

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده فیزیک و مهندسی هسته‌ای  
پایان‌نامه کارشناسی ارشد فیزیک حالت جامد

بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانو صفحات آلومینیم نیتريد آلايش يافته باعناصر

واسطه جهت کاربرد در قطعات اسپین ترونیک

نگارنده : مهرزاد بیرانوند

**استاد راهنما:**

دکتر طیبه مولاروی

**استاد مشاور:**

دکتر فاطمه بدیعیان باغ‌سیاهی

تیر ۹۷

شماره:  
تاریخ:

باسمه تعالی



مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم شماره (۳) صورتجلسه نهایی دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

با نام و یاد خداوند متعال، ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد خانم مهرزاد بیرانوند با شماره دانشجویی ۹۴۳۷۳۹۴ رشته فیزیک، گرایش حالت جامد تحت عنوان بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانوصفحات آلومینیم نیترید آرایش یافته با عناصر واسطه جهت کاربرد در قطعات اسپین ترونیک که در تاریخ ۹۷/۴/۱۲ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار گردید به شرح ذیل اعلام می گردد:

<input type="checkbox"/> مردود	<input type="checkbox"/> قبول (با درجه: .....)
<input type="checkbox"/> عملی	<input checked="" type="checkbox"/> نظری

امضاء	مرتبه علمی	نام و نام خانوادگی	عضو هیأت داوران
	استادیار	دکتر طیبه مولاروی	۱- استادراهنمای اول
			۲- استادراهنمای دوم
	استادیار	دکتر فاطمه بدیعیان باغسیاهی	۳- استاد مشاور
	استادیار	دکتر مجتبی هاشم زاده	۴- نماینده تحصیلات تکمیلی
	دانشیار	دکتر محمد ابراهیم قاضی	۵- استاد ممتحن اول
	دانشیار	دکتر مرتضی ایزدی فرد	۶- استاد ممتحن دوم



نام و نام خانوادگی رئیس دانشکده:

تاریخ و امضاء و مهر دانشکده:

تیسره: در صورتی که کسی مردود شود حداکثر یکبار دیگر (در مدت مجاز تحصیل) می تواند از پایان نامه خود دفاع نماید (دفاع مجدد نباید زودتر از ۴ ماه برگزار شود).

## تقدیم به

ماحصل آموخته هایم را تقدیم می کنم  
به آنان که مهر آسمانی شان آرام بخش آلام زمینی ام است

به استوارترین تکیه گاهم، دستان پرمهر پدرم  
به سبزترین نگاه زندگیم، چشمان سبز مادرم

که هرچه آموختم در مکتب عشق شما آموختم و هرچه بکوشم قطره ای از دریای بی کران مهربانیتان  
را سپاس نتوانم بگویم.

امروز هستی ام به امید شماست و فردا کلید باغ بهشتم رضای شما

باشد که حاصل تلاشم نسیم گونه غبار خستگیان را بزدايد.

بوسه بر دستان پرمهرتان .

## تقدیر و تشکر:

از استاد گرامیم سرکار خانم دکتر طیبه مولاروی که در انجام این پژوهش مرا همراهی و مساعدت فرمودند تشکر و قدردانی می‌نمایم.

و برای این بزرگوار از خداوند بزرگ و منان آرزوی توفیق روز افزون در تمام مراحل زندگی را مسئلت می‌نمایم.

# تعهد نامه

اینجانب **مهرزاد بیرانوند** دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک دانشکده فیزیک و مهندسی هسته‌ای دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه **بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانو صفحات آلومینیم نیتريد آلايش یافته با عناصر واسطه جهت کاربرد در قطعات اسپین‌ترونیک**.

تحت راهنمایی خانم دکتر طیبه مولاروی متعهد می شوم .

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

## تاریخ

## امضای دانشجو

### مالکیت نتایج و حق نشر

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

\* متن این صفحه نیز باید در ابتدای نسخه های تکثیر شده پایان نامه وجود داشته باشد .

## چکیده

در این پژوهش خواص الکترونی و مغناطیسی نانوصفحات AIN خالص و آرایش یافته با عناصر واسطه (Ti, Ni, Cr, V, Mn, Co, Fe, Cu) با استفاده از رهیافت نظریه تابع چگالی قطبیده اسپینی و تقریب شیب تعمیم یافته GGA توسط کد محاسباتی SIESTA مطالعه شده است. محاسبات روی نانوصفحات دسته صندلی (۴,۴) و زیگزاگ (۶,۰) صورت گرفته است. نانوصفحات زیگزاگ و دسته صندلی خالص به ترتیب دارای گاف نواری ۳/۳۶ و ۳/۳۸ الکترون ولت می باشد. بعد از آرایش با عناصر واسطه تغییرات گاف هر دو نانوصفحه بسیار اندک است. ابتدا خواص الکترونی و مغناطیسی نانوصفحات خالص و آرایش یافته مطالعه شده است و سپس پایدارترین حالت آرایش بررسی شده است. نتایج حاصل از محاسبات الکترونی نشان دهنده خواص نیم‌رسانایی این نانوصفحه‌هاست. ساختارهای الکترونی نشان می‌دهد نانوصفحات خالص زیگزاگ و دسته صندلی دارای گاف نواری مستقیم بوده و در هر دو نوع نانوصفحه با افزایش تعداد اتم ناخالصی گاف نواری کاهش یافته است. تقارن چگالی حالت‌ها بیانگر عدم خاصیت مغناطیسی نانوصفحات خالص می‌باشد.

چگالی حالت‌های قطبیده اسپینی نشان می‌دهد که نانوصفحات آلومینیم نیتريد آرایش یافته با عناصر واسطه Co, Fe, Cr در فاز فرومغناطیسی مستقل از تعداد و مکان آرایش نیم‌رسانای مغناطیسی رقیق شده و با Cu فلز غیر مغناطیسی‌اند. در حالیکه نانوصفحات آرایش یافته با عناصر واسطه Ti, V, Mn, Ni بسته به تعداد و موقعیت آرایش ممکن است نیم‌فلز یا نیم‌رسانای مغناطیسی رقیق شده باشند. در فاز آنتی‌فرومغناطیس نیز نانوصفحات آرایش یافته با عناصر واسطه فلز غیرمغناطیسی یا نیم‌رسانای غیرمغناطیسی‌اند. نانوصفحات آرایش یافته با Ti, V, Mn, Ni که دارای خاصیت نیم‌فلزی‌اند کاربرد خوبی در صنعت اسپین‌ترونیک و بویژه مبحث اسپین فیلترینگ دارند. فاز پایدار مغناطیسی نانوصفحه AIN دسته صندلی (۴,۴) آرایش یافته با اتم‌های Ni, Mn مستقل از مکان آرایش فرومغناطیس و برای آرایش با Fe, Co, Ni آنتی‌فرومغناطیسی بدست آمد در حالیکه آرایش این نانوصفحه با عناصر V, Cu, Cr, Ti بسته به مکان آرایش فاز پایدار AFM یا FM می باشد.

در نانوصفحه AIN زیگزاگ (۶,۰) نیز فاز پایدار مغناطیسی برای آرایش با اتم‌های Cu, Mn, Cr مستقل از مکان آرایش فرومغناطیسی و برای اتم‌های V, Co آنتی‌فرومغناطیسی بدست آمد در صورتیکه فاز پایدار نانوصفحه آرایش یافته با Fe, Ti, Ni بسته به مکان آرایش FM یا AFM می‌باشد. گشتاور مغناطیسی کل ایجاد شده در ساختار از Ti به سمت Fe افزایش یافته و بیشینه مقدار را آرایش Fe نشان می‌دهد و سپس با افزایش عدد اتمی از Fe به سمت Cu کاهش می‌یابد. در هر دو نانوصفحه زیگزاگ و دسته‌صندلی آرایش یافته با عناصر واسطه بیشترین گشتاور جزئی مربوط به اتم Mn می‌باشد. نتایج حاصل از این تحقیق می‌تواند جهت مطالعات تجربی آینده روی نیم‌رساناهای مغناطیسی رقیق شده مفید واقع گردد. با توجه به نتایج حاصل از این پژوهش و انعطاف پذیری نانوصفحات AIN در حضور آرایش و مشاهده خاصیت فرومغناطیسی، نانو صفحات AIN آرایش یافته با عناصر واسطه به عنوان کاندیدای مناسب جهت کاربرد در قطعات اسپین‌ترونیکی، فیلترهای جریان اسپینی و تزریق کننده‌های جریان اسپینی پیشنهاد می‌شوند.

**کلمات کلیدی:** نانوصفحات AIN، خواص مغناطیسی، نظریه تابع چگالی، کد SIESTA، نیم‌رسانای رقیق شده مغناطیسی (DMS)، اسپین‌ترونیک.



## لیست مقالات مستخرج از پایان نامه:

۱- مهرزاد، بیرانوند؛ طیبه، مولاروی؛ فاطمه، بدیعیان باغسیاهی؛ ”بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانوصفحه دسته‌صندلی آلومینیم نیترید آرایش یافته با عناصر واسطه“ در سومین کنفرانس فیزیک محاسباتی ایران، یازدهم و دوازدهم بهمن ۱۳۹۶ دانشگاه شهید بهشتی تهران.

۲- مهرزاد، بیرانوند؛ طیبه، مولاروی؛ فاطمه، بدیعیان باغسیاهی؛ ”بررسی فازهای پایدار مغناطیسی نانوصفحه آلومینیم نیترید دسته‌صندلی آرایش یافته با اتم‌های آهن و منگنز“ در سومین کنفرانس فیزیک محاسباتی ایران، یازدهم و دوازدهم بهمن ۱۳۹۶ دانشگاه شهید بهشتی تهران.

۳- مهرزاد، بیرانوند؛ طیبه، مولاروی؛ فاطمه، بدیعیان باغسیاهی؛ ”بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانو صفحه زیگزاگ (۶،۰) آلومینیوم نیترید آرایش یافته با عناصر واسطه“ دهمین کنفرانس فیزیک آماری، ماده چگال نرم و سیستم‌های پیچیده، پنجم و ششم اردیبهشت ۱۳۹۷ دانشگاه محقق اردبیلی.

۴- مهرزاد، بیرانوند؛ طیبه، مولاروی؛ فاطمه بدیعیان باغسیاهی؛ ”بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانوصفحه زیگزاگ (۶،۰) آلومینیوم نیترید آرایش یافته با عناصر واسطه“ مجله علمی و پژوهشی پژوهش‌های سیستم‌های بس ذره‌ای، با کد jrmb-manuId و شماره JRMB-1421 دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز.

## فهرست مطالب

۱	فصل اول
۱-۱	مقدمه
۱-۲	دسته‌بندی نانو مواد
۳-۱	آلومینیم نیتريد
۴-۱	نانوساختارهای آلومینیم نیتريد (AIN)
۵-۱	مروری بر کارهای گذشته
۱۵	فصل دوم
۱-۲	مقدمه
۲-۲	اسپین ترونیک
۳-۲	مواد تزریق کننده‌ی جریان قطبیده اسپینی
۱-۳-۲	فرومغناطیس‌ها
۲-۳-۲	فرومغناطیس‌های فلز (TM)
۳-۳-۲	نیم‌رساناهای رقیق شده مغناطیسی (DMS)
۴-۲	مدل‌های نظری برای توصیف فرومغناطیس در DMS‌ها
۱-۴-۲	مدل تبادلی دوگانه
۲-۴-۲	مدل ابر تبادلی زئر
۳-۴-۲	مدل میدان میانگین
۴-۴-۲	مدل RKKY
۵-۴-۲	مدل میدان میانگین زئر
۲۹	فصل سوم
۱-۳	مقدمه

۳۰	..... نظریه تابعی چگالی (DFT)
۳۱	..... مسئله بس-ذره‌ای
۳۳	..... نظریه توماس-فرمی
۳۴	..... شمای کلی نظریه تابع چگالی DFT
۳۴	..... نظریه هوهنبرگ-کوهن
۳۶	..... معادلات کوهن-شم (KS)
۳۸	..... تقریب چگالی موضعی (LDA)
۳۹	..... تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)
۴۰	..... روش‌های حل معادلات تک ذره‌ای کوهن-شم
۴۰	..... کد SIESTA
۴۱	..... مجموعه پایه جایگزیده اوربیتال اتمی
۴۱	..... مجموعه پایه‌ها
۴۲	..... تعداد پایه‌ها
۴۳	..... اوربیتال‌های زتای یگانه (SZ)
۴۳	..... اوربیتال‌های زتای دوگانه (DZ)
۴۴	..... شبه پتانسیل
۴۵	..... نقاط ویژه K
۴۷	..... فصل چهارم
۴۸	..... مقدمه
۵۰	..... بهینه‌سازی پارامترها
۵۰	..... تعیین پارامترهای ورودی نانوصفحه AIN خالص و آرایش یافته
۵۰	..... انرژی قطع

- ۲-۳-۴ بردار شبکه‌بندی و تعداد نقاط K در فضای وارون.....۵۲
- ۳-۳-۴ مجموعه پایه‌ها.....۵۳
- ۴-۳-۴ بهینه‌سازی ساختارها.....۵۳
- ۴-۴ بررسی خواص الکترونی نانوصفحات خالص AIN (زیگزاگ و دسته‌صندلی).....۵۵
- ۱-۴-۴ بررسی ساختار نواری نانوصفحه زیگزاگ و دسته‌صندلی خالص AIN.....۵۵
- ۲-۴-۴ محاسبه چگالی حالت‌های کلی (DOS) نانوصفحه زیگزاگ و دسته‌صندلی خالص AIN.....۵۶
- ۵-۴ بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانوصفحات AIN آرایش یافته با عناصر واسطه.....۵۷
- ۱-۵-۴ نانوصفحه AIN دسته‌صندلی (۴,۴) آرایش یافته با عناصر واسطه.....۵۹
- ۱-۱-۵-۴ ساختار نواری نانوصفحه AIN (۴,۴) آرایش یافته.....۶۰
- ۲-۱-۵-۴ بررسی چگالی حالات نانوصفحه آرایش یافته AIN (۴,۴).....۶۲
- ۲-۵-۴ بررسی خواص مغناطیسی نانوصفحه‌ی دسته‌صندلی آرایش یافته AIN (۴,۴).....۷۳
- ۱-۲-۵-۴ بررسی فاز پایدار مغناطیسی نانوصفحه آرایش یافته AIN دسته‌صندلی (۴,۴).....۷۳
- ۲-۲-۵-۴ بررسی گشتاورهای مغناطیسی در نانوصفحه AIN (۴,۴) آرایش یافته.....۷۵
- ۳-۲-۵-۴ بررسی پایداری ساختارها.....۷۹
- ۲-۵-۴ نانوصفحه AIN زیگزاگ (۶,۰) آرایش یافته با عناصر واسطه.....۸۴
- ۱-۲-۵-۴ بررسی خواص الکترونی نانوصفحه‌ی آرایش یافته AIN (۶,۰).....۸۵
- ۱-۱-۲-۵-۴ ساختار نواری نانوصفحه آرایش یافته AIN (۶,۰).....۸۵
- ۲-۱-۲-۵-۴ بررسی چگالی حالت‌های نانوصفحه‌ی آرایش یافته AIN زیگزاگ (۶,۰).....۹۱
- ۲-۲-۵-۴ بررسی خواص مغناطیسی نانوصفحه‌ی آرایش یافته AIN زیگزاگ (۶,۰).....۹۶
- ۱-۲-۲-۵-۴ شناسایی فاز پایداری مغناطیسی نانوصفحه‌ی آرایش یافته AIN (۶,۰).....۹۶
- ۲-۲-۲-۵-۴ بررسی گشتاورهای مغناطیسی در نانوصفحه AIN (۶,۰) آرایش یافته.....۹۷
- ۳-۲-۲-۵-۴ بررسی پایداری ساختار نانوصفحه‌ی آرایش یافته AIN زیگزاگ (۶,۰).....۱۰۲

۳-۵-۴ بررسی گشتاورهای مغناطیسی نانوصفحه‌ی AIN (۶,۰) آرایش یافته با عناصر واسطه.....۱۰۷

۴-۵-۴ بررسی گشتاور مغناطیسی نانوصفحه AIN (۶,۰) آرایش یافته با Cu.....۱۱۱

نتیجه‌گیری.....۱۱۲

منابع.....۱۱۵

## فهرست جدول‌ها

عنوان	صفحه
<b>فصل ۱</b>	
جدول ۱-۱ : پارامترهای پایه‌ای ساختار شش گوشه‌ی ورتسایت AIN.....	۷
جدول ۱-۲ : گشتاور مغناطیسی کل نانوروبان زیگزاگ AIN با غلظت‌های متفاوت.....	۱۴
<b>فصل ۴</b>	
جدول ۱-۴ : انرژی قطع بر حسب انرژی کل، نانوصفحه خالص (۶,۰) و نانوصفحه خالص (۴,۴).....	۵۱
جدول ۲-۴ : تعداد نقاط K بر حسب انرژی کل، نانوصفحه خالص (۶,۰) و نانوصفحه خالص (۴,۴).....	۵۳
جدول ۳-۴ : پارامترهای ورودی محاسبات، برای نانوصفحات دسته‌بندی (۴و۴) AIN خالص.....	۵۴
جدول ۴-۴ : پارامترهای ورودی محاسبات، برای نانوصفحه‌های زیگزاگ (۶و۰) AIN خالص.....	۵۴
جدول ۵-۴ : مقدار گاف نواری و موقعیت تراز فرمی برای الف) نانوصفحه خالص AIN (۴,۴) ب) نانوصفحه خالص AIN (۶,۰).....	۵۶
جدول ۶-۴ : پارامترهای ورودی محاسبات، برای نانوصفحه دسته‌بندی AIN (۴,۴) آرایش یافته با عناصر واسطه.....	۵۸
جدول ۷-۴ : پارامترهای ورودی محاسبات، برای نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) AIN آرایش یافته با عناصر واسطه.....	۵۹
جدول ۸-۴ : گاف نواری و موقعیت تراز فرمی بر حسب eV در آرایش ۴٪ نانوصفحه AIN (۴,۴).....	۶۸
جدول ۹-۴ : گاف نواری و موقعیت تراز فرمی بر حسب eV در آرایش ۸٪ نانوصفحه AIN (۴,۴) در فاز فرومغناطیس.....	۶۹
جدول ۱۰-۴ : گاف نواری و موقعیت تراز فرمی بر حسب eV در آرایش ۸٪ نانوصفحه AIN (۴,۴) در فاز فرومغناطیس.....	۷۰
جدول ۱۱-۴ : گاف نواری و موقعیت تراز فرمی بر حسب eV در آرایش ۸٪ نانوصفحه AIN (۴,۴) در فاز آنتی فرومغناطیس.....	۷۱

جدول ۴-۱۲: مقادیر اختلاف انرژی و فاز پایدار مغناطیسی نانوصفحه (۴,۴) AIN آلایش یافته در دو وضعیت لبه دور و لبه نزدیک با غلظت ۸٪ با عناصر واسطه.....۷۴

جدول ۴-۱۳: مقادیر اختلاف انرژی و فاز پایدار مغناطیسی نانوصفحه (۴,۴) AIN آلایش یافته در دو وضعیت وسط دور و وسط نزدیک با غلظت ۸٪ با عناصر واسطه.....۷۴

جدول ۴-۱۴: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت لبه نزدیک نانوصفحه دسته صندلی (۴,۴) AIN ۸٪.....۷۷

جدول ۴-۱۵: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت لبه دور نانوصفحه دسته صندلی (۴,۴) AIN ۸٪.....۷۷

جدول ۴-۱۶: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت وسط نزدیک نانوصفحه دسته صندلی (۴,۴) AIN ۸٪.....۷۸

جدول ۴-۱۷: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت وسط دور نانو صفحه دسته صندلی (۴,۴) AIN ۸٪.....۷۸

جدول ۴-۱۸: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن، در وضعیت لبه و وسط نانوصفحه دسته صندلی (۴,۴) AIN ۴٪.....۷۹

جدول ۴-۱۹: مقادیر انرژی پیوندی نانوصفحه دسته صندلی (۴,۴) AIN با غلظت ۸٪ در موقعیت لبه نزدیک و لبه دور آلایش یافته با عناصر واسطه در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیس.....۸۱

جدول ۴-۲۰: مقادیر انرژی پیوندی نانوصفحه دسته صندلی (۴,۴) AIN با غلظت ۸٪ در موقعیت وسط دور و وسط نزدیک آلایش یافته با عناصر واسطه در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیس.....۸۲

- جدول ۴-۲۱: مقادیر انرژی پیوندی نانوصفحه دسته صندلی (۴,۴) AIN با غلظت ۴٪ در موقعیت لبه و وسط آرایش یافته با عناصر واسطه..... ۸۲
- جدول ۴-۲۲: مقادیر انرژی تشکیل نانوصفحه دسته صندلی (۴,۴) AIN با غلظت ۸٪ در موقعیت لبه نزدیک، لبه دور، وسط نزدیک و وسط دور آرایش یافته با عناصر واسطه در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیس..... ۸۳
- جدول ۴-۲۳: مقادیر انرژی تشکیل نانوصفحه دسته صندلی (۴,۴) AIN با غلظت ۴٪ در موقعیت لبه و وسط آرایش یافته با عناصر واسطه..... ۸۴
- جدول ۴-۲۴: گاف نواری و موقعیت تراز فرمی بر حسب  $eV$  در آرایش ۴٪ نانوصفحه AIN (۶,۰)..... ۸۸
- جدول ۴-۲۵: گاف نواری و موقعیت تراز فرمی بر حسب  $eV$  در آرایش ۸٪ نانوصفحه AIN (۶,۰) در فاز فرومغناطیس..... ۸۹
- جدول ۴-۲۶: گاف نواری و موقعیت تراز فرمی بر حسب  $eV$  در آرایش ۸٪ نانوصفحه AIN (۶,۰) در فاز فرومغناطیس..... ۹۰
- جدول ۴-۲۷: مقادیر اختلاف انرژی و فاز پایدار مغناطیسی نانوصفحه (۶,۰) AIN آرایش یافته در دو وضعیت لبه دور و لبه نزدیک با غلظت ۸٪ با عناصر واسطه..... ۹۶
- جدول ۴-۲۸: مقادیر اختلاف انرژی و فاز پایدار مغناطیسی نانوصفحه (۶,۰) AIN آرایش یافته در دو وضعیت وسط دور و وسط نزدیک با غلظت ۸٪ با عناصر واسطه..... ۹۷
- جدول ۴-۲۹: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت لبه نزدیک نانوصفحه دسته صندلی (۶,۰) AIN ۸٪..... ۹۹
- جدول ۴-۳۰: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت لبه دور نانوصفحه دسته صندلی (۶,۰) AIN ۸٪..... ۹۹
- جدول ۴-۳۱: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در



دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت وسط نزدیک نانوصفحه دسته صندلی (۶,۰) AIN ۸٪ ..... ۱۰۰

جدول ۴-۳۲: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت وسط دور نانوصفحه دسته صندلی (۶,۰) AIN ۸٪ ..... ۱۰۰

جدول ۴-۳۳: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن، در وضعیت لبه و وسط نانوصفحه دسته صندلی (۶,۰) AIN ۴٪ ..... ۱۰۱

جدول ۴-۳۴: مقادیر انرژی پیوندی نانوصفحه دسته صندلی (۶,۰) AIN با غلظت ۸٪ در موقعیت لبه دور و لبه نزدیک آرایش یافته با عناصر واسطه در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیس ..... ۱۰۲

جدول ۴-۳۵: مقادیر انرژی پیوندی نانوصفحه دسته صندلی (۶,۰) AIN با غلظت ۸٪ در موقعیت وسط دور و وسط نزدیک آرایش یافته با عناصر واسطه در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیس ..... ۱۰۲

جدول ۴-۳۶: مقادیر انرژی پیوندی نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) AIN با غلظت ۴٪ در موقعیت لبه و وسط آرایش یافته با عناصر واسطه ..... ۱۰۳

