].

۲-۲-۱-۱ مواد فرومغناطیس

مواد فرومغناطیس دارای چگالی حالتهای (DOS) نابرابر برای اسپینهای بالا و اسپینهای پایین، در اطراف تراز فرمی میباشند. میزان مغناطش (M) و قطبش (P) فرومغناطیسها توسط روابط زیر داده می شود:

$$M \propto n_{\uparrow}(E_F) - n_{\downarrow}(E_F) \tag{1-Y}$$

$$P = \frac{n_{\uparrow}(E_F) - n_{\downarrow}(E_F)}{n_{\uparrow}(E_F) + n_{\downarrow}(E_F)}$$
(Y-Y)

که در روابط بالا $n_1(E_F)$ چگالی حالتهای الکترونهای اسپین بالا، و $n_1(E_F)$ چگالی حالتهای اسپین پایین در تراز فرمی میباشند. فرومغناطیسهای فلزی، فرومغناطیسهای نیمرسانا و فرومغناطیسهای نیم فلزی^۱ سه گروه از فرومغناطیسها هستند که هر کدام معایب و مزایای خاص خود را دارا میباشند. از معایب فرومغناطیسهای فلزی مسئله، تزریق بهینه اسپین از ماده فرومغناطیس به درون کانال نیمرسانا است که کار تزریق را با مشکل مواجه میکند. همچنین قطبش اسپینی آنها نسبت به فرومغناطیسهای نیمفلزی در اطراف تراز فرمی کمتر است و از مزایای آن

¹ Half metal

می توان به دمای کوری T_c بالای این دسته از فرومغناطیسها اشاره کرد. از معایب فرومغناطیسهای نیمرسانا می توان به دمای کوری پایین آنها نسبت به فرومغناطیسهای فلزی و نیم فلزی اشاره کرد و از مزایای آنها به سازگاری با صنعت نیمرساناها به منظور پتانسیل کاربردی در اسپین ترونیک نیمرساناها اشاره نمود. از مزایای فرومغناطیس نیم فلزها می توان به قطبش اسپینی ۱۰۰ ٪ در تراز فرمی همچنین دمای کوری بالای آنها اشاره کرد.

۲-۱-۱ فرومغناطیسهای فلزی (TM)



شکل ۲-۸: نمودار چگالی حالت یک فلز فرومغناطیس. به ازای هر دو حالت اسپین بالا و پایین در تراز فرمی، شاهد چگالی حالت غیر صفر و نامتقارن هستیم [۲۷].

¹ Transition metal

² Majority spin

³ Minority spin

DMS) نیمرساناهای رقیق شده مغناطیسی (DMS)

یک نیمرسانا رقیق شده مغناطیسی (DMS) یک آلیاژ رقیق شده متشکل از یک فلز واسطه مغناطیسی یا فلزات خاکی کمیاب (مانند Eu و Pl (نوعا کمتر از ۱۰٪) با یک نیمرسانا غیرمغناطیسی است که خواص نیمرسانایی و مغناطیسی را تواما نشان میدهد. دانشمندان اولین بار چنین آلپاژهایی را با نیمرساناهای گروه II-VI تولید نمودند مانند Zn_{1-x}Mn_xTe و Cd_{1-x}Mn_xTe ولی بررسیها دمای کوری پایین و فرومغناطیسی ضعیف را برای این DMS ها نشان داد. اخیرا مطالعاتی روی آلایش Mn در گروه W–III صورت گرفته که نمونههای بارز آن: آلایش Mn در GaAs است که به این صورت نشان داده می شود Mn,Ga)As) و Mn,In)As) که دمای کوری و خاصیت فرومغناطیسی بالایی دارند و Mn,Ga)N, (Cd,Mn)Te همچناین آلایش Co و آلایش Co در TiO2 که این نیمرساناهای مغناطیسی نامزدهای بالقوه، برای تزریق الکترون های با اسپین قطبیده در قطعات اسپین ترونیکی دارند [۲۸-۲۹]. انرژی سیستم وابسته به به جهت گیری گشتاور عنصر مغناطیسی است و آن هم وابسته به سه نوع مكانيسم برهمكنش تبادلي: اول برهمكنش تبادلي مستقيم يا پتانسیل ' مبتنی بر برهم کنش کولنی بین اسپینها (برهم کنش اوربیتالهای s-d) ؛ دوم برهم کنش تبادلی جنبشی^۳ ناشی از هیبریداسیون اوربیتالها (جفت شدگی اوربیتالهای p-d) ؛ سوم تبادل غیرمستقیم[†] از نوع ابر تبادلی⁶ (برهم کنش اوربیتالهای d-d) [^۲۸].

مقدار انرژی جفت شدگی اوربیتالهای p-d شش الی هشت برابر بزرگتر از انرژی برهم کنش اوربیتالهای d-d میباشد و برهم کنش اوربیتالهای d-d نیز از برهم کنش های دیگر بسیار کوچکتر است[۲۸].

¹ rare-earth metals

² potential exchange interaction

³ Kinetic exchange interaction

⁴ Indirect exchange ⁵ super exchange

برهم کنش اول بین اسپین الکترونهای نوار رسانش s با اسپین یون مغناطیسی است و انرژی آن در حدود ۲eV برای تمام DMSهاست. برهم کنش دوم بصورت آنتی فرومغناطیس بین حاملهای بار (الکترون – حفره) لایه ظرفیت و اسپین یون مغناطیسی است و مقدار آن منفی است. برهم کنش سوم بین اسپین یونهای مغناطیسی است.

قطعات اسپین ترونیکی باید بتوانند در دمای اتاق عملکردی مناسب داشته باشند، بنابراین یکی از اهداف تحقیقات روی DMS ها، جستجوی فرومغناطیسهایی نیمرسانا با دمای کوری بالای در حدود دمای اتاق است . دمای کوری برای AG(Ga) که یکی از این سیستمهاست ۱۹۰ کلوین گزارش شده است [۳۰]. کارهای نظری و محاسبات دیتل ^۱ و همکارانش [۳۱] نوید بخش DMSهایی دمای کوری، بالای دمای اتاق میباشد. محاسبات آنها نشان داد که آلایش OnS و GaN با عناصر واسطهی فلزی عموماً Mn و Cr، تمایل به ایجاد خاصیت فرومغناطیس شدن با دمای کوری بالاتر از ترکیبات بود [۳۰۳]. نمودار چگالی حالتها در ترکیبات نیمرساناهای مغناطیسی به ازای هر دو این ترکیبات بود [۳۰۳۳]. نمودار چگالی حالتها در ترکیبات نیمرساناهای مغناطیسی به ازای هر دو نمودار یک حالت بیشتر از حالت دیگر است و نشان از قطبش اسپینی اطراف تراز فرمی میباشد، نمودار یک حالت بیشتر از این ترکیبات در شکل ۲–۹ نمایش داده شده است.



شکل ۲-۹: الف) نمونهای از یک نیمرسانای مغناطیسی ب) نمایش چگالی حالت یک نیمرسانای مغناطیسی

(HM) نيم فلزها (HM)

مفهوم واژهی نیم فلز اولین بار توسط گروت ^۱ و همکارانش بر پایهی محاسبهی ساختار نـواری، برای ترکیب هویسلر ^۲ NiMnSb در سال ۱۹۸۳ مطرح شد[۳۴]. فرومغناطیسها نیم فلزی (HMFs) مواد هستند که خاصیت فلزی و عایق را بطور همزمان به تناسب جهت اسپین نشان می دهد. دلیل وقوع چنین رفتاری این است که الکترونهای مسئول رفتار فلزی جهتی متفاوت با الکترونهایی است که مسدول رفتار عایق بودن است. این رفتار غیر معمول می توان با رسم نمودار چگالی حالـتها (DOS) برای هر دو اسپین مطابق شکل ۲–۱۰ قابل درک میباشد. شکل DOS نشان می دهد کـه نوارهای به ازای اسپین اکثریت به صورت جزیی پرشده و خاصیت فلزی مشـاهده مـیشود و بـرای اسپین اقلیت شاهد گاف بین نوار ظرفیت و نوار رسانش و حضور تراز فرمی در گاف نواری هستیم که نشان از یک نیمرسانا دارد. این شکل نشان مـیدهـد کـه بـدلیل بـرهمکـنش تبـادلی DOS بـرای الکترونهای با اسپین بالا و پایین متفاوت است. بنابراین حاملهای جریان تنها الکترونهای با اسپین بالا هستند.



شکل ۲-۱۰: نمودار چگالی حالت برای نیمفلز

اگر ↓N و N را به ترتیب تعداد الکترونها با اسپین پایین و بالا ، برای یک سلول واحد در نورا رسانش نمایش دهیم؛ اسپین قطبیده به صورت فرمول ۲-۱ تعریف می شود:

¹ Groot

² Heusler compound

$$P_{S} = \frac{N\uparrow - N\downarrow}{N\uparrow - N\downarrow} \tag{1-7}$$

برای پارامغناطیس ۲ N = ۷ و در نتیجه $P_s = 0$ و برای یک نیم فلز ایدآل مشابه شکل ۲-۱۰ برای پارامغناطیس ۲ N = ۹ و در نتیجه ۲ N می دهد و بشدت برای تزریق اسپین مناسب میباشد. کوبلر ^۲ و همکارانش برای اولین بار حضور گاف نواری برای الکترونهای اقلیت، مرتبط با ترکیب هویسلر Co₂MnA1 را گزارش کردند [۳۵]. رفتار نیمفلزی ترکیب هویسلر Co₂FeSi توسط ورمل ^۲ و همکارانش [۳۶] و گرسی ^۳ و همکارانش [۳۷] گزارش گردید. فرومغناطیسهای نیمفلزی در دیگر ترکیبات و ساختارها از جمله اکسیدهای فلـزی همچـون Fe₃O4 (شدهاند [۲۰،۴۰] و ۲۰۱۶] حتی نیمرساناهای آلاییده ی مغناطیسی که در فاز زینک بلند ^۴ متبلور شدهاند [۴۳،۴۲] به صورت نظری و برخی از آنها به صورت تجربی نیز تأیید شدهاند.

GaN پیوند آویزان⁴ و اثر آن در ساختار نانو روبان

پیوند آویزان هنوز بین شیمیدانان تعریف واحدی ندارد. ولی ویژگیهای اساسی این نوع پیوند نزدیک ۵۰ سال است که شناخته شده است . به طور ساده میتوان گفت یک پیوند آویزان یک ظرفیت اشباع نشده از یک اتم در سطح بلور است که با هیچ اتمی از بلور پیوند برقرار نکرده ولی امکان ایجاد پیوند در راستای بیرون بلور را دارد. البته این سطح میتواند درون ساختار نیز باشد. هر پیوند آویزان، یک پیوند نیمه پر است و تنها یک الکترون دارد (پیوند کوالانسی به دو الکترون نیاز دارد) و تراز انرژی آن میانه گاف انرژی قرار می گیرد و از این جهت که بالای نوار ظرفیت قرار می گیرد مشابه تراز فرمی است[۴۴].

این پیوند همچنان که گفته شد در بلورها و جامدات دیده می شود، اگر این پیوند در گازها و

¹ Kubler

² Wurmehl

³₄ Gercsi

⁴ Zinc blende

⁵ Dangling Bond

مایعات باشد به آن اتم ، مولکول یا یون رادیکال آزاد می گویند. خواص فیزیکی نیمرساناهای چهار وجهی علاوه بر جایگاه پیوندهای آویزان به نوع این پیوندها نیز وابسته است. GaN یک نیمرسانای چهاروجهی است که هیبریداسیون SP3 دارد ، درشکل۴-۲ بطور شماتیک میتوان تراز یک پیوند آویزان را در ساختار نواری SP3 مشاهده نمود[۴۵].

این پیوندها میتواند بدلیل ناپیوستگی ناگهانی ساختار شبکه یا با کندن اتمههای سطح توسط یک میکروسکوپ تونلی روبشی ⁽(STM) ، در سطح بوجود بیایند ، به هر جهت وقتی پیوندی شکسته شود یک الکترون آزاد میشود که میتواند در جریان رسانش شرکت کند به همین دلیل تعدادی از ترازهای انرژی جایگزیده یا مراکز تولید-بازترکیب داخل ناحیه سطحی شوند. این ترازها ممکن است به طور عمده آهنگ بازترکیب را در ناحیه سطحی افزایش دهند، بنابراین فهم فرآیندهای بازترکیب سطحی (ترکیب الکترون وحفرهها) مهم است، زیرا اثری بسیار قوی بر مشخصههای بسیاری از قطعات نیمرسانا دارد[۶۶]. پیوندهای آویزان ظرفیتهای مختلفی دارند و این درحالیست که جایگاه خود را در گاف انرژی حفظ میکند. در یک بلور نوع n و در موادی که با غلظت بالا آلایش نوع n شدهاند، پیوند آویزان الکترون گرفته و به سمت نوار رسانش متمایل میشود[۴۷].



شکل ۲-۱۱: (الف) گسترش تراز انرژی مولکولی به نوار و جایگاه تراز پیوند آویزان (ب) تصویر STM پیوند آویزان در یک صفحه ۰۱۱ سیلیسیوم-هیدروژن که به با غلظت بالا آلایش نوع n شده

در کل باید گفت پیوندهای آویزان چاههای کوانتومی هستند که میتواند الکتـرونهـای سـرگردان ً

¹ scanning tunneling microscope

² Itinerant

از تزريق جريان و يا آلايش ، كه اسپيني مخالف با اسپين الكترون آنها را داراست، را به دام بيندازند و در صورت داشتن فاصله مناسب میتوانند با یکدیگر برهم کنش نموده و الکترونهای سرگردان را بین یکدیگر به روش تونل زنی به اشترک بگذارند، گاهی این امر باعث بروز اثر یان – تلر '، این اثر ناشی از وجود تعداد الکترونهای نامساوی در اوربیتالهای همتراز رخ میدهد، و موجب تغییر در هندسه ساختار، می شود [۴۶،۴۸،۴۹،۵۰]. این اثر در نتیجهی عدم تعادل بین توزیع متقارن بار هسته و توزیع غير متقارن حالتهاى الكترونيكي بار، باعث بروز يك نيروى الكتريكي مي گردد كه اين نيرو مولكول را به سمت ساختاری با تقارن کمتر سوق میدهد؛ جایی که تبهگنیها از بین میروند [۵۱] با توجه به این مطلب باید انتظار فیلترینگ مناسبی در جریان اسپینی داشت[۵۲] همچنین این توزیع بارها در پیوندهای آویزان باعث مغناطیس شدگی ساختار می گردد[۵۴،۵۳]. به عنوان نمونهای از بررسی اثر پیوندهای آویزان روی ساختار نانو روبان BN توسط گروه ژنگ^۲ و همکاران در سال ۲۰۰۸ مورد بررسی قرار گرفت. آنها اثر وجود پیوند آویزان روی B و N بطور جداگانه و همزمان با همینطور اعمال محدودیت ' برای هر دو اتم توسط اتم هیدروژن که نتیجه آن بروز خاصیت نیم فلزی برای نانوساختار BN زیگزاگ در حالتی است که N دارای پیوند آویزان و B بوسیله هیدروژن محدود شده باشد[۵۵].

¹ Jahn-Teller effect

² Zheng

³ Terminate (passivation)

فصل سوم

نظریه تابعی چگالی (DFT)

و تابع گرین غیر تعادلی(NEGF)

۳-۱ مقدمه

مکانیک کوانتومی به خوبی ما را در درک هرچه بهتر ساختار و خواص اتـمها، مولکـولها، جامدات و رفتار ذرات زیراتمی یـاری داده است، همـان طـور کـه بـرای توجیـه پدیـدههـای عـالم ماکرووسکوپی فیزیک کلاسیک به تنهایی ناقص و نارسا است شاید برای بررسی تمـام جوانـب عـالم زیراتمی فیزیک کوانتومی با سرعتی متحیر کننده مسیر ترقی خود را میپیماید . نظریه تابعی چگالی یک ابزار مفیدی برای محاسبه حالتهای کوانتومی اتمها، مولکولها، جامدات و دینامیـک مولکـولی ابتدا به ساکن میباشد. یکی از روشهای مورد استفاده در فیزیک ماده چگال محاسباتی نظریهی تک الکترونی است . این نظریه، روشی برای حل معادلهی شرودینگر یک سیستم بسذرهای و پیدا کردن

۲-۳ نظریه تابعی چگالی

نظریه تک الکترونی شامل تقریبهای بورن – اپنهایمر و هارتری - فوک است که با توجه تعریف چگالی الکترونی و مدل توماس - فرمی، معادلهی شرودینگر یک سیستم بسذرهای را به معادلات تک ذره ای تبدیل می کند و یکی از مهمترین روشهایی که در این نظریه وجود دارد نظریه تابعی چگالی (DFT) است. این روش یکی از کارآمدترین روشهای محاسباتی سیستمهای بسذره ای است و این بدلیل کارایی محاسباتی بالای آن، کاهش حجم محاسبات و دقت خوب آن در مقایسه با سایر روشها است. اهمیت DFT هنگامی روشنتر می شود که بدانیم بخاطر آن جایزه نوبل شیمی در الکترونهایی که هیچ برهم کنشی نداران آن داده شده است .کوهن و شم یک دستگاه فرضی شامل الکترونهایی که هیچ برهم کنشی ندارند را در نظر گرفتند و درنهایت به معادلاتی رسیدند که با آنها به صورت خود – سازگار خواص حالت پایه دستگاه را محاسبه کردند. در نظریه تابعی چگالی انـرژی کل ترکیبی از سه جمله است: یک جمله سهم انرژی جنبشی یک جمله سهم انرژی کولنی به خاطر برهم کنش الکترواستاتیکی تمام ذرات باردار داخل سیستم و جمله سوم انرژی تبادلی – همبستگی میباشد که تمام برهم کنشهای سیستم بس ذرمای را در برمی گیرد. در بین این جملات، سهم انرژی تبادلی – همبستگی فرم نامشخصی دارد. پیدا کردن این انرژی به صورت کلی امکان ندارد بنابراین باید از روشهای تقریبی استفاده کرد که بعضی از این تقریبها ، تقریب چگالی موضعی(LDA) و تقریب شیب تعمیم یافته(GGA) است. نظریه تابعی چگالی با سیستمی n الکترونی سروکار دارد که تابع موج آن سیستم تابعی از ۳n متغییر است. در این نظریه تمام ویژگیهای ساختار الکترونی سیستم شامل اندرکنش الکترونها در پتانسیل خارجی (پتانسیل ناشی ازهستهها) میباشد، توسط چگالی بار الکترونی یعنی ($\rho(r)$ مشخص می شود . توجه شود که (r) فقط تابعی از سه متغییر است که به کاهش حجم محاسبات میانجامد . در واقع نظریهی تابعی چگالی، معادله شرودیگر گونهی سیستم بس ذرمای را به یک مجموعه ای از معادلات تک ذرمای تبدیل میکند. این معادلات تکذرمای به معادلات کوهن – شم معروف است که فقط به چگالی الکترون وابستهاند[⁴⁴].

۳-۲-۱ مسئله بس ذرهای

بررسی مجموعه ای از اتمها؛ مولکولها، جامدات، گازها، مایعات و غیره را شکل میدهند که تشکیل شده از الکترونها و هستهها میباشند. توسط مکانیک کوانتومی میتوان یک سیستم بر هم کنشی از الکترونها و هستهها را توسط معادله شرودینگر توصیف کرد:

$$\widehat{H}\Psi = E\Psi \tag{1-7}$$

که E ویژه مقدار انرژی می باشد و عملگر هامیلتونی بس ذره ای به صورت زیر می باشد:

$$\widehat{H} = \sum_{i=1}^{N_e} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{I=1}^{N_{nuc}} -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_I^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I|} + \frac{1}{2} \sum_{I \neq j} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_J|}$$
(Y-Y)

در معادله (۳–۲) بخش اول و دوم انرژیهای جنبشی الکترونها و هستهها و سه بخش آخر به ترتیب m در معادله (π –۲) بخش اول و دوم انرژیهای جنبشی الکترون هسته، و هسته هسته میباشند. \hbar ثابت پلانک، m و i همکنشهای بین الکترون الکترون، الکترون هسته، و هسته امین میباشند. \hbar ثابت پلانک، m و i موقعیت i به ترتیب جرمهای الکترون، r_i و r_i ، موقعیت I

امين الكترون و I امين هسته مي باشند.

حل معادله شرودینگر بسذرهای بسیار پیچیده است. برای ساده سازی مسئله از تقریب بورن اوپن-هایمر ^۱ استفاده شده است، که بیان میکند هستهها بسیار سنگینتراز الکترونها هستند و بسیار کندتر از الکترونها حرکت میکنند. در نتیجه میتوان حرکت هستهها و الکترون ها را جدا کرد. فرض بر این است که که موقعیت اتم ها ثابت شدهاند در حالی که الکترونها در زمینه میدان باری هستهها حرکت میکنند. تابع موج کلی میتواند به دو قسمت تابع موج الکترونی و یونی جدا سازی شود. در نتیجه معادله شرودینگر برای قسمت الکترونی به صورت زیر نوشته می شود:

$$\hat{H}_e(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \Psi_e = E_e \Psi_e(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \tag{(7-7)}$$

که عملگر هامیلتونی الکترونی، توسط معادله زیر بیان می شود:

$$\hat{H}_{e} = \sum_{i=1}^{N_{e}} -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla_{i}^{2} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^{2}}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} + \hat{V}_{ext}$$
(f- \mathcal{V})

P_{ext} پتانسیلی است که توسط هستهها روی الکترونها عمل می کند. توجه شود که برهم کنش بین هستهها به عنوان یک پارامتر وارد می شود. اگر چه تعداد درجات آزادی سیستم توسط تقریب بورن – اوپن-هایمر می تواند کاهش یابد اما حل مسئله بر هم کنشی الکترون –الکترون همچنان مشکل است. بعلاوه تابع موج الکترونی وابسته به مختصات تمام الکترونها است. تعداد الکترونها در مقایسه با تعداد هستهها بسیار بیشتر می باشند. همانطور که در ادامه نشان داده خواهد شد، استفاده از توصیف نظریه تابعی چگالی بجای تابع موجهای بس ذره ای بسیار کاربردی تر می باشد. نظریه تابعی چگالی به محاسبات کمتری نیازمند بوده و توصیف خوبی برای خواص الکترونی حالت پایه سیستم ارائه می دهد.

۳-۲-۲ نظریه هوهنبرگ –کوهن

در سال ۱۹۶۴ هوهنبرگ و کوهن با ارائه ی دو قضیه مشهور خود نشان دادند که برای مشخص

¹ Born-Oppenheimer

کردن خواص حالت پایهی یک سیستم، می توان از چگالی به جای پتانسیل استفاده کرد و این دو قضیه مبنای نظریه ی تابعی چگالی قرار گرفتند. این قضایا نشان می دهند که تمامی خواص حالت پایه یک سیستم بس الکترونی بر هم کنشی را می توان از روی چگالی حالت پایه ای بدست آورد. بطوریکه نظریه تابعی چگالی، یک سیستم برهم کنشی را بجای توابع موج بس ذرهای بر اساس چگالی الکترونی توصیف می نماید. [۵۷].

نظریه اول بیان می کند که انرژی حالت پایه یک سیستم بر هم کنشی از الکترونها، تابعی یکتا^۱ ازچگالی بار الکترونی است. به عبارت دیگر یک ارتباط یک به یک بین تابع موج حالت پایه و چگالی الکترونی حالت پایه وجود دارد. نظریه اول هوهنبرگ –کوهن فقط اثباتی است بر وجود تابعی از چگالی الکترونی، اگرچه شکل درست تابعی ناشناخته است.