جدول ۴-۳۷: مقادیر انرژی تشکیل نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) AIN با غلظت ۸٪ در موقعیت لبه نزدیک، لبه دور، وسط نزدیک و وسط دور آرایش یافته با عناصر واسطه در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیس ..... ۱۰۴

جدول ۴-۳۸: مقادیر انرژی تشکیل نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) AIN با غلظت ۴٪ در موقعیت لبه و وسط آرایش یافته با عناصر واسطه ..... ۱۰۵

جدول ۴-۳۹: مقادیر انرژی تشکیل نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) AIN، در موقعیت وسط آرایش یافته با غلظت ۴٪ با عناصر واسطه ..... ۱۰۶

جدول ۴-۴۰: مقادیر گشتاور مغناطیسی کل و گشتاور مغناطیسی جزئی فلزات واسطه در نانوصفحه آرایش یافته (۶,۰) AIN با غلظت ۴٪ ..... ۱۰۷

جدول ۴-۴۱: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرو مغناطیس و آنتی فرو مغناطیس، سهم گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در وضعیت لبه نزدیک نانو صفحه زیگزاگ (۶,۰) AlN آرایش یافته با غلظت ۸٪/..... ۱۰۸

جدول ۴-۴۲: مقادیر گشتاور مغناطیسی Cu، N و Al و مقدار گشتاور کل به ازای آرایش Cu در نانو صفحه زیگزاگ (۶,۰) AlN..... ۱۱۱

## فهرست شکل‌ها

صفحه

عنوان

### فصل اول

شکل ۱-۱: طبقه‌بندی نانومواد: الف) نانوذرات ب) نانوسیم ج) نانولوله د) نانوصفحه ه) نانو کریستال‌ها..... ۳

شکل ۱-۲: تغییرات گاف نواری با ثابت شبکه برای ساختارهای ورتسایت وزینک بلند GaN و InN و AlN..... ۴

شکل ۱-۳: الف- تک کریستال ALN ب- بلورک‌های ALN..... ۵

شکل ۱-۴: الف- الگوریتم ساختار ALN ب- ساختار چهارتایی از اتم‌های ALN..... ۷

شکل ۱-۵: a) از بالا b) از کنار صورتی = Al، آبی = N..... ۸

شکل ۱-۶: چگالی حالت‌های کلی آرایش یافته با عناصر واسطه a) خالص، Cr(b)، Co(c)، Fe(e)

.....Ni(f)، Mn(d) ۹

شکل ۱-۷: چگالی حالت‌های جزئی آرایش یافته با عناصر واسطه a) خالص، Cr (b)، Mn (c)، Co،

.....Ni (f)، Fe (d)، Co ۹

شکل ۱-۸: ساختار خالص نانوروبان زیگزگ AIN..... ۱۱

شکل ۱-۹: الف) ساختار نواری نانوروبان زیگزگ AIN خالص ب) چگالی حالت نانوروبان زیگزگ

AIN خالص..... ۱۲

شکل ۱-۱۰: ساختار نواری نانوروبان زیگزگ AIN (a) یک اتم ناخالصی (b) دو اتم ناخالصی

(c)، سه اتم ناخالصی (d) و چهار اتم ناخالصی (e)..... ۱۲

شکل ۱-۱: چگالی حالت‌های نانوروبان زیگزاگ (a) AIN یک اتم ناخالصی (b) دو اتم ناخالصی، (c) سه اتم ناخالصی و (d) چهار اتم ناخالصی..... ۱۳

## فصل دوم

شکل ۲-۱: نمودار چگالی حالت به ازای هر دو حالت اسپین بالا و پایین در دو ساختار خالص الف) دسته‌صندلی و ب) زیگزاگ در تراز فرمی شاهد چگالی حالت صفر و کاملاً متقارن..... ۲۰

شکل ۲-۲: نمودار چگالی حالت اسپین بالا و پایین در تراز فرمی، شاهد عدم تقارن چگالی حالت‌ها و غیر صفر بودن آن هستیم..... ۲۱

شکل ۲-۳: جفت شدگی فرومغناطیسی، بین دو یون  $Co^{2+}(3d^7)$  توسط مکانیزم برهم‌کنشی تبادل‌ی دوگانه..... ۲۴

شکل ۲-۴: الف) برهم‌کنش ابر تبادل‌ی مستقیم: جفت‌شدگی دو یون TM مجاور هم به صورت آنتی‌فرومغناطیس توسط یک آنیون (یون مثبت) اشتراکی ب) برهم‌کنش ابر تبادل‌ی غیرمستقیم: جفت‌شدگی فرومغناطیس اسپین‌های جایگزیه بواسطه‌ی الکترون‌های رسانش..... ۲۵

شکل ۲-۵: مدل میدان میانگین: جفت شدگی فرومغناطیس اسپین‌های جایگزیده Mn بواسطه‌ی حفره‌های آزاد..... ۲۵

شکل ۲-۶: انرژی تبادل‌ی RKKY و وابستگی آن به فاصله‌ی بین اتمی  $r$ ، که رفتاری نوسانی دارد و باعث جفت‌شدگی به صورت فرومغناطیس یا آنتی‌فرومغناطیس می‌شود..... ۲۶

شکل ۲-۷: دمای کوری محاسبه شده برای نیم‌رساناهای متفاوت نوع p آرایش یافته با ۵ درصد Mn، با تمرکز حامل حفره  $10^{20}$  بر  $3/5$   $cm^{-3}$ ..... ۲۷

## فصل چهارم

شکل ۴-۱: نمودار انرژی قطع بر حسب انرژی کل الف) نانوصفحه خالص (۴,۴) ب) نانوصفحه خالص (۶,۰)..... ۵۱

شکل ۴-۲: نمودار بردار نقاط K بر حسب انرژی کل، الف) نانوصفحه خالص (۴,۴) ب) نانوصفحه خالص (۶,۰)..... ۵۲

شکل ۴-۳: ساختار نواری الف) نانوصفحه خالص AIN (۴,۴) ب) نانوصفحه خالص AIN (۶,۰)..... ۵۵

شکل ۴-۴: نمودار چگالی حالت‌های کلی الف) نانوصفحه دسته صندلی (۴,۴) ب) نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰)..... ۵۷

شکل ۴-۵: سلول واحد نانوصفحه خالص دسته صندلی (۴,۴) AIN ب) ابر سلول  $AIN_1 \times 1 \times 3$  خالص ج) آلایش ۴٪ در لبه د) آلایش ۴٪ در وسط ه) آلایش ۸٪ در لبه در وضعیت نزدیک و) آلایش ۸٪ در لبه در وضعیت دور ی) آلایش ۸٪ در وسط در وضعیت نزدیک ر) آلایش ۸٪ در وسط در وضعیت دور..... ۶۰

شکل ۴-۶: ساختار نواری نانوصفحه‌ی آلایش یافته (۴,۴) با درصد آلایش ۴٪ در لبه الف) Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn..... ۶۱

شکل ۴-۷: ساختار نواری نانوصفحه‌ی آلایش یافته (۴,۴) با درصد آلایش ۴٪ در لبه الف) Fe، ب) Co، ج) Ni، د) Cu..... ۶۲

شکل ۴-۸: چگالی حالت‌های نانوصفحه AIN آلایش یافته با ۴٪ عناصر واسطه در وضعیت لبه الف) Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu..... ۶۳

- شکل ۴-۹: چگالی حالت‌های نانوصفحه AIN آرایش یافته با ۴٪ عناصر واسطه در وضعیت وسط الف) (Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu ..... ۶۴
- شکل ۴-۱۰: چگالی حالت‌های نانوصفحه AIN آرایش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت لبه دور فرومغناطیس الف) (Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu ..... ۶۴
- شکل ۴-۱۱: چگالی حالت‌های نانوصفحه AIN آرایش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت لبه نزدیک فرومغناطیس الف) (Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu ..... ۶۴
- شکل ۴-۱۲: چگالی حالت‌های نانوصفحه AIN آرایش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت وسط نزدیک فرومغناطیس الف) (Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu ..... ۶۵
- شکل ۴-۱۳: چگالی حالت‌های نانوصفحه AIN آرایش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت وسط دور فرومغناطیس الف) (Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu ..... ۶۵
- شکل ۴-۱۴: چگالی حالت‌های نانوصفحه AIN آرایش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت لبه نزدیک آنتی فرومغناطیس الف) (Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu ..... ۶۵
- شکل ۴-۱۵: چگالی حالت‌های نانوصفحه AIN آرایش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت لبه دور آنتی فرومغناطیس الف) (Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu ..... ۶۶
- شکل ۴-۱۶: چگالی حالت‌های نانوصفحه AIN آرایش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت وسط نزدیک آنتی فرومغناطیس الف) (Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu ..... ۶۶
- شکل ۴-۱۷: چگالی حالت‌های نانوصفحه AIN آرایش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت وسط دور آنتی فرومغناطیس الف) (Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu ..... ۶۶
- شکل ۴-۱۸: الف) ساختار خالص نانوصفحه زیگزاگ (۶،۰) AIN ب) ساختار افزایش یافته خالص AIN ج) آرایش ۴٪ در وسط د) آرایش ۴٪ در لبه ه) آرایش ۸٪ در لبه در وضعیت نزدیک و) آرایش ۸٪

در لبه در وضعیت دور ز) آرایش ۸٪ در وسط در وضعیت نزدیک ر) آرایش ۸٪ در وسط در وضعیت دور..... ۸۵

شکل ۴-۱۹: ساختار نواری نانوصفحه‌ی آرایش یافته (۶,۰) با درصد آرایش ۴٪ در وسط الف(Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn..... ۸۶

شکل ۴-۲۰: ساختار نواری نانوصفحه‌ی آرایش یافته (۶,۰) با درصد آرایش ۴٪ در وسط الف(Fe، ب) Co، ج) Ni، د) Cu..... ۸۷

شکل ۴-۲۱: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ AIN (۶,۰) سهم عناصر واسطه با ۴٪ آرایش در وضعیت لبه الف(Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu..... ۹۲

شکل ۴-۲۲: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ AIN (۶,۰) سهم عناصر واسطه با ۴٪ آرایش در وضعیت وسط الف(Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu..... ۹۳

شکل ۴-۲۳: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ AIN (۶,۰) سهم عناصر واسطه با آرایش ۸٪ در وضعیت لبه نزدیک فرومغناطیس الف(Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu..... ۹۳

شکل ۴-۲۴: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ AIN (۶,۰) سهم عناصر واسطه با آرایش ۸٪ در وضعیت لبه دور فرومغناطیس الف(Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu..... ۹۳

شکل ۴-۲۵: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ AIN (۶,۰) سهم عناصر واسطه با آرایش ۸٪ در وضعیت وسط نزدیک فرومغناطیس الف(Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu..... ۹۴

شکل ۴-۲۶: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ AIN (۶,۰) سهم عناصر واسطه با آرایش ۸٪ در وضعیت وسط دور فرومغناطیس الف(Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ر) Cu..... ۹۴

شکل ۴-۲۷: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ  $AlN$  (۶,۰) سهم عناصر واسطه با آرایش ۸٪ در وضعیت لبه دور آنتی فرومغناطیس (الف)  $Ti$ ، (ب)  $V$ ، (ج)  $Cr$ ، (د)  $Mn$ ، (ه)  $Fe$ ، (و)  $Co$ ، (ز)  $Ni$ ، (ر)  $Cu$ .....۹۴

شکل ۴-۲۸: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ  $AlN$  (۶,۰) سهم عناصر واسطه با آرایش ۸٪ در وضعیت لبه نزدیک آنتی فرومغناطیس (الف)  $Ti$ ، (ب)  $V$ ، (ج)  $Cr$ ، (د)  $Mn$ ، (ه)  $Fe$ ، (و)  $Co$ ، (ز)  $Ni$ ، (ر)  $Cu$ .....۹۵

شکل ۴-۲۹: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ  $AlN$  (۶,۰) سهم عناصر واسطه با آرایش ۸٪ در وضعیت وسط دور آنتی فرومغناطیس (الف)  $Ti$ ، (ب)  $V$ ، (ج)  $Cr$ ، (د)  $Mn$ ، (ه)  $Fe$ ، (و)  $Co$ ، (ز)  $Ni$ ، (ر)  $Cu$ .....۹۵

شکل ۴-۳۰: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ  $AlN$  (۶,۰) سهم عناصر واسطه با آرایش ۸٪ در وضعیت وسط نزدیک آنتی فرومغناطیس (الف)  $Ti$ ، (ب)  $V$ ، (ج)  $Cr$ ، (د)  $Mn$ ، (ه)  $Fe$ ، (و)  $Co$ ، (ز)  $Ni$ ، (ر)  $Cu$ .....۹۵

شکل ۴-۳۱: نانوصفحه زیگزاگ  $AlN$  (۶,۰)، آرایش یافته با عناصر واسطه در موقعیت وسط با غلظت ۴٪ (الف) در مکان  $Al$  (ب) در مکان  $N$ .....۱۰۶

شکل ۴-۳۲: گشتاور مغناطیسی کل (خطوط توپر) و گشتاور مغناطیسی جزئی فلزات واسطه (خطوط خط چین) در نانوصفحه آرایش یافته  $AlN$  (۶,۰) با غلظت ۴٪.....۱۰۸

شکل ۴-۳۳: گشتاور مغناطیسی کل ساختار  $AlN$  ( $\mu_B$ ) و سهم گشتاور مغناطیسی در اتم اول و دوم ( $\mu_B$ ) عناصر واسطه در نانوصفحه  $AlN$  (۶,۰) آرایش یافته با غلظت ۸٪ در دو حالت (الف) فرومغناطیس (ب) آنتی فرومغناطیس در وضعیت لبه نزدیک.....۱۰۹

شکل ۴-۳۴: گشتاور مغناطیسی کل در نانوصفحه  $AlN$  زیگزاگ (۸,۰) آرایش یافته با عناصر واسطه.....۱۰۹

شکل ۴-۳۵: ساختار نانوصفحه زیگزاگ  $AlN$  (۴,۰) آرایش یافته با (دواتم ناخالصی  $V$ ) (ب) چگالی حالت نانوصفحه زیگزاگ  $AlN$  (۴,۰) با آرایش در وضعیت لبه نزدیک.....۱۱۰



# فصل اول

آلومینیم نیتريد AIN ، خواص ، کاربرد  
مروری بر کارهای انجام شده

## ۱- مقدمه

مواد در مقیاس کوچک به دلیل خواص منحصر به فرد و بالقوه خود در زمینه علم مواد از اهمیت خاصی برخوردار هستند. با توجه به روند کوچک سازی قطعات الکترونیکی و با پیشرفت فناوری نانو در دهه‌های اخیر صنایع تولیدی و تحقیقات علمی پژوهشی و دانشگاهی به سمت نانو ساختارهای مواد گسترش پیدا کرده است. از این رو با رشد روز افزون نانوتکنولوژی، و تلاش برای دستیابی به ابعاد کوچکتر، مصرف کمتر و بازده بیشتر این حوزه جدید توانسته است سهم بسزایی از تحقیقات نظری و تجربی را به خویش اختصاص دهد و نوید بخش آینده‌ای روشن در حوزه فناوری اطلاعات باشد. لذا توجه پژوهشگران به طور گسترده‌ای به استفاده از مولکول‌های آلی نانو مقیاس، که تهیه و تولید آن‌ها در طبیعت به راحتی قابل انجام است، معطوف گردیده است که از این میان می‌توان نانولوله‌های کربنی، فولرن‌ها و بالاخره گرافن را نام برد. امروزه گرافن با توجه به ویژگی‌های منحصر به فرد خود کانون توجه بسیاری از پژوهش‌های نظری و علمی قرار گرفته است.

## ۱-۲. دسته‌بندی نانو مواد

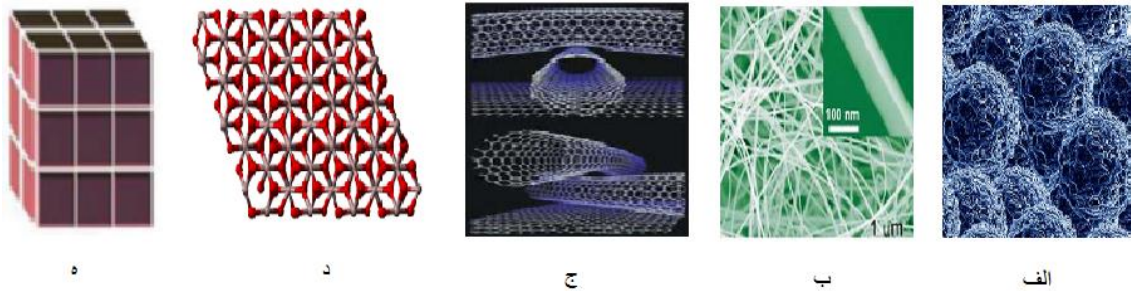
برای اینکه به فهم و درک درستی از نانو مواد برسیم، آن‌ها را بر طبق ابعاد، مطابق شکل ۱-۱ به چهار دسته تقسیم بندی می‌کنیم.

۱- صفر بعدی: نانو ذرات

۲- یک بعدی: نانوسیم‌ها، نانولوله‌ها

۳- دو بعدی: نانو صفحات

۴- سه بعدی: نانوکریستال‌ها



شکل ۱- (الف: طبقه‌بندی نانو مواد: الف) نانوذرات (ب) نانوسیم (ج) نانولوله (د) نانوصفحه (ه) نانو کریستال‌ها

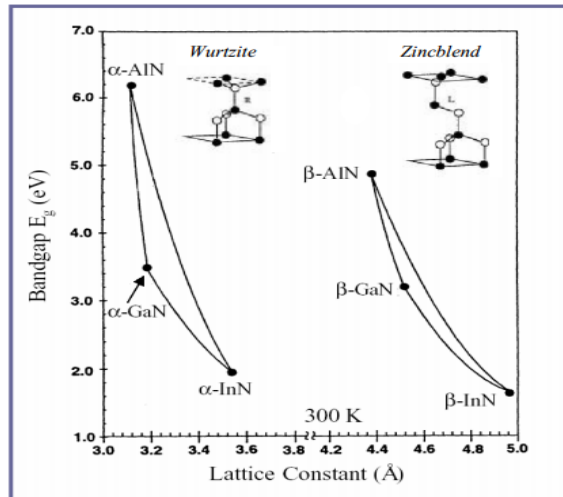
### ۱-۳ آلومینیم نیتريد

آلومینیم نیتريد از یک جامد ترکیب شده از تعداد یکسان اتم‌های نیتروژن و آلومینیم بوجود آمده است. آلومینیم نیتريد شامل عناصر گروه (III-V) آلومینیم Al و N با فرمول شیمیایی AlN می‌باشد که در یک بلور با هم پیوند داده‌اند. پتانسیل عظیم AlN برای استفاده در صنایع میکروالکترونیک شناخته شد و از آن به بعد به صورت یک ماده تجاری با ارزش وارد بازارهای اقتصادی شد. AlN امروزه در صنعت کاربرد گسترده‌ای پیدا کرده و از این رو مورد توجه بسیاری از دانشمندان قرار گرفته است [۱].

آلومینیم نیتريد یک ترکیب دوتایی است که به گروه نیم‌رساناها تعلق دارد و به عنوان یک نیم‌رسانایی با گاف نواری پهن شناخته می‌شود. با توجه به خصوصیات منحصر به فرد و مفید آن مانند خواص الکتریکی بسیار عالی و داشتن گاف نواری بزرگ ( $6/2 \text{ eV}$ ) که باعث افزایش جذب در خواص اپتیکی، الکترونیکی و فوتوالکترونیکی می‌شود، می‌توان اشاره کرد [۲-۳]

از ترکیبات دوتایی گروه سه نیتريد III-N می‌توان به ایندیوم نیتريد (InN)، گالیوم نیتريد (GaN) و آلومینیم نیتريد (AlN) که به ترتیب دارای گاف نواری بزرگی با مقادیر  $1/9 \text{ eV}$  و  $3/4 \text{ eV}$  و  $6/2 \text{ eV}$  در دمای اتاق‌اند اشاره کرد. تغییرات گاف نواری با ثابت شبکه برای این ترکیبات در شکل (۱-۲) نشان داده شده است [۴]. بنابراین گروه سه نیتريد برای تولید دستگاه‌های الکترونیکی استفاده می‌شود. بنابراین ترکیبات این گروه برای استفاده در قطعات اپتوالکتریکی از قبیل ساخت LEDها، لیزرها و آشکارسازهایی که در ناحیه سبز، آبی یا طول موج‌های ماورای بنفش فعال هستند بسیار مورد توجه‌اند [۵-۱۱]. این

مواد همچنین کاربردهایی، در حوزه الکترونیک توان بالا<sup>۱</sup>، سیستم‌های میکرو موج<sup>۲</sup>، ارتباطات بی سیم<sup>۳</sup> و ماهواره‌ها نیز دارند. از دیگر حوزه‌های کاربردی این گروه از ترکیبات، شامل سیستم‌های آشکارساز و سنسورهای بیولوژیکی<sup>۴</sup> و حوزه جدیدی از علم الکترونیک به نام اسپین ترونیک می‌باشد.



شکل ۱-۲: تغییرات گاف نواری با ثابت شبکه برای ساختارهای ورتسایت وزینک بلند GaN و InN و AlN [۴].

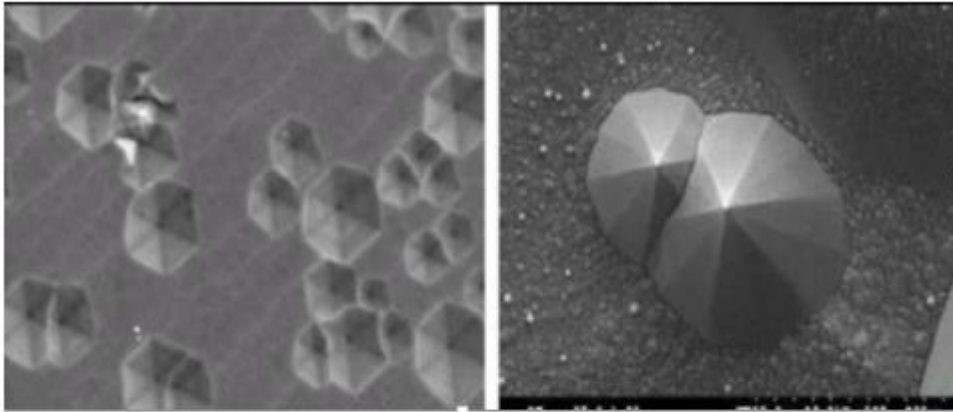
در میان نانو مواد، نانوصفحات و بخصوص نانو صفحات AlN ماده‌ای با خواص فیزیکی بسیار عالی نظیر هدایت حرارتی بالا، ضریب انبساط حرارتی پایین، مقاومت الکتریکی بالا، ثابت دی الکتریک پایین، پایداری حرارتی بالا، چگالی پایین و همچنین خواص مکانیکی مناسبی همچون مقاومت سایشی بالا و سختی قابل قبول است [۱۳ و ۱۲]. شکل ۱-۳ الف) ساختاری از تک کریستال AlN و همچنین در شکل ۱-۳ ب) ساختاری از بلورکهای AlN نشان داده شده است. ساختارهای بالک (کپه‌ای) نیم‌رسانای گروه III-V به علت اهمیت ویژه آنها برای کاربردهای تکنولوژیکی مانند دیودهای آبی و ماورابنفش، ترانزیستورها، درجه حرارت بالا عمل می‌کنند، به طور گسترده مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. پیشرفت تکنولوژیکی منجر به پیدایش اشکال کم حجم و در ابعاد نانو ترکیبات دوتایی گروه (III-V) نظیر نانوسیم AlN می‌باشد [۱۴].

<sup>۱</sup>High power electronics

<sup>۲</sup>Microwave systems

<sup>۳</sup>Wireless communication

<sup>۴</sup>Biological detection and sensors



ب

الف

شکل ۱-۳ الف- تک کریستال ALN ب-بلورکهای ALN [۱۵].