از نظریه دوم هوهنبرگ-کوهن این مطلب اثبات می شود که انرژی کل هر سیستم بس الکترونی نسبت به چگالی حالت پایه آن، از یک اصل وردشی^۲ تبعیت می کند. به عبارت دیگر برای هر سیستم بس الکترونی یک تابعی انرژی جهان شمول^۳ بر حسب چگالی الکترونی وجود دارد که کمینه مطلق آن، به انرژی حالت پایه سیستم مربوط است و چگالی الکترونی که تابعی انرژی را کمینه می کند چگالی حالت پایه سیستم است. بر طبق این نظریه مقدار چشمداشتی هامیلتونی در معادله ۳-۴ می تواند به صورت زیر بیان شود:

$$\left\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \right\rangle = E[n(\mathbf{r})] \tag{2-7}$$

که [n(r)] تابعی انرژی کل است و n(r) چگالی الکترونی است. اگر شکل تابعی انرژی مشخص E[n(r)] باشد، میتوان چگالی الکترونی را تا جایی که تابعی انرژی توسط اصل وردشی کمینه شود تغییر داد:

¹ Unique functional

² Variational principle

³ Universal functional energy

$$\frac{\delta E[n(\mathbf{r})]}{\delta n}\Big|_{n=n_0} = 0 \tag{9-7}$$

از معادله (۳–۶) چگالی الکترونی که به کمینه انرژی مربوط میشود، چگالی حالت پایـه(n₀(**r**) میباشد. بر طبق نظریه اول، انرژی حالت پایه میتواند به صورت زیر بیان شود:

$$E_0 = \langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle = E[n_0(\mathbf{r})] \tag{V-T}$$

۳-۲-۳ معادلات کوهن – شم

راه حلی برای کاهش مسئله بس ذرهای حقیقی، به یک مسئلهی تک الکترونی کمکی توسط کوهن و شم مطرح شد[۵۸]. الکترونهای برهم کنشی، جایگزین الکترونهای غیر برهم کنشی که تحت یک پتانسیل موثر ^۱ حرکت می کنند، شد. انرژی تابعی کل در معادله (۳–۵) میتواند به صورت زیـر نوشته شود:

$$E[n(\mathbf{r})] = T_0[n(\mathbf{r})] + \frac{1}{2} \iint \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{\mathbf{r} - \mathbf{r}'} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + \int V_{ext}(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} + E_{xc}[n(\mathbf{r})]$$
(A-\vec{r})

در معادله (۳–۸)، [*n*(*r*)] T₀ تابعی انرژی جنبشی سیستم الکترونی غیر بر هـم کنشـی، بخـش دوم انرژی الکترواستاتیکی یا انرژی هارتری^۲ و بخش سوم انرژی خارجی ناشی از هستهها مـی باشـند و بخش آخر همه ی باقی مانده آنچه که تصحیح کننده انرژی است، که انـرژی تبـادلی و همبسـتگی^۲ نامیده می شود. با کمینه کردن معادلهی (۳–۸) نسبت به چگالی، معادلات تـک ذرهای کـوهن شـم بدست می آید:

$$\left[-\frac{\nabla_i^2}{2} + V_{eff}(\mathbf{r})\right] \Psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\mathbf{r})$$
(9-\mathcal{V})

که در معادله بالا

¹ Effective potential

² Hartree energy

³ Exchange and correlation energy

$$V_{eff}(\mathbf{r}) = V_{ext} + \int \frac{n(\mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \frac{\delta E_{xc}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})}$$
(1.-7)

توجه شود که توابع موج کوهن-شم (Ψ_i(**r**)، هیچ معنی فیزیکی مستقیمی را نمیدهند. آنها فقط توابع مـوج کمکی^۱ برای محاسبه چگالی الکترونی هستند. چگالی الکترونی میتواند توسط توابع مـوج کوهن-شم بدست آید.

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N} |\Psi_i(\mathbf{r})|^2 \tag{11-7}$$

به منظور یافتن چگالی الکترونی حالت پایه، باید معادلات کوهن-شم به صورت خود سازگار ^۲ توسط روش تکرار ^۳ بر طبق الگوریتم شکل ۳-۱ حل شوند.

رویکرد کوهن-شم نشان داد که چطور مسئله بسذرهای را به یک مسئله تک الکترونی موثر تبدیل کنیم. البته نیازاست که تابعی تبادلی همبستگی، [(n(r)] مشخص و تعیین شود. متاسفانه، شکل دقیق تابعی همبستگی-تبادلی به سادگی شناخته شده نیست؛ بنابراین باید از تقریب استفاده نمود. سادهترین تقریب، تقریب چگالی موضعی[†] (LDA) [۵۹] نامیده می شود. تقریب چگالی موضعی برای پتانسیل تبادلی-همبستگی توسط کوهن-شم در سال ۱۹۶۵ ارائه شد[۶۰] که از انرژی تبادلی – همبستگی گاز الکترونی همگن بدست میآید. تابعی تبادلی – همبستگی LDA به صورت معادلـه

$$E_{xc}^{LDA}[n(\mathbf{r})] \approx \int n(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}^{homo}(n(\mathbf{r})) d\mathbf{r}$$
(17-7)

که ^{homo}»، انرژی همبستگی-تبادلی چگالی گاز الکترونی همگن، با چگالی الکترونی (n(**r** میباشد. بنابراین تنها اطلاعاتی که نیاز میباشد، انرژی تبادلی-همبستگی گاز الکترونی است که محاسبه دقیق آن امکان پذیر است. بدلیل آنکه تابعی، از چگالی الکترونی یکنواخت موضعی بدست میآید انتظار

¹Auxiliary functions

² Self-consistence

 ³ Iterative method
 ⁴ Local density approximation

خطا برای مسائلی میرود که چگالیهای آنها به سرعت تغییر میکند [۶۱]. اگرچه تقریب LDA برای جامدات کپهای بسیار خوب کار میکند، اما در صورت تغییر سریع چگالی الکترونی، همانند داخل اتم و مولکول، بهتر است از تابعی دیگری استفاده شود. تعمیم LDA برای سیستمهای قطبیده اسپینی، تقریب چگالی اسپینی موضعی (LSDA) است که $\mathcal{E}_{xc}^{\pm}(r) = \mathcal{E}_{xc}^{\pm}(n^{+}(r), n^{-}(r))$

$$E_{xc} = \int n(\mathbf{r}) \left[\varepsilon_x^{homo} \left(n(\mathbf{r}) \right) + \varepsilon_c^{homo} \left(n(\mathbf{r}) \right) \right] d\mathbf{r}$$
(1)"-")

عبارت
$$arepsilon_x^{homo}ig(n(m{r})ig)$$
 شکل سر راستی دارد و به صورت زیر محاسبه میشود:

$$\varepsilon_x^{homo}(n(\mathbf{r})) = -\frac{3}{4} (6 n(\mathbf{r}) / \pi)^{\frac{1}{3}}$$
 (14-7)

محاسبه عبارت $\varepsilon_{x}^{homo}\left(n(r)
ight)$ قدری مشکل تر از جمله $\varepsilon_{x}^{homo}\left(n(r)
ight)$ است و محاسبه دقیق آن با روش مونت کارلوی کوانتومی ^۲ انجام می گیرد.

راه حلی برای بدست آوردن نتایجی بهتر، با در نظر گرفتن کمیتهای فیزیکی بیشتر یعنی شیب چگالی الکترونی انجام شد. تقریب دیگری که نسخه تعمیم یافته و بهبود یافته ADA محسوب میشود تقریب GGA میباشد که فرمول بندیهای متفاوتی از آن توسعه پیدا کرده است. تلاشهای زیادی برای پیدا کردن تابعی خوب و مناسب از این تقریب انجام گرفته است. دو تا از پر استفادهترین تابعیهای این تقریب، تابعی پردو ونگ (PW91) [۶۳] و پردو بورگ ارنزرهوف (PBE) [۶۴] میباشد. در این پایان نامه از دومین تابعی این تقریب بهره گرفته شده است. در تقریب GGA، انرژی تبادلی – همبستگی علاوه بر چگالی الکترونی در هر نقطه، به تغییرات چگالی در آن نقطه نیز وابسته است.

¹ Local spin density approximation

² Quantum Monte Carlo

LDA) تقريب چگالی موضعی (LDA)

تابع تبادلی – همبستگی شکل صریحی ندارد و برای محاسبه آن به ناچار باید از تقریب استفاده کنیم، به طور نسبی سهم جمله مربوط به انرژی تبادلی – همبستگی نسبت به دیگر جملات در تابعی انرژی کل کوچک است و استفاده از تقریب برای محاسبه این جمله خطای قابل ملاحظهای ایجاد نخواهد نمود، یکی از این تقریبها تقریب چگالی موضعی است. این تقریب یک تقریب ساده و موفق جهت یافتن پتانسیل تبادلی – همبستگی است به وسیله کوهن شم در سال ۱۹۶۵ بیان شد. در این تقریب برای محاسبهی انرژی تبادلی – همبستگی از فرمول گازهای همگن به صورت موضعی استفاده می کنیم. هرگاه چگالی الکترونی تفاوت زیادی با چگالی دستگاه همگن نداشته باشد و تغییرات چگالی کند باشد می توان ازااین تقریب استفاده نمود. به طور خلاصه در این تقریب انرژی تبادلی – همبستگی یک لکترون در یک نقطه ی r را به طور موضعی با انرژی تبادلی – همبستگی یک الکترون در یک گاز فرمی یکنواخت که دارای همان چگالی است مساوی قرار می دهیم از آنجا که پتانسیل تبادلی – همبستگی مشتق انرژی تبادلی – همبستگی میباشد و این انرژی تابع چگالی الکترونی است ، پس

۲−۳–۵ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)

یکی دیگر از تقریب GGA برای محاسبه ی تابعی انرژی تبادلی – همبستگی تقریب GGA است این تقریب از تقریب LDA دقیق تر است . انرژی تبادلی – همبستگی در بسیاری از حالتها ممکن است علاوه بر چگالی موضعی در ناحیه مربوطه به چگالی درنواحی مجاور نیز بستگی داشته باشد . به همین دلیل در تقریب GGA وابستگی تابعی تبادلی – همبستگی به شیب چگالی نیز منطور می شود . به دلایل زیر می توان تقریب GGAرا دقیق تر از تقریب LDA دانست [۵۶].

۱- در تقریب LDA انرژی تبادلی – همبستگی به صورت یکتایی تعریف می شود و
 تغییرات چگالی درنظر گرفته نمی شود ولی در در تقریب GGA بدلیل اینکه شیب چگالی

نیز در محاسبات وراد می شود از آزادی بیشتری برای محاسبه انرژی تبادلی – همبستگی می توان بهره جست. می توان بهره جست. ۲- در تقریب GGA از پارامترهای زیاد و از مقادیر تجربی برای اتمها و مولکول ها استفاده

میشود و باعث دقیقتر شدن شکل تابعی انرژی تبادلی – همبستگی می شود

۳-۲-۶ شمای کلی نظریه ی تابعی چگالی

در نظریه ی تابعی چگالی محاسبات به صورت خود-سازگار حل می شوند. مراحل محاسبات نظریه ی تابعی چگالی رامی توان به صورت زیر بیان کرد:

- ۱- دادههای ورودی : دادههای ورودی مختصات، عدد اتمی اتم ها و تعداد کل الکترون ها می باشد. اگر شبه پتانسیل به کار رود باید فرم واضح آن را بدانیم و اگر امواج تخت به کار گرفته شده باشد باید بررسی کنیم که چگونه نتایج به بعضی پارامترهای بحرانی بستگی دارد. برای مثال تعداد نقاط برای منطقه بریلوئن و غیره.
- ۲- چگالی ورودی: در این مرحله،چگالی آزمایشی اولیه را قرار می دهیم که ممکن است بر هم
 نهی چگالیهای بار اتمی باشد و یا از محاسبات نیمه تجربی به دست آمده باشد.
- ۳- ایجاد پتانسیل هارتری: در این جا از معادله ی مکان که مشتق دوم پتانسیل را به چگالی
 بار مربوط می کند استفاده می کنیم.
- ۴- ایجاد پتانسیل تبادلی: برای چگالی ورودی پتانسیل تبادلی محاسبه می شود که این
 پتانسیل به صورت زیر میباشد.
- V_{ext} موثر: این پتانسیل با جمع کردن سه مولفه پتانسیل تبادلی خارجی V_{ext} -۵ ایجاد پتانسیل موثر: این پتانسیل با جمع کردن سه مولفه پتانسیل تبادلی V_{act} این V_{act} این V_{act} این $V_{Hartree}$ این $V_{Hartree}$ این ای میدهیم .
- ۶- حل معادلات کوهن شم: در این مرحله معادلات کوهن شم هم در فضای مستقیم و هم در فضای وارون حل می شوند.
- ۷- به دست آوردن چگالی خروجی: با حل کردن معادلات کوهن شم چگالی خروجی به دست میآید.
- ۸- امتحان کردن میزان همگرایی: در این مرحله اختلاف میان چگالی ورودی و چگالی
 خروجی محاسبه می شود که اگر بیش تر ازمقدار معینی که از قبل تعیین می شود باشد
 چرخه باید تکرار شود. ولی اگر اختلاف زیاد نباشد، چگالی حالت پایه را بدست آوردهایم[۵۶].



۳-۲-۳ نظریه تابعی چگالی قطبیده اسپینی⁽ (SDFT)

متغیرهای اساسی در نظریه تابعی چگالی قطبیده اسپینی خطی، چگالی الکترونی و چگالی

¹ Spin density functional theory

مغناطیسی میباشند که به صورت زیر تعریف می شوند. چگالی الکترونی کل:

$$n(\mathbf{r}) = n^{+}(\mathbf{r}) + n^{-}(\mathbf{r}) \tag{10-7}$$

و چگالی مغناطیسی برابر با تفاوت دو چگالی اسپینی است:

$$m(\mathbf{r}) = n^{+}(\mathbf{r}) - n^{-}(\mathbf{r}) \tag{19-7}$$

چگالیهای مجزای حاملهای الکترونی اکثریت $n^+(r)$ و اقلیت $n^-(r)$ $n^-(r)$ برابرند با:

$$n^{\pm}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N\pm} \Psi_i^{\pm^*}(\mathbf{r}) \Psi_i^{\pm}(\mathbf{r})$$
(1)

که \pm جهت اسپین را مشخص می کند. +، مربوط به حاملهای اکثریت یا اسپینهای بالا است و -، مربوط به حاملهای اقلیت یا اسپین پایین است. $\pm N$ تعداد الکترونهای با اسپین بالا و پایین را مشخص می کند که مجموع آنها برابر است با تعداد کل الکترونها $N^+ + N^- = N^+$ ، $\Psi_i^{\pm}(r)$ مشخص می کند که مجموع آنها برابر است با تعداد کل الکترونها حرف الکترونها معادلات کوهن – شم توابع موج تک ذرمای مربوط به حاملهای اکثریت و اقلیت میباشند که از حل معادلات کوهن – شم زیر به دست می آیند:

$$\left[-\frac{\nabla_i^2}{2} + V_{eff}^{\pm}(\boldsymbol{r})\right] \Psi_i^{\pm}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_i^{\pm} \psi_i^{\pm}(\boldsymbol{r}) \tag{1A-W}$$

که پتانسیل موثر به صورت زیر تعریف می شود:

$$V_{eff}^{\pm}(\mathbf{r}) = V_{ext}^{\pm}(\mathbf{r}) + V_{H}(\mathbf{r}) + V_{xc}^{\pm}(\mathbf{r})$$
(19-7)

در اینجا $r = \int \frac{n(r)}{|r-r|} dr$ بستگی دارد. پتانسیل خارجی $V_H(r) = \int \frac{n(r)}{|r-r|} dr$ 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 تبادلی – همبستگی $V_{xc}^{\pm}(r)$ بصورت مشتق تابعی انرژی تبادلی- همبستگی مطابق رابطهی زیر تعریف میشود:

$$V_{xc}^{\pm} = \frac{\delta_{xc}[n^+(r), n^-(r)]}{\delta n^{\pm}(r)} \tag{(7.-7)}$$

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

SIESTA کد ۸-۲-۳

در کد SIESTA، برای حل معادلهی کوهن-شم، از ترکیب خطی اوربیتال های اتمی عددی جایگزیده به عنوان مجموعه پایه به منظور بسط، استفاده می شود. این اوربیتال های اتمی می توانند به صورت حاصل ضربی از یک تابع شعاعی در یک هماهنگ کروی نوشته شوند:

$$\phi_{lmn}(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi) \tag{(1-7)}$$

که $R_{n,l}$ یک تابع شعاعی برای اوربیتال n، و $Y_{l,m}$ یک هماهنگ کروی حقیقی برای تکانه r_c زاویه ای اوربیتالی l وعدد کوانتومی مغناطیسی m میباشد. تابع شعاعی فراتر از یک شعاع خاص r_c مفر می شود یعنی l وعدد کوانتومی مغناطیسی m میباشد. تابع شعاعی فراتر از یک شعاع خاص مرب صفر می شود یعنی n وعدد کوانتومی مغناطیسی m میباشد. تابع شعاعی فراتر از یک شعاع خاص r_c مفر می شود یعنی l وعدد کوانتومی مغناطیسی m میباشد. تابع شعاعی فراتر از یک شعاع خاص r_c مفر می شود یعنی l وعدد کوانتومی مغناطیسی m میباشد. تابع شعاعی فراتر از یک شعاع خاص r_c مفر می شود یعنی l وعدد کوانتومی مغناطیسی m میباشد. تابع شعاعی فراتر از یک شعاع خاص r_c مفر می شود یعنی l وعد کران و شکل پایه هاست. اندازه ی تعداد پایه ها بر مبنای زتای (تای اوربیتال های اتمی، وابسته به اندازه و شکل پایه هاست. اندازه ی تعداد پایه ها بر مبنای زتای (ξ) چند گانه میباشد که می توان برای هر m و l، تعداد اختیاری از توابع شعاعی بدون گره استفاده (ξ) چند گانه میباشد که می توان برای هر m و l، تعداد اختیاری از توابع شعاعی بدون گره مرا به درد کرد که اوربیتال های زتای ξ مرتبه بالاتر گفته می شود [۲۷]. هر اوربیتال زتا ξ ، مربوط به هماهنگهای کروی مشابه و مشترک با توابع شعاعی متفاوت میباشد.

در کد SIESTA مجموعه اندازه پایههای متفاوتی برای انجام محاسبات موجود میباشد که در قسمت ۴-۲-۳-۳ به طور مفصل به آن خواهیم پرداخت.

¹ Node

۳-۳ مقدمه بر تابع گرین غیر تعادلی⁽(NEGF)

امروزه محاسبات ساختار الکترونی یک ابزار مهم برای بررسی فیزیکی و شیمیایی مواد و مولکولهای جدید هستند. یک عامل مهم برای موفقیت این تکنیکها گسترش روشهای اصول اولیه است بدون این که پارامترهای وابستهی سیستمی را معرفی نماید، واقعیت بخشیدن به مدلسازی یک دامنهی وسیعی از سیستمها را ممکن میسازد. بیشتر روشها در دو جنبه محدود می شوند:

۱) هندسه بسته به این که سیستم تناوبی باشد یا محدود و غیرتناوبی

۲) سیستم الکترونی باید در حالت تعادلی باشد.

از لحاظ تئوری به منظور پرداختن به موقعیتی که سیستم در مقیاس اتمی/ مولکولی در تماس با الکترودهای حجمیباشد، نیازمند روشی است که قادر باشد به صورت سیستم بینهایت رفتار کند. در موردی که یک ولتاژ بایاس محدود به الکترودها اعمال شود، یک جریان از میان ناحیهی بدست می آید، زیرا سیستم الکترونی در حالت تعادل گرمایی نیست و مدل باید توانایی این را داشته باشد که این موقعیت غیرتعادلی را تشریح کند. هدف کار حاضر گسترش اصول اولیهی جدیدی در یک روش ساختار الکترونی غیرتعادلی برای شبیه سازی یک نانو ساختار جفت شده با الکترودهای خارجی در پتانسیل های شیمیایی متفاوت است (در اینجا جملهی پتانسیل شیمیای را با تراز فرمی معاوضه می کنیم). در این پژوهش، برای یافتن خواص ترابرد الکترونی حالت پایه در قطعات نانو از رهیافت تابع گرین غیر تعادلی (*NEGF*) استفاده شده است. این رهیافت حالت خارج از تعادل یک سیستم کوانتومی را توصیف می کند که شامل ناحیهی پراکندگی می باشد که به مخازن الکترونی نیمه بینهایت، الکترود متصل شده است[۸۸]. رهیافت تابع گرین غیرتعادلی محاسبه سه خاصیت اصلی

¹ Non-equilibrium Green's Function

۳-۳-۱ مدل ساده برای ترابرد غیرتعادلی

بررسی ترابرد را با یک مدل ساده تک تراز که توسط داتا ['][۶۹] ارائه شده است، شروع می کنیم. دو پراب جریان/ ولتاژ با پتانسیل شیمیایی μ_1 و μ_2 درنظر بگیرید که از طریق یک اتم با یک تراز انرژی \mathcal{F} به هم اتصال دارند (شکل۳–۱ الف). وقتی $\mu_{1=\mu_2}$ ، الکترودها و اتم هر سه در تعادل هستند. اما چنانچه $\mu_1 \neq \mu_2$ بسته به اینکه تراز انرژی اتم با کدام الکترود در تعادل باشد، عدد اشغال با توابع فرمی دیراک زیر داده می شود:

$$f_1(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{(\varepsilon - \mu_1)/k_B T}} \tag{(YT-T)}$$

$$f_2(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{(\varepsilon - \mu_2)/k_B T}} \tag{(YT-T)}$$



شکل ۳-۱:الف) شکل طرحواره دو پراب جریان/ ولتاژ که از طریق یک سیستم تک تراز انرژی 3 به هـم متصـل شـده اند1 » - ۱:الف) شکل طرحواره دو پراب جریان/ ولتاژ که از طریق یک سیستم تک تراز انرژی 3 به هـم متصـل شـده اند1 » - ۱:الف) شکل 2 > 3 > 2

¹ Datta

الکترود اول، الکترونها را به سمت تراز انرژی اتم پمپ می کند تا تراز اتمی با انرژی فرمی الکترود اول برابر شود و عدد اشغال تراز برابر با $(f_1(\varepsilon))$ باشد. از طرف دیگر الکترود دوم، الکترونها را به سمت خود می کشد تا تراز با الکترود دوم در تعادل باشد و عدد اشغال آن با تابع توزیع $(3) f_2$ برابر شود. این حالت یک حالت غیرتعادلی می باشد که میانگین تعداد الکترونها N در حالت پایا مقداری شود. این حالت یک حالت غیرتعادلی می باشد که میانگین تعداد الکترونها N در حالت پایا مقداری است بین f_1 و f_2 . تفاوت عدد اشغال در حالت به سمت خود می کشد تا تراز با تا کنرود دوم در تعادل باشد و عدد اشغال آن با تابع توزیع $(3) f_2$ برابر شود. این حالت یک حالت غیرتعادلی می باشد که میانگین تعداد الکترونها N در حالت پایا مقداری مود. این حالت یک حالت غیرتعادلی می باشد که میانگین تعداد الکترونها N در حالت پایا مقداری می می و ناحیه پراکندگی با اختلاف اعداد اشغال در حالت تعادلی و غیرتعادلی منج به ایجاد حریان می شود [۶۸]. شار خالص ا

$$I_1 = e\frac{\gamma_1}{\hbar} (f_1 - N) \tag{7f-T}$$

به همین ترتیب شارI₂ بین اتصال سمت راست و اتم برابر است با:

$$I_2 = e \frac{\gamma_2}{\hbar} (f_2 - N) \tag{7\Delta-T}$$

$$N = \frac{\gamma_1 f_1 + \gamma_2 f_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \tag{(YP-Y)}$$

$$I = -I_1 = I_2 = \frac{e}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} (f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon))$$

$$(\Upsilon V - \Upsilon)$$

این جریان به ازای هر اسپین است. چنانچه دو حالت اسپینی با انرژی یکسان داشته باشـیم، جریان در ضریب دو ضرب می شود. از رابطه بالا دیده می شود که به جز در دماهای خیلی بالا، تنهـا

وقتی شارش جریان داریم که تراز انرژی \mathfrak{s} با فاصله چند $k_{
m B}$ بین μ_1 و μ_2 قـرار گـیرد یـعنی $\mu_1 > \epsilon = \mu_1 \circ \mu_2 \circ \epsilon = \mu_1$ در غير اين صورت اگر $\mu_2 > \mu_1 \circ \mu_2 \circ \mu_1$ آنگاه $f_1 \sim f_2 \sim 0$ و چنانچه $\mu_2 > \epsilon < \mu_1$ آنگاه $f_1 \sim f_2 \sim 1$ ضروری است وتفاوتی ندارد که $E=\mu$ ضروری است وتفاوتی ندارد که $f_1 \sim f_2 \sim 1$ این حالتها در هنگام تعادل قبل از اعمال ولتاژ بایاس، حالتهای خالی هستند(نوعn) یا پر(نـوp). اگر حالتهای خالی باشند الکترونها توسط الکترود منفی تزریق و سپس توسط الکترود دیگر حمع مى شوند. اگر حالتها در ابتدا پر باشند، الكترونها توسط الكترود مثبت جمع مى شوند وسپس توسط الكترود منفى تزريق مى شوند. مدلى كه تا كنون ارائه شد اطلاعاتى راجع به اشغال تراز انرژی(معادله(۳-۲۶)) و جریان حالت پایا (معادله(۳-۲۷)) به ما میدهد. این روابط به ما کمک میکند که از یک روش خودسازگار برای پیدا کردن جریان وعدد اشغال شده استفاده کنیم. در این مدل ساده تقریبا همه جنبههای مدل عمومی ترابرد بر پایه تابع گرین غیرتعادلی لحاظ شده است. برای کامل شدن تشابه، باید گستردگی تراز انرژی نیز در نظر گرفته شود. چون تراز انرژی ٤ با الکترودها جفت شده است وآهنگ فرار الکترون از این ترازها $\frac{\gamma_1}{\hbar}$ و $\frac{\gamma_2}{\hbar}$ است، لذا زمان حیات الکترون روی این تـراز محدود و برابر با \hbar/γ است که $\gamma_{1} + \gamma_{2} = \gamma_{1} + \gamma_{2}$ بنابراین بر طبق اصل عدم قطعیت، تراز انرژی باید به اندازه γ گسترده باشد. به این ترتیب میتوان چگالی حالتهای انرژی (DOS) را به صورت تابع لورنتس حول $E = \epsilon$ مطابق رابطه زیر تعریف کرد:

$$D(E) = \frac{\gamma_{2\pi}}{(E-\varepsilon)^2 + (\gamma_2)^2}$$
(YA-Y)