گاف انرژی نواری آلیاژها و ترکیبات دوتایی و سه تایی گروه III-N همچون آلومینیم گالیوم نیتريد (AlGaN) و ایندیوم گالیوم نیتريد (InGaN)، با تغییر میزان ترکیب عناصر و غلظت آلاینش آنها، می تواند از  $1/9 \text{ eV}$  تا  $6/2 \text{ eV}$  تغییر کند.

#### ۴-۱ ساختار آلومینیم نیتريد (AlN)

تا به امروزه کارهای کمتری روی نانو صفحات انجام شده است. نانوصفات AlN ساختاری مثل گرافیت دارند. در نانوصفات نیمه هیدروژنه با افزایش لایه صفات خاصیت نیمه فلزی مشاهده می شود. خواص ساختاری الکترونی و همچنین پایداری نانوصفات AlN هیدروژنه و نیمه هیدروژنه توسط محاسبات نظریه تابع چگالی بررسی شده است [۱۶]. با وارد کردن عناصر واسطه در نانو صفات AlN نیم رسانای غیر مغناطیسی می توان خواص مغناطیسی و افزایش صفات ورق نانو را بدست آورد که این خواص مغناطیسی و الکترونی کاربردهای زیادی در عرصه الکترونیک و اسپین ترونیک دارند [۱۶]. اکثریت ترکیبات عناصر گروه (III-V) هم از این قاعده مستثنی نبوده و برای بررسی نانو ساختارهای این ترکیبات به صورت نظری و تجربی کارهای زیادی انجام شده است حوزهی مقیاسی نانو مواد نوعاً

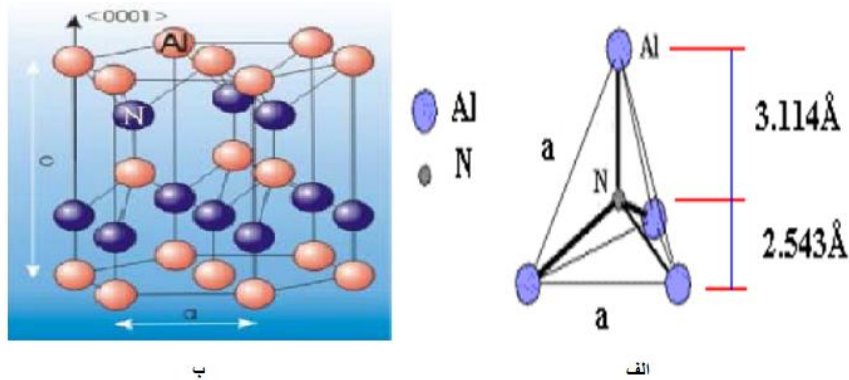
زیر  $100\text{ nm}$  است. خواص نانو مواد به طور قابل ملاحظه و چشمگیری متفاوت تر از خواص آن‌ها در حوزه مغناطیسی و حالت کپه‌ای آن‌ها است. در آن‌ها شاهد خواص منحصر به فردی هستیم که ناشی از محدودیت کوانتومی و اثرات سطحی می‌باشد. در حوزه نانو، خواص کوانتومی و اثرات سطحی مواد مورد بررسی قرار می‌گیرد. نانو ساختارهای AIN شامل نانوصفحه، نانو لوله، نانوسیم، نانو ذرات و نانو روبان‌ها می‌باشند که به دلیل گاف نواری عریض و بزرگ آنان و مقاومت بالا و انرژی پیوند بزرگ به عنوان عناصر جدید در علم نانو پتانسیل بسیار بالایی برای کاربرد در ساخت قطعات اسپین‌ترونیک، قطعات اپتیکی، الکترونیک و سنسورها با بهره بالا دارد.

آلومینیم نیتريد دارای ساختارهای متفاوتی از جمله مکعبی و شش گوش می‌باشد. آلومینیم نیتريد برای اولین بار Fichter و Osterheld در سال ۱۹۱۵ گزارش دادند که بلور ALN می‌تواند توسط روش تصعید<sup>۱</sup> در محیط نیتروژن سنتز شود [۱۷].

در سال ۲۰۰۷ ژانک<sup>۲</sup> و همکاران به طور موفقیت آمیزی نانوصفحه تک بلور AIN را با استفاده از مواد اولیه پودر و آمونیاک و زیر لایه سیلیکون توسط روش فاز انتقال بخار، سنتز کردند. این سنتز به ما فرصتی می‌دهد که بتوانیم نانوصفحه AIN را در طراحی قطعات الکترونیک مورد استفاده قرار دهیم [۱۸]. پیشرفت قابل توجه در تحقیقات گرافن سبب شده تا دانشمندان به کشف سایر مواد 2D بپردازند که در میان نانوصفحات، ساختار لانه زنبوری شبکه گرافن نانوصفحات AIN به شدت مورد بررسی قرار می‌گیرد [۱۹].

---

<sup>۱</sup>Sublimation  
<sup>۲</sup>Xitian Zhang



شکل ۱-۴: الف-الگوریتم ساختار ALN ب-ساختار چهارتایی از اتم های ALN

جدول ۱-۱: پارامترهای پایه‌ای ساختار شش گوشه‌ی ورتسایت AlN [۲۰ و ۲۱]

ساختار کریستالی	Wurtzit
ثابت شبکه	$3.112 a (A^\circ)$
گاف نواری	6.2 (eV)
استقامت دی‌الکتریک	$1.2 \left(\frac{MV}{cm}\right)$
ضریب انبساط حرارتی	$4.3 \times \frac{10^{-6}}{K}$
هدایت حرارتی	$320 (wm^{-1}k^{-1})$
سختی	$800 \left(\frac{kg}{mm^2}\right)$
نقطه ذوب	$2750 C^\circ$
C	$4.982 (A^\circ)$
مقاومت الکتریکی	$4 \times 10^8 \frac{\Omega}{cm}$
چگالی	$3.26 \frac{g}{cm^3}$
ثابت دی‌الکتریک نسبی	$\epsilon_r = 8.8 MHz$

کاربردهای دیگر این ترکیبات گروه III-N می‌توان به پایداری حرارتی و مکانیکی بالا، همچنین ثابت پیزوالکتریکی بزرگ آن‌ها اشاره کرد [۲۲].

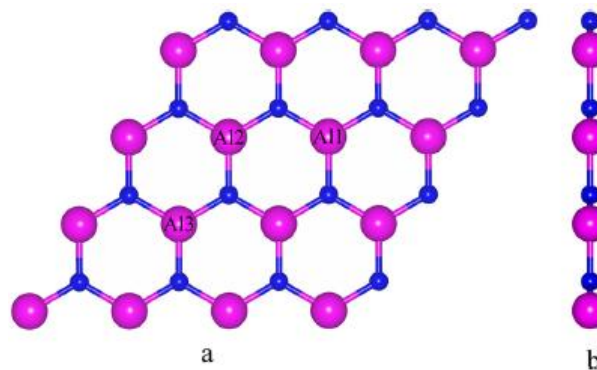
غالباً نیم‌رساناهایی از گروه (III-V) دارای ساختاری فشرده هستند کاربردهایی در صنایع و تولید تکنولوژیکی مانند لیزرها، دیودها، و ترانزیستورها دارای اهمیت زیادی می‌باشند و مورد مطالعه قرار گرفته‌اند [۲۳-۲۸]. به دلیل داشتن رسانایی گرمایی و هدایت الکتریکی بالا در صنایع میکروالکترونیک

مورد استفاده قرار می‌گیرد. از دیگر کاربردهای آن می‌توان به استفاده در صنایع نظامی و هوانوردی و همچنین در صنعت سرامیک برای ساخت سرامیک‌هایی با دمای ذوب بالا و آجرهای نسوز اشاره کرد.

## ۵-۱ مروری بر کارهای گذشته

گروه جانگمین شی<sup>۱</sup>، هنگویی چین<sup>۲</sup> در سال ۲۰۱۴ نانوصفحه AlN خالص آلایش یافته با عناصر واسطه را مورد بررسی قرار دادند. با در نظر گرفتن ۳۲ اتم با استفاده از نظریه تابع چگالی DFT خواص الکترونی و مغناطیسی نانوصفحات را بررسی نمودند [۲۹]. آن‌ها محاسبات خود را با تقریب شیب تعمیم یافته GGA و کد محاسباتی VASP و با استفاده از طرح منخارست پک<sup>۳</sup> با تعداد نقاط  $k$   $4 \times 4 \times 1$  و با در نظر گرفتن ساختار ۳۲ اتمی بررسی کردند.

ساختار خالص نانوصفحه AlN در شکل ۵-۱، و مدل ساختاری و آلایش یافته مورد استفاده به همراه نمودار چگالی حالت کلی و جزئی مربوط به آن در این کار در شکل‌های ۶-۱ و ۷-۱ رسم شده است.



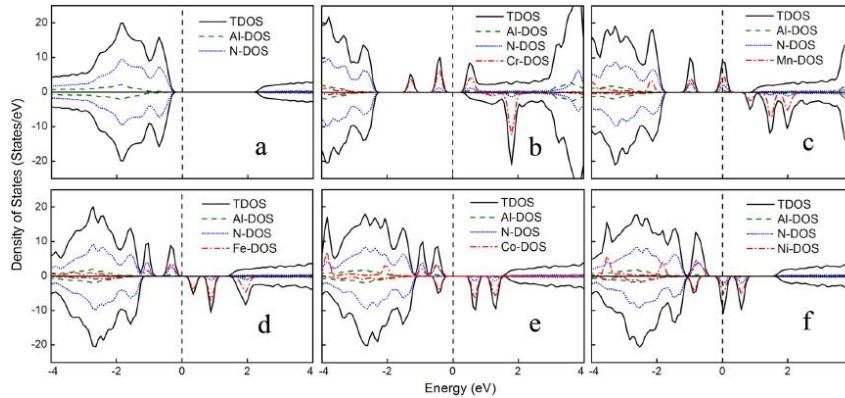
شکل ۵-۱: (a) از بالا (b) از کنار صورتی=Al، آبی=N

در این تحقیق در نانوصفحه AlN زیگزاگ  $(4,0)$  با توجه به آلایش عناصر واسطه در موقعیت نشان داده شده تفاوت اندازه انرژی بین اسپین بالا و اسپین پایین ناشی از شکافتگی اسپینی تبادل می‌باشد. اختلاف گاف نواری اسپین بالا و اسپین پایین در اطراف تراز فرمی و گشتاور مغناطیسی غیر صفر باعث

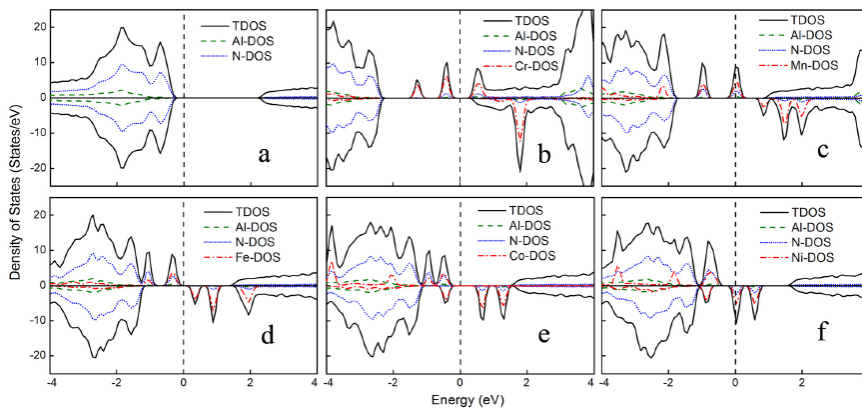
<sup>۱</sup>Changmin shi  
<sup>۲</sup>Hongwei Qin  
<sup>۳</sup>Monkhorst-Pack



ایجاد یک قطبش اسپینی می‌شود که نشان دهنده سهم متفاوت الکترون‌ها با اسپین بالا و اسپین پایین در خواص تراپردی است. خط عمودی نشان دهنده سطح تراز انرژی فرمی می‌باشد.



شکل ۶-۱: چگالی حالت‌های کلی نانوصفحه AlN آلاینش یافته با عناصر واسطه (a) خالص، (b) Cr، (c) Co، (d) Mn، (e) Fe،



شکل ۷-۱: چگالی حالت‌های جزئی نانوصفحه AlN آلاینش یافته با عناصر واسطه (a) خالص، (b) Cr، (c) Mn، (d) Fe، (e) Co، (f) Ni

با توجه به چگالی حالت‌های رسم شده در شکل‌های ۶-۱ و ۷-۱ در Mn با توجه به اینکه در حالت اسپین بالا و Ni در حالت اسپین پایین گاف نواری آن‌ها صفر است از خود رفتار نیم‌فلزی نشان می‌دهند [۲۹].

Sahin و همکاران اولین مطالعه نظری خود را بر روی ساختار شش ضلعی AlN انجام دادند و پایداری و پایدارترین این ساختار را بررسی کردند [۳۰]. اخیراً مطالعات تجربی بر روی پایداری ساختار شش گوشه توسط Tsipa و گزارش شده است [۳۱]. Du و همکاران خواص ساختاری و الکترونیکی نانوساختارهای AlN یک بعدی مانند نانوسیم‌ها با ساختار شش ضلعی و نانولوله‌های AlN فشرده و تک

محور را مورد بررسی قرار دادند [۳۲]. ژو جوان دو جمئه<sup>۱</sup> و همکاران در سال ۲۰۱۲ با استفاده از تابع چگالی DFT و تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) و کد (VASP)، مطالعات بر روی پایداری و خواص الکترونیکی نانوساختارهای AIN را مورد بررسی قرار دادند [۳۲]. آنان دریافتند که نانوسیم AIN و نالوله‌های دوجداره AIN نیم‌رساناهایی با گاف نواری بزرگ هستند که کاندیدای مناسبی برای استفاده در انعطاف پذیری، سنسورهای موجی پالس و زوناتورهای نانو مکانیکی و دیودهای نوری می‌باشند [۳۲]. مطالعات نظری و تجربی ساختار AIN توسط ژنگ و همکاران صورت گرفت [۳۳]. Almeida و همکاران با استفاده از نظریه تابع چگالی DFT و تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) در تحقیقات خود پیش بینی کردند که نانوروبانهای زیگزاگ AIN دارای یک گاف نواری غیر مستقیم هستند در حالیکه نانوروبانهای دسته‌صندلی AIN دارای گاف نواری مستقیم می‌باشند و مقدار این گاف نواری با افزایش عرض نوار کاهش می‌یابد [۳۴].

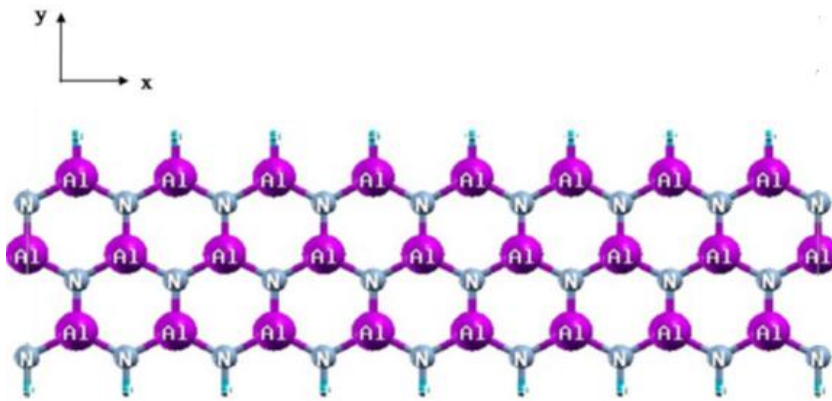
چن و همکاران به طور سیستماتیکی خواص الکترونی، ساختار نانوروبان دسته‌صندلی و زیگزاگ AIN و GaN را مورد بررسی قرار دادند. این محققان دریافتند که گاف نواری هر دو نانوروبان دسته‌صندلی و زیگزاگ به صورت یکنواختی و به دلیل افزایش عرض نوار کاهش می‌یابد [۳۵].

در پژوهشی که آخیلی<sup>۲</sup> و همکاران بر روی نانوروبانهای (۸,۰) زیگزاگ AIN انجام داده‌اند به بررسی خواص مغناطیسی و الکترونی از جمله چگالی حالت‌ها، رفتار الکترونی و گشتاور مغناطیسی، با وارد کردن ناخالصی اتم Mn (یک، دو، سه و چهار اتم ناخالصی) در ساختار نانوروبان AIN پرداخته‌اند [۳۶].

---

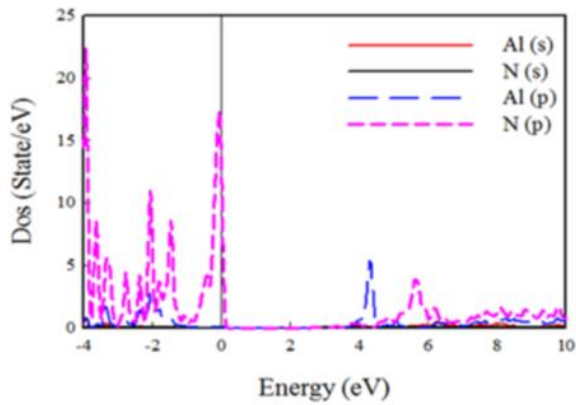
<sup>۱</sup>Xiu-Juan Du  
<sup>۲</sup>Aghili

روش محاسبات بر پایه DFT با تقریب GGA با کد WIEN2K انجام شده است. این ابر سلول همانطور در شکل ۸-۱ نشان داده شده است دارای ۵۰ اتم است که این ابر سلول دارای ۲۵ اتم Al و ۲۵ اتم N می‌باشد. ناخالصی Mn با چهار غلظت متفاوت با ابر سلول AlN آرایش داده شد. ۱. یک اتم ناخالصی =  $(\frac{1}{56})$ ، ۲. دو اتم ناخالصی =  $(\frac{3}{12})$ ، ۳. سه اتم ناخالصی =  $(\frac{6}{24})$  و ۴. چهار اتم ناخالصی =  $(\frac{12}{48})$  [۳۶].

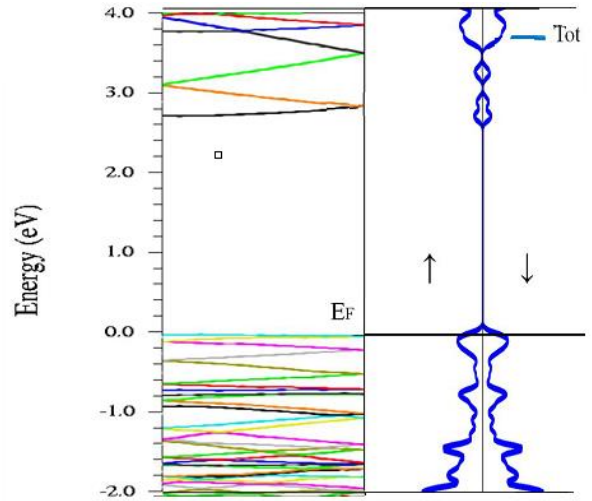


شکل ۸-۱: ساختار خالص نانوروبان زیگزاگ AlN [۳۸].

در این تحقیق آنان دریافتند که با توجه به ساختار نواری و چگالی حالت همانطور که در شکل ۹-۱ نشان داده شده است، ساختار نواری در شکل ۸-۱ الف) نانوروبان زیگزاگ AlN در حالت خالص دارای گاف نواری (۲/۷۸ eV) می‌باشد، چگالی حالت در شکل ۸-۱ ب) نانوروبان زیگزاگ AlN در حالت خالص متقارن و دارای رفتاری کاملاً غیر مغناطیسی است [۳۶].

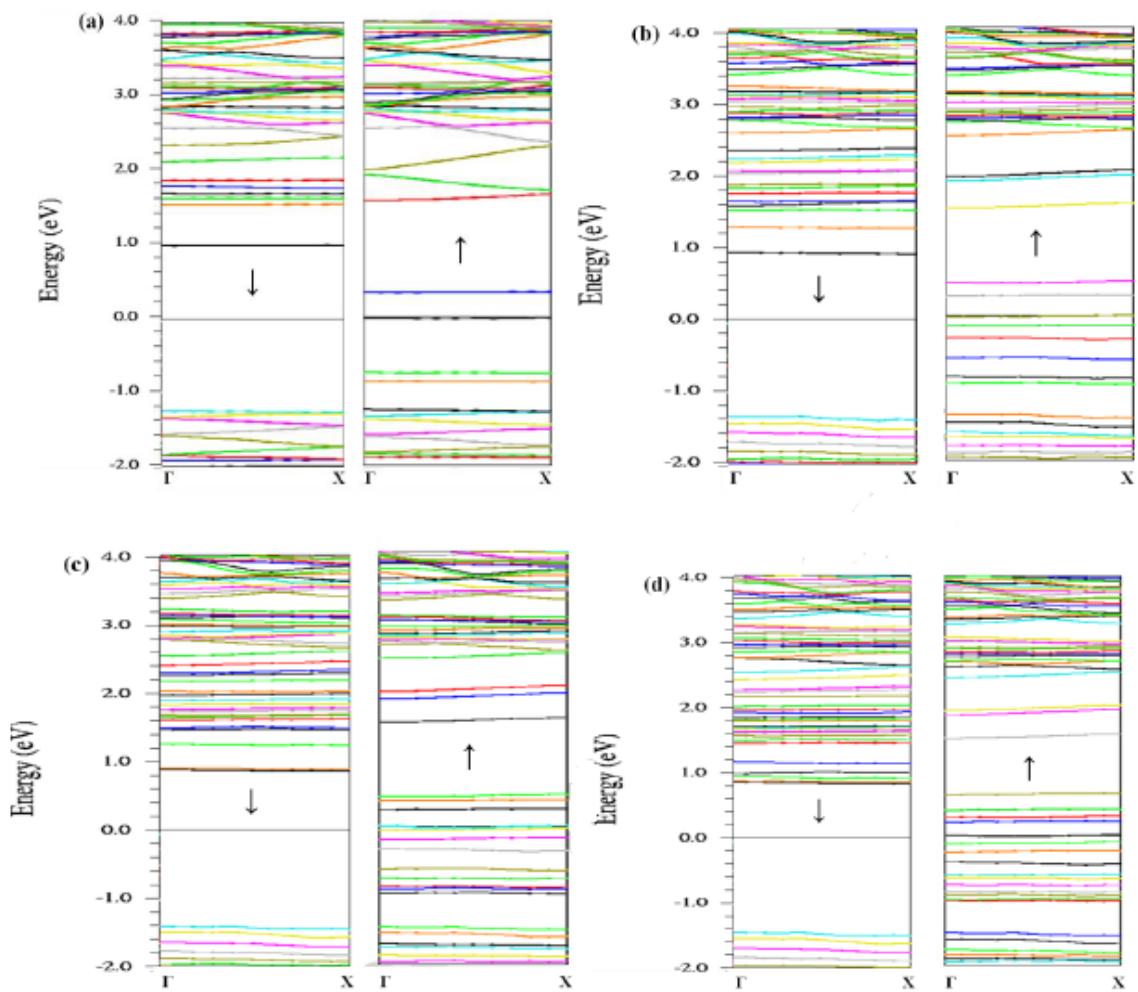


ب



الف

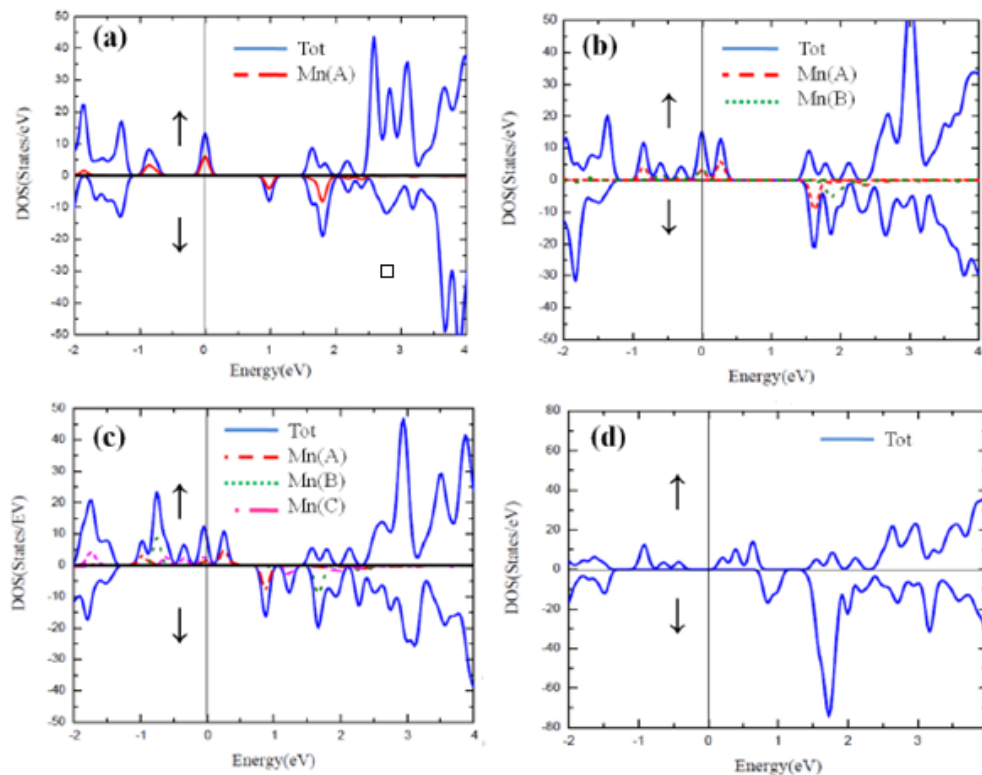
شکل ۹-۱: الف) ساختار نواری نانوروبان زیگزاگ AlN خالص ب) چگالی حالت نانوروبان زیگزاگ AlN خالص [۳۶]



شکل ۱۰-۱: ساختار نواری نانوروبان زیگزاگ AlN (a) یک اتم ناخالصی (۰.۱/۵۶) (b) دو اتم ناخالصی (۰.۳/۱۲)، (c) سه

اتم ناخالصی (۰.۶/۲۴) و (d) چهار اتم ناخالصی (۰.۱۲/۴۸) [۳۶]

با بررسی ساختار نواری نانوروبان آلایش یافته AIN (TM=Mn) با غلظت‌های (۰.۳/۱۲)، (۰.۱/۵۶)، (۰.۶/۲۴) و (۰.۱۲/۴۸) در شکل ۱-۱۰ و مقایسه آن با ساختار نواری خالص AIN مشاهده کردند که نوارهایی در میان گاف نواری خالص ایجاد شده و باعث تغییر شکل ساختار نواری و تغییر در اندازه گاف انرژی شده است. نتیجه اختلاف گاف بین دو حالت اسپینی، باعث ایجاد یک قطبش اسپینی اطراف تراز فرمی می‌شود.