به طوری که حاصل انتگرال گیری از D(E) روی بازه انرژی باید برابر با یک الکترون باشد. بنابراین عدد اشغال را برحسب DOS به صورت زیر بازنویسی میکنیم:

$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \rho(E) \tag{79-7}$$

$$\rho(E) = D(E) \frac{\gamma_1 f_1(E) + \gamma_2 f_2(E)}{\gamma_1 + \gamma_2} \tag{(\texttt{``-``)}}$$

و جریان بر حسب DOS به شکل زیر در میآید:

$$I = \frac{e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dET(E) [f_1(E) - f_2(E)]$$
(\mathbf{T} \neq \mathbf{I} - \mathbf{T})

$$T(E) = D(E) \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \tag{(TT-T)}$$

که T(E) برابر احتمال عبور است. معادله (۳–۳۱) همان معادله لانداور در نظریه پراکنـدگی ho(E) و D(E) مسائل چند پایانهای مفید است که روابط(۳–۲۴) و (۳–۲۵) را برحسـبD(E) و p(E) بنویسیم. برای الکترود lpha، a به شکل زیر نوشته می شود:

$$I_{\alpha} = \frac{e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE [\gamma_{\alpha}^{in} D(E) - \gamma_{\alpha} \rho(E)]$$
(\mathcal{T}-\mathcal{T})

 $\gamma_{\alpha}^{in} = \gamma_{\alpha} f_{\alpha}$ که

در این معادلات جریان و عدد اشغال بر حسب چگالی بار الکترون و احتمال ترابرد نوشته شدند. میتوان روابط قبل را بر حسب تابع گرین تک ذرهای زیر نوشت: $G_M(E) = \frac{1}{E - \varepsilon + i \gamma/2}$

این امر کمک میکند تا بتوان مفاهیم معرفی شده را به مسائل با ساختار الکترونی پیچیـده و روشهای خود سازگار بسط داد. چگالی حالتها DOS و چگالی بار را به صورت تابعی از G بازنویسی میکنیم:

$$D(E) = \frac{1}{2\pi} G_M(E) \gamma(E) G_M^*(E) = i [G_M(E) - G_M^{\dagger}(E)]$$
 (r\D_-r)

$$n(E) = \frac{1}{2\pi} G(E) \gamma^{in}(E) G^{\dagger}(E) \tag{(3.17)}$$

که $\gamma_1^{in} = \gamma_1^{in} + \gamma_2^{in}$. با جایگذاری روابط بالا در (۳۲-۳۲) جریان و ضریب ترابرد به صورت زیر در میآید:

$$I = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dET(E) [f_1(E) - f_2(E)]$$
(\mathbf{TV}-\mathbf{T})

$$T(E) = G(E)\gamma_1(E)G^*(E)\gamma_2(E)$$
(٣٨-٣)

تابع گرین غیرتعادلی(NEGF) ⁽، شامل تعمیم روابط تک ترازی بالا برای ساختارهای الکترونی پیچیده میباشد[۶۸].

TRANSIESTA روش نظری در کد ۲-۳-۳

روش کار بر پایهی نظریهی تابعی چگالی است. همانطور که در بخش اول این فصل اشاره شد در این روش، اگر تابعی همبستگی – تبادلی دقیق در دسترس باشد چگالی الکترونی واقعی و انرژی کل بدست می آید، ولی این امر امکان پذیر نیست و تابعی همبستگی – تبادلی باید بوسیلهی یک تابعی تقریبی جایگزین شود. که در این پژوهش از تقریب شیب تعمیم یافته استفاده شده است.

برای محاسبه ترابرد تنها از چگالی الکترونی کل استفاده نمیشود، بلکه توابع موج کوهن – شم نیز به صورت موج تک ذره ای واجد شرایط، هنگامی که جریان الکترونی محاسبه می شود، استفاده خواهد شد. بنابراین فرض می کنیم که توابع همبستگی – تبادلی متداوالی که استفاده می شوند، قادرند تا موقعیتهایی را که الکترونها در حالت غیرتعادلی هستند توصیف کنند و شار جریان را محاسبه نماید. این رهیافت تک الکترونی قادر نیست که اثرات بس ذره ای عمیق را که ممکن است در برخی موارد در خلال فرآیندهای ترابرد ظاهر شوند را، توصیف کند. بـه عنوان مثال، پراکندگیه ای غیرالاستیک به وسیله فونونها در نظر گرفته نمی شود. هماهگونه که در مراجع ۷۰ و ۲۱ توضیح داده شده است، بستهی محاسباتی SIESTA به وسیلهی محاسبهی ماتریس چگالی^۲ و با استفاده از روش توابع گرین غیر تعادلی، به سیستمهای غیرتعادلی بسط داده شده است. این کد ساختار الکترونی غیرتعادلی، به نام TRANSIESTA نامگذاری شد[۲۲]. در ادامه این فصل توضیح خواهیم داد کـه چگونه سیستم به دوقسمت "الکترود" و "ناحیه تماس" تقسیم شده است و چگونه با استفاده توابع

¹ non-equilibrium Greens function

² Density matrix

گرین، ماتریس چگالی حالت غیرتعادلی به دست آمده است.

۳-۳-۳ برپایی سیستم

موقعیت طراحی شده در شکل (۳–۲) را در نظر می گیریم. دو الکترود نیمه نامتناهی چپ و راست با ناحیهی تماس^۱، جفت میشوند. تمام عناصر ماتریس هامیلتونی یا انتگرالهای همپوشانی^۲ بین اروبیتالهای اتمها در دو الکترود چپ و راست صفر هستند به طوریکه جفتشدگی بین الکترودها تنها از طریق ناحیهی تماس رخ میدهد. بنابراین ناحیهی مورد نظر شامل سه قسمت: الکترود چپ (*L*)، ناحیه تماس (*C*) و الکترود راست (*R*) میباشد. فرض میشود اتمها در (*R*)*L* بخشی از الکترودهای حجمی نیمه نامتناهی چپ (راست) باشند که با اتمهای ناحیهی تماس برهم کنش دارند و همچنین فرض میشود که هامیلتونی و ماتریس چگالی به مقادیر حجمی در ناحیهی *R* و *L* همگرا شود. بنابراین هامیلتونی، ماتریس چگالی و ماتریس همپوشانی تنها در بخشهای *C*، *L* و *R*-*C*



بدست آید. بنابراین تنها به قسمت متناهی L-C-R از ماتریس چگالی و ماتریس تابع گرین علاقهمند

¹ Contact region

² Overlap integrals

هستیم. که مقدار هامیلتونی کل برابر است با:

$$H = \begin{pmatrix} H_{LL} & H_{LC} & 0 \\ H_{LC}^{\dagger} & H_{CC} & H_{CR} \\ 0 & H_{CR}^{\dagger} & H_{RR} \end{pmatrix}$$
(3.4)

که H_{RR} , H_{LL} و H_{RR} به ترتیب ماتریسهای هامیلتونی در ناحیههای L، R و C هستند و H_{RR} , H_{LL} (H_{CR}) بر هم کنش بین ناحیههای (R) و C است. جفت شدگی L و R برای قسمت $H_{LC}(H_{CR})$ بر هم کنش بین ناحیه ای (R) و C است. جفت شدگی L و R برای قسمت باقیمانده ی الکترودهای نیمه نامتناهی، تماما به وسیله خود انرژی های \sum_{L} و \sum_{L} بر شمرده می شود. توصیف توابع گرین در فیزیک حالت جامد در مرجع ۷۲ یافت می شود. در اینجا ما خواص عمومی توابع گرین مربوط به رهیافت NEGF را ارائه می دهیم. فرض می کنیم سیستم به وسیله هامیلتونی تک ذره ای H ومی از می شود.

$$H\psi_i = ES\psi_i$$
 (۴۰-۳)
که ψ_i بردار N بعدی تابع موج تک ذرهای با ویژه مقدار E است و S ماتریس همپوشانی
میباشد. چون H و S هرمیتی هستند، E حقیقی میباشد. که با توابع گرین به صورت زیر رابطه دارد:
(۴۱-۳)

که I بردار یکه هست معادلعه تابع گرین به واسطه هامیلتنونی کل به صورت زیر بدست می آوریم:

$$\begin{pmatrix} ES_{LL} - H_{LL} & ES_{LC} - H_{LC} & 0\\ (ES_{LL} - H_{LL})^{\dagger} & ES_{CC} - H_{CC} & ES_{CR} - H_{CR} \\ 0 & (ES_{CR} - H_{CR})^{\dagger} & ES_{RR} - H_{RR} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{LL} & G_{LC} & G_{LR} \\ G_{CL} & G_{CC} & G_{CR} \\ G_{RL} & G_{RC} & G_{RR} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_{LL} & 0 & 0\\ 0 & I_{CC} & 0\\ 0 & 0 & I_{RR} \end{pmatrix}$$
(**fT**-**T**)
in the state of the st

$$[(ES_{CC} - H_{CC}) - (ES_{LC} - H_{LC})^{\dagger} (ES_{LL} - H_{LL})^{-1} (ES_{LC} - H_{LC})$$

$$-(ES_{CR} - H_{CR})^{\dagger} (ES_{RR} - H_{RR})^{-1} (ES_{CR} - H_{CR})]G_{CC} = I_{CC}$$
(FT-T)

$$(ES_{LL} - H_{LL})^{-1} = G_{LL} \tag{(FF-T)}$$

$$(ES_{RR} - H_{RR})^{-1} = G_{RR} \tag{$ f \Delta - V)}$$

با قرار دادن معادلات (۳–۴۰) و (۳–۴۵) در معادله (۳–۴۳) خواهیم داشت:
(
$$ES_{cc} - H_{cc}) - (ES_{Lc} - H_{Lc})^{\dagger}G_{LL}(ES_{LC} - H_{LC})$$
 (۴۶–۳)
- $(ES_{CR} - H_{CR})^{\dagger}G_{RR}(ES_{CR} - H_{CR})]G_{cc} = I_{cc}$

که از معادله (۳–۴۶) خود انرژیهای چپ و راست به صورت زیر تعریف می شوند:
$$\sum_L = (ES_{LC} - H_{LC})^{\dagger} G_{LL} (ES_{LC} - H_{LC})$$

$$\sum_{R} = (ES_{CR} - H_{CR})^{\dagger} G_{RR} (ES_{CR} - H_{CR})$$
(*A-*)

خود انرژی های چپ و راست ماتریس های غیر هرمیتی هستند، و در شکل (۳-۳) نشان داده است. با استفاده از معادلات (۳–۴۷) و (۳–۴۸) در معادله (۳–۴۶) خواهیم داشت:

$$[((ES_{CC} - H_{CC}) - \sum_{L} - \sum_{R}]G_{CC} = I_{CC}$$

$$(\$9-\$)$$

 $G_{CC} = \{ES_{CC} - [H_{CC} + \sum_{L} + \sum_{R}]\}^{-1}$

$$\Sigma_{L}$$

$$H_{CC}$$

$$H_{CC} + \Sigma_{L} + \Sigma_{R}$$

 $(\Delta \cdot - \nabla)$

هرگاه یک سیم مولکولی بین دو الکترود فلزی نامتناهی قرار گیرد، اعمال یک ولتاژ خارجی به الكترودها باعث می شود، پتانسیل الكتروشیمیایی دو الكترود چپ (راست) نسبت به هم متفاوت

که تابع گرین در ناحیه پراکندگی به صورت زیر نشان داده می شود:

می شوند و سیستم دیگر در حالت تعادل نباشد و منجر به جریان غیرصفر، می شود. برای بدست آوردن مقدار جریان ناحیه ی پراکندگی از روش خودساز گار استفاده می کنیم که شکل شماتیک این روش در شکل (۳-۴) نشان داده شده است. تحت ولتاژهای غیر صفر، ماتریس چگالی غیرتعادلی به صورت زیر است:

$$\rho = \frac{1}{2\pi i} \int dE \left[G_{CC} \Gamma_L G_{CC}^{\dagger} f(E - \mu_L) + G_{CC} \Gamma_R G_{CC}^{\dagger} f(E - \mu_R) \right]$$
 (\$\Delta 1-\mathbf{T}\$)

که ۲_{L(R)} نمایشگر اتصال بین الکترودها و ناحیهی پراکندگی است و معرفی کننده میزان پهن شدگی تراز مولکولی است که به صورت زیر تعریف می شود:

$$\Gamma_{L(R)} = i(\Sigma_{L(R)} - \Sigma_{L(R)}^{\mathsf{T}}) \tag{\Delta T-T}$$



$$G^{<} = iG_{CC} [f(E - \mu_L) \sum_L + f(E - \mu_R) \sum_R] G^{\dagger}_{CC}$$
 (۵۳-۳)
که F تابع توزیع فرمی – دیراک میباشد و با استفاده از معادله (۴ – ۵۳) در معادله (۴ – ۵۱)،
$$\rho = \frac{1}{2\pi i} \int dE i G^{<} \tag{df-T}$$

داريم:

از مقایسه ماتریس چگالی با مدل DFT، یک چگالی حالت پایه تولید می شود که منجر به

محاسبه هامیلتونی
$$H_{cc}$$
 میشود. سپس جریان را میتوان از طریق رابطه زیر بدست میآید:
 $I = \frac{e}{h} \int dET(E) [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)] \approx \frac{e}{h} \int_{\mu_R}^{\mu_L} dET(E)$
(۵۵-۳)

در این معادله (E) نشان دهنده، احتمال عبور الکترون تزریق شده با انرژی E میباشد. تابع T(E) می اند ایردی می توانند از تابع گرین ناحیه ی پراکندگی محاسبه می شود. تحت ولتاژ غیر صفر، چگالی و جریان برابر است با:

$$\rho^{\sigma} = \frac{1}{2\pi} \int dE \left[G_{CC} \sum_{L} f(E, \mu_{L}) G_{CC}^{\dagger} + G_{CC} \sum_{R} f(E, \mu_{R}) G_{CC}^{\dagger} \right]_{ij}^{\sigma} \tag{ds-r}$$

$$I^{\sigma} = \frac{e}{h} \int dE \left[Tr(\sum_{L} G_{CC} \sum_{R} G_{CC}^{\dagger}) (f(E, \mu_{L}) - f(E, \mu_{R})) \right]^{\sigma}$$
 ($\Delta V - \mathcal{V}$)

که در معادله بالا E_f و $\mu_L = E_f - \frac{eV}{2}$ و $\mu_L = E_f + \frac{eV}{2}$ انرژی فرمی الکترون و V، ولتاژ اعمالی میباشد[۷۳].

فصل چهارم

نتايج (قسمت اول):

بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانو روبانهای گالیوم نیترید (GaN) آلایش یافته با عناصر واسطه

۴-۱ مقدمه

در این فصل ابتدا به بهینهسازی دادههای ورودی برای انجام محاسبات می پردازیم و سپس دادههای خروجی را بررسی نموده و نهایتا الکترود و پراکننده ^۱ مطلوب برای بررسیهای اسپینترونیکی را معرفی مینماییم.

در این فصل برای یافتن گزینههای مطلوب جهت بررسیهای اسپین ترونیکی، به بررسی خواص الکترونی نظیر ساختار نواری و چگالی حالتهای نانو روبانهای GaN در دو نظم دسته صندلی^۲ و زیگزاگ^۳ برای حالتهای مختلف زیر می پردازم:

- ۱- نانو روبانهای خالص
- ۲- نانو روبانهای آلایش یافته با عناصر واسطه فلزی
- ۳- نانو روبانهای خالص دارای پیوند آویزان[†] (محدود نشده) و فاقد پیوند آویزان (محدود شده⁴).

محاسبات انجام شده در چارچوب نظریه تابعی چگالی با کد محاسباتی SIESTA که بر پایه بسط تابع موج برحسب ترکیب خطی اوربیتالهای اتمی و تقریب شبه پتانسیل استوار است، انجام گرفته است. همچنین برای تابع همبستگی – تبادلی از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) پردو، برک، انزرهوف (PBE) به همراه اسپین قطبیده شده ^۷ استفاده کردهایم.

۲-۴ بهینهسازی پارامترها

دلیل بهینه سازی پارامترها، بدست آوردن نتایج دقیق با محاسبات کمتر و درنتیجه افزایش

¹ Scatter

² Armchair

³ Zigzag

⁴ Dangling bond

⁵ terminated or passivated

⁶ Perdew-Burke-Ern zerhof

⁷ spin-polarization

سرعت همگرایی است. بنابراین پارامترهای مانند انرژی قطع ٔ و بردار شبکهبندی را بهینه میکنیم.

۴-۲-۴ انرژی قطع

این پارامتر، چگالی نقاط شبکه حقیقی^۲را تعریف میکند و مقدار آن توسط کاربر، بصورت یک انرژی وارد میشود، این مقدار به صورت پیش فرض ۱۰۰Ry است. انرژی قطع بطور ضمنی مولفه *Δx* (فاصلهی بین نقاط در فضای شبکهبندی حقیقی) معادله موج تخت قطع^۳ (معادله ۴-۱) را تعریف می کند.



شکل ۴-۱: فضای حقیقی شبکه بندی شده

$$k_c = \frac{\pi}{\Delta x}$$
 $\mathbf{E}_{cut} = \frac{\hbar^2 k_c^2}{2m_e}$ if $m, \hbar = 1$ $\Delta x = \frac{\pi}{\sqrt{2E_{cut}}}$ 1-4

که در آن k_c بردار موج تخت قطع و E_{cut} انرژی قطع و m_e جرم الکترون میباشد، بنابراین مش قطع مربوط به دقت فضای شبکه حقیقی است. هرچه مقدار انرژی قطع بیشتر شود، در شبکهی حقیقی فاصلهی نقاط کمتر، و تعداد آنها بیشتر میشود، در نتیجه تعداد بیشتری از آنها در انتگرالگیری روی این فضا مشارکت میکنند و این باعث افزایش دقت انتگرالگیری در شبکهی حقیقی میشود. البته افزایش بیش از حد آن باعث افزایش تعداد مراحل واهلش [†] میگردد.

۴-۲-۴ بردار شبکهبندی و تعداد نقاط K در فضای وارون

برای یک سیستم تناوبی، به جای انتگرالگیری روی تمام فضای حقیقی (بی نهایت گسترده)،

¹ Cutoff energy

² Real-space grids

³ Plane wave cut-off

⁴ Relaxation

انتگرال گیری (محدود) را روی منطقهی اول بریلوئن در فضا وارون و با استفاده از قضیه بلوخ (معادله (۲-۴)) انجام می دهند. اگرچه اصولا باید توابع موج به ازای تمام نقاط k در منطقهی اول بریلوئن را بدانیم، اما در عمل کافی است توابع موج در تعداد محدودی از این نقاط را داشته باشیم.

$$\psi_n\left(\vec{k},\vec{r}+\vec{R}\right) = \psi_n\left(\vec{k},\vec{r}\right)e^{(i\vec{k}.\vec{R})} \tag{(7-f)}$$

به عنوان مثال می توان انتگرال گیری هایی که با جمع زنی روی مقادیر انتگرالده (مانند: چگالی بار) برای تعداد متناهی از نقاط در منطقهی اول بریلوئن انجام می شود (که این نقاط را نقاط K شبکه بندی ^۲ می نامند) را ذکر نمود. شبکه بندی باید به گونه ای باشد که تراکم کافی از نقاط برای انتگرال گیری وجود داشته باشد، چرا که برای همگرایی نتایج بسیار مهم است، بنابراین یکی از اهداف اصلی در بهینه سازی بدست آوردن تعداد نقاط K به حساب می آید. در اینجا باید توجه داشت که اصل و در به می اول برای انتگرال گیری وجود داشته باشد، چرا که برای همگرایی نتایج بسیار مهم است، بنابراین یکی از اهداف وردشی ناظر بر همگرایی اوردن تعداد نقاط K به حساب می آید. در اینجا باید توجه داشت که اصل اصلی در بهینه سازی بدست آوردن تعداد نقاط K به حساب می آید. در اینجا باید توجه داشت که اصل اورد شی ناظر بر همگرایی از از دی ای به نیست، این به این معناست که رفتار انرژی کل لزوما با افزایش تعداد نقاط K

برای انتگرال گیری روی نقاط منطقهی اول بریلوئن، باید آن را شبکهبندی کنیم. یکی از روشها شبکهبندی روش منخارست پک^۳ میباشد که در کـد SIESTA از آن بهـره مـی.بـریم. یـک شـبکه منخارست پک $N \times M \times K$ است که به منخارست پک در مختصات کسری، شبکه مستطیل شکلی از نقاط با ابعاد $K \times M \times M$ است که به فاصلههای مساوی در منطقه اول بریلوئن فرض میشود. این پارامترها اعداد صحیح ($v \neq v$) می باشند.

برای سیستمهایی با سه درجهی آزادی مثل سیستمهای کپهای که بردارهای شبکهی یکسان $(\vec{a} = \vec{b} = \vec{c})$ دارند به صورت ($N \times N \times N$)، برای شبکههای دوبعدی مثل گرافنها با دو درجه $(\vec{c} = \vec{c})$ آزادی در راستای \vec{b} به صورت ($N \times N \times N$)، برای ساختارهای

¹ Bloch's theorem

 $[\]frac{2}{2}$ **k**-point mesh

³ Monkhorst-Pack

یک بعدی و شبه یک بعدی همانند نانو روبانها، نانولولهها، نانو سیمها و با درجه آزادی در راستای \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} معدودیت در سه راستای \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} به صورت $(N \times 1 \times N)$ و برای ساختارهایی با سه درجهی محدودیت در سه راستای [X]. همانند ملکولها به صورت $1 \times 1 \times 1$ انجام میپذیرد که این نقطه T در منطقه بریلوئن میباشد [T]. ابعاد بزرگتر شبکه حقیقی، شبکهبندی فضای وارون را کوچکتر و دقیقتر خواهد کرد و از ایس نظر ر

۴-۲-۴ تعیین پارامترهای ورودی نانو روبان GaN خالص و آلایشیافته ۴-۲-۴ انرژی قطع



شکل ۴-۲: بهینه انرژی قطع برای نانو روبانهای زیگزاگ (الف) محدود شده (ب) محدود نشده



شکل ۴-۳: بهینه انرژی قطع برای نانو روبانهای دسته صندلی (الف) محدود شده (ب) محدود نشده

مطابق آنچه در بخش ۴–۲–۲ گفته شد برای بهینه سازی تعداد نقاط K برای ساختار نانو روبان که یک ساختار یک بعدی است، از روش منخارست پک با یک درجه آزادی استفاده می نماییم، بنابراین شرایط مرزی به این صورت که در دو راستای a e d به اندازه کافی خلا داشته باشیم منظور گردید تا از برهم کنش در این راستاها جلوگیری شود. در راستای c برای ساختار نانو روبان رفتاری دوره ای در نظر گرفته شد و مش بندی به صورت $N \times 1 \times 1$ انتخاب گردید. سپس پارامتر بهینه انرژی قطع را وارد نموده و برای تعداد نقاط مختلف مقدار انرژی کل را بررسی نمودیم (شکل۴–۴) طبق نمودار؛ ۵۰ نقطه، تعداد بهینه شده برای نقاط K میباشد، چرا که اختلاف انرژی کل بعد از گرفته شد.



شکل ۴-۴: بهینه تعداد نقاط K برای نانو روبانهای GaN محدودشده (الف) دسته صندلی (ب) زیگزاگ

البته همانگونه که در قسمت ۴-۲-۳-۱ برای بهینه کردن انرژی قطع مشاهده گردید تفاوتی بین حالت محدود شده و محدود نشده وجود نداشته و در این قسمت برای اختصار فقط نتایج مربوط به حالت محدود شده ارائه گردید.