شکل ۱-۱۱: چگالی حالت‌های نانوروبان زیگزاگ AIN (a) یک اتم ناخالصی (b) دو اتم ناخالصی، (c) سه اتم ناخالصی و (d)

چهار اتم ناخالصی [۳۶]

با توجه به منحنی چگالی حالت‌ها در شکل ۱-۱۱ در نانوروبان زیگزاگ AIN آلایش یافته با اتم واسطه Mn با غلظت‌های متفاوت مشاهده کردند که گاف اسپین بالا با آلایش یک اتم ناخالصی، دو اتم ناخالصی و سه اتم ناخالصی صفر می‌باشد، که نشان دهنده رفتار نیم‌فلزی در ساختارهای آلایش یافته می‌باشد [۳۶].

جدول ۱-۲: گشتاور مغناطیسی کل نانوروبان زیگزاگ AlN با غلظت‌های متفاوت

Mn impurity (%)	Magnetic momentum ( $\mu\text{B}$ )	Polarization ( $U_p$ )	Polarization ( $D_n$ )	P(%)
x=0	0.00191	0	0	0
x=1.56	4.00297	13.5	0	100
x=3.12	7.99942	15.22	0	100
x=6.24	11.98965	11.07	0	100
x=12.48	16.00145	0	0	0

با توجه به محاسبه گشتاور مغناطیسی کل در حالت خالص، مشاهده کردند که نانوروبان زیگزاگ AlN شاهد هیچ‌گونه قطبش اسپینی در اطراف تراز فرمی نبودند و ساختار خالص دارای گشتاور مغناطیسی کل صفر می‌باشد. در این تحقیق آنان دریافتند که با افزایش تعداد اتم ناخالصی گشتاور مغناطیسی کل افزایش پیدا می‌کند [۳۶].

## فصل دوم

# اسپین ترونیک و نیم‌رساناهای رقیق شده مغناطیسی (DMS)

## ۲-۱ مقدمه

اسپین ترونیک یک تحول انقلابی در سطح جدید و نوین بر اساس درجه آزادی اسپین حامل‌ها به اضافه‌ی بار الکتریکی آن‌ها است. مضاف بر بار الکتریکی، یک الکترون دارای تکانه‌ی زاویه‌ای ذاتی است که اسپین نامیده می‌شود و گشتاور مغناطیسی مستقیماً به آن مربوط می‌شود.

امروزه حوزه اسپین ترونیک که از هر دو درجه بار و آزاد شدن چرخش الکترون‌ها برای ایجاد ویژگی‌های جدید فراتر از دستگاه‌های نیمه‌رسانای معمول استفاده می‌کنند توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند. به نظر می‌رسد مواد نیمه‌رسانای رقیق شده مغناطیسی ( $DMS^1$ ) به عنوان مواد ایده‌آل برای این حوزه و DMSها از جمله AIN به دلیل دارا بودن گاف نواری گسترده مورد مطالعه قرار گرفته‌اند [۳۷-۳۸].

نیمه‌رساناهای مغناطیسی رقیق شده موادی‌اند که نوع نیمه‌رسانا غالباً از عناصر گروه (III-V) و گروه (II-VI) جدول تناوبی می‌باشد که با عناصر واسطه رقیق شده‌اند [۳۹].

اسپین یک کمیت کاملاً کوانتومی است که به الکترون درجه آزادی اضافه‌ای برای برهم‌کنش با میدان مغناطیسی می‌دهد. بنابراین اضافه کردن درجه آزادی اسپینی به الکترونیک نیمه‌رساناهای معمولی که بر پایه‌ی بار الکتریکی عمل می‌کنند قابلیت و عملکرد بیشتری می‌دهد. در سال ۱۹۹۲، اشترن<sup>۲</sup> و گراخ<sup>۳</sup> با طرح آزمایشی تجربی شواهد تجربی وجود اسپینی و طبیعت کوانتیده بودن اسپین الکترون  $(S_z = \pm \frac{\hbar}{2})$  را نشان دادند [۴۰].

---

<sup>۱</sup> Diluted Magnetic Semiconductor

<sup>۲</sup> Stern

<sup>۳</sup> Gerlach



## ۲-۲ اسپین ترونیک

خواص ساختاری الکترونی و همچنین پایداری نانوصفحات AIN هیدروژنه و نیمه هیدروژنه توسط محاسبات نظریه تابع چگالی بررسی شده است. با آرایش عناصر واسطه در نانو صفحات AIN که نیم‌رسانای غیر مغناطیسی اند می توان خواص مغناطیسی و افزایش ضخامت ورق نانو را بدست آورد که این خواص مغناطیسی و الکترونی کاربردهای زیادی در عرصه ی الکترونیک و اسپینترونیک دارند [۴۱].

از دیدگاهی اساسی تر، اسپین ترونیک شامل بررسی ترابرد اسپین همچون دینامیک و واهلش آن در مواد حالت جامد که به لحاظ تکنولوژی پیشرفته‌اند، می‌باشد. اساسی‌ترین و مهم‌ترین روند برای عملکرد قطعات اسپین ترونیک شامل مراحل زیر می‌باشد:

۱- کد گذاری اطلاعات کوانتومی در اسپین الکترون به عنوان یک جهت‌گیری اسپینی خاص در خروجی فرستنده<sup>۱</sup>.

۲- انتقال و ترابرد اسپین‌ها در همان جهت‌گیری اسپینی اولیه‌شان برای یک بازه طولی و زمانی مشخص بدون از دست دادن حالت و فازشان توسط الکترون‌های متحرک.

۳- آشکارسازی حالت‌های منتقل شده واطلاعات تغییر نکرده<sup>۲</sup> در خروجی دریافت کننده اطلاعات<sup>۳</sup>.

از مزایای قطعات اسپین ترونیک نسبت به قطعات الکترونیک می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

- ۱- سرعت پردازش و عملکرد بالا: به دلیل اینکه ذخیره‌سازی و پردازش اطلاعات در قطعات اسپین ترونیک تواما انجام می‌پذیرد و حافظه و عملیات منطقی روی یک تراشه واحد قرار می‌گیرد.
- ۲- مصرف انرژی فوق العاده پایین با بهره بالا: انرژی لازم برای چرخش اسپین حامل بار و جهت‌گیری آن به مراتب نسبت به تغییر جهت حرکت خود حامل بار به میزان قابل توجهی کمتر می‌باشد [۴۲].

---

<sup>۱</sup>Sender terminal  
<sup>۲</sup>Undisturbed information  
<sup>۳</sup>Reciver terminal

۳- ذخیره کننده‌های بر مبنای اسپین حامل بار در گروه حافظه‌های غیر فرار<sup>۱</sup> قرار می‌گیرند در حالیکه بر مبنای بار الکتریکی، با قطع ولتاژ اطلاعات از بین می‌شود.

۴- طول عمر اسپینی (همچون طول همدوسی و طول واهلش) خصوصاً در نیم‌رساناها نسبت به فلزات بالاست و اسپین‌ها همدوسی خود را در زمان‌ها و فواصل طولانی حفظ می‌کنند [۴۳-۴۴].

## ۲-۳ مواد تزریق کننده‌ی جریان قطبیده اسپینی

یکی از مهمترین مولفه‌ها در قطعات اسپین ترونیکی تزریق جریان بهینه اسپینی و کنترل آن در این قطعات می‌باشد. مطالعه تزریق اسپین، بیانگر توسعه روشهایی به منظور تزریق بهینه‌ی اسپین در یک ماده‌ی غیرمغناطیسی است. در این حوزه، در یک نکته که از چه مواد و روش‌هایی به عنوان منبعی از حامل‌های قطبیده اسپینی و این که چطور نحوه‌ی قطبش اسپینی را در مرز اتصال بین ماده‌ی تزریق کننده‌ی جریان قطبیده و غیرمغناطیسی حفظ کنیم حائز اهمیت است. پایه‌ترین موارد برای ترابرد اسپینی در قطعات اسپین ترونیکی، ایجاد یک جمعیت غیر تعادلی از حامل‌ها است که دارای گشتاور اسپینی غیر صفر در داخل قطعات و کنترل این جریان قطبیده اسپینی توسط ولتاژ گیت [۴۵] یا میدان مغناطیسی موضعی و در نهایت آشکارسازی آن می‌باشد. ایجاد کردن این چنین شرایط غیر تعادلی از جریان، قطبش اسپینی غیر صفر، به صورت معروف به تزریق اسپین می‌باشد. روش‌های متنوعی به منظور ایجاد کردن این جمعیت غیرتعادلی از اسپین‌ها، از قبیل روش‌های اپتیکی و پالس لیزری<sup>۲</sup>، اعمال میدان خارجی مغناطیسی و الکتریکی وجود دارند [۴۶ و ۴۷].

---

<sup>۱</sup>Non-volatile memory

<sup>۲</sup>Laser pulse

## ۲-۳-۱ فرومغناطیس‌ها

مواد فرومغناطیس دارای چگالی حالت‌های (DOS) نامتقارن برای اسپین‌های بالا و اسپین‌های پایین در اطراف تراز فرمی می‌باشند. با توجه به روابط زیر میزان مغناطش (M) و میزان قطبش (P) فرومغناطیس‌ها محاسبه می‌شود:

$$M \propto n_{\uparrow}(E_F) - n_{\downarrow}(E_F) \quad (2-1)$$

$$P = \frac{n_{\uparrow}(E_F) - n_{\downarrow}(E_F)}{n_{\uparrow}(E_F) + n_{\downarrow}(E_F)} \quad (2-2)$$

که در روابط فوق  $n_{\uparrow}(E_F)$  چگالی حالت‌های الکترون‌های اسپین بالا،  $n_{\downarrow}(E_F)$  چگالی حالت‌های الکترون‌های اسپین پایین در تراز فرمی می‌باشند.

در این قسمت به معرفی ویژگی‌های سه گروه از فرومغناطیس‌ها می‌پردازیم که هر کدام دارای معایب و مزایای خاص خود می‌باشند.

۱- فرومغناطیس‌های فلزی

۲- فرومغناطیس‌های نیم‌رسانا

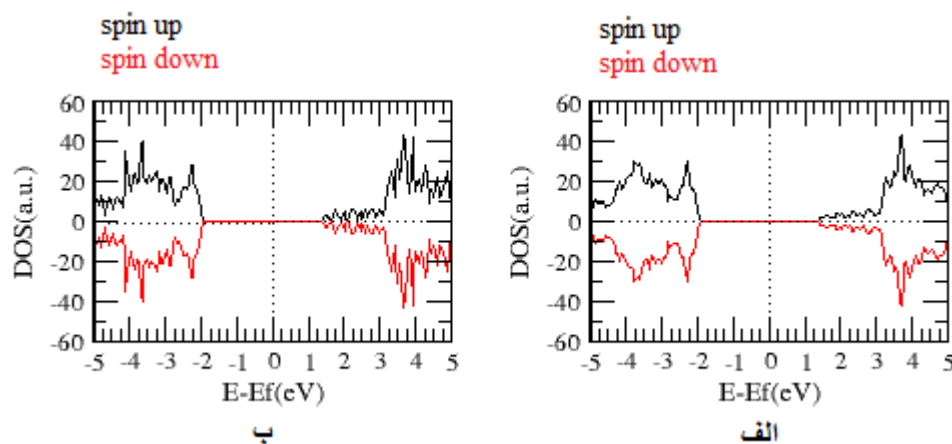
۳- فرومغناطیس‌های نیم‌فلزی

از معایب فرومغناطیس‌های فلزی عدم تطابق ساختار نواری در محل اتصال با نیم‌رسانا می‌باشد که در واقع این عیب، تزریق بهینه اسپین از ماده فرومغناطیس به درون نیم‌رسانا را با مشکل مواجه می‌کند. اما در واقع قطبش اسپینی این دسته از مواد نسبت به فرومغناطیس‌های نیم‌فلزی<sup>۱</sup> در اطراف تراز فرمی پایین‌تر است و از مزایای این گروه می‌توان به دمای کوری  $T_C$  بالای آن‌ها اشاره کرد. از معایب

---

<sup>۱</sup>Half metal

فرومغناطیس‌های نیم‌رسانا دمای کوری پایین آن‌ها نسبت به گروه فلزی و نیم‌فلزی می‌باشد. از مزایای آن‌ها می‌توان به سازگاری با صنعت نیم‌رسانا به منظور پتانسیل بالا و کاربردی که در حوزه اسپین‌ترونیک نیم‌رساناها می‌باشد، اشاره کرد. از مزایای فرومغناطیس‌های نیم‌فلزی، دمای کوری بالا و قطبش اسپینی ۱۰۰ درصد در تراز فرمی آن‌ها می‌توان اشاره کرد. در شکل ۱-۲ نمونه‌ای از چگالی حالت متقارن را نشان می‌دهد که با توجه به متقار بودن اسپین بالا و اسپین پایین ساختاری کاملاً غیر مغناطیسی نشان می‌دهد.



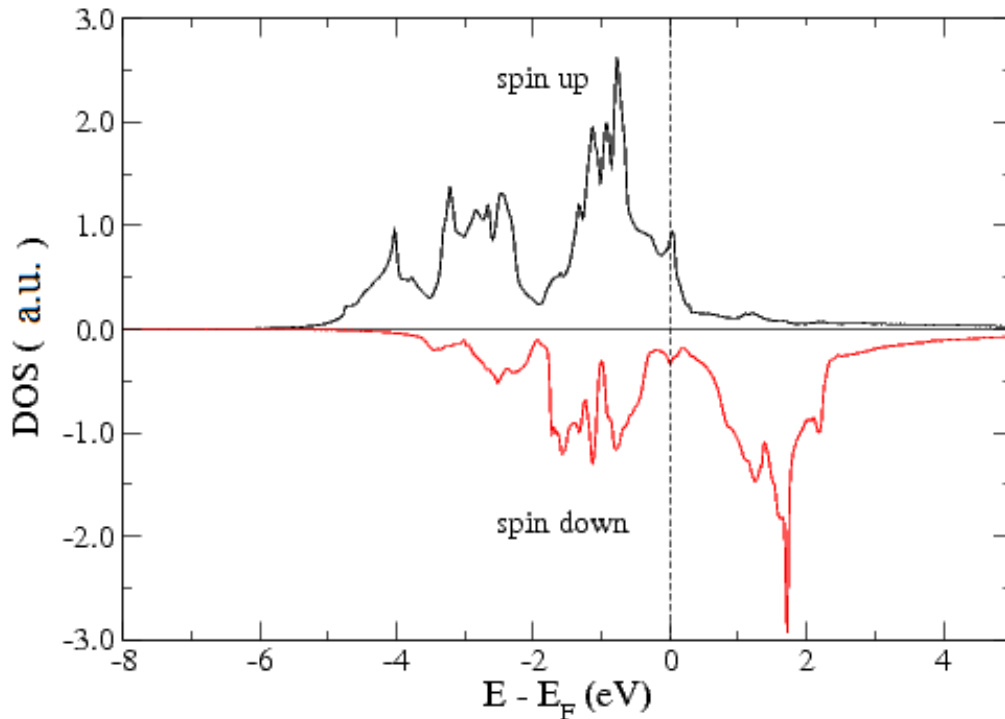
شکل ۱-۲: نمودار چگالی حالت به ازای هر دو حالت اسپین بالا و پایین در دو ساختار خالص الف) دسته‌صندلی AIN (ب) زیگزاگ در تراز فرمی شاهد چگالی حالت صفر و کاملاً متقارن

## ۲-۳-۲ فرومغناطیس‌های فلزی<sup>۱</sup> (TM)

این گروه از فرومغناطیس‌ها جز اولین دسته از فرومغناطیس‌های شناخته شده می‌باشند که از مهمترین این دسته از فرومغناطیس‌ها می‌توان به Fe، Co و Ni اشاره کرد. چگالی حالت‌ها در تراز فرمی به ازای دو حالت اسپینی اکثریت<sup>۲</sup> و اقلیت<sup>۳</sup> مقداری غیر صفر می‌باشد. که نشان دهنده رفتار فلزی آن‌ها می‌باشد.

<sup>۱</sup>Transition metal  
<sup>۲</sup>Majority spin  
<sup>۳</sup>Minority spin

وجود عدم تقارن در چگالی حالت‌های اسپین بالا و پایین در این دسته از مواد در اطراف تراز فرمی، به این عناصر خاصیت مغناطیسی با قطبش اسپینی غیر صفر داده است. در شکل ۲-۲ نمونه‌ای از نمودار چگالی حالت فرومغناطیس فلزی را نشان می‌دهد.



شکل ۲-۲: نمودار چگالی حالت اسپین بالا و پایین در تراز فرمی، شاهد عدم تقارن چگالی حالت‌ها و غیر صفر بودن آن هستیم [۴۸].

### ۲-۳-۳ نیم‌رساناهای رقیق شده مغناطیسی (DMS<sup>۱</sup>)

زمانی که تعدادی از اتم‌های مغناطیسی جایگزین یون‌های نیم‌رسانای غیر مغناطیسی شوند، اسپین اتمی این ساختارهای آرایش شده مغناطیسی<sup>۲</sup> با برهم‌کنشی که با حامل‌های داخل شبکه انجام می‌دهند، یک خاصیت و نظم مغناطیسی در ماده به وجود می‌آید. در نتیجه ماده هم خاصیت نیم‌رسانایی و هم خاصیت مغناطیسی پیدا می‌کند که به این دسته از مواد نیم‌رسانای رقیق شده مغناطیسی گفته می‌شود.

<sup>۱</sup> Diluted Magnetic Semiconductor

<sup>۲</sup> Magnetic dopant

DMSها هم از جنبه نظری و هم از جنبه فناوری حائز اهمیت می‌باشند. بر خلاف فلزات، نیم‌رساناها دارای خواصی همچون گاف نواری می‌باشند، که می‌توان در آنها کنترل بیشتری روی حامل‌های بار داشت. تلاش‌های قابل ملاحظه‌ای به منظور توسعه‌ی کاندیداهای متنوع DMSها، برای پی بردن به منشاء مغناطیسی شدن در این مواد، از سال ۱۹۸۰ آغاز شد. اولین مطالعات روی ترکیبات گروه (II-VI) که توسط عناصر واسطه‌ی فلزی آلائیده شده بود [۴۹] انجام شد.

## ۲-۴ مدل‌های نظری برای توصیف فرومغناطیس در DMSها

در این پژوهش رفتار مغناطیسی نانوصفحات نیم‌رسانای AIN آرایش یافته با عناصر واسطه بررسی می‌شود. در این بخش با توجه به مشخص نبودن کامل مکانیزم‌های رفتار فرومغناطیسی در نیم‌رساناهای مغناطیسی، به معرفی مهمترین مدل‌ها و مکانیزم‌های برهم‌کنش ارائه شده در این حوزه پرداخته می‌شود. به دلیل اینکه رفتار مغناطیسی شدن در مواد مرتبط به برهم‌کنش اسپین‌ها و مدل‌های تبدالی می‌باشد، ابتدا به صورت کلی تعریفی از برهم‌کنش‌های تبدالی<sup>۱</sup> ارائه شده و سپس به توصیف مکانیزم‌های متفاوت برهم‌کنش‌های تبدالی می‌پردازیم. در جامدات، اوربیتال‌های الکترونی اتم‌های همسایه با یکدیگر هم‌پوشانی می‌کنند که از همبستگی الکترونی<sup>۲</sup> ناشی می‌شود. این ویژگی برهم‌کنش‌های تبدالی داخل اتمی است که انرژی کل بلور را وابسته به آرایش نسبی اسپین‌های جایگزیده اتم‌های همسایه می‌کند. بزرگترین برهم‌کنش مغناطیسی در جامدات ( $\cong 1 eV$ ) برهم‌کنش تبدالی می‌باشد که مسئول نظم‌های اسپینی موازی (فرومغناطیس) یا پاد موازی (آنتی‌فرومغناطیس) می‌باشد. برهم‌کنش‌های تبدالی بسته به نوع ماده و سیستم مورد نظر می‌تواند به مکانیزم‌های متفاوت ایجاد شود.