۴-۲-۳-۳ مجموعه پایهها

بطور معمول یک مجموعه پایه، مجموعهای از بردارهاست که فضایی را که مسائل در آن حل می شوند را تعریف می کنند. مثلا مجموعه پایه های i,j,k فضای کارتزین را تعریف ملی کنند، املا در فیزیک و شیمی کوانتومی بطور معمول مجموعه پایهها، مجموعهای از توابع تک ذرهای هستند که برای ساخت اوربیتال مولکولی استفاده می شوند. همان طور که در فصل سوم با جزئیات بیشتر بیان شد، کد محاسباتی SIESTA توابع موج تک ذرهای کوهن -شم را بر حسب ترکیب خطی از پایههای اوربیتالهای اتمی بسط میدهد. اوربیتالهای اتمی را می توان به صورت حاصل ضرب تابع شعاعی در هماهنگهای کروی در نظر گرفت. دقت محاسبات وابسته به شکل و اندازه این پایههاست. پایههای اتمی می توانند توسط تعدادی از پایههای چندگانه زتا ٤ بسط داده شوند. ٤ پهنای اوربیتال را کنترل می کند(زتای بزرگتر اوربیتالی کم عرض و زتای کوچکتر اوربیتالی گسترده میدهد). در این قسمت دو اندازه مجموعه پایه (وابسته به تعداد تابع بکارگیری شده برای اوربیتال های اشغال شده) معرفی می کنیم که عبارتند از: تک زتا (SZ) ⁽ و زتای دوگانه (DZ) ^۲. برای تک زتا (SZ) تعداد توابع با تعـداد زیرلایههای (مثلا s,p,d,f) پر منطبق است، بطوریکه به ازای هر زیرلایه یک پارامتر زتا خواهیم داشت، حال اگر به ازای هر زیرلایه دو تابع وجود داشته باشد یعنی به ازای یک n و l مشخص دو زتای متفاوت داشته باشیم این حالت زتای دوگانه خواهد بود. افزایش تعداد زتا باعث افزایش دقت می شود [۷۴].

راه دیگر برای افزایش اندازه مجموعه پایه ها، به منظور نزدیکتر شدن به انرژی الکترونیکی

¹ Single zeta

² Double zeta

دقیق و تابع موج، عبارتست از: افزودن توابع قطبیده ⁽ در مجموعه پایهها. در واقع هر تکانه زاویـه ای مداری بالاتر که به طور معمول در یک اتم مجزا، پر نشده و در مجموعه پایهها مـورد اسـتفاده قـرار بگیرد را تابع قطبیده گویند، به عنوان مثال، برای اتم هیدروژن، تنها اوربیتال پر، اوربیتال نوع S است. بنابراین، اگر اوربیتال نوع q یا b به توابع پایه اضافه شوند، این دو اوربیتال به عنوان توابع قطبیده اتم هیدروژن شناخته می شوند توابع قطبیده شوند، این دو اوربیتال به عنوان توابع قطبیده اتم هیدروژن شناخته می شوند. برای عناصری مانند گالیوم، اوربیتالهای نوع fb به عنوان توابع قطبیده اتم هیدروژن شناخته می شوند. برای عناصری مانند گالیوم، اوربیتالهای نوع fb به عنوان توابع قطبیده اتم در نظر گرفته می شوند رای فلزات واسطه که اوربیتال b آنها در حال پر شدن است، تنها اوربیتال دو f یا یا توابع قطبیده دو گانه قطبیده ای از ترای دوگانه (DZP) بیشتر خواهد بود. لذا در این پایان نامـه جهـت بررسـی خواص الکترونی و مغناطیسی حالت خالص و آلایش یافته از مجموعه پایه DZP و برای برسی خواص ترایی دو ای یا در این یا در ای یا دو ای یا در ای یافته ای و اینه یا دو ای یا دو اید این در این پایان نامـه جهـت بررسـی خواص الکترونی و مغناطیسی حالت خالص و آلایش یافته از مجموعه پایه DZP و برای برای براسی خواص ترایردی (به جهت کاهش محاسبات) از مجموعه پایه SZP استفاده شده است[۲].

۴ –۲ –۴ بهینهسازی ساختار

با بهینهسازی پارامترهای مورد نیاز برای انجام محاسبات می توانیم به بررسی خواص الکترونی ساختار بپردازیم، اما بهتر است ابتدا ساختار را بهینه کنیم – این مرحله واهلش نامیده می شود – به این معنا که موقعیت اتمها درون ساختار بگونه ای باشد که کمترین نیرو به آنها وارد شود، این کار توسط رهیافت دینامیک مولکولی^۲(MD) انجام می گیرد. این رهیافت به مطالعه دینامیک یونی و نیروه ای بین اتمی می پردازد.

روشهای دینامیک مولکولی متفاوتی برای این امر وجود دارد، ولی در محاسبات از روش شیب همیوغ (CG)^۳ بهره برده شد که توسط آن موقعیت و جایگاههای اتمی دائما تغییر میکنند و در وضعیتهای متفاوت نیروی بین آنها توسط روش هلمن-فاینمن تا زمانی که انرژی کل ساختار و

¹ Polarized

² Molecular dynamic

³ Conjugate Gradients

سیستم به ازای موقعیت اتمها و یونها کمینه شود ادامه مییابد. دقت نیروی بین اتمی و بیشینهی تغییرات آن، به عنوان پارامتر ورودی تعریف میشود. با بهینه کردن ساختار میتوان به جایگاههای اتمی، ثابتهای شبکهی تعادلی و همچنین طول پیوندهای اتمی به منظور بررسی خواص الکترونی دستیافت[۲]. بنابر بهینه سازی های صورت گرفته نهایتا برای انجام محاسبات از پارامترهای ورودی زیر بهره برده ایم.

مقدار	پارامتر ورودی	مقدار	پارامتر ورودی
GGA(PBE)	تابعی همبستگی-تبادلی	۳d٬۴s٬۴p	آرایش لایه ظرفیت اتم گالیوم (Ga)
۱×1×۵۰	بردار شبکهبندی فضای K	شيب هميوغ (CG)	روش دینامیک ملکولی (MD)
۵۰۰Ry	انرژی قطع	≤•/••۵ <mark>€۷</mark> Å	همگرایی نیرو
۱+ ^{-۵}	همگرایی چگالی بار	DZP	مجمو عه پايهها

جدول ۴-۱: پارامترهای ورودی برای انجام محاسبات ساختاری، خواص الکترونی و مغناطیسی

۴-۴ خواص الکترونی نانو روبانهای خالص GaN (دستهصندلی، زیگزاگ)

در این قسمت با داشتن موقعیت اتمها و ثابتهای شبکه بهینه شده در مرحله واهلش، به مطالعه ی خواص الکترونی ساختارها مشتمل بر ساختار نواری، چگالی حالتهای جزئی وکلی آنها می پردازیم. برای شروع این بررسی را به ازای چند پهنای متفاوت که عبارتند از ۴،۶،۸،۱۰،۱۲ اتم انجام می دهیم. لازم به ذکر است در تمام محاسبات تراز ۳۵ گالیوم درنظر گرفته شده است.

۴–۳–۱ ساختار نواری

وقتی اتمها با هم یک مولکول را تشکیل میدهند، توابع موج اوربیتالهای این اتمها با یکدیگر ترکیب شده و توابع موجی جدیدی بوجود میآورند که همان اوربیتالهای مولکولی هستند. الکترونهای این اتمها به ترتیب افزایش انرژی در این اوربیتالها قرار میگیرند. اوربیتالهای جدید پیوندی و ضد پیوندی هستند و سطح انرژی آنها با اوربیتالهای اتمی متفاوت است. با ادامه یافتن ترکیب اتمها و شکل گیری یک جامد این اوربیتالها تبدیل به یک نوار پیوسته میشوند که شامل N سطح انرژی است که اوربیتالهای پیوندی نوار ظرفیت و اوربیتالهای ضد پیونـدی نـوار رسانش را بوجود میآورند. ساختار نواری کلیدی برای دانستن نوع ماده به لحاظ عایق، رسانا و یا نیمرسانا بودن است و این یعنی دانستن اندازه گاف نواری و مستقیم یا غیرمستقیم بودن آن. حال برای محاسبهی ساختار نواری ابتدا محاسبات خود سازگار انجام میشود تا انرژی فرمی بدست آید. نکته مهم بعد از انجام محاسبات خود سازگار، انتخاب مسیر مناسب انتگرالگیری در فضای وارون در منطقهی بریلوئن به منظور محاسبهی نوارهای انرژی میباشد. این مسیر دارای بیشترین تقارن میباشد. از آنجا که نانو روبان، ساختاری یک بعدی در راستای محوری (c) دارد، مسیر انتگرال گیری در فضای وارون در منطقه بر دانو محاسبه ساختاری یک بعدی در راستای محوری (c) دارد، مسیر انتگرال گیری در فضای وارون برای محاسبه ساختارهای نواری از (0,0,0) به ($\frac{1}{2}$,0,0) مورت گرفته است که مختصات نقاط بر حسب بردارهای شبکهی وارون معین میشوند.

۴–۳–۱ بررسی اثر پهنا در ساختار نواری نانو روبانها

همچنان که گفته شد ابتدا به بررسی اثر پهنا در ساختار نواری نانو روبانهای دسته صندلی و زیگزاگ خالص که محدود شده و محدود نشده هستند می پردازیم که نتایج آن را می توان در شکل ۴–۵ و ۴–۶ به ترتیب مشاهده نمود. در حالت محدود شده با افزایش پهنا شاهد کاهش یکنواخت گاف انرژی می باشیم که برخی گفتهاند ناشی از محدودیت حاملهاست یا انرژی پین شده به لبهها دارد [۲۵]و برخی گفتهاند ناشی ازمحدودیت کوانتومی نیست و وابسته به توزیع بار در لبه ها است؛ به هرجهت وابستگی گاف به پهنا [۴۵] و روند کاهش آن امری متداول است. با مقایسه ساختار نواری دو وضعیت محدود شده و محدود نشده برای ساختار زیگزاگ و دسته صندلی در می یابیم که الکترونهای جفت نشده موجود در پیوندهای آویزان توانستهاند ساختار نواری نانو روبان زیگزاگ را برهم زده و نوارهایی روی تراز فرمی و بالاتر از آن ایجاد نمایند که مطابق انتظار ما از جایگاه نوار انرژی پیوندهای آویزان است اما برای نانو روبان دسته صندلی تنها گاف نواری کاهش یافته است که



شکل ۴-۵:(ردیف بالا)ساختار نواری نانو روبانهای دستهصندلی خالص محدود نشده GaN (ردیف پایین) ساختار نواری نانو روبانهای دستهصندلی خالص محدود شده GaN



شکل ۴-۶: (ردیف بالا) ساختار نواری نانوروبانهای زیگزاگ محدود نشده GaN (ردیف پایین) ساختار نواری نانوروبانهای زیگزاگ خالص محدود شده GaN

که در نزدیکی یکدیگر واقع شدهاند. در تمام نمودارهای ساختار نواری، سطح انرژی صفر بیانگر موقعیت تراز فرمی میباشد که با خط افقی مستقیم نشان داده شده است. در نیمرساناهای ذاتی که چگالی الکترونها و حفرهها با هم برابراند، 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. جهت بررسی تعدادی از پارامترها در جدول ۴-۲ آمده است. واحدهای انرژی در این جدول بر حسب *P* میباشند.

	٥	حدود نشد	۵		محدود شده				نانو روبان دستەصندلى	
w =17	w =\•	w =٨	w =۶	w =۴	w =17	$w = 17$ $w = 1$. $w = \lambda$ $w = \beta$ $w = \beta$				
р	р	n	n	n	р	р	n	р	n	نوع (type)
١/٧٢	١/٧١	١/٧١	۱/۷۶	١/٨٠	۲/۵۳	۲/۶۵	۲/۸۰	٣/•٧	٣/۶٩	گاف نواری (<i>eV</i>)
	مستقيم – غير مغناطيسي					مستقیم – غیر مغناطیسی				
	محدود نشده					ه	محدود شد	5		نانو روبان زیگزاگ
w =17	w =1 ·	w =٨	w =۶	w =۴	w =17	w =1 •	w =٨	w =9	w =۴	لنهي
HM,	سى	لز مغناطيس	ف	р	n n n n				نوع (type)	
-	-	-	-	٠/١٧	۲/۵۳	۲/۶۶	۲/۸۲	٣/٠٨	۳/۵۳	گاف نواری (<i>eV</i>)
-	-	-	-	(غ ـم)	ىي	غیر مستقیم – غیر مغناطیسی				

جدول ۴-۲: بررسی گاف نواری برای سلول واحد نانو روبانهای GaN

همانطور که مشاهده می شود نانو روبان های دسته صندلی گاف نواری مستقیم دارند و بنابراین برای مصارف اپتیکی مناسب است. روند کاهش گاف انرژی برای این ساختار در حالت محدود نشده

¹ Half Metal

دارای کاهشی جزیی است. برای نانو روبانزیگزاگ محدود نشده، شاهد انتقال از نیمرسانا با گاف نواری اندک به حالت فلز مغناطیسی و سپس به حالت نیم فلزی شده است. البته با بررسی صورت گرفته روی نانو روبانزیگزاگ پهنای ۱۴ اتم نیز خاصیت نیم فلزی مشاهده گردید. با بررسی دقیق تر متوجه همان جابهجایی اندک نوارها که در نانو روبان دستهصندلی محدود نشده مشاهده شده بود در اینجـا نيز تكرار شده با اين تفاوت كه بدليل نزديكي نوارها به تراز فرمي اين جابهجايي موجب بروز چنـين خواصی گردیده است. نانو روبانهای زیگزاگ محدود شده گاف نواری غیر مستقیم داشته که با افزایش یهنا روند کاهشی در حدود ۱eV تجربه میکند، این نتایج با دادههای گزارش شده تطابق خوبی دارد[۷۵،۷۶]. از آنجا که رویکرد این پایاننامه بررسی ترابرد اسپینی و به طور خاص فیلترینگ اسپین است، لذا، سعی بر پیدا کردن حالتهای نیم فلزی داریم، ولی بدلیل محدودیتهای موجود، امکان بررسی تعداد اتمهای بالا لااقل در دوره کارشناسی ارشد وجود نداشته؛ به ناچار مجبور به استفاده از پهناهای کوچکتر هستیم. پهنای ۶ اتم، پهنای مورد استفاده برای تمام بررسیهای انجام شده در این پایان نامه است. از طرفی فلز مغناطیسی برای انجام کارهای ترابردی مناسب میباشد، به عنوان مثال اهن یکی از فلزات مغناطیسی مورد استفاده در بررسیهـای ترابـردی اسـت. در ادامـه شـاهد سـایر بررسیهای ما برای پیدا کردن نانو روبانی به پهنای ۶ اتم با خاصیت نیم فلزی خواهید بود. اما پیش از آن خواص ظاهر شده در نانو روبان خالص پهنای ۶ اتم را بیشتر مورد بررسی قرار میدهیم. نمای دو حالت مورد بررسی که اولی در حضور پیوندهای اویزان و دومی در حالتی است که این پیونـدهـا بـا هیدروژن محدود شدهاند. این پیوندها را میتوان در شکل ۴-۷ مشاهده نمود.



شکل ۴-۷: (الف)پیوندهای آویزان محدود نشده (ب)پیوند آویزان محدود شده با هیدروژن (در نانو روبان دستهصندلی) برای دانستن سهم پیوندهای آویزان هر عنصر در بروز خاصیت فلز مغناطیسی نانو روبان

زیگزاگ با پهنای ۶ اتم، از نمودار چگالی حالتهای کلی ترکیب استفاده میکنیم.



شکل ۴-۸ : چگالی حالتهای کلی ترکیب برای ساختار زیگزاگ GaN محدود نشده

از روی آنالیز چگالی حالتهای کلی اتمها و مقایسه آن با چگالی حالت کلی ترکیب میتوان پی برد که کدام اتمها نقش بیشتری در شکل گیری نوارهای انرژی (نوار ظرفیت و رسانش) داشتهاند. برای ما چگالی حالتهای اطراف تراز فرمی از اهمیت خاصی برخوردار است، چون بسیاری از خواص به آنها وابسته است؛ از جمله رسانش الکتریکی یا به عبارتی غالب ترابردها در اطراف تراز فرمی رخ می دهد . با توجه به نمودار شکل ۴–۸ پیوندهای آویزان اتمهای گالیوم و نیتروژن در ایجاد نوارهای انرژی روی تراز فرمی نقش داشتهاند بطوریکه سهم گالیوم برای اسپین بالا بیشتر از نیتروژن میباشد. و هیدروژن تقریبا هیچ نقشی در وجود و بروز چگالی حالتهای اطراف تراز فرمی ندارد. بنابراین با توجه به اثر پیوندهای آویزان روی خواص الکترونی و مغناطیسی نانوساختارها در سایر بررسی ها نیز هردو

GaN بررسی اثر تهی جای در نانو ساختارهای نانو روبان GaN

بدلیل تمایل به بررسی خواص پیوندهای آویزان ابتدا به اثر تهی جای میپردازیم به این دلیل که تهی جای منجر به تولید پیوندهای آویزان درون ساختار میگردد و بسته به نوع برهم کنش آنها با هم ممکن است خواص جالبی بروز دهند. از آنجا که در قسمت قبل رفتار مغناطیسی بهتری از نانو روبان زیگزاگ مشاهده نمودیم، ابتدا اثر تهی جای N را در موقعیت لبه و مرکز نانو روبان زیگزاگ بررسی مینماییم و سپس این داده ها را با دادههای بدست آمده از تهی جای Ga مقایسه می کنیم. این دادهها در جدول ۴–۳ بطور کامل برای موقعیت های مختلف آمده است.

Ga .		کای N			
مركز	لبه	کز	مر	لبه	موقعيت
مغناطيسي	سانای یسی	نيمرس مغناط	نیمرسانای غیر مغناطیسی	رفتار الكترونيكى	
- 2982./96.	- 2982./669	-۳۱۳۷۵/۹۳۲		- 31381/338	انرژی کل (eV)
٣/١۴	۳/۳۲	1/11		۲/۹۲	گاف نواری بالا-
۰/۵۶	•/88	۲/۰۳		۲/۹۲	پايين(eV)
لا غیر مستقیم ایین مستقیم	برای اسپین بالا غیر مستقیم برای اسپین پایین مستقیم			غير ه	نوع گاف نواری
४/१११	٣	•/٩	•/٩٩٨ •		$(\pmb{\mu}_{B})$ گشتاور مغناطیسی کل $(\pmb{\mu}_{B})$
-•/•۴۴	•/•) ¥	•/9	980	•	گشتاور مغناطیسیGa (μ_B)
۲/۹۳۱	۳/۰۱۶	•/٣١١		•	گشتاور مغناطیسیN ((μ_B)
۰/۱۰۸	-•/• ۲ ۵	•/•	77	•	$(\mu_B) \mathrm{H}$ گشتاور مغناطیسی (μ_B)
р	р	n بالاp پايين		n	نوع

جدول ۴-۳: اندازه و نوع گاف نواری اسپین بالا، اسپین پایین و خواص الکترونی ناشی از تهی جایهای مختلف



شکل ۴-۹ : ساختار نواری (الف) تهی جای N در موقعیت لبه (ب) تهی جای N در موقعیت مرکز(ج)تهی جای Ga در موقعیت لبه (د) تهی جای Ga در موقعیت مرکز

با توجه به دادههای جدول ۴–۳ تهیجای Ga موجب بروز خاصیت نیمرسانای مغناطیسی گردیده است. بیشترین سهم در ایجاد گشتاور کل، ناشی از گشتاور موضعی Nها میباشد و تفاوتی در موقعیت مرکز و لبه نمی کند. نکته مطلوب این ساختار این است که بدون استفاده از عناصر واسطه توانستهایم به یک نیمرسانای مغناطیسی دست بیابیم. همچنان به دنبال یافتن نانو روبانی با پهنای ۶ اتم که خاصیت نیم فلزی داشته باشد به بررسی آلایش توسط عناصر واسطه در موقعیتهای مختلف می پردازیم؛ در این پایان نامه عناصر واسطه با اتم گالیوم جایگزین شدهاند. چون انتظار داریم الکترونهای اضافی ناشی از آلایش در چاه کوانتومی پیوند آویزان به دام افتاده و خواص پیوندهای آویزان از خواص آلایش قابل تشخیص نباشند؛ در ابتدا تمام این پیوندهای را توسط هیدورژن محدود می کنیم و صرفا به بررسی خواص آلایش در نانو روبان محدود شده GaN می پردازیم.

۴-۴ بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانو روبان آلایشیافته GaN

۴-۴-۱ بررسی نانو روبانهای محدود شده توسط هیدورژن

آلایش عناصر واسطه ی مغناطیسی باعث ایجاد حالتهایی در میان گاف نواری نانو روبان خالص به واسطه ی هیبریداسیون اوربیتالی گردیده و ساختار نواری و اندازه ی گاف نانو روبان را تغییر می دهند. در حضور آلاینده ها به ازای حالتهای اسپین بالا و اسپین پایین گاف های نواری متفاوتی بدست آمد این عدم تقارن در چگالی حالتهای اسپینی و ایجاد حالتهای قطبشی اطراف تراز فرمی به ساختار خاصیت مغناطیسی می دهند.

ابتدا به بررسی اثر آلایش در مرکز نانو روبانهای دستهصندلی، که بطور کامل توسط اتمهای هیدوژن محدود شدهاند می پردازیم. مطابق با جدول ۴–۴ و شکل ۴–۱۱ آلایش عناصر مغناطیسی مثل آهن و غیرمغناطیسی مثل مس هر دو سبب مغناطیسی شدن این ساختار می گردد با این تفاوت که در مغناطیسی شدن ساختار با آلایش آهن سهم عمدهای از گشتاور مغناطیسی کل ناشی از گشتاور مغناطیسی آهن است ولی در آلایش با مس ، این آلایش حالتهای در نزدیکی تراز فرمی ایجاد نموده و ساختار نواری نانوروبان GaN را تغییر می دهد و باعث القای فرومغناطیس در اتمهای ۸. اطراف خود می گردد. بنابراین خاصیت فرومغناطیسی این ساختار ناشی از مکانیسم هیبریداسیون تراز b مس با q نیتروژن است[۷۷]. مطابق جدول۴–۴ نوع نیمرسانایی در هر صورت به نوع P تغییر



شکل ۴-۱۰: آلایش در مرکز (راست) لبه (چپ) ابر سلول نانو روبان دسته صندلی GaN کاملا محدود شده



شکل ۴-۱۱: ساختار نواری نانو روبانهای دستهصندلی در حضور آلایش در مرکز ساختار

Cr	Fe	Cu	Mn	خالص	آلایش
	مغناطيسي	نيمرسانا	رفتار الكترونيكى		
- 36461/•12	- 38728/412	-87891/801	- 3801 • / 313	- 3799•/119	انرژی کل(eV)
٠/٨٩	٣/١	۲/9۵	•/٧٣۵	٣/٠٩	گاف نواری اسپین بالا-
٣/٢۴	۲/۲۲	•/1	٣/١٩		پايين(<i>eV</i>)
	نوع گاف نواری				
٣	۵	٢	۴	•	گشتاور مغناطیسی کل (µ _B)
•/۵٩٩	•/٢•۶	•/•۵٩	•/184	•	گشتاور مغناطیسیGa (μ_B)
-•/ ۵ •۲	+/STV	1/8+6	-•/8fv	•	$(oldsymbol{\mu}_B) \; \mathbf{N}$ گشتاور مغناطیسی
-•/• \ \	٠/٠١٩	•/•٣۶	-•/• ٢٣	•	گشتاور مغناطیسی H (μ_B)
- 3/4.2	4/747	•/&•9	4/14	•	گشتاور مغناطیسی آلایش (µ _B)
Р	р	р	Р	n	نوع

وژن محدود شدهاند	توسط اتمهای هید	که بطور کامل	اى دستەصندلى،	مركز نانو روبانها	, ۴-۴ : اثر آلایش در	جدول
------------------	-----------------	--------------	---------------	-------------------	----------------------	------

حال همین بررسی را در مورد آلایش در لبه نانو روبان دسته صندلی (شکل ۴–۱۰) انجام می

دهيم.

مىكند.