---

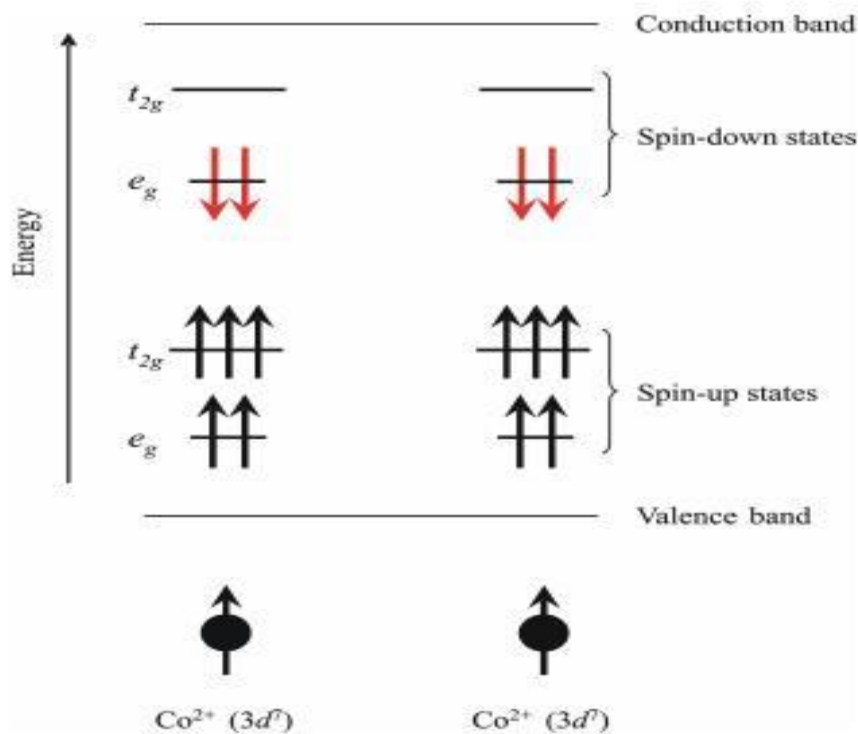
<sup>۱</sup>Exchange interactions  
<sup>۲</sup>Electron correlation

## ۲-۴-۱ مدل تبادلی دوگانه<sup>۱</sup>

ساتو و کاتایاما- یوشیدا [۵۱ و ۵۰]. با انجام محاسبات الکترونی بر اساس رهیافت اصول اولیه ابتدا به ساکن<sup>۲</sup> برای آرایش نوع n در اکسید (ZnO) پیشنهاد افزایش دمای کوری در حضور نمونه‌های آرایش یافته Fe، Co، Ni را دادند. در این مدل، حالت فرومغناطیسی در اکسید روی آرایش یافته با عناصر واسطه فلزی بر اساس برهم‌کنش تبادلی دوگانه که اولین بار توسط زنر<sup>۳</sup> به منظور توصیف مشاهدات تجربی رفتار فرومغناطیسی در مواد منگنایت<sup>۴</sup> ارائه شد [۵۴]، توضیح داده شد. برهم‌کنش تبادلی دوگانه توسط پرش<sup>۵</sup> (جهش) الکترون‌ها بین دو یون همسایه عناصر واسطه (TM) توضیح داده می‌شود. DMSها، در در ترازهای ۳d یون‌های عناصر واسطه توسط میدان بلوری<sup>۶</sup>، به ترازهای دوگانه ( $e_g$ ) با انرژی پایین‌تر و ترازهای سه‌گانه ( $t_{2g}$ ) با انرژی بالاتر شکافته می‌شوند. حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین نیز توسط شکافتگی تبادلی<sup>۷</sup>، شکافته می‌شود. در ZnO آرایش یافته با Co، حالت‌های ۳d اسپین بالای Co نسبت به حالت‌های اسپین پایین، در انرژی پایین‌تری قرار می‌گیرند و به شدت با حالت‌های ۲P اکسیژن اطراف خود هیبرید (ترکیب) می‌شوند [۵۳-۵۴]. از طرفی دیگر، حالت‌های اسپین پایین یون‌های Co، نزدیک نوار رسانش ماده ZnO میزبان قرار می‌گیرند. اگر گشتاور مغناطیسی یون‌های همسایه دارای آرایش موازی باشند، الکترون‌های اوربیتال‌های بخشی پر ۳d یون‌های Co اجازه دارند از یک یون به یون دیگر به منظور پایدارتر شدن حالت پایه فرومغناطیسی پرش کنند (شکل ۲-۳).

---

<sup>۱</sup>Doube exchanged  
<sup>۲</sup>First Principles ab-initio  
<sup>۳</sup>Zener  
<sup>۴</sup>Manganite materials  
<sup>۵</sup>Hopping  
<sup>۶</sup>Crystal field  
<sup>۷</sup>Exchange Splitting



شکل ۲-۳: جفت شدگی فرومغناطیسی، بین دو یون  $Co^{2+}(3d^7)$  توسط مکانیزم برهم‌کنشی تبادلی دوگانه

## ۲-۴-۲ مدل ابر تبادلی زنی<sup>۱</sup>

نظریه‌ای که توسط زنی مطرح شد [۵۵-۵۶] نشان می‌دهد که برهم‌کنش ابر تبادلی مستقیم<sup>۲</sup> [۵۷]، بین لایه d نیمه پر الکترون‌های یون‌های کاتیونی TM و اوربیتال‌های P کاملاً پر آنیون‌های اطراف آن، به صورت آنتی‌فرومغناطیس (شکل ۲-۴ الف) می‌باشد. به دلیل این که الکترون‌های لایه‌ی d دو اتم TM مجاور هم، تراز P مشابه را پر می‌کنند، بر طبق اصل طرد پائولی<sup>۳</sup>، اسپین آن‌ها باید در جهت خلاف هم قرار گیرد که این جفت شدگی آنتی‌فرومغناطیسی<sup>۴</sup> بین نزدیکترین کاتیون‌های TM همسایه، توسط آنیون اشتراکی می‌شود. از طرفی دیگر برهم‌کنش غیرمستقیم ابر تبادلی<sup>۵</sup> بین الکترون‌های لایه‌ی جایگزیده d کاتیون‌های TM، به صورت واسطه‌گری حامل‌های نواری غیر جایگزیده، تمایل به نظم

<sup>۱</sup>Superexchange Zener model

<sup>۲</sup>Direct superexchange

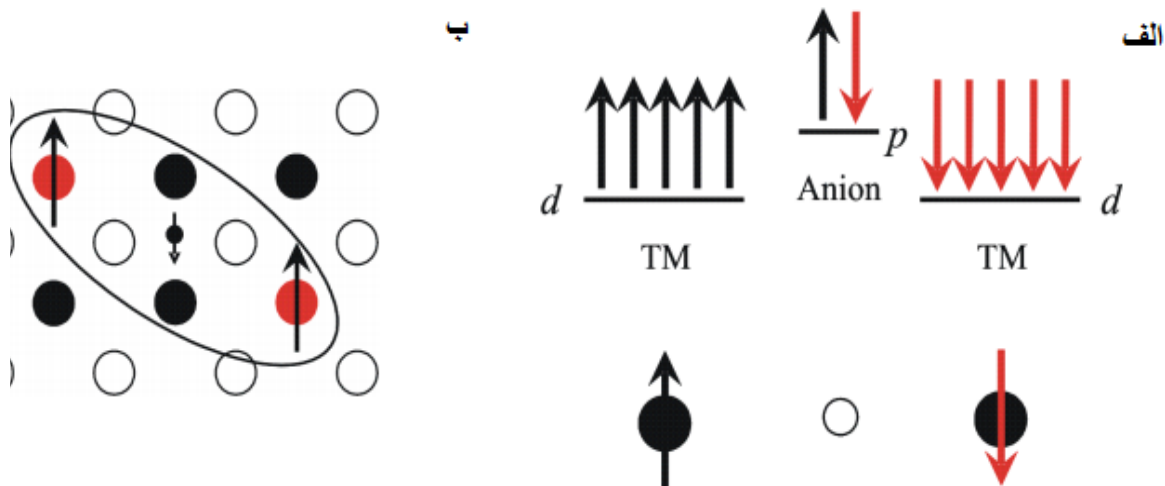
<sup>۳</sup>Pauli exclusion principle

<sup>۴</sup>Antiferromagnetic Coupling

<sup>۵</sup>Indirect superexchange



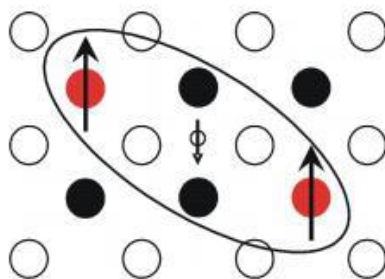
لایه‌های d نیمه پر TM به صورت جفت‌شدگی فرومغناطیس دارد (شکل ۲-۴ ب). در مدل زنر رفتار فرومغناطیسی فقط زمانی امکان دارد که برهم‌کنش ابر تبادلی غیرمستقیم، بر برهم‌کنش ابر تبادلی مستقیم غالب باشد.



شکل ۲-۴: الف) برهم‌کنش ابر تبادلی مستقیم: جفت‌شدگی دو یون TM مجاور هم به صورت آنتی‌فرومغناطیس توسط یک آنیون (یون مثبت) اشتراکی ب) برهم‌کنش ابر تبادلی غیرمستقیم: جفت‌شدگی فرومغناطیس اسپین‌های جایگزین بواسطه‌ی الکترون‌های رسانش

### ۲-۴-۳ مدل میدان میانگین<sup>۱</sup>

در مدل میدان میانگین، برهم‌کنش بین دو اتم جایگزیده Mn بواسطه‌ی حفره‌های آزاد در ماده، باعث آرایش فرومغناطیس بین اتم‌های Mn می‌شود. به دلیل احتمال برهم‌کنش مستقیم ابر تبادلی بین دو اتم Mn، همیشه بین برهم‌کنش فرومغناطیس و آنتی‌فرومغناطیس رقابتی وجود دارد (شکل ۲-۵).

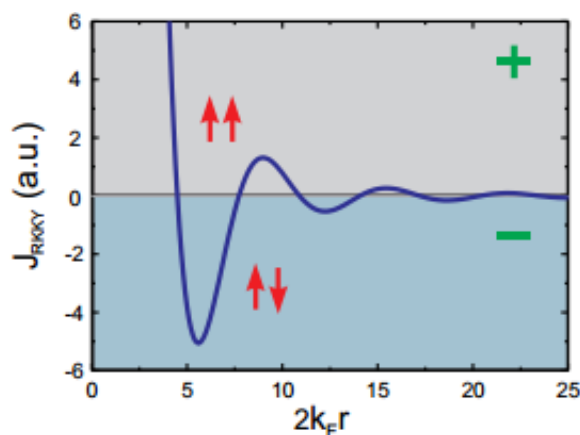


شکل ۲-۵: مدل میدان میانگین: جفت‌شدگی فرومغناطیس اسپین‌های جایگزیده Mn بواسطه‌ی حفره‌های آزاد

<sup>۱</sup>Mean field model

## ۲-۴-۴ مدل RKKY

مدل RKKY (رودرمن-کیتل-کاسویا-یوشیدا)<sup>۱</sup>[۵۸] توصیف کننده برهم کنش مغناطیسی، بین یک یون مغناطیسی جایگزیده با الکترون‌های غیر جایگزیده نوار رسانش می‌باشد. به دلیل این برهم کنش، الکترون‌های رسانش نزدیک یون مغناطیسی، مغناطیده می‌شوند و به عنوان یک میدان موثر به منظور قطبیده کردن دیگر یون‌های مغناطیسی اطرافش، با یک رفتار قطبشی که به صورت نوسانی (شکل ۲-۶) انتشار می‌یابد، تاثیر می‌گذارد. این رفتار نوسانی بسته به فاصله‌ی جدایی بین یون‌های مغناطیسی، به صورت جفت‌شدگی تبادلی فرومغناطیس یا آنتی فرومغناطیس نمایان می‌شود. مدل RKKY یک مدل تبادلی غیر مستقیم می‌باشد و زمانی که در ماده میزبان شاهد حضور تمرکز بالای از حامل‌های غیر جایگزیده همچون فلزات هستیم، این مدل بهره‌وری لازم را دارد.



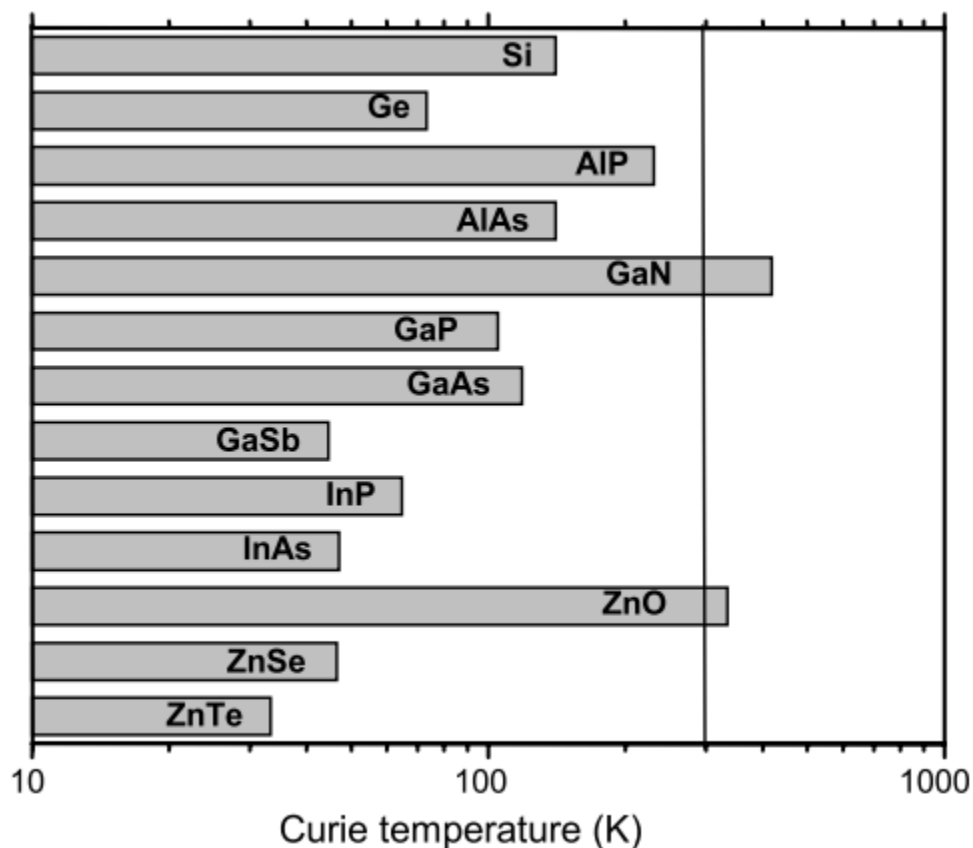
شکل ۲-۶: انرژی تبادلی RKKY و وابستگی آن به فاصله‌ی بین اتمی  $r$ ، که رفتاری نوسانی دارد و باعث جفت‌شدگی به صورت فرومغناطیس یا آنتی فرومغناطیس می‌شود [۵۹]

## ۲-۴-۵ مدل میدان میانگین زئر

مدل میدان میانگین زئر که توسط دیتل و همکارانش [۶۰] مطرح شد، بر اساس برهم کنش ابر تبادلی غیر مستقیم زئر می‌باشد. در این نظریه، حامل‌های حفره‌ی غیر جایگزیده با ایجاد کردن یک برهم کنش شبه RKKY بین یون‌های TM جایگزیده، باعث جفت‌شدگی فرومغناطیس بین آن‌ها می‌شود. در

<sup>۱</sup>Rudrman-Kittel-Ka

مقایسه با برهم‌کنش RKKY، مدل میدان میانگین زئر، ساختار نواری پیچیده‌ی نوار ظرفیت نیم‌رساناهای فرومغناطیس زینک-بلند (ZB) را در نظر گرفت. با استفاده از این مدل، دیتل و همکارانش مقدار  $T_C$  مشاهده شده در ساختارهای (Ga,Mn)As و (Zn,Mn)Te به صورت تجربی را با موفقیت توضیح دادند. مهم‌تر از آن رفتار فرومغناطیسی با دمادی کوری بالاتر از دمای اتاق برای الایش نوع p در مواد GaN و ZnO با آلاینده‌ی Mn توسط این مدل پیش‌بینی شد (شکل ۲-۱۷). اگر چه این مدل غلبه‌ی تبادل حفره را بیان می‌کند، پیش‌بینی‌های نظریه ساتو و همکارانش [۵۱] نشان دادند که رفتار فرومغناطیسی با دمای کوری بالا، می‌تواند در ZnO رفتار نوع n هم ایجاد شود.



شکل ۲-۷: دمای کوری محاسبه شده برای نیم‌رساناهای متفاوت نوع p آلیش یافته با ۵ درصد Mn، با تمرکز حامل حفره  $10^{20}$  ۳/۵ بر  $cm^{-3}$  [۶۱]



## فصل سوم

روش محاسبات:

نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT)

## ۳-۱ مقدمه

نظریه های مکانیک کلاسیک و کوانتومی دو نظریه اصلی مورد استفاده برای توصیف اکثر قریب به اتفاق سیستم های فیزیکی هستند اما محدودیت اصلی شان این است که تنها مساله های تک ذره ای و دو ذره ای در این چارچوب ها دارای حل تحلیلی دقیق هستند و برای بررسی سیستم هایی با بیش از دو ذره در حالت کلی باید دست به دامان نظریه ها و تقریب های توسعه یافته و روش های محاسباتی شد. راهکارهای متعدد و مختلفی برای توصیف محاسباتی سیستم های بس ذره ای توسعه پیدا کرده است که هر یک، بسته به اهداف مسائل و خواص مورد مطالعه از تقریب ها و مدل های نظری مختلفی استفاده می کند. یکی از نظریه های مهم و پایه برای بسیاری از محاسبات سیستم های بس ذره ای نظیر مولکول و بلورها، نظریه ی تابعی چگالی<sup>۱</sup> (DFT) است. در این نظریه، با معرفی تابعی جهان شمول انرژی وردش گیری از آن، ویژگی های الکترونی ماده (در اینجا چگالی الکترون) بدست می آید [۶۲].

استفاده از این نظریه به همراه رهیافت کوهن-شم<sup>۲</sup> منجر به یک توصیف تک ذره ای از سیستم های بس ذره ای می شود که تاثیر بسزایی در ساده سازی محاسبات آن ها دارد و به همین امروزه مبنای اکثر محاسبات کوانتومی بلورها که جز مسائل اساسی فیزیک ماده چگال هستند به شمار می رود. در این فصل ابتدا مروری کوتاه بر مفاهیم اولیه نظریه تابع چگالی داریم و سپس با معرفی رهیافت کوهن-شم هامیلتونی تک ذره ای مربوطه را استخراج می کنیم.

## ۳-۲ نظریه تابعی چگالی

برای محاسبه خواص مواد بر اساس توصیف الکترونی و اتمی، به یک چارچوب نظری نیاز داریم تا آنها را در قالب مناسبی نشان دهیم. نظریه تابعی چگالی چنین چارچوبی را فراهم کرده است. استفاده

---

<sup>۱</sup>Density functional theory  
<sup>۲</sup>Kohn-Sham scheme

از این نظریه در فیزیک ماده چگال و علوم محاسباتی نانو در پیشگویی مواد جدید و برآورد خواص آنها بسیار تاثیرگذار بوده است.

هدف اصلی DFT، معرفی تعداد پارامترهای مورد نیاز برای توصیف سیستم های چند ذره ای<sup>۱</sup> است. در چنین سیستم هایی که ممکن است در هر جای آن ۲ تا ۱۰<sup>۲۳</sup> ذره که هر کدام با سه مختصه فضایی و یا شاید یک مختصه اسپینی توصیف می شود. بدیهی است حل معادلات چنین دستگاه هایی نا امید کننده یا غیر ممکن باشد. علاوه بر آن از آنجا که در مکانیک کوانتومی، ذرات تمیز ناپذیرند که آیا فرمیون اند یا بوزون، پس تلاش ما برای تعیین مکان و درک یک ذره منفرد، کاملاً بیهوده است

برای درک خواص حالت پایه الکترونی سامانه، از روش محاسبات اولیه بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT) بهره گرفته ایم، گرچه کارایی نظریه تابعی چگالی شناخته شده است. بنابراین این بخش را با خلاصه ای از بعضی ویژگی های مهم و البته شناخته شده مربوط به روش های (DFT) مورد استفاده در کدهای کامپیوتری، برای سامانه مورد نظر دنبال می کنیم.

### ۳-۳ مسئله بس-ذره ای

یکی از اهداف فیزیک ماده چگال، مطالعه نظری خواص الکترونی مواد است. یک سیستم بس-ذره ای از تعداد زیادی (بیش از سه ذره) ذره ی برهم کنش کننده تشکیل شده است. بررسی مجموعه ای از اتم ها، مولکولها، جامدات، گازها و مایعات و غیره را شکل می دهند که تشکیل شده از الکترون ها و هسته ها می باشند. توسط مکانیک کوانتومی می توان یک سیستم برهم کنشی از الکترون ها و هسته ها را توسط معادله شرودینگر توصیف کرد:

$$E\Psi = H\Psi \quad (۱-۳)$$

---

<sup>۱</sup>Many body system

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

$$H_{tot} = \sum_i \frac{P_i^2}{2m_i} + \sum_I \frac{P_I^2}{2M_I} + \sum_i V_{nucl}(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{z_I z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \quad (2-3)$$

در معادله ۲-۳ بخش اول و دوم انرژی های جنبشی الکترون ها و هسته ها و سه بخش آخر به ترتیب بر هم کنش های بین الکترون الکترون، الکترون هسته، و هسته هسته می باشند.  $\hbar$  ثابت پلانک M و m به ترتیب جرمهای الکترون و هسته،  $z_I$  عدد اتمی I امین اتم، e بار الکترون،  $r_i$  و  $R_I$ ، موقعیت I امین الکترون و I امین هسته می باشند.

حل معادله بس ذره ای بسیار پیچیده است. با توجه به تعداد زیاد بر هم کنش های موجود در این مسئله حل کردن آن حتی امروزه برای قویترین ابر کامپیوترها، بسیار مشکل است. بنابراین محققان برای پیدا کردن بعضی از تقریب ها که به سادگی این عمل را انجام دهد، تلاش های زیادی را انجام داده اند. اولین آن ها، توسط بورن و اپنهاইمر<sup>۱</sup> در سال ۱۹۲۷ بیان شد [۶۲].

این تقریب بیان می کند هسته ها بسیار سنگین تر از الکترون ها هستند و بسیار کندتر از الکترون ها حرکت می کنند. در نتیجه می توان حرکت هسته ها و الکترون ها را جدا کرد. فرض بر این است که موقعیت اتم ها ثابت شده اند در حالی که الکترون ها به دو قسمت تابع موج الکترونی و یونی جداسازی شود. در نتیجه معادله شرودینگر برای قسمت الکترونی بصورت زیر نوشته می شود:

$$\hat{H}_e(\mathbf{r}, \mathbf{R})\Psi_e = E_e\Psi_e(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \quad (3-3)$$

<sup>۱</sup>Born Oppenheimer



که عملگر هامیلتونی الکترونی، توسط معادله زیر بیان می‌شود:

$$\hat{H}_e = \sum_{i=1}^{N_e} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + V_{ext} \quad (3-4)$$

$V_{ext}$  پتانسیلی است که توسط هسته‌ها روی الکترون‌ها عمل می‌کند. توجه شود که برهم‌کنش بین هسته‌ها به عنوان یک پارامتر وارد می‌شود. اگرچه تعداد درجات آزادی سیستم توسط تقریب بورن-اوپنهایمر می‌تواند کاهش یابد اما حل مسئله برهم‌کنشی الکترون-الکترون همچنان مشکل است.

بعلاوه تابع موج الکترونی وابسته به مختصات تمام الکترون‌ها است. تعداد الکترون‌ها در مقایسه با تعداد هسته‌ها بسیار بیشتر می‌باشند. همانطور که در ادامه نشان داده خواهد شد، استفاده از توصیف نظریه تابعی چگالی بجای تابع موج‌های بس ذره‌ای بسیار کاربردی‌تر می‌باشد. نظریه تابعی چگالی به محاسبات کمتری نیازمند بوده و توصیف خوبی برای خواص الکترونی حالت پایه سیستم ارائه می‌دهد.

### ۳-۳-۱ نظریه توماس-فرمی

یک رویکرد متفاوت توماس فرمی<sup>۱</sup> در سال (۱۹۲۷-۱۹۲۸) ارائه شد [۶۳]، بطوریکه مسئله بس ذره‌ای در قالب چارچوب نیمه کلاسیکی قرار می‌گیرد و درجات آزادی سامانه تنها در چگالی الکترونی  $n(r)$  متمرکز شده است. توسعه این روش توسط دیراک<sup>۲</sup> در سال ۱۹۳۰ [۶۴]. که در آن برهم‌کنش تبدیلی بین الکترون‌ها برحسب تابعی از چگالی در نظر گرفته شده، و همچنین بوسیله اسلیتر<sup>۳</sup> که اثرات هم بستگی را در نظر گرفت، بیان شد. این‌ها پایه و اساس توسعه نظریه تابعی چگالی بودند.

<sup>۱</sup>Thomas and Fermi

<sup>۲</sup>Dirac

<sup>۳</sup>Slater

## ۴-۳ شمای کلی نظریه تابع چگالی (DFT)

گرچه در مدل توماس فرمی امکان اصلاح (همانند اثرات همبستگی و تبادلی یا گرادیان چگالی با بسط دیراک وجود دارد و می‌تواند منجر به نتایج واقعا خوبی شود، آن را نمی‌توان بعنوان اولین روش ساده نظریه تابعی چگالی در نظر گرفت. اولین پایه علمی نظریه تابعی چگالی در سال ۱۹۶۴ بوسیله هوهنبرگ و کوهن که منجر به دریافت جایزه نوبل شیمی در سال ۱۹۹۸ به کوهن شده بود معرفی شد [۶۵]. آن‌ها نشان دادند که همه خواص الکترونی سامانه، در پیکربندی حالت پایه غیر تبهگن‌اش، بطور کامل توسط چگالی الکترونی سامانه  $n(r)$  مشخص می‌شود: علاوه بر این انرژی و پتانسیل را می‌توان تنها بعنوان تابعی از چگالی الکترون بیان کرد. یک سال بعد، در سال ۱۹۶۵، کوهن-شم، یک طرح خودسازگار به منظور نگاشت مسئله برهم‌کنشی بس ذره‌ای به یک مجموعه از معادلات تک-ذره غیر بر هم کنشی، فرمولبندی دوباره روش میدان میانگین با یک اصل وردشی که تنها بر اساس پایه‌ای از چگالی الکترون می‌باشد، ارائه دادند [۶۶].

بنابراین اولین نقطه عطف نظریه تابعی چگالی، می‌تواند بر اساس نظریه هوهنبرگ-کوهن و معادلات کوهن-شم، در نظر گرفته شود.

## ۴-۳-۱ نظریه هوهنبرگ-کوهن

هدف اصلی نظریه تابعی چگالی، یک سیستم برهم‌کنشی بر اساس چگالی الکترونی بجای توابع موج بین ذره‌ای می‌باشد. نظریه تابعی چگالی بر اساس دو نظریه بنیادی، توسط هوهنبرگ و کوهن در سال ۱۹۶۴ پایه ریزی شد [۶۷، ۶۸]. راهبرد مهم ویژه برای حل مسئله عملی (DFT) توسط کوهن و شم معرفی شده است [۶۹].

نظریه اول بیان می‌کند که انرژی حالت پایه یک سیستم برهم‌کنشی از الکترون‌ها، تابعی یکتا<sup>۱</sup> از چگالی بار الکترون است. به عبارت دیگر یک ارتباط یک به یک بین تابع موج حالت پایه و چگالی الکترونی

---

<sup>۱</sup>Unique functional

حالت پایه وجود دارد. نظریه اول هوهنبرگ-کوهن فقط اثباتی است بر وجود تابعی از چگالی الکترونی اگر چه 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<sup>۱</sup> تبعیت می کند. به عبارت دیگر برای هر سیستم بس الکترونی یک تابعی انرژی جهان شمول<sup>۲</sup> 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 [۷۰]. برطبق این نظریه مقدار چشم داشتی هامیلتونی در معادله (۳-۴) می تواند به صورت زیر بیان شود:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = E[n(r)] \quad (۳-۵)$$

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

$$\left. \frac{\delta E[n(r)]}{\delta n} \right|_{n=n_0} = 0 \quad (۳-۶)$$

از معادله ۳-۶ چگالی الکترونی که به کمینه انرژی مربوط می شود، چگالی حالت پایه  $n_0(r)$  می باشد. بر طبق نظریه اول، انرژی حالت پایه می تواند به صورت زیر بیان شود:

$$E_0 = \langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle = E[n_0(r)] \quad (۳-۷)$$

---

<sup>۱</sup>Variational principle

<sup>۲</sup>Universal functional energy

### ۳-۴-۲ معادلات کوهن-شم (KS)

راه حلی برای کاهش مسئله بس ذره‌ای حقیقی، به یک مسئله‌ی تک الکترونی کمکی توسط کوهن و شم مطرح شد. در سال ۱۹۶۵ کوهن و شم به منظور کاربردی کردن نظریه تابعی چگالی یک سیستم را برای حل مسئله بس الکترونی مطرح کردند [۷۱].

الکترون‌های برهم‌کنشی، جایگزین غیر برهم‌کنشی که تحت پتانسیل موثر<sup>۱</sup> حرکت می‌کنند، شد انرژی تابعی کل در معادله (۳-۵) می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$E[n(r)] = T_o[n(r)] \quad (۳-۸)$$

$$+ \frac{1}{2} \iint \frac{n(r)n(r')}{r-r'} drdr' + \int V_{ext}(r)n(r)dr + E_{xc}[n(r)]$$

در معادله (۳-۸)  $T_o[n(r)]$  تابعی انرژی جنبشی سیستم الکترونی غیر برهم‌کنشی، بخش دوم انرژی الکترواستاتیکی یا انرژی هاتری و بخش سوم انرژی خارجی ناشی از هسته‌ها می‌باشند و بخش آخر همه‌ی باقی مانده آنچه که تصحیح کننده انرژی است، که انرژی تبادلی و همبستگی<sup>۲</sup> نامیده می‌شود. با کمینه کردن معادله‌ی (۳-۸) نسبت به چگالی، معادلات تک ذره‌ای کوهن شم بدست می‌آید:

$$\left[ -\frac{V_i^2}{2} + V_{eff}(r) \right] \Psi_i(r) = \varepsilon_i \Psi_i(r) \quad (۳-۹)$$

$$V_{eff}(r) = V_{ext} + \int \frac{n(r')}{|r-r'|} dr' + \frac{\partial E_{xc}[n(r)]}{\delta n(r)} \quad (۳-۱۰)$$

<sup>۱</sup>Effective potential

<sup>۲</sup>Exchange and correlation energy

توجه شود که توابع موج کوهن-شم  $\Psi_i(r)$ ، هیچ معنی فیزیکی مستقیمی را نمی‌دهند. آن‌ها فقط توابع کمکی برای محاسبه چگالی الکترونی هستند. چگالی الکترونی می‌تواند توسط توابع موج کوهن-شم بدست آید.

$$n(r) = \sum_{i=1}^N |\Psi_i(r)|^2 \quad (11-3)$$

به منظور یافتن چگالی الکترونی حالت پایه، باید معادلات کوهن-شم به صورت خودسازگار توسط روش تکرار حل شوند.

۱- یک حدس اولیه چگالی الکترونی،  $n(r)$  تعریف می‌شوند.

۲- پتانسیل موثر،  $V_{ext}$ ، توسط چگالی الکترونی حدس زده شده، محاسبه می‌شود.

۳- معادلات کوهن-شم به منظور بدست آوردن تابع موج کوهن-شم،  $\Psi_i(r)$  حل می‌شود.

۴- چگالی الکترونی با استفاده از تابع موج کوهن-شم محاسبه می‌شود.

۵- چگالی الکترونی محاسبه شده، به عنوان چگالی اولیه برای مرحله بعد مورد استفاده قرار می‌گیرد تا

جائیکه چگالی الکترونی همگرا شود، سپس چگالی الکترونی حالت پایه بدست آورده و برای محاسبه

انرژی، نیروها، تنش‌ها و غیره مورد استفاده قرار می‌گیرد.

### ۳-۵ تقریب چگالی موضعی (LDA)

رویکرد کوهن شم نشان داد که چگونه مسئله را به یک مسئله تک الکترونی موثر تبدیل کنیم که البته نیاز است که تابعی تبادل-همبستگی  $E_{xc}[n(r)]$  مشخص باشد.

متأسفانه شکل دقیق تابعی تبادل-همبستگی به سادگی شناخته شده نیست، بنابراین باید از تقریب استفاده نمود. ساده‌ترین تقریب، تقریب چگالی موضعی (LDA) نامیده می‌شود. این تقریب برای پتانسیل تبادل-همبستگی توسط کوهن-شم در سال ۱۹۶۵ ارائه شد [۷۱].

که انرژی تبادل-همبستگی گاز الکترونی همگن بدست می‌آید. تابعی تبادل-همبستگی LDA به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$E_{xc}^{LDA}[n(r)] \cong \int n(r) \epsilon_{xc}^{homo}(n(r)) dr \quad (۱۲-۳)$$

که  $\epsilon_{xc}^{homo}$  انرژی همبستگی-تبادل گاز الکترونی همگن، با چگالی الکترونی  $n(r)$  می‌باشد. رابطه (۱۲-۳) را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$E_{xc} = \int n(r) [\epsilon_x^{homo}(n(r)) + \epsilon_c^{homo}(n(r))] dr \quad (۱۳-۳)$$

عبارت  $\epsilon_x^{homo}(n(r))$  به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\epsilon_x^{homo} = -\frac{3}{4} \left( \frac{6n(r)}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (۱۴-۳)$$

محاسبه عبارت  $\epsilon_c^{\text{homo}}(n(r))$  قدری مشکل تر از عبارت  $\epsilon_x^{\text{homo}}(n(r))$  است و محاسبه دقیق آن به روش مونت کارلو<sup>۱</sup> کوانتومی انجام می گیرد. تعمیم LDA برای سیستم های قطبیده اسپینی، تقریب چگالی اسپینی موضعی<sup>۲</sup> (LSDA) است که  $\epsilon_{xc}^{\pm}(r) = \epsilon_{xc}^{\pm}(n^+(r), n^-(r))$  می باشد [۷۱].

### ۳-۶ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)<sup>۳</sup>

تقریب پر استفاده ای دیگری که نسخه تعمیم یافته LDA محسوب می شود تقریب GGA می باشد که فرمولبندی متفاوتی از آن توسعه پیدا کرده است. پر استفاده ترین تابع های این تقریب، تابع پر دو-وونگ (۹۱PW) در سال ۱۹۹۲ و تابع پر دو-بورگ-انزوهرف (PBE) در سال ۱۹۹۶ با پارامترهای مختلف فرمولبندی شد.

در این پروژه از دومین تابع این تقریب بهره گرفته شده است. در تقریب GGA، انرژی تبادلی-همبستگی علاوه بر چگالی الکترون در هر نقطه به تغییرات چگالی در آن نقطه وابسته است. به همین ترتیب رابطه انرژی تبادلی به صورت زیر نوشته می شود:

$$E_{xc}^{GGA} = \int n(r) \epsilon_{xc}[n(r), |\nabla n(r)|] dr = n(r) \epsilon_{xc}^{\text{homo}}(n, |\nabla n|) dr \quad (۱۵-۳)$$

که در این رابطه عبارت  $F_{xc}$  یک تابع بدون بعد است که به صورت زیر نوشته می شود:

$$F_{xn}(n, |\nabla n|) = F_x(n, |\nabla n|) + F_c(n, |\nabla n|) \quad (۱۶-۳)$$

محاسبه  $F_c$  مشکل تر از  $F_x$  می باشد اگرچه نقش آن در عبارت بالا کمتر است. برای  $F_c$  تابع های مختلفی پیشنهاد شده است. اما تنها نام تابع های مربوط به  $F_x$  ذکر می شود که در بالا به دو مورد آن اشاره شد آن هم به علت اهمیت بیشتر  $F_x$  نسبت به  $F_c$  می باشد [۷۲]. برای سیستم های قطبیده اسپینی چگالی انرژی در این تقریب به صورت زیر است.

<sup>۱</sup>Quantum Monte Carlo

<sup>۲</sup>Local Spin Density Approximation

<sup>۳</sup>Generalized gradient approximation

$$\varepsilon_{xc}^{\pm}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{xc}^{\pm}(n^{+}(\mathbf{r}), n^{-}(\mathbf{r}), |\nabla_{\mathbf{n}}^{+}(\mathbf{r})|, |\nabla_{\mathbf{n}}^{-}(\mathbf{r})|) \quad (17-3)$$

### ۳-۷ روش‌های حل معادلات تک ذره‌ای کوهن-شم

کدهای زیادی وجود دارند که از روش DFT برای محاسبات ساختار الکترونی مواد استفاده می‌کنند [۷۳-۷۵]. تفاوت اساسی بین کدها در تقریب‌های به کار گرفته در آنها و عموماً مربوط به مجموعه پایه است. توابع موج کوهن-شم را بر اساس آن بسط داده می‌شود. این مجموعه پایه‌ها به سه گروه عمده تقسیم می‌شوند:

۱- روش پایه‌های غیر جایگزیده امواج تخت (PW): کدهایی نظیر VASP, QuantumEspresso و غیره بر این مبنا می‌باشد.

۲- روش پایه‌های جایگزیده: از جمله توابع Gaussian, Gqussian, مانند کد Gaussian و اوربیتال اتمی نظیر کد SIESTA و ...

۳- روش هیبریدی و ترکیبی کره‌های اتمی، نظیر اوربیتال مافین-تین خطی. این روش تلفیقی از دو روش بالا است که دو نوع پایه استفاده می‌کنند. کد محاسباتی WIEN2K بر این روش استوار است. که برای بدست آوردن نتایج دقیق، انتخاب یک پایه مناسب ضروری است.

همانطور که ذکر شد یکی از مجموعه‌های پایه‌های انتخابی ممکن، امواج تخت می‌باشد برای سیستم‌های دوره‌ای، مجموعه پایه‌های امواج تخت انتخابی مناسب به نظر می‌رسد.

### ۳-۷-۱ کد SIESTA

کد سیستا بر مبنای روش دوم، یعنی بسط تابع موج کوهن-شم بر مبنای ترکیب خطی از اوربیتال‌های جایگزیده اتمی و تقریب شبه پتانسیل برای توصیف الکترون‌های مغزی و هسته می‌باشد. که در اینجا به طور مختصر توصیفی از کد SIESTA را ارائه می‌دهیم.



### ۳-۷-۱-۱ مجموعه پایه جایگزیده اوربیتال اتمی

درکد SIESTA، برای حل معادله‌ی کوهن-شم از ترکیب خطی اوربیتال های اتمی جایگزیده به عنوان مجموعه پایه به منظور بسط، استفاده می‌شود. این اوربیتال‌های اتمی می‌توانند به صورت حاصل ضربی از یک بخش شعاعی در یک بخش هماهنگ کروی نوشته شوند:

$$\Phi_{lmn}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (3-18)$$

که  $R_{n,l}$  یک بخش شعاعی برای اوربیتال  $n$  و  $Y_{l,m}$  یک هماهنگ کروی حقیقی برای تکانه زاویه‌ای اوربیتالی  $L$  و عدد کوانتومی مغناطیسی  $m$  می‌باشد. تابع شعاعی فراتراز یک شعاع خاص  $r_c$  صفر می‌شود یعنی  $R_{n,l}(r_c) = 0$ . بر خلاف امواج تخت نتایج، دقیق برای سیستم داده شده بر مبنای اوربیتال‌های اتمی، وابسته به اندازه و شکل پایه‌هاست. اندازه‌ی تعداد پایه‌ها بر مبنای  $(\xi)$  چندگانه می‌باشد که می‌توان برای هر  $L, m$ ، تعداد اختیاری از توابع شعاعی بدون گره استفاده کرد که اوربیتال‌های ذاتی مرتبه بالاتر گفته می‌شود [۷۶]. هر اوربیتال ذاتی  $\xi$  مربوط به هماهنگ‌های کروی مشابه و مشترک با توابع شعاعی متفاوت می‌باشد. در اینجا به معرفی مجموعه اندازه پایه‌های متفاوت که در SIESTA موجود می‌باشد پرداخته می‌شود.

### ۳-۷-۱-۲ مجموعه پایه‌ها

انتخاب یک پایه‌ی مناسب برای به دست آوردن نتایج دقیق الزامی است. رایج‌ترین آن‌ها در سیستم‌های دوره‌ای و متناوب، امواج تخت است که هم یک انتخاب طبیعی است و هم مزایای متعددی نیز دارد از جمله، عدم وجود خطای بر هم نهی مجموعه‌ی پایه<sup>۱</sup>، دقت بالا با افزایش تعداد امواج، سازگاری با شرایط سیستم تناوبی و به کارگیری ساده آن‌ها، از طرفی امواج تخت در مرکز هسته واقع نشده اند بلکه در سرتاسر فضا پخش شده‌اند و در کل سلول بدون حضور هیچ باری تکثیر می‌شوند

---

<sup>۱</sup>Basis set superposition Error

بنابراین استفاده از مجموعه پایه‌ی امواج تخت برای محاسبات شبکه‌ای ساختار الکترونی در یک سیستم دوره‌ای بزرگ، حجم محاسبات را شدیداً افزایش می‌دهد بنابراین مدل بستگی قوی<sup>۱</sup> که اوربیتال‌های اتمی را به عنوان توابع پایه جایگزیده (LCAO) در نظر می‌گیرد انتخاب مناسبی است. اساس کار در SIESTA این است که توابع پایه می‌توانند به هر شکلی باشند، اما باید یک بسط شعاعی محدود و متناهی داشته باشند. پس اوربیتال‌های اتمی به صورت ترکیبی از توابع شعاعی و یک هماهنگ‌گرایی نوشته می‌شود:

$$\Phi_{lmn}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (۱۹-۳)$$

که  $R_{n,l}$  یک تابع شعاعی برای اوربیتال  $n$  و  $Y_{l,m}$  یک هماهنگ‌گرایی حقیقی برای تکانه زاویه‌ای اوربیتالی  $l$  و عدد کوانتومی مغناطیسی  $m$  می‌باشد. از طرفی چون تابع شعاعی در فراتر از شعاع خاص  $r_c$  صفر می‌شود پس شرط محدود بودن بسط توابع لحاظ می‌شود.

### ۳-۱-۷-۳ تعداد پایه‌ها

دقت نتایج در یک سیستم علاوه بر شکل، به تعداد پایه‌ها نیز وابسته است. تعداد پایه‌ها را می‌توان با استفاده از مجموعه‌ی پایه چندگانه زتا ( $\xi$ ) بسط داد. هر اوربیتال  $\xi$  به هماهنگ‌گرایی مشابهی مربوط می‌شود با این تفاوت که توابع شعاعی مختلفی دارند، یعنی به ازای توابع شعاعی ۱ و ۲ و ۳ به ترتیب زتای یگانه یا SZ و زتای دوگانه یا DZ و زتای سه گانه یا TZ هستند [۷۷].

اوربیتال‌های زتای یگانه<sup>۲</sup>، آرایش الکترون‌های لایه ظرفیت را پوشش می‌دهند که شامل پوسته‌های باز<sup>۳</sup> و گاه پوسته‌های بسته مانند لایه d در عناصر واسطه می‌شوند. و اوربیتال‌های  $\xi$  دوگانه<sup>۴</sup>، به دلیل

<sup>۲</sup>Strongly correlated model

<sup>۱</sup>Single zeta

<sup>۳</sup>Open shells

<sup>۴</sup>Double shells

شکافت مجموعه‌ی پایه‌ی Gaussian ساخته می‌شوند. علاوه بر این می‌توان برای تغییر شکل ناشی از تشکیل پیوند در مولکول‌ها یا بلورها، توابع قطبش<sup>۱</sup> را نیز در نظر گرفت. تابع یک تکانه زاویه‌ای<sup>۲</sup> دارند که یک واحد بالاتر از حداکثر فضای اشغال شده در اتم می‌باشد یعنی از اوربیتال های  $p$  می‌توان برای قطبی کردن اوربیتال‌های  $s$  و از اوربیتال‌های  $d$  می‌توان برای قطبی کردن اوربیتال‌های  $p$  استفاده نمود. اضافه کردن توابع پولاریزاسیون در پایه را با  $P$  نمایش می‌دهند. مثلاً  $DZP$  یعنی توابع پولاریزاسیون  $\xi$  دوگانه که معمولاً در محاسبات ساختاری سیستم‌ها نتایج با کیفیت‌تری را می‌دهد.

### ۳-۷-۱-۴ اوربیتال‌های زتای یگانه (SZ)

مجموعه پایه‌ی زتای یگانه (SZ)، آرایش الکترونی لایه ظرفیت را پوشش می‌دهد که محتوای همه پوسته‌های باز و در بعضی مواقع پوسته‌های بسته با انرژی بالا از قبیل لایه  $d$  در عناصر واسطه می‌باشد. این توابع پایه توسط حل معادله شعاعی شرودینگر برای اتم با پتانسیل محدود کننده بدست می‌آید.

### ۳-۷-۱-۵ اوربیتال‌های زتای دوگانه (DZ)

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

$$R_l^{2\xi}(r) = \begin{cases} r^{l(a_l - b_l r^2)} & \text{if } r < r_l^{split} \\ R_l^{1\xi}(r) & \text{if } r \geq r_l^{split} \end{cases} \quad (20-3)$$

<sup>۱</sup>Polarization function

<sup>۲</sup>Angular momentum

ثابت‌های  $b_l, a_l$  با استفاده از پیوستگی توابع موج و مشتقات آن‌ها در  $r_l^{split}$  تعیین می‌شوند. تابع شعاعی دومین زتا  $\xi$  یعنی  $R_l^{2\xi}$  در  $r \geq r_l^{split}$  دنباله‌ای مشابه اولین زتا  $\xi$  دارد. شعاع شکافت  $r_l^{split}$  توسط پارامتر نرم شکافت تعیین می‌شود. این پارامتر، شعاع انطباق ( $r_m$ ) یک اوربیتال تحلیلی که اوربیتال زتای اولی را به پایه‌ی زتای دوگانه می‌شکافت، پیدا می‌کند. شعاع انطباق  $r_m$ ، با مشخص کردن اینکه روند شکافت اوربیتال نسبت به روند اوربیتال زتای اولی باید دارای مقدار نرم شکافت<sup>۱</sup> باشد، تعیین می‌شود.

مقدار معتبر نرم شکافت در بازه‌ی بین ۰ تا ۱ (به غیر از شامل شدن خود ۰ و ۱) قرار دارد.  $r_c$  شعاع محدود کننده‌ی اوربیتال زتای اولی و  $r_m$  شعاع محدود کننده‌ی اوربیتال زتای دومی می‌باشد. مقدار  $r_c$  توسط انرژی برانگیختگی و مقدار  $r_m$  توسط پارامتر نرم شکافت کنترل می‌شود.

### ۳-۷-۲ شبه پتانسیل

پتانسیل کولنی قوی و الکترون‌های مغزی به شدت مقید در اتم‌ها باعث تغییراتی بسیار سریع در توابع موج با تعداد زیادی گره می‌شوند. در نتیجه به تعداد زیادی توابع پایه برای توصیف نیاز داریم. برای کاهش تعداد توابع پایه از روش شبه پتانسیل استفاده می‌کنیم. برای کاهش تعداد حالت‌ها در محاسبات می‌توان الکترون‌های یک اتم را به الکترون‌های ظرفیت و مغزی تقسیم کرد.

الکترون‌های ظرفیت الکترون‌هایی هستند که پوسته‌های خارجی اتم را اشغال می‌کنند و مسئول پیوندهای شیمیایی می‌باشند. بنابراین خواص الکترون این حالت به میزان بسیار زیادی به محیط شیمیایی آن‌ها بستگی دارد. اما الکترون‌های مغزی الکترون‌هایی هستند که پوسته‌های داخلی اتم و نزدیک به هسته را اشغال می‌کنند و در پیوندهای شیمیایی مشارکت ندارند.