شکل ۴-۱۲: ساختار نواری نانو روبانهای دستهصندلی در حضور آلایش در لبه ساختار

Cr	I	Te	Cu	Mn	خالص	آلايش		
لغناطيسي	نيمرسانا م		نيمرسانا	نیمرسانا مغناطیسی	نيمرسانا	رفتار الكترونيكى		
- 48474/844	- 36720/714		-۳۷۳۹۲/۱۷۱	- 3601 • / • 21	- ४४११•/۱۱٩	انرژی کل(eV)		
٠/۵١	٣	·• A	./614	•/٩٩	٣/,٩	گاف نواری اسپین بالا-		
۳/۱۱	1/988		•// 61	۳/۳۸	1/•3	پايين(eV)		
	نوع گاف نواری							
४/९९९	۴/۱	999	•	٣/٩٩٩	•	(μ_B) گشتاور مغناطیسی کل (μ_B)		
•/•۴۴	۰/۱۰۵		۰/۱۰۵		•	۰/۰۵	•	$(\mu_B) \; ext{Ga} گشتاور مغناطیسی) Ga$
-•/٣۶	•/471		•	-+/166	•	$(\mu_B) \ge N$ گشتاور مغناطیسی (μ_B)		
-•/**	۰/۰۹۳		۰/۰۹۳		•	-•/784	•	$(\mu_B) \ { m H}$ گشتاور مغناطیسی $(\mu_B) \ { m H}$
37/228	4/378		•	4/393	•	گشتاور مغناطیسی آلایش (ال		
Р	nada	n VI.	n	n	n	(#B)		
I	پايين ۱۱	hĩả	Ч	Ч	11	نوع		

جدول ۴-۵: اثر آلایش در لبه نانو روبانهای دستهصندلی، که بطور کامل توسط اتمهای هیدوژن محدود شدهاند.

اهمیت جایگاه آلایش به وضوح از تفاوت نتایج آلایش مس در لبه و مرکز قابل مشاهده است، هرچند برای سایر عناصر تفاوت چشم گیری مشاهده نمی شود. همین طور با توجه به ثبات تقریبی انرژی کل برای هر دو جایگاه آلایش می توان نتیجه گرفت که جایگاه آلایش تفاوتی در پایداری ساختار محدوده شده بوجود نمی آورد هرچند با آلایش، ساختار کمی ناپایدارتر از حالت خالص می گردد. در ادامه برای ساختار زیگزاگ ابتدا اثر آلایش در مرکز نانو روبان را بررسی و سپس با نمونه



شکل ۴-۱۳: آلایش در لبه (راست) مرکز (چپ) ابر سلول نانو روبان زیگزاگ GaN کاملا محدود شده



شکل ۴-۱۴: ساختار نواری نانو روبانهای زیگزاگ در حضور آلایش در مرکز ساختار

لور کامل توسط اتمهای هیدوژن محدود شده	و روبانهای زیگزاگ، که بط	جدول ۴ -۶ :اثر آلایش در مرکز نانر
---------------------------------------	--------------------------	-----------------------------------

Cr	Cr		Fe		Cu Mn		خالص	آلايش	
		ىي	نيمرسانا	رفتار الكترونيكى					
- 30118	>/179	- 8. 6. 6/699		- 31 • 29/7 • 9		-81.09/1.9 -8.24/222		-81017/776	انرژی کل(<i>eV</i>)
•/A ٣/٢	8 '1	۳/۰۹ ۳ ۲/۱۷ ۰/۲۴۱		//•9 W •/۶٩• //IV •/۲۴1 W/19		٣/١١	گاف نواری اسپین بالا- پایین(eV)		
پايين غ	بالا م	پايين غ	بالا م	پايين غ	بالا	مستقيم	غيرمستقيم	نوع گاف نواری	
٣	۳ ۴/۹۹۹		.૧૧	1/999		۴	•	گشتاور مغناطیسی کل((μ_B)	
•/۵۱	18	۰/۲	•۴	۰/۰۵		۰/۱۳۵	•	$(\mu_B) \; ext{Ga} گشتاور مغناطیسی) Ga$	
-•/۴	٩٨	•/۵		T 1/TVA		-•/ ٣ ۴	•	گشتاور مغناطیسیN (µ _B)	
_•/•	77	•/• ٢٧		•/•9۵		-•/• ٣ ٧	•	گشتاور مغناطیسی H (μ_B)	
٣/۴+۶		۴/۲	49	•/۶•6	۵	4/747	-	گشتاور مغناطیسی آلایش (µ _B)	
پايين p	n بالا	پايين n	بالا p	р		р	р	نوع	

با توجه به دادههای جدول ۴-۶ در این ساختار نیز سهم عمدهای از گشتاور کل مربوط به عناصر مغناطیسی آلایش شده است به جز در مورد مس که آلایش این عنصر همانند آنچه برای نانو سر روبان دسته صندلی گفته شد موجب القا فرومغناطیس در نیتروژنها گردیده و گشتاور کل سیستم بیشتر ناشی از گشتاور نیتروژن هاست. پایدارترین حالت آلایش شده نیز همین حالت آلایش با مس است و گاف نواری برای اسپین پایین در این وضعیت برابر با ۰/۲۴۱eV است که در شکل ۴–۱۴ می توان این گاف اندک را مشاهده نمود. دو عنصر Ga و H در تمامی موارد نقش اندکی در گشتاور مغناطیسی کل ساختار دارند. انرژی کل به ازای انواع آلایش افزایش نشان می دهد که این منجر به کاهش پایداری می گردد ، در میان آلایش های موجود پایدارترین حالت مربوط به آلایش مس و ناپایدارترین حالت مربوط به آلایش Cr می باشد. حال آلایش در لبه را بررسی می کنیم.



شکل ۴-۱۵: ساختار نواری نانو روبانهای زیگزاگ در حضور آلایش در لبه ساختار

با توجه به دادههای جدول ۴–۷ و شکل ۴–۱۵ در تمامی حالتهای بررسی شده گشتاور عناصر آلایش شده سهم عمدهای از گشتاور کل سیستم را تشکیل می دهد؛ پایدارترین حالت مربوط به آلایش آهن و بازهم آلایش کروم ناپایدارترین سیستم نسبت به حالت خالص است که می تواند ناشی از کوچکی شعاع این اتم نسبت به شعاع گالیومی باشد که جایگزین آن شده است از طرفی شعاع اتمی مس نیز از سایر آلایشهای مورد بررسی نزدیک ترین عدد اتمی و شعاع اتمی را با گالیوم دارد و کمترین میزان تغییر در پایداری سیستم را در آلایش مس شاهد هستیم، آلایش در موقعیتهای مختلف ساختار زیگزاگ، همانند ساختار دسته صندلی، تاثیری تقریبا یکسان و اندکی در ناپایدار نمودن سیستم کاملاً محدود شده داشته است؛ که نشان از پایداری نسبتا بالای این ساختارها دارد، گاف برای اسپین بالا در دو مورد M و Cr به ترتیب برابر ۴۴۸ و ۱/۳۹۱

Cr		Fe		Mn	l	خالص	آلايش		
سى	نيمرسانا مغناطيسي		نيمرسانا مغناطيسي		نيمرسانا	رفتار الكترونيكى			
- 3• 110/8	7.	- 3. 6. 6	14.4	- 3• 241/• 72		- 3• 24/• 72		-81012/206	انرژی کل(eV)
•/۳۹1 ۳/۱۳		۲/99 ۲/۲۷	۱ ۴	•/440 4/101		٣/١١	گاف نواری اسپین بالا- پایین(eV)		
م پايين م	بالاغ ه	ستقيم	م	ىتقيم	مى	غيرمستقيم	نوع گاف نواری		
४/११११		۵		۴		•	$(oldsymbol{\mu}_B)$ گشتاور مغناطیسی کل		
۰/۰۷۵		•/141	٢	۰/۰۵	۷	•	$(\mu_B)~{ m Ga}$ گشتاور مغناطیسی		
-•/FY		•/۵ ٨ ٧		-•/ ٣ ·	٠٨	•	$(oldsymbol{\mu}_B) \mathbf{N}$ گشتاور مغناطیسی		
-•/•۲۱		•/•٣۴		•/•٣	۴	•	گشتاور مغناطیسی H (μ_B)		
37/381		4/14	,	4/212		-	گشتاور مغناطیسی آلایش (μ_B)		
р		پايين n	بالا	پ ايين p	n بالا	р	نوع		

جدول ۴-۲: اثر آلایش در لبه نانو روبانهای زیگزاگ، که بطور کامل توسط اتمهای هیدوژن محدود شدهاند

هرچند دراین قسمت نیمرساناهای رقیق شدهی مغناطیسی با گشتاور مغناطیسی مناسب یافت گردید، اما هنوز ساختاری با خاصیت نیم فلزی که هدف ما از این بررسیها را ارضا کند یافت نشده است. برای ادامه آلایش روی نانو روبانهای محدود نشده را بررسی خواهیم نمود. در این حالت بدلیل وجود همزمان پیوندهای آویزان و آلایش انتظار داریم خواص متفاوتی را مشاهده نماییم چرا که الکترون اضافه شده توسط آلایش می توانند درون این پیوندها به دام افتاده و موجب بروز خواص متفاوت شود. اما قبل از آن اثر پیوند آویزان روی پایداری دو سیستم مشابه را مورد بررسی قرار میدهیم.

جدول ۲۰۰۰ بررسی اثر پیوند اویران بر اثرری کل برخسب(۲۰)
--

محدود نشده	محدود شده	ساختار
_979&V/719A.7	_97794/197894	دستەصندلى
_89987/197917	_&\$99\$\$/18.898	زیگزاگ

بنابر جدول ۴–۸ پیوند آویزان مقداری انرژی کل سیستم برای هر دو ساختار حدود ۰/۵٪

افزایش میدهد که نهایتا میتوان نتیجه گرفت حالت کاملا محدود شده پایدارتر است.

۴-۴-۲ بررسی روی نانو روبانهای محدود نشده

همانند قسمت پیش ابتدا بررسیهای خود را روی ساختارهای دسته صندلی و سپس زیگزاگ متمرکز خواهیم نمود. برای شروع ابتدا اثر آلایشهای مختلف در مرکز نانو روبان دسته صندلی محدود نشده را بررسی می نماییم. نتایج و نمودارهای این بررسی به ترتیب در جدول ۴-۹ و شکل ۴-۱۶ بطور کامل آمده است.



شکل ۴-۱۶: ساختار نواری نانو روبانهای دستهصندلی در حضور آلایش در مرکز ساختار

C	r	F	e	Cu Mn		ſn	خالص	آلایش
		Ĺ	مغناطيسي	نيمرسانا	رفتار الكترونيكى			
- 7384	۳۷/۴۸۹	- 22926/•1		-2401/440 -222/11		- 200 1264	انرژی کل(eV)	
•/۲ ١/٧	"1T NS	1/44X 1/878		•/119 •/89	119 •/19 175 1/YA		1/428	گاف نواری اسپین بالا- پایین(eV)
قيم	مست	پايين غ	بالا م	غيرمستقيم	بالاغ م پايين م		مستقيم	نوع گاف نواری
۲/۹	.99	۴/۹	199	•/••¥\$	4/1		•	(μ_B) گشتاور مغناطیسی کل (μ_B)
٠/١	٠٣	۰/۱	18	+/111	•/1	18	•	$(\mu_B)~{ m Ga}$ گشتاور مغناطیسی
-•//	-+/&98 +/&98		-•/ f f	_•/'	F	•	گشتاور مغناطیسیN ((μ_B)	
٣/۴	°97	۴/۱	۹۳	•/٣٣٩	۴/۱	۳۰۹	-	گشتاور مغناطیسی آلایش (µ _B)
پايينP	بالا n]	p	р	بالا n پايينP		n	نوع

د نشده	ی محدو	دستەصندلى	بانھای	نانو رو	مر کز	لایش در	-۹: اثر آ/	جدول ۴۰
--------	--------	-----------	--------	---------	-------	---------	------------	---------

دراین ساختار گاف برای اسپین بالا در حضور آلایش Mn برابر با ۷۹۲/۰ میباشد. همچنان بیشترین سهم در گشتاور مغناطیسی کل مربوط به عناصر آلایش شده است و باتوجه به افزایش انرژی کل سیستم نتیجه می گیریم پایداری سیستم با آلایش کاهش یافته است. اینک به بررسی آلایش در لبه همین نانو روبان می پردازیم.



شکل ۴-۱۷: ساختار نواری نانو روبانهای دستهصندلی در حضور آلایش در لبه ساختار

(Cr Fe		Cu Mr		خالص Mn		آلایش		
نيمرساناي مغناطيسي								نيمرسانا	رفتار الكترونيكى
- ۲۳۶	48/128	- 2292	४४/•९४	- 24092/910		- 2278 • /840		- 20 • 12/269	انرژی کل(eV)
۱/	69	۱/۱	/¥18 1/AT		٨٢	+/VY		1/428	گاف نواری اسپین بالا-
۱/۵	۵1۷	1/889		•/٧٩۴		1/84			پايين(<i>eV</i>)
پايين	بالا غ	قيم	مست	نيم نيم	مستن	پايين م	بالاغ	مستقيم	نوع گاف نواری
	٣	۵/۰۰۰۰۱		१/९९९९		۴		•	$({m \mu}_B)$ گشتاور مغناطیسی کل $({m \mu}_B)$
-•	••۶	•/184		•/•97		•/•¥X		•	گشتاور مغناطیسیGa (μ_B)
-•/988		•/88		1/499		-•/VIY		•	گشتاور مغناطیسی N ((μ_B)
37/984		۴/۱۸۷		•/۴۳۶		F/88F		_	گشتاور مغناطیسی آلایش
									(µ _{<i>B</i>})
پايينn	بالا p	پايينn	بالا p	پايينn	بالا p	Р		n	نوع

جدول ۴-۱۰: اثر آلایش در لبه نانو روبانهای دسته صندلی محدود نشده

مشاهده می شود که به ازای آلایش مس گشتاور مغناطیسی در سیستم بوجود آمده که این برخلاف حالتی است که آلایش مس در مرکز بوده دراین حالت پایداری سیستم نسبت به آلایشهای دیگر بیشتر است. حضور مس باعث ایجاد قطبش در نیتروژن شده است. حال نانو روبان زیگزاگ را به همین ترتیب بررسی می کنیم. با توجه به شکل ۴–۱۸ در تمامی آلایشهای انجام شده خاصیت فلزی مغناطیسی مشهود است. نکته قابل توجه در این دادهها این است که در ساختار دسته صندلی آلایش مس در مرکز نانو روبان باعث القای اثر فرومغناطیس در نیتروژن می گردد و در حالیکه این ساختار به طور خالص غیر مغناطیسی بوده؛ بواسطه این آلایش مغناطیسی می شود، اما نمونه زیگزاگ خالص محدود نشده مطابق شکل ۴–۱۸ یک فلز مغناطیسی است که با استناد به جدول ۴–۱۱ و مشاهدات دقیق تر، گشتاور مغناطیسی کل آن ناشی از پیوندهای آویزان نیتروژن و گالیومهای موجود در لبه بالا و پایین است؛ حال با آلایش مس در مرکز، مغناطش ناشی از حضور پیوند آویزان در نیتروژن و گالیوم از بین رفته و مغناطش سیستم بسیار اندک می شود. این پدیده می تواند ناشی از نحوه تبادل بار بین مس و پیوندهای آویزان باشد.



شکل ۴-۱۸: ساختار نواری نانو روبانهای زیگزاگ در حضور آلایش در مرکز ساختار

ٔ : اثر آلایش در مرکز نانو روبانهای زیگزاگ محدود نشده	جدول ۴-۱۱
---	-----------

Cr	Fe	Cu	Mn	خالص	آلایش
	يسى	فنــــــاطـــــ	فـــــلز مغ		رفتار الكترونيكى
- 1834/197	- 17830/47•	- 18291/004	- 17481/211	- 1880 1/388	انرژی کل(eV)
8/48.878	4/220968	•/•••110	4/	४/४٩۶٩٨٩	گشتاور مغناطیسی کل((µ _B)
۱/۱۴	-•/۵۳۸	-•/• ٢٢	+/+ \Y	1/191	$(\mu_B) \; { m Ga}$ گشتاور مغناطیسی
- 1/• ۸ ۳	-•/•۶۵	•	-•/٣٣٨	1/8+4	$(oldsymbol{\mu}_B) \; \mathbf{N}$ گشتاور مغناطیسی
٣/۴٠٢	2/226	•	4/224	_	گشتاور مغناطیسی آلایش (µ _B)

مطابق جدول ۴–۱۲ و شکل ۴–۱۹ با آلایش مس در لبه ساختار، احتمال برهم کنش بین مس

و پیوندهای آویزان بیشتر شده و ساختار از فلزمغناطیسی به نیمرسانای غیر مغناطیسی تبدیل می شود و همان گشتاور مغناطیسی ناچیز که در ساختار دسته صندلی دیده شد نیز نخواهیم داشت.



شکل ۴-۱۹: ساختار نواری نانو روبانهای زیگزاگ در حضور آلایش در لبه ساختار

Cr	Fe	Cu	Mn	خالص	آلایش
فلز مغناطيسي		نيمرسانا	اطیسی	فلز مغنا	رفتار الكترونيكى
- 17347/870	- 17838/•01	- 18291/833	- 1848 • /428	- 188 • 1/488	انرژی کل(<i>eV</i>)
•/991490	2/41.479	•/••••	1/842004	2/296989	$(oldsymbol{\mu}_B)$ گشتاور مغناطیسی کل $(oldsymbol{\mu}_B)$
•/• \ ¥	٠/٢٢٩	•	٠/٣١	1/191	گشتاور مغناطیسیGa((μ_B
-1/341	-•/ \· A	•	-1/220	1/808	$(\mu_B) \; \mathbf{N}$ گشتاور مغناطیسی
2/218	٣/٢٩	•	۲/۹۷۱	_	گشتاور مغناطیسی آلایش (-11)
					(μ_B)

جدول ۴-۱۲:اثر آلایش در لبه نانو روبان های زیگزاگ محدود نشده

مطابق جدول ۴–۱۰ نیز هر چند مس خاصیت مغناطیسی ندارد اما مشاهده گردید که در ساختار دسته صندلی محدود نشده می تواند باعث قطبش نیتروژن شده و سیستم را دارای گشتاور مغناطیسی(۱/۹۹۹ µ_۱) نماید. بنابراین می توان نتیجه گرفت برای آلایش مس مجموعه از جایگاه آلایش و شکل لبهها در بروز خواص مختلف، ناشی از آلایش با این عنصر، موثر هستند.

البته ناگفته نماند که برای یافتن نیم فلز آلایشهای دیگر و آلایش جایگزین نیتروژن و افزایش آلایش، آلایش دور و نزدیک، حالتهای فرو و آنتی فرومغناطیس را بعضا برای دو ساختار عمده، کاملا محدود شده و کاملا محدود نشده، بررسی نمودهایم که از حوصله این پایان نامه خارج است، لـذا در ادامه به بررسی حالتهایی که در آنها ترکیبی از حالت محدود شده و محدود نشده که آن را نیمه محدود شده مینامیم بسنده میکنیم.

۴-۴-۳ بررسی حالتهای نیمه محدود شده

حالتهای نیمه محدود به حالتهایی می گوییم که در آنها پیوندهای آویزان فقط برای بعضی از عناصر موجود در لبه ساختار، محدود شده است، مثلا فقط گالیومهای موجود در لبه یا فقط نیتروژنها محدود شده باشند. در شکل ۴-۲۰ محدویت برای Ga در دو ساختار زیگزاگ و دسته صندلی به خوبی نمایش داده شده است.



شکل ۴-۲۰: ساختار دسته صندلی با Ga محدود شده (راست) ساختار زیگزاگ با Ga محدود شده(چپ)

نکتهای که باید در مورد پایداری این ساختارهای نیمه محدود شده گفت با ارائه مقادیر انرژی کل برای سه حالت کاملا محدود شده کاملا محدود نشده ونیمه محدود شده نشان می دهیم.

محدود	نشده نيمه	محدود	محدود شده،	كاملا	حالت ً	سە	eV) برای	عسب ('	کل برح	نرژی ـ	': بررسی ا	17-4	ىدول	?
-------	-----------	-------	------------	-------	--------	----	----------	--------	--------	--------	------------	------	------	---

محدود نشده	نيمه محدود	محدود شده	ساختار
_979&V/W19A+Y	_9711./VA&99.	_98194/191094	دستەصندلى
_89987 /198918	_0911079779	_89994/14.494	زیگزاگ

جدول ۴–۱۳ نشان میدهد پایداری حالت نیمه محدود، مقداری میان دو حالت دیگر است و با محدود کردن پیوندهای آویزان ساختارها پایدارتر میشوند. N است محدودیت برای Ga و عدم محدودیت برای است محدودیت ا

حال به بررسی حالتی می پردازیم که در آن پیوندهای آویزان Ga های موجود در لبه، توسط هیدروژن اشباع شدهاند ولی این پیوندها برای N وجود دارند. ابتدا ساختار نواری و سپس چگالی حالتهای کلی ترکیب را بررسی مینماییم. مقایسه را با حالت کاملا محدود شده انجام میدهیم.



شکل ۴-۲۱: ساختار GaN (الف) دستهصندلی محدود شده با هیدورژن (ب) دستهصندلی Ga محدود شده (ج) زیگزاگ محدود شده با هیدورژن (د) زیگزگ Ga محدود شده

همان طور که مشاهده می شود برای هردو حالت مورد برسی شاهد بروز رفتار نیم فلزی هستیم. این بدین معنا است که هر دو ساختار نسبت به اسپین پایین خاصیت فلزی و نسبت به اسپین بالا خاصیت نیمرسانایی دارند. گاف انرژی برای اسپین بالا در حالت دسته صندلی و زیگزاگ به ترتیب برابر ۷۳ ۲/۲۸ و ۳/۴۲ که در محدود گاف نواری گروه نتیرید هاست. حال سهم هر عنصر در بروز چنین رفتاری را توسط نمودار چگالی حالت کلی ترکیب، برای هر دو ساختار بررسی می کنیم.



برای هر دو حالت سهم عمدهای از چگالی حالتهای روی تراز فرمی مربوط به نیتروژن است، که با توجه به شکل ۴–۲۲ ناشی از حضور پیوندهای آویزان هستند بنابراین سهم عمده مربوط به پیوندهای آویزان نیتروژن است، که باعث بروز قطبش ۱۰۰٪ گردیده است، هرچند در چنین شرایطی گالیوم هم نقش اندکی داشته است. بنابراین این ساختار بدلیل داشتن خاصیت نیم فلزی ذاتی ^۱ بهترین گزینه برای تزریق اسپین درون ناحیه پراکنندگی است.در مورد مزایای یک نیم فلز ذاتی نسبت به نیم فلزاتی که توسط آلایش عناصر واسطه به دست میآیند باید گفت که نیم فلزات آلایشی ممکن است با بسیاری از فناوریهای رشد یافته امروز که به شدت متکی به گروه اصلی نیمرساناها هستند، تناسب لازم را نداشته باشند، از طرفی فلزات سنگین واسطه اغلب مانند عوامل سمی در

Ga و عدم محدودیت برای N و عدم محدودیت برای Ga

دراین قسمت نیز همانند قسمت پیش ابتدا ساختار نواری و سپس چگالی حالتهای کلی ترکیب را بررسی مینماییم. نتایج این بررسی در شکل ۴-۲۳ آمده است، با رسم چگالی حالت کلی ترکیب (شکل ۴-۲۴) به بررسی سهم هر یک از عناصر میپردازیم.



شکل ۴-۲۳: ساختار GaN (الف) دستهصندلی محدود شده با هیدورژن (ب) دستهصندلی N محدود شده (ج) زیگزاگ محدود شده با هیدورژن (د) زیگزگ N محدود شده

¹ intrinsic half metallicity



شکل ۴-۲۴:چگالی حالتهای کلی ترکیب؛ (راست) ساختار زیگزاگ N محدود شده؛ (چپ) ساختار دستهصندلی N محدود شده

در این بررسی مشاهده می شود که اطراف تراز فرمی چگالی حالتهایی با جهت گیری اسپینی متفاوت برای هر دو ساختار بوجود آمده و هر دو ساختار نیمرسانای شده اند. نتایج نشان می دهـ د بیشترین سهم در تولید خاصیت نیمرسانای مغناطیسی را Ga یا به عبارتی پیوندهای آویزان Ga بر عهده دارند اما همچنان H نقشی در این اثر ندارد. در قسمت بعد محدودیت پیوندهای آویزان توسط سایر عناصر غیر از هیدروژن را بررسی می نماییم.

F-4-4 بررسی اعمال محدودیت توسط سایر عناصر روی نانوساختارهایGaN

در این قسمت می خواهیم اثر نوع عنصر استفاده شده برای اعمال محدودیت روی نانوساختارهای دسته صندلی و زیگزاگ را بررسی می کنیم هدف از این کار بررسی اثر نوع عنصر محدود کننده و پیدا کردن بهترین عنصر برای اعمال محدودیت است؛ در واقع با این آزمایشات سعی در پیدا کردن بهترین الکترود برای تزریق اسپین درون ناحیه پراکننده داریم. کارهای زیادی برای پیدا کردن بهترین عنصر جهت اعمال محدودیت روی پیوندهای آویزان صورت گرفت که چند مورد از نتایج آن در جدول ۴–۱۴ آمده است. همچنان که مشاهده می شود سهم عمدهای از گشتاور مغناطیسی کل سیستم مربوط به نیتروژن است و استفاده از عناصر سنگینی مثل مس و پلاتین صرفا ساختار را ناپایدار می سازد، بنابراین تاثیرات مطلوبی که در قسمت قبل دیده شد همچنان که قابل گشتاور مغناطیسی دارند اما بر رفتار الکترونیکی تاثیری عمدهای داشته تاجایی که در حالت اعمال محدودیت با Pt شاهد ایجاد نوارهایی بالا و روی تراز فرمی هستیم که خاصیت فلزی مغناطیسی را بروز میدهد . گشتاور مغناطیسی آمده در این جدول نیز بر حسب (μ_B) میباشد.

	ىتار زىگزاگ GaN	ساخ	مندلی GaN		
Pt	Cu	Н	F	Н	عنصر محدود كننده
فلز مغناطيسي	نيم فلز	نيم فلز	نیمرسانای مغناطیسی	نيم فلز	رفتار الكترونيكى
-14187/800	-10+41/222	-81419/8+8	-7789/89	-20201/828	انرژی کل(eV)
_	1/•۶A -	4 /44	۳ ۱/۰۰۵	4 /47	گاف نواری بالا- پایین(eV)
-	يم	مستق	بالا م پايين غ م	مستقيم	نوع گاف نواری
2/161262	1/912220	F/9999VF	4/	4/18	گشتاور مغناطیسی کل
-•/• Y	-•/• * *	-•/1۶	-•/• \ ۶	-•/ \\ ٣	گشتاور مغناطیسیGa
1/944	۱/۸۰۸	۵/۱۲	۴/۰۵۸	4/189	گشتاور مغناطیسیN
•/۲۴	•/184	•/•۴	+/+1۵	•/••1	گشتاور مغناطیسی عنصر محدود کننده
-	р	р	р	р	نوع (type)

جدول ۴-۱۴: نتایج اعمال محدودیت Ga با استفاده از عناصر مختلف، در دو ساختار زیگزاگ و دسته صندلی



شکل ۴-۲۵: ساختارهای نواری حاصل از اعمال محدودیت Ga با استفاده از عناصر مختلف، در دو ساختار زیگزاگ (سمت چپ) و دستهصندلی (سمت راست)

در ساختارهای زیگزاگ شکل ۴–۲۵ نوارها برای تمام عنصر محدود کننده، روی تراز فرمی جایگزیده هستند و اثر یان – تلر رخ نداده است اما در ساختار دسته صندلی اثر یان – تلر ساختار را تغییر داده و سبب جدایی نوارها از یکدیگر شده است. با سنگین شدن عنصر محدود کننده، نوارهای اسپین بالا نیز دچار تغییرات شده و موجب بروز خاصیت فلزی مغناطیسی در حالت ایجاد محدودیت با ۲۲ می گردد. برای محدودیت با عناصر ۲۲ و Cu در ساختار زیگزاگ شاهد افزایش انرژی کل و در نتیجه کاهش پایداری سیستم هستیم و این در حالیست که برای F در ساختار دسته صندلی شاه کاهش انرژی کل و افزایش پایداری سیستم هستیم.

۴-۵ جمع بندی

در این فصل به بررسی اثر پهنا، جایگاه پیوندهای آویزان، انواع عناصر برای محدود کردن این پیوندها، پیوندهای آویزان درون ساختاری (تهیجای)، آلایشهای مختلف و جایگاه متفاوت برای آنها در دو ساختار کلی دسته صندلی و زیگزاگ پرداختیم. در موارد آلایش خاصیت نیم فلزی مشاهده نگردید، اما با استفاده از پیوندهای آویزان خاصیت نیم فلزی مشاهده گردید،که بهترین آنها وجود پیوندهای آزاد تنها برای اتم نیتروژن در لبه ساختار بود.

در بررسی اثر پیوندهای آویزان، با مقایسه محدودیتهای اعمال شده توسط هیدروژن، دریافتیم که هرچه پیوندهای آویزان در سیستم کمتر باشند سیستم پایداری بیشتری دارد بطوریکه ساختارهایی که کاملاً محدود شدهاند از ساختار نیمه محدود شده و ساختارهای محدود نشده پایدارتر هستند. البته در حالت کاملا محدود نشده میزان تغییرات انرژی کل برای هر دو ساختار زیگزاگ و دسته صندلی حدود ۵/۰٪ است و این در حالیست که در بهترین حالت آلایش(آلایش با مس)، که کمترین میزان افزایش در انرژی کل را شاهد هستیم، این افزایش ۴/۱٪ است. بنابراین پیوندهای آویزان در حالتی که تعداد آنها بیشینه است(حالت کاملا محدود نشده) از بهترین حالت آلایش (حالتی که کمترین افزایش انرژی کل را داشته باشیم و بطور خاص آلایش با مس) کمتر موجب افزایش انرژی کل می گردد. به طور خلاصه حالت کاملا محدود نشده از حالت آلایش با مس نیـز، پایدارتر است و این مزیتی دیگر برای پیوندهای آویزان است. در تمامی ساختارها Ga وH نقشی اندکی در گشتاور مغناطیسی کل دارند. اما نتیجه اصلی بدست آوردن ساختاری با خاصیت نـیم فلـزی و گشتاور مغناطیسی نسبتاً بزرگ برای تزریق اسپین در ناحیه پراکندگی بود که با توجه به نتایج بدست آمده، بهترین گزینهها نانو روبانهای زیگزاگ و دسته صندلی Ga محدود شده هستند کـه علاوه بـر پایداری نسبتا بالا، تعداد اتم اندک و گشتاور مغناطیسی مناسبی دارند، البته نانو روبانها با پهنای ۱۲ و ۱۴ اتم نیز خاصیت نیم فلزی دارند، اما بدلیل اینکه برای ساخت قطعه اسپین ترونیکی آنها تعداد زیادی اتم در گیر می شوند و نهایتا منجر به طولانی تر شدن محاسبات می گردد از آنها صرف نظـر نمودیم. در مجموع با توجه به اینکه پیوندهای آویزان در ساختار نانو روبان Ga ایجاد نوارهایی در اطراف و روی تراز فرمی برای اسپین پایین می کنند بنابراین میتوان در فصل بعد از این ساختارها به عنوان ترزیق کنندههای جریان اسپینی پایین درون ناحیه پراکننده استفاده نمود.

فصل پنجم

نتايج (قسمت دوم) :

بررسی خواص ترابردی نانو روبان گالیوم نیترید (GaN)

۵-۱ مقدمه

دراین فصل به ساخت قطعاتی برای فیلترینگ جریان می پردازیم با توجه به استعداد نانو روبانهای GaN همچنان که در بخش قبلی بررسی شد، فیلترینگ روی جریان اسپینی بالا انجام می شود به این صورت که اسپین بالا فیلتر شده و اسپین پایین از دستگاه عبور خواهد نمود. برای نیل به این مقصود دستگاههای مختلفی ساخته و مورد آزمایش قرار گرفت. در این پژوهش برای تزریق جریان از نانو روبانهایی با خاصیت فلز مغناطیسی و نیم فلز استفاده گردیده و برای ناحیه پراکندگی از نیمرسانای مغناطیسی، نیمرسانای غیر مغناطیسی، نیم فلز و فلز مغناطیسی بهره بردهایم که نتایج آن در ادامه می آید.

۵-۲ فیلترینگ'

آنچه در این پایان نامه به عنوان فیلترینگ یا قطبش اسپینی^۲ مطرح است نسبت سهم جریان اسپینی از کل جریان می پردازیم.

$$SP = \frac{|I_{up} - I_{down}|}{|I_{up} + I_{down}|} \times \%100$$
^(1- Δ)

۵-۳ مقاومت دیفرانسیلی منفی^۳ (NDR)

هرچند این اثر اولین بار توسط ایزاکی در سال ۱۹۵۸ کشف شد [۷۸]، اما محققان جدیدا از این اثر در طراحی کلیدهای الکترونیکی پر سرعت، جهت قطع و وصل کردن جریان، استفاده نمودهاند. منظور از مقاومت دیفرانسیلی منفی آن است که با افزایش ولتاژ، جریان عبوری از قطعه کاهش یابد که این کاهش در نمودار جریان – ولتاژ با یک شیب منفی قابل مشاهده است (شکل ۵–۱).

¹ Filtering

² Spin polarization

³ negative differential resistance (NDR)



شکل ۵-۱: شکل شماتیک جریان-ولتاژ برای مقاومت دیفرانسیلی منفی

اما همچنان که میدانیم مطابق قانون اهم با افزایش ولتاژ باید شاهد افزایش جریان باشیم، بنابراین NDR از قانون اهم پیروی نمی نماید. این خاصیت که تا سال ۲۰۰۰ یک خاصیت مرموز بود، در طی سالیان اخیر مورد توجه بوده و دانشمندان برای آن توجیهات گوناگونی بیان نمودهاند، به عنوان مثال برای جفت شدگیهای ضعیف، باریک بودن چگالی حالتهای انرژی یا در موردی دیگر NDR را به انطباق اوربیتالهای جایگزیده متقارن بین الکترودها و ناحیه پراکننده -که در بین دو الكترود و كه مولكول گسترده نيز نام دارد-نسبت مىدهند و يا حتى آن را ناشى از تحريك بارها و تغییر شکل ساختاری مولکول میدانستند[۷۹] و توجیهات دیگر. اما بهترین توجیهی که برای منشا NDR يافت شد، چنين بيان مي نمود كه با اعمال ولتاژهاي بالا، جفت شدگي مولكول به الكترودها غير متقارن مي شود كه اين بدليل عدم تقارن بين سطوح انرژي بالاترين اوربيتال هاي اشغالي مولكولي HOMO و پايين ترين اوربيتال مولكولي خالي LUMO است. به عبارتي اعمال ولتاژ بالا باعث ظهور یک پتانسیل غیر متقارن در الکترود و مولکول میشود و در نتیجه موجب جایگزیدگی HOMO و LUMO در قسمتهای مختلف سیستم می شود که می تواند باعث کاهش همیوشانی اوربیتالی و نهایتا کاهش ضریب عبور شود[۸۲-۸۱-۸۰] در ساختارهای که به جای تراز شاهد نوارهای انرژی هستیم همین توضیح برای پدیده NDR قابل استفاده است با این تفاوت که در آنجا به جای HOMO و LUMO به ترتیب نوار ظرفیت و نوار رسانش را خواهیم داشت.

۵-۴ انواع قطعات مورد بررسی

بطور معمول در سیستمهای ترابـردی از الکترودهـای فلـزی غیـر مغناطیسـی ماننـد طـلا و
مغناطیسی مانند آهن برای تزریق جریان، بدلیل چگالی حامل بالا، درون ناحیه پراکندگی بهره می برند. استفاده از الکترود فلزی بدلیل تفاوت الکترود با ناحیه پراکنندگی که معمولا یک نیمرساناست مشکل عدم تطابق (ثابت شبکه) ورسانایی را در محل اتصال بوجود می آورد که خود باعث پراکندگی و اتلاف جریان می گردد. اما در صورت استفاده از ماده با همان ثابت شبکه با قطبش ۱۰۰٪ مقداری از مشکلات حل می گردد. ما در این جا سعی نمودیم تا با استفاده از نمونههای خالص آزمایش شده در فصل قبل دستگاههایی را مدل کنیم که نسبت جریان و ولتاژ، در آنها بهینه باشد لازم به ذکر است تمامی محاسبات در این فصل با انتخاب پارامتر زتای یکانه قطبیده SZP و تمامی موارد نیز نانو روبان زیگزاگ با پهنای ۶ اتم البته موارد ۱، ۲، ۶ علاوه بر حالت زیگزاگ نانو روبان دسته صندلی هم بررسی شده است - دلیل انتخاب ساختار زیگزاگ تعداد اتمهای کمتر با ازای هر سلول واحد و ترابرد بهتر ساختار زیگزاگ است؛ قطعات به ترتیب عبارتند از:

- ۳- الکترودها دارای پیوندهای آویزان محدود ن<u>شده</u> ناحیه پراکندگی دارای پیوندهای آویزان
 محدود شده (شکل ۵-۱۲)
- ۴- الکترودها دارای پیوندهای آویزان محدود ن<u>شده</u> ناحیه پراکندگی دارای پیوندهای آویزان نیمه محدود شده (شکل ۵-۱۴)
 - ۵- الکترودها دارای پیوندهای آویزان نیمه محدود <u>شده</u> ناحیه پراکندگی دارای پیوندهای آویزان محدود نشده (شکل ۵-۱۷)
 - ۶- الکترودها دارای پیوندهای آویزان نیمه محدود شده ناحیه پراکندگی دارای پیوندهای آویزان نیمه محدود شده (شکل ۵-۲۰)
 - ۷- الکترودها دارای پیوندهای آویزان نیمه محدود <u>شده</u> ناحیه پراکندگی دارای پیوندهای
 آویزان محدود <u>شده</u> (شکل ۵-۳۲)

این هفت قطعه اسپین ترونیکی را به ترتیب به نام قطعه نوع یک تا قطعه نوع هفت نامگذاری نموده و آنها را در ادامه بررسی مینماییم. ۵-۴-۱ بررسی جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه نوع یک

۵–۴–۱–۱ ساختار دسته صندلی

در این قسمت ابتدا به بررسی ساختار دسته صندلی می پردازیم که شامل یک نیمر ساناست که به دو الکترود با خاصیت نیمر سانایی متصل شده است.



شکل ۵-۲ : الکترودها و ناحیه پراکندگی هردو دارای پیوندهای آویزان محدود <u>نشده دستهصندلی - قطعه نوع</u> یک همین نکته که الکترودهای این قطعه نیمرسانا هستند برای دانستن ضعیف بودن ایـن قطعـه کافیست، چرا که الکترودهای نیمرسانا توانایی لازم برای تزریق جریان اسپینی درون ناحیه پراکندگی را بدلیل چگالی حاملهای اندک و گاف نواری بزرگ ندارند. نتایج حاصل از این بررسی در جدول ۵-۱ فیلترینگ را برای تمامی ولتاژها ۳۳/۳۳ ٪ نشان میدهد و مطابق شکل ۵-۴ با افزایش ولتاژ شـاهد افزایش جریان هستیم. البته این جریان بسیار اندک است و میتوان آن را تقریبا صفر در نظر گرفت که نشان میدهد حتی با اعمال ولتاژ و جابجایی نوارهـا در الکترودهـا تغییـر عمـدهای در خاصـیت نیمرسانایی الکترودها حاصل نشده که ناشی از گاف بسیار بزرگ این ساختار است.

1/80	١	۰/۷۵	۰/۵	•/۲۵	•	ولتاژ (V)
۱/۶ ×۱۰ ^{-۱۲}	۴/۲ ×۱۰ ^{-۱۳}	۶/۴ ×۱۰ ^{-۱۸}	۱/٨ ×۱۰⁻™	۶/۲ ×۱۰ ^{-۱۹}	•	جريان اسپين بالا(A)
$r/r \times 1 \cdot r$	۸/۴ ×۱۰ ^{-۱۳}	1/T ×1.	۳/۷ ×۱۰-۱۸	۱/۲ ×۱۰ ^{-۱۸}	•	(\mathbf{A}) جريان اسپين پايين (\mathbf{A})
		7.347/24				ميزان فيلترينگ

جدول ۵-۱: جریان – ولتاژ برای ساختار دسته صندلی (قطعه نوع یک)

برای فهم بهتر تغییرات جریان نمودار ضریب ترابرد این قطعه که در شکل ۵–۳ آمده را بررسی



شکل ۵-۳: نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی برای ولتاژهای مختلف قطعه نوع یک - دسته صندلی



شكل ۵-۴: نمودار جريان-ولتاژ برای قطعه نوع یک - دستهصندلی

مینماییم. در این نمودار هیچ قلهای در پنجره ولتاژ (این پنجره بازهای است که در آن انتگرالگیری به منظور محاسبهی جریان صورت میگیرد؛ از ۷/۲- تا ۷/۲+) دیده نمی شود که ناشی از عدم وجود هرگونه نوار انرژی اطراف تراز فرمی است که در نمودار چگالی حالت (DOS) (شکل ۵-۵) نیز قابل مشاهده میباشد. با کمی توجه درمییابیم که DOS ناحیه پراکندگی تطبیق خوبی با نمودار ضریب عبور در ولتاژ صفر دارد. دلیل این امر مشابهت کامل ساختاری و خواص الکترونیکی الکترودها و ناحیه پراکننده است که در نتیجه آن، الکترود و ناحیه پراکندگی در محل اتصال به یکدیگر هیچ گونه عدم تطابقی که منجر به پراکندگی شود نخواهند داشت. البته این موضوع که هیچ مکانیسم پراکندگی ای در محل اتصال وجود ندارد را میتوان از شکل پلهای نمودار ضریب عبور متوجه شد. به عنوان آخرین مطلب این قسمت باید گفت که نتایج ارائه شده در جدول با توجه به عدم وجود هرگونه قلهای در پنجره ولتاژ نمودار ضریب ترابرد کاملا منطقی است.



شکل ۵-۵ : نمودار چگالی حالتها برای ناحیه پراکندگی برای قطعه نوع یک –دستهصندلی ۲-۴-۲ ساختار زیگزاگ

ساختار زیگزاگ نیز شامل یک فلز مغناطیسی است که به دو الکترود با خاصیت فلز مغناطیسی متصل گردیده است. بنابراین برای تزریق جریان قطبیده اسپینی، درون ناحیه پراکندگی از الکترودی مناسب بهره میبریم که نوید دهنده جریان مطلوب بدلیل بالا بودن چگالی حاملهای الکترود برای این قطعه است.



شکل ۵-۶: الکترودها و ناحیه پراکندگی هردو دارای پیوندهای آویزان محدود نشده زیگزاگ-قطعه نوع یک

نتایج حاصل از این بررسی در جدول ۵-۲ فیلترینگ را برای تمامی ولتاژها نشان میدهد و مطابق شکل ۵-۷ با افزایش ولتاژ تا ۱۷۵۵ ولت، شاهد افزایش جریان هستیم و در ولتاژ ۱ ولت شاهد کاهش جریان، یا همان پدیده NDR میباشیم. فیلترینگ و NDR را میتوان با روش مشابه توجیه نمود؛ به این معنا که دلیل فیلترینگهای مختلف در ولتاژهای متفاوت و بروز NDR در یک ولتاژ خاص، ناشی از عدم تطابق نوارهای الکترود و ناحیه پراکننده است. این عدم تطابق باعث میشود الکترون نواری برای فرود در ناحیه پراکننده یا در الکترود سمت راست پیدا نکند که در هر صورت موجب فیلتر شدن یک جریان اسپینی به خصوص میشود. با توجه به اینکه جریان اسپین بالا در این قطعه فیلتر شده است بنابراین میتوان پیش بینی نمود که همترازی بین الکترودها و ناحیه پراکندگی برای نوارهای اسپین بالا رخ نداده است. در مورد اسپین پایین پیش بینی برعکس است. به همین برای نوارهای اسپین بالا رخ نداده است. در مورد اسپین پایین پیش بینی برعکس است. به همین ترتیب پدیدهی NDR نیز ناشی از کاهش تطابق نوارها در سه ناحیه مورد بررسی است، مسئول این

1/20	١	۰/۷۵	•/۵	۰/۲۵	•	ولتاژ (V)
-	۲/۶ ×۱۰-۶	۴/۳ ×۱۰ ^{-۶}	۶/۴ ×۱۰ ^{-۷}	۲/۷ ×۱۰-۶	٠	جريان اسپين بالا(A)
-	۲/۹ ×۱۰ ^{-۶}	$r/r \times r^{-\Delta}$	۱/٩ ×۱۰⁻۵	$1/7 \times 1 \cdot^{-\Delta}$	•	جریان اسپین پایین(A)
-	% 0 • / ۱ λ	%YY/&Y	<u>%</u> ٩٣/٨٢	%F1/TA	٠	ميزان فيلترينگ

جدول ۵-۲: جریان - ولتاژ برای نانوساختار زیگزاگ قطعه نوع یک



شکل ۵-۷:نمودار جریان - ولتاژ برای نانوساختار زیگزاگ قطعه نوع یک

این تحلیل با بررسی نمودار ضریب عبور کاملا مطابقت دارد.



شکل ۵-۸ : نمودار ساختار نواری و چگالی حالتها الکترود های قطعه نوع یک-زیگزاگ همان طور که در شکل ۵–۸ و ۵–۹ مشاهده می شود برای ولتاژ صفر نمودار (T(E بسیار مشابه نمودار DOS (شکل ۵−۸) میباشد که ناشی از یکسان بودن هر سه ناحیه است و شکل پلهای نمودار T(E) نیز نشأت گرفته از یکسان بودن هر سه ناحیه و به تبع آن عدم وجود هرگونه پراکندگی است. مطابق نمودار (T(E) در ولتاژ ۲/۵۵ ولت سهم عمدهای از کانالهای عبور الکترون در پنجره ولتاژ مربوط به اسپین پایین است. در ولتاژ ۰/۵ ولت سهم اسپین بالا از کانالهای باز موجود در پنجره ولتاژ بسیار اندک می گردد که منطبق با دادههای جدول۵-۲ است و فیلترینگ ۹۳/۸۲ ٪ اسپین بالا را به خوبي توجيه مينمايد. با بررسي همين نمودار براي ولتاژ ٧٥/٠ ولت شاهد افزايش سهم اسپين پايين از کانال های باز موجود در پنجره ولتاژ هستیم که مطابق با فیلترینگ ۷۲/۵۲٪ جدول ۵-۲ میباشد، البته پر واضح است که افزایش مقدار جریان نسبت به ولتاژ ۱/۵ ناشی از افزایش بازه انتگرال گیری یا همان پنجره ولتاژ است. حال برای یافتن علت وقوع NDR با استفاده از نمودار (T(E)، این نمودار را در ولتاژ ۱ ولت بررسی مینماییم. در این ولتاژ مشاهده میشود که ضریب عبور به ازای اسپین پایین و بالا در پنجره ولتاژ كاهش مىيابد، هرچند همچنان سهم اسپين پايين بيش از اسپين بالاست كه اين تسهیم فیلترینگ ۵۰/۱۸٪ را رقم میزند. وقوع این پدیده بدلیل عدم همترازی نوراها در اطراف تراز فرمی و درون پنجره ولتاژ است که در مرجع ۸۰ به خوبی توضیح داده شده است.



شکل ۵-۹: نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی برای ولتاژهای مختلف قطعه نوع یک-زیگزاگ این قطعه بیشترین جریان را بین قطعات مورد بررسی این پایاننامه داشته و با وجود پدیدهی NDR میتواند علاوه بر استفاده به عنوان یک فیلتر اسپینی به عنوان یک سوئیچ پرسرعت و در حافظه ها از آن بهره برد . البته به طور مشخص فیلترهای اسپینی استفاده بسیار زیادی در قطعات اسپین ترونیکی دارند.

۵-۴-۲ بررسی جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه نوع دو دراین قسمت ناحیه پراکننده و الکترودها ساختار یکسان دارند و دارای خاصیت نیمرسانای غیرمغناطیسی با گاف نواری بزرگ هستند (شکل ۵-۱۰). این شرایط برای ساختار زیگزاگ و دسته صندلی صادق میباشد. بدیهی است که بدلیل خاصیت نیمرسانایی با گاف نواری بزرگ و ممچنین غیرمغناطیسی با گاف دواری بزرگ هستند (شکل ۵-۱۰). این شرایط برای ساختار زیگزاگ و ممچنین غیرمغناطیسی با گاف دواری بزرگ هستند (شکل ۵-۱۰). این شرایط برای ساختار زیگزاگ و ممچنین غیرمغناطیسی با گاف دواری بزرگ هستند (شکل ۵-۱۰). این شرایط برای ساختار زیگزاگ و ممچنین غیرمغناطیسی با گاف دواری بزرگ مستند (شکل ۵-۱۰). این شرایط برای ساختار زیگزاگ و ممچنین غیرمغناطیسی با گاف دواری بزرگ و آمین مشکل در تزریق جریان برای این دو نمونه پیش خواهد آمد اما برای شناخت بهتر اثر پیوندهای آویزان این قطعات را نیز مورد آزمایش قرار می دهیم. نتایج بررسی ها در جداول ۵-۳ و ۵-۴ جریان بسیار اندکی را به ازای تمامی ولتاژها نشان میدهد که با

انتـظار ما از این قطعات منطبق است. بررسی نمودار جریان-ولتاژ برای این قطعات فیلترینگ اندکی را برای این قطعات گزارش میدهد (شکل ۵–۱۱).