خواص الکترونی این حالت‌ها به میزان بسیار جزئی به محیط شیمیایی آن‌ها بستگی دارد. پس می‌توان فرض کرد که پتانسیل الکترون‌های مغزی مستقل از محیط است. در نتیجه می‌توان الکترون‌های مغزی

---

<sup>۱</sup>Split-norm

را از محاسبات حذف کنیم و فقط الکترون‌های ظرفیت را در نظر بگیریم. پس می‌توان پتانسیل ناشی از الکترون‌های مغزی و ظرفیت در جامدات توسط چگالی بار در ناحیه‌ی پیوند تعیین می‌شوند، نیاز به توصیف چگالی بار در نزدیکی هسته وجود ندارد بنابراین می‌توان این پتانسیل موثر را با شبه پتانسیل  $V_{pp}$  جایگزین کرد تا از تکینگی در هسته جلوگیری شود. در نتیجه در فواصل دورتر از هسته پتانسیل صحیح را ایجاد کند. به اتمی که هسته و الکترون‌های مغزی آن توسط شبه پتانسیل جایگزین شود شبه اتم می‌گویند. در SIESTA شبه پتانسیل‌های ترولیر-مارتین استفاده می‌شود [۷۸,۷۹].

### ۳-۷-۳ نقاط ویژه K

گفته شد که برای استخراج بسیاری از خواص بلور نظیر چگالی و انرژی نیاز به محاسبه انتگرال توابع تناوبی نظیر  $f(k) = f(k + G)$  در سر تا سر ناحیه اول بریلوئن داریم که به صورت زیر است:

$$\bar{f} = \frac{1}{\Omega_{BZ}} \int f(k) dk = \frac{\Omega_{cell}}{(2\pi)^d} \int f(k) dk = \frac{1}{N_k} \sum_k f(k) \quad (۲۱-۳)$$

که  $\Omega_{BZ}$ : حجم یاخته بسیط در فضای  $k$  و  $N_k$ : تعداد نقاط  $\Omega_{cell}$  و  $\Omega_{cell}$ : حجم یاخته بسیط در فضای  $r$  و  $d$ : تعداد ابعاد بلور و  $\bar{f}$ : میانگین  $f$  به ازاء هر  $K$  و یا معادل آن میانگین  $f$  به ازاء هر یاخته بسیط در فضای معمولی است.

واقعیت آن است که می‌توان انتگرال اخیر را به جای آن که در کل BZ محاسبه نماییم تنها به ازاء چند  $k$  خاص محاسبه و با تقریب خوبی همان  $\bar{f}$  را به دست آوریم. با مثالی موضوع را توضیح می‌دهیم. فرض کنید هدف محاسبه انتگرال زیر باشد:

$$I_1 = \int_0^{2\pi} dk \sin(k) = \cos k = \cos(2\pi) - \cos(0) = 1 - 1 = 0 \quad (۲۲-۳)$$

بنابراین با محاسبه دقیق جواب این انتگرال  $I_1 = 0$  حاصل می‌شود.

حال می‌توان همین جواب  $I_1 = 0$  را به طریق دیگری نیز به دست آورد و آن این است که مقدار انتگرال (عبارت زیر علامت انتگرال) را به ازاء یک  $K$  میانگین  $k = \pi$  محاسبه نماییم:

$$f_1(k) = \sin(k) \rightarrow \sin(k = \pi) = 0 \quad (۳-۲۳)$$

این قاعده در حالت کلی نیز درست است و ما می‌توانیم انتگرال عبارتهای تناوبی را به جای محاسبه دقیق در فضای  $K$ ، تنها با انتخاب چند  $K$  خاص، با تقریب خوبی محاسبه نماییم. در کد SIESTA انتخاب نقاط از روش منخارست-پک<sup>۱</sup> [۸۰]. برای نمونه‌گیری در فضای بریلوئن استفاده می‌شود و انتگرال روی تعداد کمی نقاط  $k$  با شاخص وزنی  $W$  تقریب زده می‌شود. شبکه‌بندی در این روش در حالت کلی به صورت  $N \times M \times K$  می‌باشد که پارامترها عدد صحیح و  $N, M, K \neq 0$  می‌باشند و به منظور شبکه بندی فضای وارون در راستاهای مختلف به کار می‌روند. برای ساختارهای یک بعدی مثل نانولوله‌ها با یک درجه آزادی در راستای  $\vec{c}$  و محدودیت در دو راستای دیگر به صورت  $1 \times 1 \times N$  و برای ساختارهای دو بعدی دو درجه آزادی در راستای  $\vec{b}$  و  $\vec{c}$  و در یک راستای دیگر به صورت  $1 \times M \times N$  و برای ساختارهایی که دارای سه درجه محدودیت در سه راستای  $\vec{a}$  و  $\vec{b}$  و  $\vec{c}$  مانند مولکول‌ها به صورت  $1 \times 1 \times 1$  انجام می‌شود که همان نقطه  $\Gamma$  در منطقه بریلوئن می‌باشد. بنابراین هر چه سلول و ساختار مورد بررسی، ابعاد بزرگتری در فضای حقیقی داشته باشد، فضای وارون آن (منطقه بریلوئن) ابعاد کوچکتری خواهد داشت و بالعکس. بنابراین با کوچکتر شدن فضای وارون به تعداد مش‌بندی و نقاط  $K$  کمتری در منطقه بریلوئن نیازمندیم.

---

<sup>۱</sup>Monkhorst- Pack

## فصل چهارم

نتایج:

بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی  
نانوصفحات آلومینیم نیتريد AIN خالص  
و آرایش یافته با عناصر واسطه

در سال‌های اخیر تحقیق بر روی مواد گرافنی دو بعدی به دلیل خواص الکترونیکی قابل توجه آنها رشد سریعی را در زمینه فیزیک نیم‌رسانا داشته است [۸۱]. الکترون دارای دو درجه آزادی بار و اسپین است که هر کدام از این درجات آزادی به طور جداگانه در فیزیک نیم‌رساناها و مغناطیس استفاده می‌شوند. اسپین‌ترونیک ناحیه اتصال فیزیک نیم‌رساناها و مغناطیس می‌باشد که هر دو درجه آزادی الکترون به طور همزمان در آن استفاده می‌شود [۸۲]. از آنجایی که مقیاس انرژی مربوط به دینامیک اسپین به طور قابل ملاحظه‌ای کم‌تر از آن چیزی است که برای کنترل بار الکترون مورد نیاز است، قطعات اسپین‌ترونیک توان الکتریکی کمتری مصرف می‌کنند و هم‌چنین سریع‌تر هستند [۸۳]. با توجه به خصوصیات ذکر شده با رشد روز افزون نانو تکنولوژی، تلاش برای ابعاد کوچکتر مصرف کمتر و بازده بیشتر این حوزه نو پا توانسته است سهم به‌سزایی از تحقیقات نظری و تجربی را به خویش اختصاص دهد و نوید بخش آینده‌ای روشن در حوزه فناوری اطلاعات باشد. در حال حاضر فعالیت‌های پژوهشی بسیار گسترده‌ای در زمینه ساخت و مطالعه قطعات اسپین‌ترونیک در مراحل پژوهشی جهان در حال انجام است.

اسپین‌ترونیک حوزه نسبتاً جدیدی است که مبنای آن بر اساس کنترل جریان اسپینی علاوه بر جریان بار حامل‌ها و استفاده از خاصیت بار و اسپین حامل‌ها تواما در قطعات الکترونیکی همچون ترانزیستورها و دیودها می‌باشد. مزیت استفاده از حامل بار و اسپین تواما در قطعه باعث افزایش پردازش اطلاعات و قطعاتی با سرعت سوئیچینگ بالا، هم‌چنین مصرف انرژی کمتر و امکان ذخیره‌سازی اطلاعات بیشتری در فضای محدودتری در مقیاس‌های پایین می‌شود. یک مولفه‌ی مهم در استفاده از اسپین حامل‌ها در قطعات اسپین‌ترونیک، تزریق اسپین قطبیده از یک منبع فرومغناطیس می‌باشد. یک روش تزریق اسپین استفاده از مواد فرومگنتیت و عناصر واسطه‌ای که تراز  $d$  آن‌ها در حال پر شدن است مثل آهن، کبالت، نیکل و... می‌باشد. مواد مغناطیسی گروه بزرگی از مواد هستند که به طور وسیع در دستگاه‌های مختلف مغناطیسی استفاده می‌شوند [۸۴]. طیف وسیعی از مواد نیم‌رسانا با آرایش عناصر واسطه



(عناصر مغناطیسی) وجود دارند. که این مواد را عموماً به عنوان نیم‌رسانای مغناطیسی رقیق DMS می‌شناسند. آرایش ترکیبات گروه (III-V) با یونهای مغناطیسی نیز از این موضوعات قابل توجه در مطالعات محققان در زمینه DMS هاست. نیم‌رساناهای مغناطیسی رقیق شده موادی‌اند که نوع نیم‌رسانا غالباً از عناصر گروه (III-V) و گروه (II-VI) جدول تناوبی می‌باشد که با عناصر واسطه رقیق شده‌اند [۸۵]. این ترکیبات به دلیل ویژگی منحصر به فردشان از محبوبیت زیادی در ساخت قطعات اپتوالکترونیکی برخوردار هستند. بنابراین معرفی نیم‌رساناهای گروه (III-V) آرایش یافته با عناصر واسطه برای استفاده از پدیده‌های مغناطیسی که در نیم‌رساناهای غیر مغناطیسی وجود ندارد را فراهم می‌کند که امکان استفاده از این ترکیبات را در صنایع اپتوالکترونیک و اسپین‌ترونیک را میسر می‌سازد. از ترکیبات گروه (III-V) می‌توان به AIN اشاره کرد که با توجه به خصوصیات منحصر به فرد و مفید آن مانند خواص الکتریکی بسیار عالی و داشتن گاف نواری بزرگ ( $6/2 \text{ eV}$ ) که باعث افزایش جذب در خواص اپتیکی، الکترونیکی و فوتوالکترونیکی می‌شود و دارای طول پیوند  $1/798 \text{ \AA}$  می‌توان اشاره کرد [۸۶-۸۷].

و همچنین کاربرد در صنعت اسپین‌ترونیک به عنوان نیم‌رسانای رقیق شده‌ی مغناطیسی دارا بودن خاصیت فرومغناطیس در دمای اتاق ( $300$  درجه‌ی کلوین) هنگامی که با عناصر واسطه‌ی فلزی آلییده، می‌شود به منظور تزریق کننده و منبع الکترون‌هایی با قطبش اسپینی، توجهات زیادی را به خود جلب کرده است.

با توجه به موارد ذکر شده ما در این فصل قصد داریم به بررسی خواص الکترونی نظیر ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی، و خواص مغناطیسی نظیر گشتاورهای مغناطیسی کلی و جزئی پایداری فاز نانو صفحات AIN (دسته‌سندلی و زیگزگ) خالص آرایش یافته با عناصر واسطه بپردازیم. محاسبات ما در این تحقیق با استفاده از رهیافت نظریه تابع چگالی با کد محاسباتی SIESTA که بر پایه‌ی بسط تابع موج بر حسب ترکیب خطی اوربیتال‌های اتمی و تقریب شبه پتانسیل استوار است انجام می‌پذیرد.

## ۴-۲ بهینه سازی پارامترها

در ابتدا باید تعدادی از پارامترها را به منظور کاهش در زمان محاسبات، افزایش دقت و سرعت همگرایی بهینه کرد. این پارامترها شامل انرژی قطع و تعداد نقاط  $K$  در فضای وارون است که به اختصار توضیحی در مورد هر یک اشاره خواهیم کرد.

در این تحقیق مطالعات با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) به کمک کد محاسباتی SIESTA [۸۸]. تقریب شیب تعمیم یافته پردو، برک وارنرهورف (GGA-PBE) انجام شده است [۸۹]. در این محاسبات مجموعه‌های پایه به صورت DZP [۹۰] در نظر گرفته شده است. جهت محاسبه برهم‌کنش بین الکترونی‌های ظرفیت و هسته‌های اتمی از شبه پتانسیل‌های ترولیر-مارتین استفاده شده است [۹۲-۹۱].

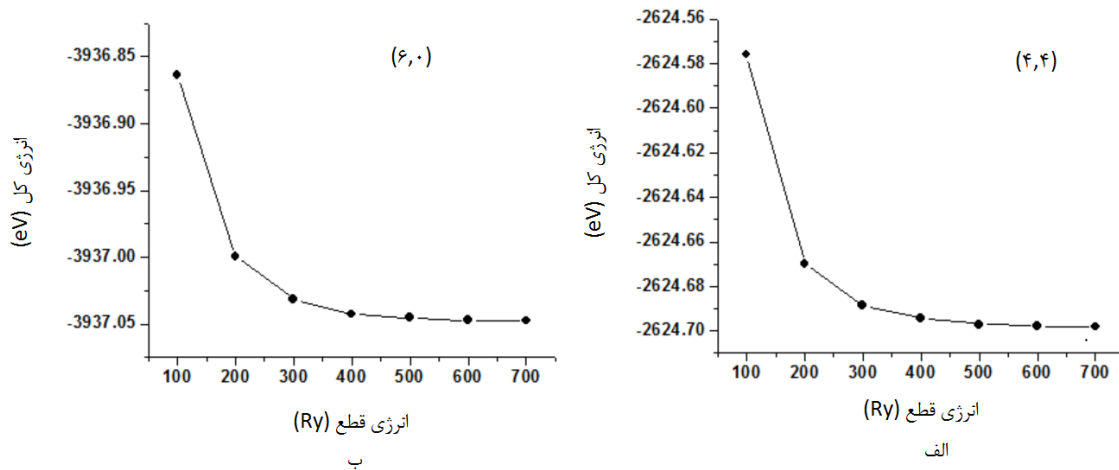
## ۴-۳ تعیین پارامترهای ورودی نانوصفحه AIN خالص و آرایش یافته

### ۴-۳-۱ انرژی قطع

از بین نانوصفحات زیگزاگ  $(n,0)$  و دسته‌صندلی  $(n,n)$  خالص AIN، محاسبات روی نانوصفحه دسته‌صندلی  $(4,4)$  و نانو صفحه زیگزاگ  $(6,0)$  انجام شده است. ابر سلول این دو نانوصفحه طوری انتخاب شده‌اند که اولاً طول هر دو نانوصفحه تقریباً یکسان و همچنین هر دو نانوصفحه دارای تعداد اتم‌های یکسانی باشند.

انتخاب درست پارامتر انرژی قطع، باعث افزایش سرعت محاسبات و افزایش سرعت همگرایی و افزایش دقت در امر محاسبات و کاهش خطا می‌شود. به منظور یافتن انرژی قطع بهینه شده، به ازای تعداد نقاط قطع  $K$  معین و همچنین دیگر پارامترها به غیر از انرژی قطع در فایل ورودی، پارامترهای ورودی دیگر را نیز دقیق و بالا در نظر گرفتیم تا خطایی در محاسبات صورت نگیرد، و با تغییر دادن انرژی قطع

در هر مرحله، به بررسی انرژی قطع‌های متفاوت پرداختیم. نتایج حاصل شده برای دو نوع نانوصفحه‌ی خالص، در جدول (۴-۱) گزارش شده است.



شکل ۴-۱: نمودار انرژی قطع بر حسب انرژی کل الف) نانوصفحه خالص (۴,۴) ب) نانوصفحه خالص (۶,۰)

جدول ۴-۱: انرژی قطع بر حسب انرژی کل، نانوصفحه خالص (۶,۰) و نانوصفحه خالص (۴,۴)

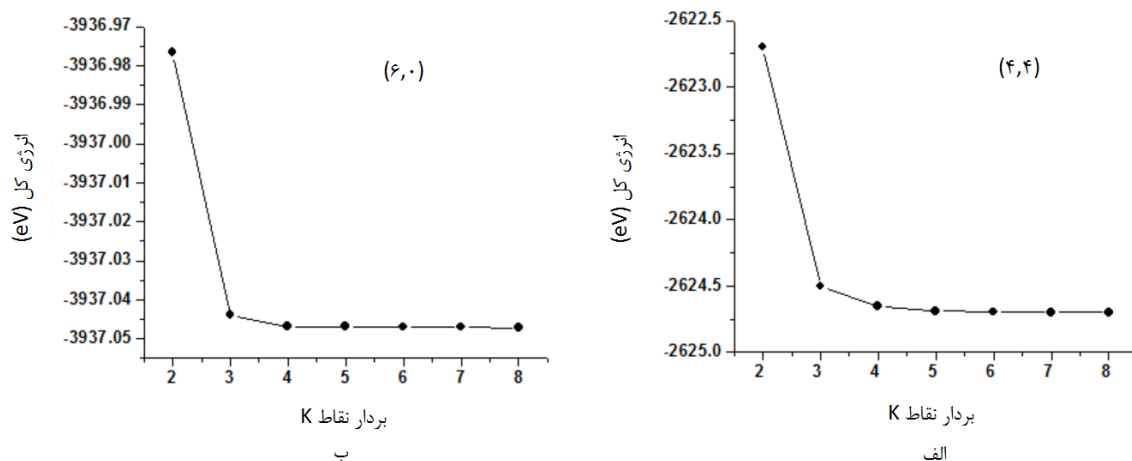
انرژی قطع (Ry)	۱۰۰	۲۰۰	۳۰۰	۴۰۰	۵۰۰	۶۰۰	۷۰۰
انرژی کل (۴,۴)(eV)	-۲۶۲۴/۵۷۵	-۲۶۲۴/۶۹۹	-۲۶۲۴/۶۸۸	-۲۶۲۴/۶۹۴	-۲۶۲۴/۶۹۷	-۲۶۲۴/۶۹۷	-۲۶۲۴/۶۹۸
انرژی کل (۶,۰)(eV)	-۳۹۳۶/۸۶۴	-۳۹۳۶/۹۹۹	-۳۹۳۷/۰۳۱	-۳۹۳۷/۰۴۲	-۳۹۳۷/۰۴۵	-۳۹۳۷/۰۴۷	-۳۹۳۷/۰۴۷

با توجه به جدول ۴-۱ و نمودار شکل ۴-۱ تغییرات انرژی کل بر حسب انرژی قطع برای نانوصفحه‌ی زیگزاگ (۶,۰) AIN تقریباً از ۶۰۰ Ry به بعد مقادیر انرژی یکسان است و برای نانوصفحه‌ی دسته‌سندلی (۴,۴) AIN تقریباً از ۴۰۰ Ry به بعد مقادیر انرژی یکسان می‌باشد. و بنابراین در محاسبات مقدار ۶۰۰ Ry را برای نانوصفحه AIN (۶,۰) و مقدار ۴۰۰ Ry را برای نانوصفحه دسته‌سندلی AIN (۴,۴) را به عنوان انرژی قطع بهینه انتخاب کرده‌ایم.

## ۴-۳-۲ بردار شبکه‌بندی و تعداد نقاط K در فضای وارون

به دلیل تعداد زیاد بودن اعداد و اتم‌ها و نیز تعداد الکترونها در یک جامد تناوبی و از آنجا که توابع موج تک ذره‌ای روی کل جامد گسترده پیدا کرده است باید برای محاسبه کمیت‌هایی مثل چگالی بار  $n(r)$  در نقطه،  $r$  تعداد زیادی توابع موج که به صورت محدود در فضا گسترده شده است، محاسبه می‌شود. راستای آزادی در حالت کلی برای شبکه‌بندی یک ساختار به صورت  $(N \times M \times K)$  می‌باشد. که برای ساختارهای دو بعدی مانند نانو صفحات با دو درجه آزادی به صورت  $(1 \times N \times M)$  می‌باشد.

بعد از بهینه سازی انرژی قطع، مرحله بعدی بهینه سازی تعداد نقاط K در هر راستا از فضای وارون است. از آنجا که ساختار مورد نظر نانوصفحه است و دو بعدی می‌باشد. شرایط مرزی اعمال شده به این صورت است که از سه راستای  $a, b, c$  در یک راستای  $a$  به اندازه کافی خلا منظور شده تا از برهم کنش در این راستا جلوگیری شود. حال همانند بهینه سازی انرژی قطع ابتدا تمامی پارامترها از جمله انرژی قطع بهینه شده را در فایل ورودی وارد می‌کنیم، و با توجه به راستای آزادی نانو صفحه که به صورت  $1 \times N \times N$  با تغییر دادن  $N$  در هر مرحله و بررسی انرژی کل مقدار بهینه را برای بردار شبکه بندی پیدا می‌کنیم. لازم به ذکر است که از این دو پارامتر بهینه شده برای محاسبات دیگر در حضور و عدم حضور ناخالصی استفاده نموده‌ایم. نتایج برای هر دو نانوصفحه خالص در جدول ۴-۲ و شکل ۴-۲ گزارش شده است.



شکل ۴-۲: نمودار بردار نقاط K بر حسب انرژی کل، الف) نانوصفحه خالص (۴،۴) ب) نانوصفحه خالص (۶،۰)

جدول ۴-۲: تعداد نقاط  $K$  بر حسب انرژی کل، نانوصفحه خالص  $(۶,۰)$  و نانوصفحه خالص  $(۴,۴)$

تعداد نقاط $K$	۲	۳	۴	۵	۶	۷	۸
انرژی کل $eV$ $(۴,۴)$	-۲۶۲۲/۶۹۷	-۲۶۲۴/۵۰۱	-۲۶۲۴/۶۵۱	-۲۶۲۴/۶۸۸	-۲۶۲۴/۶۹۵	-۲۶۲۴/۶۹۵	-۲۶۲۴/۶۹۵
انرژی کل $eV$ $(۶,۰)$	-۳۹۳۶/۹۷۶	-۳۹۳۷/۰۴۳	-۳۹۳۷/۰۴۶	-۳۹۳۷/۰۴۶	-۳۹۳۷/۰۴۶	-۳۹۳۷/۰۴۶	-۳۹۳۷/۰۴۶

با توجه به جدول ۴-۲ و نمودار شکل ۴-۲، تغییرات انرژی کل بر حسب تعداد نقاط  $K$  برای نانوصفحه دسته صندلی  $(۴,۴)$  AIN از ۶ به بعد مقادیر یکسان و برای نانوصفحه دسته زیگزاگ  $(۶,۰)$  AIN از ۴ به بعد مقادیر یکسان است. و بنابراین در محاسبات برای  $N$  زیگزاگ مقدار ۴ و برای  $N$  دسته صندلی مقدار ۶ را به عنوان تعداد نقاط  $K$  بهینه انتخاب کردیم. برای نمونه‌های آرایش شده نیز همین مقادیر را در نظر گرفته شده است.

### ۴-۳-۳ مجموعه پایه‌ها

یکی دیگر از کمیت‌هایی که به افزایش دقت در محاسبات کمک می‌کند انتخاب یک پایه مناسب به ازای اوربیتال‌های اتم‌های تشکیل دهنده ساختار مورد نظر است. همان‌طور که در فصل سوم توضیح داده شده است کد SIESTA توابع موج تک ذره‌ای کوهن-شم را بر حسب ترکیب خطی از پایه‌های اوربیتال‌های اتمی بسط می‌دهد. پایه‌های اتمی می‌تواند وسط تعدادی از پایه‌های چندگانه زتا بسط داده شود زتای دوگانه قطبیده (DZP) عموماً جوابی با کیفیت بالا با هزینه محاسباتی کم و در کمترین زمان فراهم می‌کند. پس در تمام محاسبات از این پایه به ازای اوربیتال‌های اتمی، استفاده کرده‌ایم.

### ۴-۳-۴ بهینه‌سازی ساختارها

بعد از بهینه‌سازی پارامترهای مورد نیاز برای محاسبات، قدم بعدی بهینه‌سازی ساختار و موقعیت اتم‌هاست، که با بهینه‌کردن ساختار می‌توان به جایگاه اتمی، ثابت شبکه‌ی تعادلی و همچنین طول پیوندهای اتمی، به منظور بررسی خواص الکترونی دست یافت.

مهمترین پارامترهایی که برای محاسبات نانوصفحه‌های خالص (دسته صندلی و زیگزاگ) در فایل ورودی بایستی در نظر گرفته شود در جدول ۳-۴ و ۴-۴ آمده است.