شکل ۵-۱۰: الکترودها و ناحیه پراکندگی هردو دارای پیوندهای آویزان محدود <u>شده</u> (الف)دسته صندلی (ب) زیگزاگ

دو)	نوع	(قطعه	دستەصندلى	ساختار	برای	ولتاژ	۳:جريان-	جدول ۵-'
-----	-----	-------	-----------	--------	------	-------	----------	----------

1/80	١	•/¥۵	۰/۵	•/20	•	ولتاژ (V)
۵/۶ ×۱۰ ^{-۱۹}	۲/٨ ×۱۰-۱۹	1/Y ×1.	9/9 ×1.	۴/۳ ×۱۰ ^{-۲.}	•	جريان اسپين بالا(A)
۱/۱ ×۱۰ ^{-۱۸}	$\Delta/\Lambda \times 1.$	۳/۳ ×۱۰ ^{-۱۹}	۱/۹ ×۱۰ ^{-۱۹}	$\Lambda/Y \times 1 \cdot^{-Y}$	•	(\mathbf{A}) جريان اسپين پايين (\mathbf{A})

جدول ۵-۴ : جریان - ولتاژ برای ساختار زیگزاگ (قطعه نوع دو)



شکل ۵-۱۱:الکترودها و ناحیه پراکندگی هردو دارای پیوندهای آویزان محدود شده (الف)دسته صندلی (ب) زیگزاگ

اثر اسپین فیلترینگ اندکی که به آن اشاره شد در این دو ساختار بطور کلی ۳۳/۳۳٪ میباشد و با توجه به جریان اندک عبور نموده از این ساختار، این ساختار مورد مناسبی به عنوان یک قطعه اسپین فیلترینگ نمیباشد. اما با مقایسهی ساختار زیگزاگ بخش ۵-۳-۱-۲ متوجه میشویم که تنها تفاوت ساختار زیگزاگ این بخش با بخش ذکر شده در وجود یا عدم وجود پیوندهای آویـزان است. البته نقش بسیار کلیدی این پیوند در خواص نانو روبان زیگزاگ در فصل پیش توسط ساختار نواری نشان داده شد. در قطعات بعدی سعی میکنیم با اعمال محدودیت روی پیوندهای آویـزان در نقـاط

۵–۴–۳ بررسی جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه نوع سه در این قطعه یک نیمرسانای غیر مغناطیسی با گاف نواری بزرگ را بین دو الکترود با خاصیت فلـز مغناطیسی ساندویچ نموده ایم. با توجه با اینـکه الکترودها فلز مغناطیسی هستند از نظر تـزریق جریان اسپینی نباید مشکلی وجود داشته باشد و میتوان انتظار جریانی مطلوب از قطعه داشت اما وجود گاف نواری بزرگ در ناحیه پراکندگی موجب می گردد که الکترون کانالی برای عبور در پنجره ولتاژ نداشته باشند در نتیجه در مجموع برای این قطعه نمیتوان انتظار جریانی مطلوب داشت هرچند بدلیل وجود الکترودهای فلز مغناطیسی باید جریانی بهتر از بخش قبل را مشاهده نماییم.



شکل ۵-۱۲: الکترود دارای پیوندهای آویزان محدود ن<u>شده</u> و ناحیه پراکندگی دارای پیوندهای آویزان محدود <u>شده</u> نتایج بررسیهای صورت گرفته در جدول ۵–۵ فیلترینگی مطلوب و بالای ۹۸٪ درصد را برای تمامی ولتاژها نشان میدهد اما تمام موضوع فیلترینگ نیست بلکه جریان عبوری نیز مهم است. بهترین جریان برای یک قطعه نانومتری جریان میکروآمپری میباشد.

1/20	١	۰/۷۵	۰/۵	+/20	•	ولتاژ (V)
$V/\Delta \times 1 \cdot^{-17}$	$\Delta/\Delta \times 1 \cdot^{-11}$	1/1 ×1	$\mathcal{P}/\cdot \times 1 \cdot 1^{-10}$	۴/۶ ×۱۰ ^{-۱۵}	•	جريان اسپين بالا(A)
$\Delta/Y \times 1 \cdot^{-h}$	۲/۳ ×۱۰ ^{-۸}	۱/۲ ×۱۰ ^{−۸}	۱/۱ ×۱۰ ^{−۸}	٣/٠ ×١٠⁻٩	•	جريان اسپين پايين(A)
%.99/9974	<u>%</u> 99/8789	%98/1488	<u>%</u> 99/999X	<u>%</u> 99/999 <i>9</i>	•	ميزان فيلترينگ

جدول ۵-۵: جریان - ولتاژ برای ساختار زیگزاگ (قطعه نوع سه)



شكل ۵-۱۳:نمودار جريان-ولتاژ قطعه نوع سه

گرچه در این نمونه شاهد فیلترینگ خوبی به ازای ولتاژ اعمالی مختلف هستیم اما جریان بسیار اندک است، همین جریان اندک منجر به صرف نظر ما از این ساختار می گردد.

۵-۴-۴ بررسی جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه نوع چهار

سیستم مورد بررسی در این قسمت بصورت یک نیم فلز است که بین دو فلز مغناطیسی به عنوان الکترود قرار گرفته است (شکل ۵–۱۴). نتایج حاصل از این بررسی در جدول ۵–۶ نشان میدهد که جریان از مرتبه میکرو آمپر بوده و با افزایش ولتاژ، افزایش مییابد. هرچند افزایش ولتاژ منجر به کاهش بسیارجزئی فیلترینگ میگردد اما همچنان فیلترینگ نزدیک به ۱۰۰٪ بوده، که این میزان فیلترینگ و جریان؛ در قطعات اسپینترونیکی بسیار عالی میباشند. در تمامی ولتاژهای اعمال شده



شکل ۵-۱۴: الکترود دارای پیوندهای آویزان محدود ن<u>شده</u> ناحیه پراکندگی دارای پیوندهای آویزان نیمه محدود <u>شده</u>

نسبت جریان اسپین پایین به جریان اسپین بالا از مرتبه چندین برابر بزرگی میباشد. در فصل پیش نشان دادیم که پیوندهای آویزان موجب بروز خاصیت فلز مغناطیسی و ایجاد گشتاور مغناطیسی در نانوروبان زیگزاگ می گردد و حال در این قسمت نیز جریان بزرگ خروجی از قطعه، تاییدی دوباره بر دادههای فصل گذشته است چرا که برای داشتن چنین جریان بزرگی در خروجی میبایست الکترودها جریان قطبیده مطلوبی را درون ناحیه پراکندگی تزریق کرده باشند. به عنوان نتیجهای دیگر در این بخش می توان به وضوح دریافت اعمال محدودیت توسط هیدورژن بر روی پیوندهای آویزان Ga قسمت پراکننده-که باعث نیم فلز شدن پراکننده شده- موجب فیلتر شدن کاملا مطلوب جریان قطبیده اسپینی گردیده است. برای فهم بهتر ترابرد و فیلترینگ رخ داده در این قطعه از نمودار ضریب ترابرد بهره میبریم. این نمودار از انطباق نوارهای دو الکترود و پراکننده بوجود می ایـد. نمودارهـای ضریب ترابرد این قطعه به ازای ولتاژهای مختلف در شکل ۵-۱۶ نمایش داده شده است. با توجه به این نمودارها ، در پنجره ولتاژ قلههایی دیده می شود که نشان دهنده وجود کانال هایی برای ترابرد الکترون با اسپین پایین است. بنابراین باید شاهد جریانی بزرگ برای اسپین پایین باشیم، که مطابق جـدول ۵-۶ چنین نیز هست. اما برای اسپین بالا همچنان که هیچ قلهای در پنجره ولتاژ دیده نمی شود تقریبا هیچ جریانی نیز در خروجی مشاهده نمی گردد. پدیدهای دیگری کـه در ایـن قطعـه رخ داده، پدیده ی NDR است که می توان آن را به ازای ولتاژ ۱/۲۵ مشاهده نمود و این ناشی از جابجایی نوارهای انرژی و عدم انطباق آنها در ناحیه پراکننده و الکترودها با یکدیگر است، کم شدن این انطباق را می شود از کوچک شدن قلهها در پنجره ولتاژ شکل ۵-۱۶ مشاهده نمود.

1/20	١	۰/۷۵	۰/۵	۰/۲۵	•	ولتاژ (V)
۱/٨ ×۱۰ ^{-۹}	۱/• ×۱۰ ^{-۸}	$r/1 \times 1 \cdot r$	۱/۴ ×۱۰ ^{-۱۵}	$\lambda/\Delta \times 1 \cdot^{-1\Delta}$	•	جريان اسپين بالا(A)
4/8 X18	\mathcal{F}/\mathcal{V} × $\mathcal{V}^{-\mathcal{F}}$	۴/۷ ×۱۰-۶	۱/۲ ×۱۰ ^{-۶}	$1/\lambda \times 1 \cdot^{-\gamma}$	•	جريان اسپين پايين(A)
%99/97F•X	%૧૧/۶૧૧૧٨	%११/११११।	%.११/१११११	%.99/99999	٠	ميزان فيلترينگ

جدول ۵-۶ : مقادیر جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه چهار



شکل ۵-۱۵: نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی برای ولتاژهای مختلف قطعه چهار



شکل ۵-۱۶: نمودار جریان-ولتاژ برای قطعه چهار

۵-۴-۵ بررسی جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه نوع پنج در این قسمت شاهد اتصال یک فلز مغناطیسی به دو الکترود نیم فلز مغناطیسی (شکل ۵-۱۸) با قطبیدگی بزرگ درحدود ۵ مگنتون بوهر هستیم . این به آن معناست که که جریانی کاملا قطبیده از چگالی حالتهای موجود در فلز مغناطیسی برای عبور استفاده نموده و تقریبا پراکندگی برای این جریان قطبیده رخ نخواهد داد. بنابراین پیش بینی می کنیم که این قطعه از جریان و فیلترینگ مطلوبی برخوردار باشد. مطابق نتایج بدست آمده درجدول ۵-۷ باید گفت این قطعه یکی از نتایج مطلوب این پایاننامه به عنوان یک قطعه اسپینترونیکی میباشد. البته با توجه به دادهها جدول ۵-۷ و شکل ۵-۱۹در ولتاژ بزرگتر از ۱ ولت ما شاهد وقوع پدیدهی NDR هستیم. با استفاده از نمودار الکترون با اسپین پایین است. بنابراین باید شاهد جریانی بزرگ برای اسپین پایین باشیم که به تدریج با افزایش ولتاژ و فرونشست قلهها، کاهش میابد که همان پدیده NDR را موجب میشود.



شکل ۵-۱۷: الکترود دارای پیوندهای آویزان نیمه محدود شده ناحیه پراکندگی دارای پیوندهای آویزان محدود نشده



شكل ۵-۱۸: نمودار جريان-ولتاژ براى قطعه پنج

جدول ۵-۷: بررسی جریان - ولتاژ و فیلترینگ برای قطعه نوع پنج

1/20	١	٠/٧۵	۰/۵	•/۲۵	•	ولتاژ (V)
۱/۳ ×۱۰ ^{-۱.}	۱/۶ ×۱۰ ^{-۱۳}	۶/۷ ×۱۰-۱۵	۱/۶ ×۱۰ ^{-۱۶}	۹/۱ ×۱۰ ^{-۲.}	•	جريان اسپين بالا(A)
۱/۳ ×۱۰ ^{-۶}	۲/۳ ×۱۰ ^{-۶}	۷/۵ ×۱۰ ^{-۶}	$\Delta/\Psi \times 1 \cdot^{-9}$	۴/۳ ×۱۰-۲	•	جريان اسپين پايين(A)
%११/१४१٨	%११/११११	%1	%1	%١	•	ميزان فيلترينگ



شکل ۵-۱۹: نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی برای ولتاژهای مختلف قطعه پنج

۵-۴-۵ بررسی جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه نوع شش در این قسمت مطابق دادههای فصل پیش دو نیم فلز به ازای الکترود و ناحیه پراکننده داریم که به یکدیگر متصل شدهاند. همچنان که مشاهده می شود سه قسمت این دو قطعه ساختاری یکسان دارند. با بررسی نتایج ارئه شده در جداول ۵–۸ و ۵–۹ متوجه جریان نسبتا پایین این قطعه در مقایسه با سایر قطعات مورد بررسی می گردیم. البته بدلیل اینکه هرسه قسمت نیم فلز هستند و ما انتظار جریان هرچه بیشتر را برای این چنین قطعهای داریم نمیتوان جریان میکروآمپری در ولتاژ ۱/۲۵ را نیز مناسب دانست. ما برای این قطعات حداکثر جریان و حداکثر فیلترینگ را انتظار داشتیم که این انتظار برآورده نگردید.



شکل ۵-۲۰ : الکترودها دارای پیوندهای آویزان نیمه محدود <u>شده</u> ناحیه پراکندگی دارای پیوندهای آویزان نیمه محدود <u>شده (</u>الف) دستهصندلی (ب) زیگزاگ (قطعه نوع شش)

۱/۲۵	١	۰/۷۵	۵/+	+/20	•	ولتاژ (V)
$r/\gamma \times 1 \cdot^{-1}$	۱/۱ ×۱۰⁻	$V/1 \times 1 \cdot 1^{-17}$	$\Lambda/1 \times 1 \cdot 1^{-10}$	1/F ×1.	٠	جريان اسپين بالا(A)
۱/۳ ×۱۰ ^{-۶}	۱/۵ ×۱۰ ^{-۲}	۱/۱ ×۱۰ ^{-۱۱}	۱/۳ ×۱۰ ^{-۱.}	$\Delta/\Lambda \times 1 \cdot^{-11}$	•	جريان اسپين پايين(A)
%.99/9&AVA	%99/14780	/.٨٨/•۶۵۶۳	%.99/97787	%.૧૧/૧૧૧૧૧	•	ميزان فيلترينگ

جدول ۵-۸:جریان-ولتاژ و فیلترینگ برای نمونه دستهصندلی (قطعه نوع شش)

جدول ۵-۹: جریان-ولتاژ و فیلترینگ برای نمونه زیگزاک ۹ سلول واحدی (قطعه نوع شش)

1/80	١	۰/۷۵	۰/۵	•/۲۵	•	ولتاژ (V)
-	۷/۲ ×۱۰ ^{-۹}	1/1 ×1.	۱/• ×۱۰ ^{-۱۸}	۲/۹ ×۱۰ ^{-۱۹}	٠	جريان اسپين بالا(A)
-	4/4 ×1.	۱/۲ ×۱۰ ^{-۸}	۲/۲ ×۱۰ ^{-۱۱}	۲/۱ ×۱۰ ^{-۱۳}	•	جریان اسپین پایین(A)
_	%98/A·&TF	%११/१११⋏∙	%.११/१११११	%.٩٩/٩٩٩٧٣	•	ميزان فيلترينگ

با بررسی های انجام شده متوجه بروز اثر یان – تلر در این ساختارها شدیم؛ شکل ۵–۲۱ ساختار زیگزاگ را (که ۹ سلول واحد دارد) پس از انجام واهلش نشان میدهد. وجود ۹ پیوند آویزان باعث شکستن تقارن هندسی و توزیع بار در ساختار می گردد که از عوامل پیدایش اثر یان – تلر محسوب می شوند و به عبارتی دیگر تعداد زوج و فرد این پیوندها در بروز اثر یان – تلر موثر است [۵۱]. این عوامل باعث می شوند تا ساختار به سمت تقارن کمتر و نظم جدید هندسی سوق پیدا کند. در شکل ۵–۲۱ سعی شده با پیکانها، جهت تغییرات نسبت به حالت واهلش نشده –که تقریبا مشابه شکل ۵–۲۱ است – و با خط ممتد، میزان تغییرات از یک مقدار مشخص را نمایش دهیم تا اثر یان – تلر به خوبی مشخص گردد. این اثر که ناشی از وجود تعداد الکترونهای نامساوی در اوربیتالهای همتراز است، تلاش می کند با تغییر نظم هندسی ساختار، تبهگنیهای انرژی را از بین ببرد.



شکل ۵-۲۱: بررسی اثر یان-تلر روی ساختار زیگزاگ Ga محدود شده

برای بررسی اثر زوج و فرد بودن تعداد پیوندهای آویزان، فرآیند واهلش را با پارامترهای یکسان برای ساختار زیگزاگ ۹ ساختار زیگزاگ ۱ ساختار زیگزاگ ۸ سلول واحد است تکرار نموده و ساختار نواری آن را با ساختار زیگزاگ ۹ سلول واحدی مقایسه مینماییم. با توجه به شکل ۵-۲۲ متوجه میشویم که در ساختار ۸ سلول واحدی تقریبا اثر یان – تلر دیده نمیشود که با توجیهات پیش و تقارن توزیع بار بدلیل زوج بودن پیوندهای آویزان مطابقت دارد. حال وجود و یا عدم وجود اثر یان – تلر را در ساختار نواری در شکل واحدی مقارن توزیع بار بدلیل زوج بودن واحدی توریهای آویزان مطابقت دارد. حال وجود و یا عدم وجود اثر یان – تلر را در ساختار نواری در شکل ۸ –۲۲ متوجه می شویم که در ساختار ۸ سلول واحدی تقریبا اثر یان – تلر دیده نمی شود که با توجیهات پیش و تقارن توزیع بار بدلیل زوج بودن پیوندهای آویزان مطابقت دارد. حال وجود و یا عدم وجود اثر یان – تلر را در ساختار نواری در شکل ۸ – ۲۳



شکل ۵-۲۲: ساختار نانو روبانزیگزاگ ۸ سلول واحدی؛ پس از انجام فرآیند واهلش



شکل ۵-۲۳: ساختار نواری نانو روبان زیگزاگ؛ (راست) ۸ سلول واحدی (چپ) ۹ سلول واحدی در شکل ۵-۲۳ مشاهده میشود که در نمونه ۹ سلول واحدی نوارها از یکدیگر جدا شدهاند و دیگر روی تراز فرمی هیچ نوار یا چگالی حالتی نداریم. بنابراین بروز آنچه در جداول ۵-۸ و ۵-۹ ارائه شد امری بدیهی است چرا که یک نیم رسانا با گاف اندک داریم. حال با توجه به وضعیت فعلی مقادیر ذکر شده در این جداول را با نمودار ضریب عبور (E)T مطابقت داده و سپس نمودار جریان – ولت اژ و ضریب عبور را برای نمونه ۸ سلول واحدی مورد مطالعه قرار میدهیم. البته اثر یان – تار در نانو روبان ساختار هندسی آن می گذارد که تنها با بررسی دقیق تر ساختار، هویدا می شود. در شکل ۵-۲۵ نمودار ضریب عبور برای نانو روبان دسته صندلی مشاهده می شود که برای ولتاژ صفر مطابقت خوبی با نمودار ساختار نواری (شکل ۵-۲۴) دارد، هر دو گاف نواری در اطراف تراز فرمی را نشان می دهند.



شكل ۵-۲۴:ساختار نوارى نانو روبان دسته صندلى ۵ سلول واحدى

جریانها ارائه شده در جداول ۵-۸ و۵- ۹ به ترتیب با قلههای ظاهر شده در نمودار (T(E) شکل ۵-۲۵ و ۵-۲۷ به ازای ولتاژهای مطابقت دارد؛ همچنان که برای ساختار دسته صندلی به ازای ولتاژهای صفر تا یک ولت، جریانها بسیار ناچیز هستند (جدول ۵-۸) اما با ظهور قلهها در پنجره ولتاژ به ازای ولتاژ ۱/۲۵ ولت (شکل ۵-۲۵) شاهد افزایش جریان تا حد میکروآمپر هستیم. برای نانو روبان زیگزاگ ۹ سلول واحدی نیز همان روند را مشاهده میشود. این جریانهای اندک(به نسبت حالت نیم فلزی – ۲ جدول ۵-۱۰) ناشی از قرارگیری تراز فرمی درون گاف نواری است. وجود گاف نواری در ناحیه پراکندگی موجب می گردد که الکترون کانالی برای عبور در پنجره ولتاژ نداشته باشند در نتیج ه در مجموع برای این قطعه نمی توان انتظار جریانی مطلوب داشت هرچند بدلیل وجود الکترودهایی با گاف نواری کوچک می توان با اعمال ولتاژ بیشتر به جریانهای میکروآمپری رسید.



شکل ۵-۲۵: نمودار ضریب عبور برحسب انرژی برای قطعه نوع ۶ (دستهصندلی) به ازای ولتاژ اعمالی متفاوت



شکل ۵-۲۶: نمودار جریان-ولتاژ برای قطعه نوع ۶ دستهصندلی



شکل ۵-۲۷ : نمودار ضریب عبور در نانو روبان زیگزاگ (۹ سلول واحدی) به ازای ولتاژ اعمالی متفاوت



شکل ۵-۲۸: نمودار جریان-ولتاژ برای قطعه نوع ۶ زیگزاگ (۹ سلول واحدی)

حال به بررسی نمونه ۸ سلول واحدی می پردازیم (شکل ۵–۲۹) در این نمونه هر سه قسمت نیم فلز هستند و هدف از بررسی چنین قطعهای بررسی مقدار جریان به ازای اختلاف پتانسیل اعمالی برای این نیم فلز است.



شکل ۵-۲۹: الکترودها و ناحیه پراکندگی دارای پیوندهای آویزان نیمه محدود <u>شده</u> (Ga محدود <u>شده)</u> (قطعه نوع شش)

جدول ۵-۱۰: مقادیر جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه زیگزاگ (۸ سلول واحدی) نوع ۶

1/20	١	۰/۷۵	۰/۵	۰/۲۵	•	ولتاژ (V)
۱/۳ ×۱۰ ^{-۱۱}	۶/۶ ×۱۰ ^{-۱۲}	۷/۳ ×۱۰ ^{-۱۱}	۹/• ×۱۰ ^{-۱۸}	۱/۹ ×۱۰ ^{-۱۸}	٠	جريان اسپين بالا(A)
$\Delta/\Delta \times 1 \cdot^{-9}$	۶/• ×۱۰ ^{-۶}	$1/Y \times 1 \cdot^{-\Delta}$	۱/۶۷ ×۱۰ ^{-۵}	$1/Y \times 1 \cdot^{-\Delta}$	•	جريان اسپين پايين(A)
%.99/99967	%.٩٩/٩٩٩٧٧	%.٩٩/٩٩٩١۶	/) • •	7.1	•	ميزان فيلترينگ



شکل ۵-۳۰ : نمودار جریان -ولتاژ برای نمونه زیگزاگ ۸ سلول واحدی قطعه نوع ۶

با بررسی نمودار جریان – ولتاژ شاهد وقوع یک NDR مطلوب هستیم چرا که نسبت اختلاف جریان به ازای ولتاژ ۰/۷۵ ولت قله و ۱ ولت دره نزدیک به ۱۱ میکروآمپر است که موجب می شود این قطعه به عنوان یک سویچ پرسرعت (کاربردهای سویچینگ) مورد استفاده قرار بگیرد فیلترینگ در این قطعه بدلیل نیم فلز بودن الکترودها و ناحیه پراکندگی کاملا قابل پیش بینی است. در ادامه به بررسی این ساختار با استفاده از نمودار (T(E میپردازیم.



شکل ۵-۳۱: نمودار ضریب عبور در نانو روبان زیگزاگ (۸ سلول واحدی)به ازای ولتاژ اعمالی متفاوت همچنان که در قطعات قبل توضیح داده شد مطابق نمودار (E) در ولتـاژ ۲۵/۰ ولـت سـهم عمدهای از کانالها در پنجره ولتاژ مربوط به اسپین پایین است بطوریکه بیشترین ضـریب ترابـرد در پنجره ولتاژ نیز برای همین ولتاژ است و این قلهها نشان دهنده جریان بالایـی است که در جـدول ۵-۱۰ آمده است. در ولتاژ ۵/۰ و ۲۵/۰ ولت نیز همین شرایط برقرار است و فیلترینگ اسپین پایین را

از روی این نمودار به خوبی توجیه می گردد . با بررسی همین نمودار برای ولتاژ ۱ و ۱/۲۵ ولت شاهد کاهش ضریب ترابرد اسپین پایین در پنجره ولتاژ هستیم که مطابق با کاهش جریانی است که در جدول ۵–۱۰ گزارش شد، از روی همین نمودار میتوان اثر NDR که ناشی از کاهش ضریب ترابرد در پنجره ولتاژ است را پیش بینی نمود.

۵-۴-۷ بررسی جریان و فیلترینگ به ازای ولتاژهای مختلف برای قطعه نوع هفت

در این قسمت یک نیمرسانا با گاف بزرگ را بین دو نیم فلز بعنوان الکترود ساندویچ نمودهایم.

شکل ۵-۳۲: الکترودها دارای پیوندهای آویزان نیمه محدود <u>شده</u> ناحیه پراکندگی دارای پیوندهای آویزان محدود <u>شده</u> (قطعه نوع هفت)

ولتاژ (V)	•	۰/۲۵	۰/۵	۰/۷۵	١	1/20
جريان اسپين بالا(A)	٠	1/1 ×1.	۱/۹ ×۱۰ ^{-۱۷}	۸/۶ ×۱۰ ^{-۱۲}	۶/۵ ×۱۰ ^{-۱۱}	۱/Y ×۱۰ ^{-۱.}
(\mathbf{A}) جریان اسپین پایین	•	۲/۱ ×۱۰ ^{-۱۳}	۱/۴ ×۱۰ ^{-۹}	۴/۹ ×۱۰ ^{-۸}	$\Delta/9 \times 1 \cdot^{-Y}$	۲/۶ ×۱۰-۶
میزان فیلترینگ	•	%.٩٩/٩٩٨٩٩	%.99/99999	%99/98400	%.99/97877	%.99/98881

جدول ۵-۱۱:جریان-ولتاژ و فیلترینگ برای قطعه نوع هفت

در این قطعه نیز فیلترینگ بسیار مناسب و جریان میکروآمپری در ولتاژ ۱/۲۵ ولت مشاهده گردید در این قطعه شاهد بروز پدیدهی NDR نیستیم و افزایش ولتاژ منجر به افزایش جریان است. این قطعه نمونه ای از تزریق اسپین درون ناحیه پراکندگی نیمرسانا است که توانسته جریان مطلوبی را درون این ناحیه تزریق نماید و توانایی به کارگیری در مدارات اسپین ترونیکی برای آن وجود دارد. همچون قطعات پیش می توان این دادهها را در نمودار (T)T دنبال نمود (شکل ۵-۳۳).



شکل ۵-۳۳: نمودار ضریب عبور در قطعه نوع ۷- به ازای ولتاژ اعمالی متفاوت



شكل ۵-۳۴: نمودار جريان ولتاژ براى قطعه نوع ۷

۵-۵ جمع بندی

در این فصل به بررسی ترابرد و فیلترینگ در نانو ساختارهای دسته صندلی و زیگزاگ GaN در چیدمانهای مختلف پرداختیم. این چیدمانها مبتنی بر جایگاه پیوندهای آویزان در ناحیه پراکندگی و الکترودها انجام پذیرفت. جایگاه متفاوت پیوندهای آویزان باعث بروز خواص متف وت در ساختار و نهایتا در ترابرد جریان اسپینی درون یک ساختار می گردید که توسط نمودار ضریب ترابرد، مشخصه جریان - ولتاژ و ضریب فیلترینگ محاسبه و ارائه گردید. با اعمال ولتاژ به الکترودهای هر قطعه نوارهای آن الکترود راست (چپ) به مقدارنصف ولتاژ اعمالی بالا (پایین) رفته و موجب همترازی یا عدم همترازی بین نوارهای الکترود و ناحیه پراکندگی می گردید که با وقوع همترازی شاهد تشدید در جریان و در غیر این صورت شاهد کاهش جریان بودیم.



شكل ۵-۳۵: بررسی نمودار جریان ولتاژ تمامی قطعات

حال اگر بخواهیم مقایسه بین جریانهای اسپین پایین در نانوساختارهای زیگزاگ انجام دهیم نمودار شکل ۵-۳۵ حاصل می گردد. همچنان که مشاهده می شود بیشترین جریان در این نمودار مربوط قطعه نوع یک در ولتاژ ۲۷/۰ با جریان ۲۷ میکروآمپر می باشد اما بیشترین جریان همراه بیشترین فیلترینگ مربوط به قطعه نوع شش ۸ سلول واحدی است البته قطعهی نوع پنج با فیلترینگ ۱۰۰٪ در ولتاژ ۲۵/۰ ولت نیز بسیار عالی می باشد. بنابراین توانستیم بدون استفاده از آلایش مغناطیسی یا اعمال ولتاژ گیت و تنها با نقص در ساختار نانو روبان GaN خالص و اعمال ولتاژ به دو الکترود به نتایجی در نوع خود ایده آل برسیم. آنچه در مورد قطعه نوع شش ۸ سلول واحدی رخ داد امری بدیهی بود و جز این از یک نیم فلز انتظار نمی فت. این قطعه بدلیل بروز پدیده NDR کارایی خوبی در سویچینگ خواهد داشت. در مورد مزیت کلی بررسیهای انجام شده باید گفت که نیم فلزات حاصل از آلایش با عناصر واسطه ممکن است با بسیاری از فناوریهای رشد یافته امروز که به شدت متکی به گروه اصلی نیمرساناها هستند، تناسب لازم را نداشته باشد؛ از طرف دیگر فلزات سنگین واسطه اغلب مانند عوامل سمی در سیستمهای بیولوژیکی عمل می کنند بنابراین همین نکته برای مفید بودن این قطعات مطلوب خواهد بود البته ارزان تر و ساده تر بودن روش تولید این نانوساختارها نیز مزیتی متمایز کننده است.

۵-۶ پیشنهاد برای ادامه کار

[1] S. J. Pearton, C. R. Abernathy, and F. Ren, (2006) "Gallium Nitride Processing for Electronics, Sensors and Spintronics" Springer, London, pp.6.

[۲] شعبانی م,(۱۳۹۳) پایان نامه کارشناسی ارشد: "بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله های گالیوم نیتراید آلاییده با عناصر واسطه توسط رهیافت نظریه تابعی چگالی,"دانشکده فیزیک، دانشگاه شاهرود.

[7]Y. Arakawa, (2002) "Progress in GaN-based quantum dots for optoelectronics applications," IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron., vol. 8, no. 4, pp. 823–832.

[*]M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, (1988) "Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors," no. December, p. 264.

[Δ]R. Quay,(2008) "Gallium Nitride Electronics" Springer, London, pp 65.

[۶]S. Adachi, (2005) "Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors" John Wiley & Sons Inc, Lodon.

[Y]H. Kum,(2012) ,PHD.Thesis "Spin Injection, Transport, and Modulation in III-V Semiconductors," Phys. Depart, The University of Michigan.

[A]M. J. Schulz, A. D. Kelkar, M. J. Sundaresan, and F. Group, (2006)
"Nanoengineering of Structural, Functional, and Smart Materials" Edited by. 2006, CRC perss, pp 30.

[9]S. Y. Bae, H. W. Seo, J. Park, H. Yang, and S. A. Song, (2002). "Synthesis and structure of gallium nitride nanobelts," Chem. Phys. Lett., vol. 365, no. 5–6, pp. 525–

529.

[1.] B. Road, (2014)"Effect of Nanoribbon Width and Strain on the Electronic **Properties**" vol. 20, pp. 1746–1754.

[11]W. Z. Xiao, L. L. Wang, H. J. Luo, and J. Y. Yang, (2012)"Magnetic properties in semifluorinated GaN sheet from first principles calculations," Phys. Status Solidi Basic Res., vol. 249, no. 7, pp. 1465–1469.

[17]H. Li, J. Dai, J. Li, S. Zhang, J. Zhou, L. Zhang, W. Chu, D. Chen, H. Zhao, J. Yang, and Z. Wu, (2010) "Electronic Structures and Magnetic Properties of GaN Sheets and Nanoribbons," J. Phys. Chem. C, vol. 114, no. 26, pp. 11390–11394.

[17]Q. Chen, R. Song, C. Chen, and X. Chen, (2013) "Tunable band gap of AlN, GaN nanoribbons and AlN/GaN nanoribbon heterojunctions: A first-principle study," Solid State Commun., vol. 172, pp. 24–28.

[14]G.-X. Chen, D.-D. Wang, J.-M. Zhang, and K.-W. Xu,(2013) "Structural, electronic, and magnetic properties of the period vacancy in zigzag GaN nanoribbons," Phys. Status Solidi, vol. 250, no. 8, pp. 1510–151.

[1\\Delta]F. L. Zheng, Y. Zhang, J. M. Zhang, and K. W. Xu, (2011)"Structural, electronic, and magnetic properties of C-doped GaN nanoribbon," J. Appl. Phys., vol. 109, no. 10.

[19]H. Xia, Q. Xia, A. L. Ruoff, (1993) "High-pressure structure of gallium nitride: Wurtzite-to-rocksalt phase transition", Phys. Rev. B, 47, pp 12925.

[\Y]P. Kung and M. Razegui, (2000) "III-Nitride wide bandgap semiconductors: a

survey of the current status and future trends of the material and device technology", Opto-electronics review, 8, pp 201.

[\A]W. C. Johnson, J. B. Parsons, and M. C. Crew, (1932) "Nitrogen compounds of gallium III-nitride", J. Phys. Chern, 36, pp 2561.

[19] S. Bloom, (1971) "Band structures of GaN and AIN", J. Phys. Chern. Solids, 32, pp 2027.

[$\Upsilon \cdot$]G. Schmidt, (2005) "Concepts for spin injection into semiconductors—a review," J. Phys. D. Appl. Phys., vol. 38, no. 7, pp. R107–R122,

[71] P. Chuang, S. Ho, L. W. Smith, F. S, M. Pepper, C. Chen, J. Fan, J. P. Grif, I. Farrer, H. E. Beere, G. a C. Jones, D. a Ritchie, and T. Chen, (2014) "All-electric all-semiconductor spin fi eld-effect transistors," Nat. Nanotechnol., no. December, pp. 1–5.

[77] S. Bloom, G. Harbeke, E. Meier, and I. B. Ortenburger, (1974) "Band Structure and Reflectivity of GaN", Phys. Status Solidi B, 66, pp 161.

[YT]Z. C. Feng, (2006), "III-Nitride Semicounductor Materials", World Scientific, Singapore.

[Y[¢]] S. J. Pearton, C. R. Abernathy and F. Ren, (2006) "Gallium Nitride Processing for Electronics, Sensors and Spintronics", Springer, London.

[۲۵] زربازو سیاهکلی م. (۱۳۹۰) پایان نامه کارشناسی ارشد: "بررسی فیزیک و مفاهیم اسپینترونیک, " دانشکده علوم پایه، دانشگاه کردستان.

[79]K. Ando, S. Takahashi, J. Ieda, H. Kurebayashi, T. Trypiniotis, C. H. W. Barnes,

S. Maekawa, and E. Saitoh, (2011) "Electrically tunable spin injector free from the impedance mismatch problem," Nat. Mater., vol. 10, no. 9, pp. 655–659.

[YV] X. Zhang, P. Kung, A. Saxler, D. Walker and M. Razeghi, (1996) "Observation of room temperature surface-emitting stimulated emission from GaN: Ge by optical pumping", J. Appl. Phys 80, pp 6544.

[YA]S. Editor and D. J. Lockwood, (2007) "Nanoelectronics and PhotonicsNanostructure Science and Technology "Springer, Canada.

[^Y9] H. S. Kaushik, A. Sharma, M. Sharma, and M. Engineering, (2014) "Dilute Magnetic Semiconductor: A Review of Theoretical Status," vol. 3, no. 1, pp. 5–10,

[**~·**] a P. Sutton, (1993) "Electronic Structure of Materials" CRC perss, pp 380.

[٣1]C. N. R. Rao, A. Müller, A. K. Cheetham.(2004)"**The Chemistry of Nanomaterials, Synthesis, Properties and Application**", Vol. 1, Wiley-VCH, Germany.

[YY]Y. Huang, X. Duan, Y. Cui, C. M. Lieber, (2002) "Gallium Nitride Nanowire Nanodevices", Nano Lett, 2, pp 101.

[TT] J. Goldberger, R. He, Y. Zhang, S. Lee, H. Yan, H. J. Choi, P. Yang, (2003)
"Single-crystal gallium nitride nanotubes", Nature, 422, pp 599.

[٣۴] L. Yang, Z. Zhang, R. Huang, G. Zhang, X. An, (2004) "Synthesis of Single Crystalline GaN Nanoribbons on Sapphire (0001) Substrates", Solid State Commun, 130, pp 769.

[\u03b8\u03b8] J. K\u03b8ubler, A. R. Williams, C. B. Sommers, (1983) "Formation and coupling of magnetic moments in Heusler alloys", Phys. Rev. B, 28, pp 1745. [**\varphi**]S. Wurmehl, G. H. Fecher, H. C. Kandpal, V. Ksenofontov, C. Felser, H. J.Lin, J. Morais, (2005) "Geometric, electronic, and magnetic structure of Co2FeSi: Curie temperature and magnetic moment measurements and calculations", Phys. Rev. B, 72, pp 184434.

[$\forall \forall$]Z. Gercsi, K. Hono, (2007) "Ab initio predictions for the effect of disorder and quarternary alloying on the half-metallic properties of selected Co2Fe-based Heusler alloys", J. Phys: Cond. Matter, 19, pp 326216.

[\number]F.J. Jedema, A.T. Filip, B. Van Wees, (2001) "Electrical spin injection and accumulation at room temperature in an all-metal mesoscopic spin valve", Nature, 410, pp 345.

[٣٩]S. Soya, J. Hayakawa, H. Takahashi, K. Ito, C. Yamamoto, A. Kida, H. Asano, M. Matsui, (2002) "Development of half-metallic ultrathin Fe3O4 films for spin-transport devices", Appl. Phys. Lett, 80, pp 823.

[*·]S.P. Lewis, P.B. Allen, T. Sasaki, (1997) "Band structure and transport properties of CrO2", Phys. Rev. B, 55, pp 10253.

[۴1]S. M. Watts, S. Wirth, S. von Molnár, A. Barry, J. M. D. Coey, (2000) "Evidence for two-band magnetotransport in half-metallic chromium dioxide", Phys. Rev. B, 61, pp 9621.

[47] M. Sieberer, J. Redinger, S. Khmelevskyi, P. Mohn, (2006) 'Ferromagnetism in tetrahedrally coordinated compounds of I/II-V elements: Ab initio calculations", Phys. Rev. B, 73, pp 024404.

[47] O. Volninanska, P. Jakubas, P. Boguslawski, (2006) "Magnetism of CaAs, CaP,

and CaN half-metals", J. Alloys. Compd, 423, pp 191.

[[¢][¢]]E. Kaxiras, (2003)"Atomic and Electronic Structure of Solids" Cambridge University Press,UK, pp321,398.

[4]M. Lannoo, (1990)"The role of dangling bonds in the properties of surfaces and interfaces of semiconductors," Rev. Phys. Appliquée, vol. 25, no. 9, pp. 887–894.

[۴۶] اس.ام. زی. (۱۳۷۵) "فیزیک و تکنولوژی قطعات نیمرسانا" ترجمه غلامحسین سدیر عابدی، ویراسته دکتر محمد حسینی، دانشگاه امام رضا (ع).

[*V]P. G. Piva, G. a DiLabio, J. L. Pitters, J. Zikovsky, M. Rezeq, S. Dogel, W. a Hofer, and R. a Wolkow, (2005) **'Field regulation of single-molecule conductivity by a charged surface atom,**" Nature, vol. 435, no. 7042, pp. 658–661.

[[¢]A]J. R. Weber, W. F. Koehl, J. B. Varley, a Janotti, B. B. Buckley, C. G. Van de

Walle, and D. D. Awschalom,(2010) "Quantum computing with defects," Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., vol. 107, no. 19, pp. 8513–8518.

[۴٩]L. Livadaru, P. Xue, Z. Shaterzadeh-Yazdi, G. a. Dilabio, J. Mutus, J. L. Pitters, B.
C. Sanders, and R. a. Wolkow, (2010) Dangling-bond charge qubit on a silicon surface," New J. Phys., vol. 12.

[Δ·]T. Hitosugi, S. Heike, T. Onogi, T. Hashizume, S. Watanabe, Z.-Q. Li, K. Ohno,

Y. Kawazoe, T. Hasegawa, and K. Kitazawa, (1999) "Jahn-Teller Distortion in Dangling-Bond Linear Chains Fabricated on a Hydrogen-Terminated Si(100)- 2×1 Surface," Phys. Rev. Lett., vol. 82, no. 20, pp. 4034–4037.

[Δ1]a. Ceulemans, E. Lijnen, P. W. Fowler, R. B. Mallion, and T. Pisanski, (2012) "S 5 graphs as model systems for Icosahedral Jahn-Teller problems," Theor. Chem.

Acc., vol. 131, no. 7, pp. 1–10.

[ΔΥ]M. Kepenekian, R. Robles, R. Rurali, and N. Lorente, (2014) "Spin transport in dangling-bond wires on doped H-passivated Si(100)," no. 100, pp. 1–11.

[ΔΥ]S. Okada, K. Shiraishi, and A. Oshiyama, (2003) "Magnetic ordering of dangling bond networks on hydrogen-deposited Si(111) surfaces," Phys. Rev. Lett., vol. 90, no. 2, p. 026803.

[Δ۴]J. Nakamura, T. Nitta, and A. Natori, (2005) "Electronic and magnetic properties of BNC ribbons," Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys., vol. 72, no. 20, pp. 1–5.

[ΔΔ]F. Zheng, G. Zhou, Z. Liu, J. Wu, W. Duan, B. L. Gu, and S. B. Zhang, (2008)"Half metallicity along the edge of zigzag boron nitride nanoribbons," Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys., vol. 78, no. 20, pp. 1–5.

[۵۶] صالحی ح. (۱۳۸۷) "مبانی نظریهی تابعی چگالی" چاپ اول، اهواز، انتشارات کردگار.

[ΔY]B. Chandrasekara, K. A. Narayanankutty, (2012) "Gallium Nitride Nanotube and its Application as Transistors", Inter. J. of Computer Applications, 47, pp 888.

[ΔΛ]Y. Guo, X. Yan, Y. Yang, (2009) "First-principles study of narrow singlewalled GaN nanotubes", Phys. Lett. A, 373, pp 367.

[Δ٩]S. Hao, G. Zhou, J. Wu, W. Duan, and B. L. Gu, (2004) "Spin-polarized electron emitter: Mn-doped GaN nanotubes and their arrays", Phys. Rev. B, 69, pp 113403.

[9.]Q. Wang, Q. Sun, P. Jena, and Y. Kawazoe, (2006), "Clustering of Cr in GaN

nanotubes and the onset of ferrimagnetic order", 73, pp 205320.

[91]K. Rezouali and M.A. Belkhir, (2008) "An ab initio Study, of a Model of Single
Wall GaN Nanotubes, with Oxygen and Zinc as Impurities: Structural and
Electronic Properties", Acta Physica Polonica A, 113, pp 713.

[FT]M. Yanga, J.J Shi, M. Zhang, (2013) "Electronic structures and optical properties of GaN nanotubes with MgGa– ON co-doping", Materials Chemistry and Physics, 138 pp 225.

[97] C. Hemmingsson, G. Pozina, S. Khromov and B. Monemar, (2011) "Growth ofGaN nanotubes by halide vapor phase epitaxy", Nanotechnology, 22 pp 085602.

[94]S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M.

L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova and D. M. Treger, (2001) "Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future", Science, 294, pp 1488

[۶۵] I. Žutic, J. Fabian and S. D. Sarma, (2004) "Spintronics: Fundamentals and Applications", Rev. Mod. Phys, 76, pp 323.

[99] I. Zutic, J. Fabian, and S. Das Sarma, (2004) "Spintronics: Fundamentals and applications", Rev. Mod. Phys, 76, pp 323.

[9V] 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.

[۶۸] J. Grotendorst, S. Blugel, D. Marx, (2006), "Computational Nanoscience: Do ItYourslef", Vol. 31, John von Neumann Institute for Computing, pp. 159-194.

[۶۹] پیلهور شهری ر,(۱۳۹۱) پایان نامه دکتـری:"**بررسی ترابرد اسپین در مولکولهای n-اسن"** دانشکده فیزیک،دانشگاه فردوسی. [V·] S. Datta, (1995)"Electronic Transport in Mesoscopic Systems" Cambridge University Press, UK.

[Y1] H. Haug and A.-P. Jauho, (1996) "Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors" Springer-Verlag, Berlin.

[YY] M. Brandbyge, K. Stokbro, J. Taylor, J.L. Mozos, and P. Ordejo'n, (2001) "in Nonlithography and Lithographic Methods of Nanofabrication—From Ultralarge-Scale Integration to Photonics to Molecular Electronics", edited by L. Merhari, J.A. Rogers, A. Karim, D.J. Norris, and Y. Xia, MRS Symposia Proceed Proceedings, Vol. 636 Materials Rearch Society, Boston, p. D9.25.

[VT] O. Ari, (2001) "Electronic, spintronic and transport properties og carbon based nanowires A Thesis" Tesis, no. July.

[Y[¢]] J. M. de la Vega and B. Miguel, (2011) "**Basis sets for computational** chemistry," Introd. to Adv. Top. Comput. Chem., pp. 41–80.

[Y\[a]Y. J. Zhang, H. L. Shi, S. X. Wang, P. Zhang, and R. W. Li,(2010) "Electronic structure and magnetic coupling properties of Gd-doped AlN: First-principles calculations," Eur. Phys. J. B, vol. 77, no. 3, pp. 345–349.

[Y9] H. Li, J. Dai, J. Li, S. Zhang, J. Zhou, L. Zhang, W. Chu, D. Chen, H. Zhao, J. Yang, and Z. Wu, (2010) "Electronic Structures and Magnetic Properties of GaN Sheets and Nanoribbons," J. Phys. Chem. C, vol. 114, no. 26, pp. 11390–11394.

[VV]J. Zhang, C. Sun, and K. Xu, (2012) "Modulation of the electronic and magnetic properties of a GaN nanoribbon from dangling bonds," Sci. China Physics, Mech. Astron., vol. 55, no. 4, pp. 631–638.

[YA]R. González-Hernández, A. González-Garcia, and W. López-Pérez, (2014) "Ferromagnetism in Cu-doped polar and nonpolar GaN surfaces," Comput. Mater. Sci., vol. 83, pp. 217–221.

[Y9]R. Pati, M. McClain, and A. Bandyopadhyay, (2008) "Origin of negative differential resistance in a strongly coupled single molecule-metal junction device," Phys. Rev. Lett., vol. 100, no. 24, pp. 2–5.

 $[\Lambda \cdot]D$. Wang, Z. Zhang, Z. Zhu, and B. Liang, (2014) "Magnetic structure and Magnetic transport Properties of Graphene Nanoribbons With Sawtooth Zigzag Edges," Sci. Rep., vol. 4, p. 7587.

[A1]N. Liu, G. Y. Gao, S. C. Zhu, Y. Ni, S. L. Wang, J. B. Liu, and K. L. Yao, (2014)

"Carbon doping induced peculiar transport properties of boron nitride nanoribbons p-n junctions," J. Appl. Phys., vol. 116, no. 2, p. 023708.

[AT] B. Mandal, S. Sarkar, A. Pramanik, and P. Sarkar, (2014) "**Doped defective** graphene nanoribbons: a new class of materials with novel spin filtering properties," RSC Adv., vol. 4, no. 91, pp. 49946–49952.

[A[¢]] B. Mandal, S. Sarkar, A. Pramanik, and P. Sarkar, (2013) "**Theoretical prediction of a new two-dimensional carbon allotrope and NDR behaviour of its one-dimensional derivatives**.," Phys. Chem. Chem. Phys., no. 207890, pp. 21001–21006.
Abstract

Recently, spintronic has considered widely in electronics industry, condensed matter physics and materials chemistry. Searching for suitable spintronic is a main but crucial task. Some of the importance of Electron spin devices compare to electron charge is one degree of freedom more than similar electronic system, long lasting coherence and spin relaxation time. in this research We are looking for finding structures of Gallium nitride (GaN) semiconductor with specific properties in transport studies. On the other hand we investigate the electronic and magnetic properties of pure Gallium Nitride nanoribbon and doped by transition metal impurities (Cu, Fe, Mn, and Cr) and Defects in this nanoribbon with spin polarized density function approach and generalized gradient approximation using SIESTA computation code. Then, calculate transport properties of pure and Defects in GaN nanoribbon with the nonequilibrium greens function (NEGF) and generalized gradient approximation using TRANSIESTA computation code.

The results of magnetic and electrical studies revealed that presence of dangling bonds inside of the Gallium nitride structure and their location and edge of the structure, lead to half metallic properties, magnetic metal and magnetic semiconductors. The investigation of transport properties indicates that the most current occurred for down spin to both zigzag and armchair nanostructure, especially in zigzag nanostructure and in detail for device type one in 0.75 voltage and 27 microampere and the best filtering is related to devices type 5 and 6 for 100% filtering in 0.25 voltage. In devices type 1, 4, 5 and 6, negative differential resistance (NDR) phenomena has been occurred and the best negative differential resistance (NDR) behavior was obtained in the devices type 1 and 6.

Based on the results, it is possible to gain a 100% spin polarized microampere current from a pure nanoribbon Gallium nitride structure without using magnetic doping or applying gate voltage.

Keywords: nanoribbon Gallium nitride, density functional theory, SIESTA, nonequilibrium greens function (NEGF), dangling bond.



University of Shahrood

Faculty of Physics

Study of electronic and transport properties of GaN nanoribbons by means of density functional theory (DFT)

Mohammad Afzali

Supervisors

Dr. Tayebeh Movlarooy

Dr. Saeed Hessami Pilehrood

september 2015