جدول ۳-۴: پارامترهای ورودی محاسبات، برای نانوصفحات دسته صندلی (۴و۴)  $AlN$  خالص

تقریب کد $\Leftarrow$	شبه پتانسیل	روش دینامیکی مولکولی (MD) $\Leftarrow$	شیب همیوگ (CG)
تابعی همبستگی- تبادلی $\Leftarrow$	GGA(PBE)	همگرایی نیرو $\Leftarrow$	0.04eV/ang
بردار شبکه بندی فضای K $\Leftarrow$	$1 \times 6 \times 6$	مجموعه پایه‌ها $\Leftarrow$	دوگانه قطبیده (DZP)
انرژی قطع $\Leftarrow$	$400 Ry$	آرایش لایه ظرفیت اتم (Al) $\Leftarrow$	$3s^2 3p^1$
همگرایی چگالی بار $\Leftarrow$	$10^{-5}$	آرایش لایه ظرفیت اتم (N) $\Leftarrow$	$2S^2 2P^3$

جدول ۴-۴: پارامترهای ورودی محاسبات، برای نانوصفحه‌های زیگزاگ (۶و۰)  $AlN$  خالص

تقریب کد $\Leftarrow$	شبه پتانسیل	روش دینامیکی مولکولی (MD) $\Leftarrow$	شیب همیوگ (CG)
تابعی همبستگی-تبادلی $\Leftarrow$	GGA(PBE)	همگرایی نیرو $\Leftarrow$	0.04 eV/ang
بردار شبکه بندی فضای K $\Leftarrow$	$1 \times 4 \times 4$	مجموعه پایه‌ها $\Leftarrow$	دوگانه قطبیده (DZP)
انرژی قطع $\Leftarrow$	$600 Ry$	آرایش لایه ظرفیت اتم (Al) $\Leftarrow$	$3s^2 3p^1$
همگرایی چگالی بار $\Leftarrow$	$10^{-5}$	آرایش لایه ظرفیت اتم (N) $\Leftarrow$	$2S^2 2P^3$

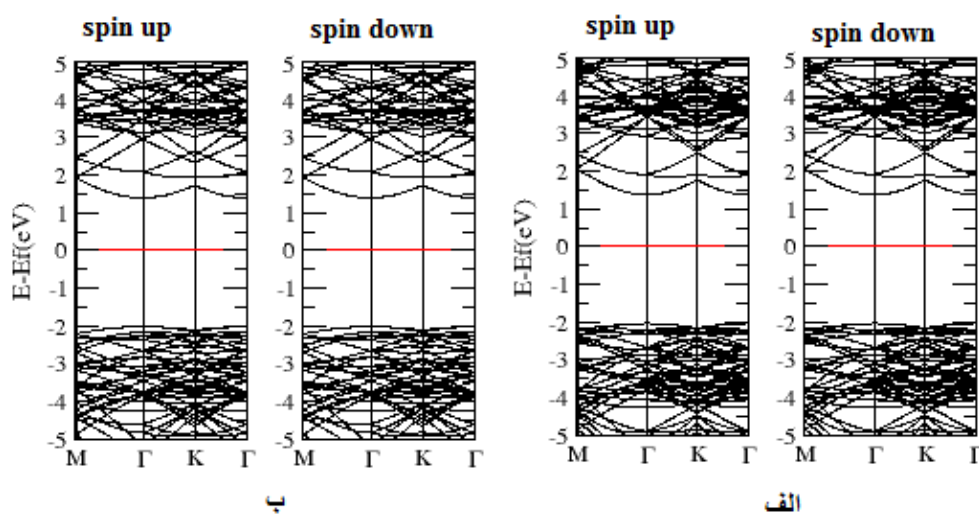
بعد از بهینه سازی ساختار با قرار دادن پارامترهای ساختاری بهینه شده به بررسی و مطالعه خواص فیزیکی همچون خواص الکترونی می‌پردازیم. در این بخش به مطالعه ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی نانوصفحه خالص زیگزاگ و دسته صندلی خالص  $AlN$  می‌پردازیم.

## ۴-۴ بررسی خواص الکترونی نانوصفحات خالص AIN (زیگزاگ و دسته‌صندلی)

در این قسمت از پژوهش پس از بهینه سازی و تعیین پارامترهای ورودی مناسب جهت انجام محاسبات به بررسی خواص الکترونی از جمله ساختار نواری و چگالی حالت‌ها می‌پردازیم.

### ۱-۴-۴ بررسی ساختار نواری نانوصفحه زیگزاگ و دسته‌صندلی خالص AIN

با بررسی ساختار نواری می‌توان به مقدار گاف نواری، مستقیم یا غیر مستقیم بودن و روند تغییرات آن دست یافت. ساختار نواری بدست آمده برای نانو صفحات AIN دسته‌صندلی و زیگزاگ در شکل ۳-۴ آمده است. در نمودارهای ساختار نواری سطح انرژی صفر به عنوان موقعیت تراز فرمی می‌باشد. با توجه به ساختار نواری اندازه گاف برای نانوصفحه (۴,۴) برای هر دو حالت اسپین بالا و پایین برابر با  $3/38 \text{ eV}$  و به صورت مستقیم و موقعیت تراز فرمی در انرژی  $3/5072 \text{ eV}$  و همچنین اندازه گاف نواری برای نانوصفحه (۶,۰) برای هر دو حالت اسپین بالا و پایین برابر  $3/36 \text{ eV}$  و به صورت مستقیم و موقعیت تراز فرمی در انرژی  $3/5242 \text{ eV}$  به دست آمده است. مقدار گاف نواری و نوع آن مستقیم (م) و غیر مستقیم (غم) و موقعیت تراز فرمی در جدول ۴-۵ برای نانو صفحه خالص AIN (۴,۴) و (۶,۰) گزارش شده است.



شکل ۳-۴: ساختار نواری الف) نانوصفحه خالص AIN (۴,۴) ب) نانوصفحه خالص AIN (۶,۰)

جدول ۴-۵: مقدار گاف نواری و موقعیت تراز فرمی برای الف) نانوصفحه خالص AIN (۴,۴) ب) نانوصفحه خالص AIN (۶,۰)

مقایسه [۹۳]	موقعیت تراز فرمی (eV)	گاف اسپین پایین (eV)	گاف اسپین بالا (eV)	نانوصفحه
م <sup>۳</sup> /۷۱	-۳/۵۰۷۲	م <sup>۳</sup> /۳۸	م <sup>۳</sup> /۳۸	AIN (۴,۴)
م <sup>۳</sup> /۳۳	-۳/۵۲۴۲	م <sup>۳</sup> /۳۶	م <sup>۳</sup> /۳۶	AIN (۶,۰)

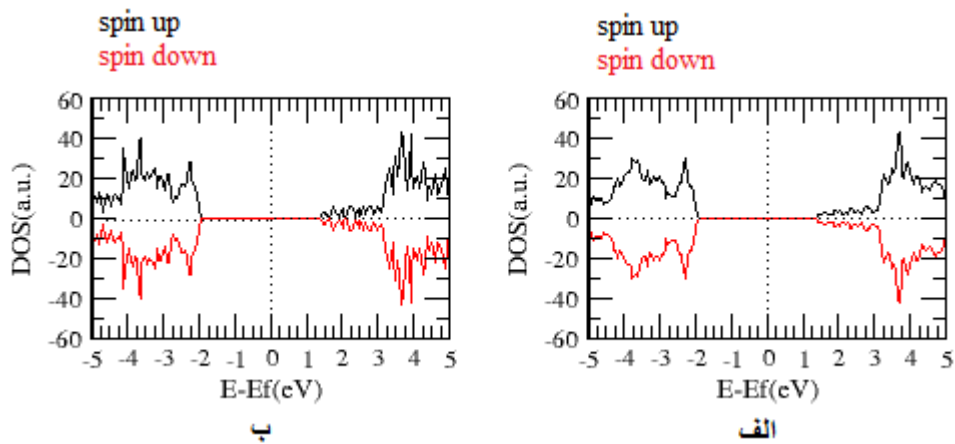
در مرجع شماره [۹۳] برای ساختار نانو صفحه AIN بر پایه DFT، با استفاده از کد VASP و تقریب GGA، که در کل دارای ۶۴ اتم، ۳۲ اتم N و ۳۲ اتم Al می‌باشد. نانوصفحه دسته‌بندی (۱۲,۱۲) AIN گاف نواری حالت خالص ۳/۷۱ بصورت مستقیم و برای نانوصفحه زیگزاگ (۸,۰) AIN گاف نواری ۳/۳۳ و به صورت مستقیم گزارش شده است.

#### ۴-۴-۲ محاسبه چگالی حالت‌های کلی (DOS) نانوصفحه زیگزاگ و دسته‌بندی AIN خالص

یکی دیگر از مهمترین کمیت‌هایی که در قسمت خواص الکترونی به آن می‌پردازیم و مورد بحث قرار می‌گیرد محاسبه‌ی چگالی حالت‌ها می‌باشد. منظور از چگالی حالت‌های یک سیستم، تعداد حالت‌های الکترونی در دسترس در واحد حجم در واحد انرژی می‌باشد که در اطراف یک انرژی می‌تواند وجود داشته باشد. یک چگالی حالت بالا در یک نوار انرژی به معنی زیاد بودن تعداد حالت‌ها برای اشغال شدن است. زمانی که با چگالی حالت صفر روبرو می‌شویم بدین معناست که هیچ حالتی برای اشغال شدن در نوار انرژی مورد نظر وجود ندارد. چگالی حالت‌های غیر صفر زیر تراز فرمی مربوط به نوار ظرفیت می‌باشند که در دمای صفر مطلق  $T=0$  کاملاً پر هستند و اشغال شده‌اند و چگالی حالت‌های غیر صفر بالای تراز فرمی مربوط به نوار ظرفیت می‌باشد. در دمای صفر مطلق  $T=0$  کاملاً خالی و اشغال نشده می‌باشند. چگالی حالت‌های کلی یک ترکیب، مجموع چگالی حالت‌های جزئی اتم‌های تشکیل دهنده‌ی آن است و چگالی حالت‌های یک اتم، مجموع چگالی حالت‌های جزئی اوربیتال‌های اتمی آن اتم می‌باشد.



مقارن بودن چگالی حالت‌های کلی یک سیستم برای اسپین بالا و اسپین پایین در تمام انرژی‌ها به این معنی می‌باشد که سیستم دارای هیچ قطبش اسپینی نمی‌باشد و در واقع سیستم هیچ خاصیت مغناطیسی از خود نشان نمی‌دهد. با توجه به رسم نمودارهای چگالی حالت‌های کلی می‌توان تشخیص داد که کدام اتم نقش بیشتری در تشکیل نوارهای انرژی رسانش و ظرفیت دارد. اما اهمیت بیشتر مربوط به چگالی حالت‌هایی می‌باشد که در اطراف تراز فرمی هستند به دلیل اینکه بسیاری از خواص از جمله رسانش الکتریکی به آن وابسته است. نمودار چگالی حالت‌های کلی برای نانوصفحه‌ی دسته‌سندلی خالص (۴,۴) و زیگزاگ خالص (۶,۰) در شکل ۴-۴ رسم شده است. در تمامی ترازها سطح انرژی صفر موقعیت تراز فرمی را نشان می‌دهد که با خط چین عمودی نشان داده شده است. بازه‌ی انرژی، برای سهم چگالی حالت‌ها بین  $-5 \text{ eV}$  تا  $+5 \text{ eV}$  در نظر گرفته شده است. با توجه به مقارن بودن چگالی حالت‌ها و گشتاور مغناطیسی به دست آمده در این نمونه‌ها که در حدود  $(-0.0003 \mu_B)$  می‌باشد می‌توان نتیجه گرفت که هر دو نانوصفحه در حالت خالص دارای خاصیت مغناطیسی نیستند.



شکل ۴-۴: نمودار چگالی حالت‌های کلی الف) نانوصفحه دسته‌سندلی (۴,۴) ب) نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰)

## ۵-۴ خواص الکترونی و مغناطیسی نانوصفحات AIN آرایش یافته با عناصر واسطه

نیم‌رساناهای مغناطیسی رقیق شده در شاخه‌ی جدید اسپین‌ترونیک که در فصل‌های دوم به آن اشاره شد، از اهمیت بالایی برخوردار است و دارای کاربرد فراوانی می‌باشند. در میان نیم‌رساناها AIN

به دلیل گاف نواری پهن که آن را به یک ماده‌ی میزبان مناسب جهت آرایش با عناصر واسطه تبدیل کرده است. آرایش نانوساختارهای این ماده بیشتر بر روی نانولوله‌ها و نانورویان صورت گرفته است. با توجه به ویژگی‌ها، خواص و شکل ساختاری نانو صفحه و کارهای اندکی که بر روی آرایش این ساختار، در نیم‌رسانای AlN مورد نظر انجام گرفته است، در این پروژه قصد داریم به بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی آن در حضور عناصر واسطه‌ی مغناطیسی بپردازیم. نانوصفحاتی که مورد بررسی قرار گرفته‌اند شامل نانوصفحات دسته‌ی صندلی (۴,۴) و زیگزاگ (۶,۰) هستند. در ابتدا قبل از بررسی خواص نانوصفحه‌های آرایش یافته، ضروریست پارامترهای ورودی به منظور محاسبات با دقت کافی تعیین شوند. این پارامترها در جداول ۴-۶ و ۴-۷ گردآوری شده‌اند.

جدول ۴-۶: پارامترهای ورودی محاسبات، برای نانوصفحه دسته‌ی صندلی (۴,۴) AlN آرایش یافته با عناصر واسطه

$3s^23p^1$	آرایش لایه ظرفیت اتم آلومینیم (Al)	شبه پتانسیل	تقریب کد $\Leftarrow$
$2s^22p^3$	آرایش لایه ظرفیت اتم نیتروژن (N)	GGA(PBE)	تابع-همبستگی تبادل $\Leftarrow$
$3d^34s^1$	آرایش لایه ظرفیت اتم تیتانیوم (Ti)	$1 \times 6 \times 6$	بردار شبکه‌بندی $k$ $\Leftarrow$
$3d^34s^2$	آرایش لایه ظرفیت اتم وانادیوم (V)	۴۰۰ Ry	انرژی قطع $\Leftarrow$
$3d^54s^1$	آرایش لایه ظرفیت اتم کروم (Cr)	$10^{-5}$	همگرایی چگالی بار $\Leftarrow$
$3d^54s^2$	آرایش لایه ظرفیت اتم منگنز (Mn)	0.04eV/ang	همگرایی نیروها $\Leftarrow$
$3d^64s^2$	آرایش لایه ظرفیت اتم آهن (Fe)	شیب همیوگ CG	روش دینامیکی مولکولی $\Leftarrow$
$3d^74s^2$	آرایش لایه ظرفیت اتم کبالت (Co)	DZP	مجموعه پایه‌ها $\Leftarrow$
$3d^84s^2$	آرایش لایه ظرفیت اتم نیکل (Ni)	----	----
$3d^{10}4s^1$	آرایش لایه ظرفیت اتم مس (Cu)	----	----

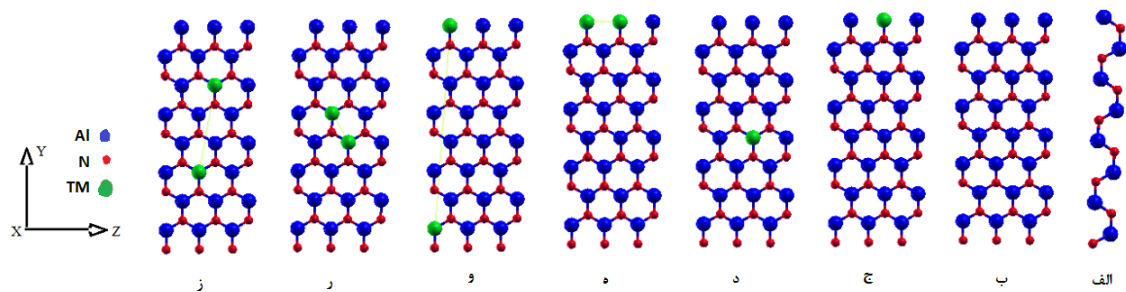
جدول ۴-۷: پارامترهای ورودی محاسبات، برای نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰)  $AlN$  آرایش یافته با عناصر واسطه

$3s^2 3p^1$	آرایش لایه ظرفیت اتم آلومینیم ( $Al$ )	شبه پتانسیل	تقریب کد $\Leftarrow$
$2s^2 2p^3$	آرایش لایه ظرفیت اتم نیتروژن ( $N$ )	GGA(PBE)	تابع-همبستگی تبدلی $\Leftarrow$
$3d^3 4s^1$	آرایش لایه ظرفیت اتم تیتانیوم ( $Ti$ )	$1 \times 4 \times 4$	بردار شبکه بندی $k \Leftarrow$
$3d^3 4s^2$	آرایش لایه ظرفیت اتم وانادیوم ( $V$ )	$600 \text{ Ry}$	انرژی قطع $\Leftarrow$
$3d^5 4s^1$	آرایش لایه ظرفیت اتم کروم ( $Cr$ )	$10^{-5}$	همگرایی چگالی بار $\Leftarrow$
$3d^5 4s^2$	آرایش لایه ظرفیت اتم منگنز ( $Mn$ )	$0.04 \text{ eV/ang}$	همگرایی نیروها $\Leftarrow$
$3d^6 4s^2$	آرایش لایه ظرفیت اتم آهن ( $Fe$ )	شیب همیوگ CG	روش دینامیکی مولکولی $\Leftarrow$
$3d^7 4s^2$	آرایش لایه ظرفیت اتم کبالت ( $Co$ )	DZP	مجموعه پایه ها $\Leftarrow$
$3d^8 4s^2$	آرایش لایه ظرفیت اتم نیکل ( $Ni$ )	----	----
$3d^{10} 4s^1$	آرایش لایه ظرفیت اتم مس ( $Cu$ )	----	----

#### ۴-۵-۱ نانوصفحه $AlN$ دسته صندلی (۴,۴) آرایش یافته با عناصر واسطه

سلول واحد نانوصفحه در راستای Y Z می باشد که جهت بررسی آرایش نانوصفحه دسته صندلی  $AlN$  (۴,۴) توسط عناصر واسطه‌ای مغناطیسی ( $Ti, Ni, Cr, V, Mn, Co, Fe, Cu$ )، از یک ابر سلول  $1 \times 1 \times 3$ ، استفاده شده است که در راستای Z سه برابر شده است. برای اینکه از برهم کنش‌های بین صفحات جلوگیری شود در راستا غیر تناوبی x حدود  $12 \text{ \AA}$  خلا در نظر گرفته شده است. ابر سلول دارای ۲۴ اتم Al و ۲۴ اتم N می باشد. با توجه به اختلاف زیاد شعاع یونی و میزان الکترون خواهی عناصر واسطه ( $Ti, Ni, Cr, V, Mn, Co, Fe, Cu$ ) مورد نظر با اتم‌های N، عناصر مغناطیسی جایگزین اتم‌های Al شده است. جایگزینی یک و دو اتم از این عناصر در نانو صفحه  $AlN$  (۴,۴) منجر به آرایش ۴٪ و ۸٪ در ابر سلول‌های انتخابی می شود. آرایش تکی (یک اتم ناخالصی) در دو حالت وسط و لبه و

آرایش دوتایی (دو اتم ناخالصی) در دو فاز فرومغناطیسی و آنتی‌فرومغناطیسی در دو وضعیت لبه و وسط در دو حالت دور و نزدیک انجام گرفته است. در شکل ۴-۵ به ترتیب ساختار خالص و ابر سلول خالص و ابر سلول آرایش یافته ۴٪ و ۸٪ در دو وضعیت دور و نزدیک و در دو حالت لبه و وسط برای نانوصفحه دسته‌سندلی  $\text{AlN}(4,4)$  نشان داده شده است. موقعیت اتم‌های عناصر واسطه‌ای مغناطیسی با رنگ سبز مشخص گردیده است.

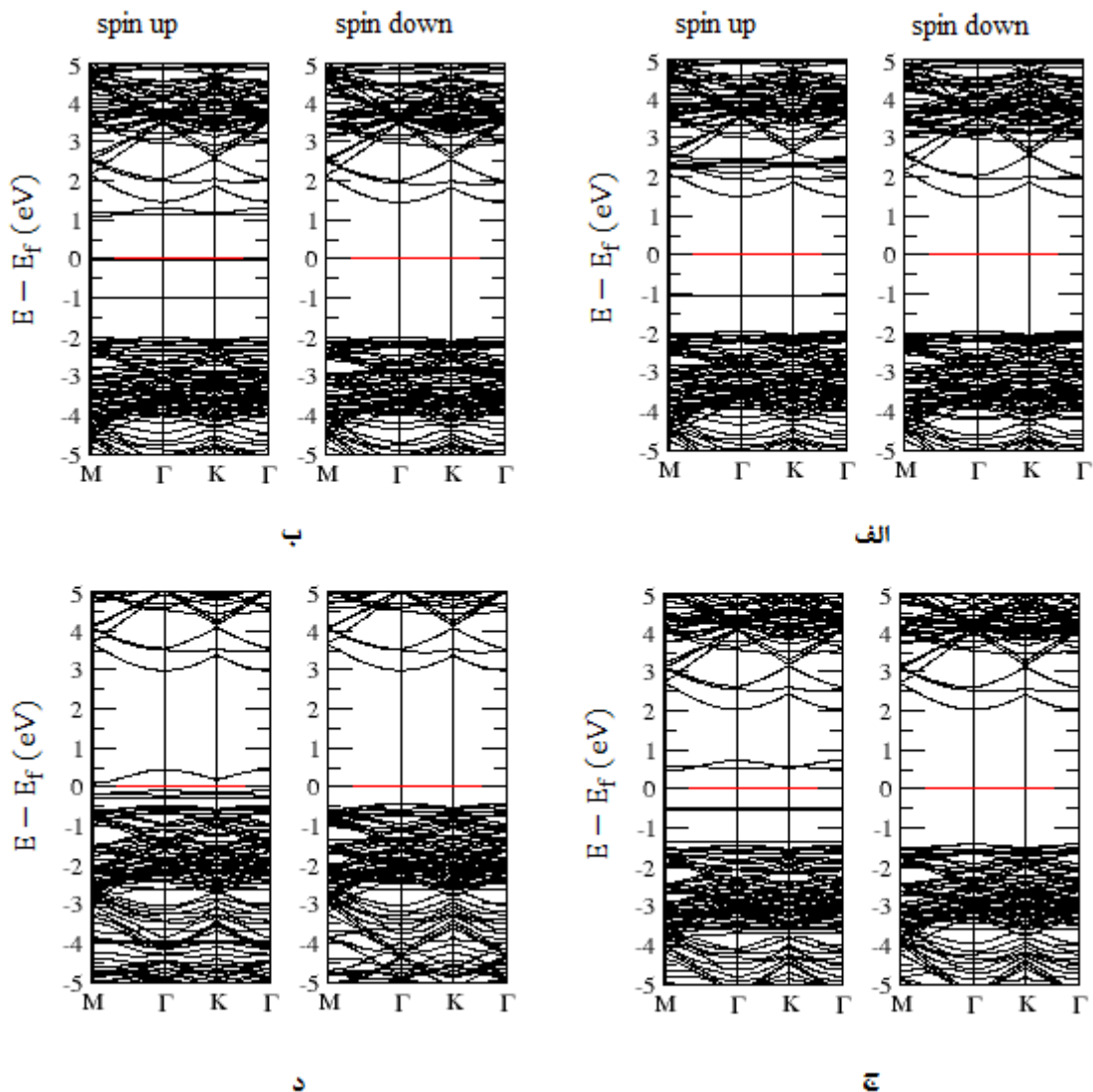


شکل ۴-۵: الف) سلول واحد نانوصفحه خالص دسته‌سندلی  $\text{AlN}(4,4)$  (ب) ابر سلول  $3 \times 1 \times 1$  خالص ج) آرایش ۴٪ در لبه د) آرایش ۴٪ در وسط ه) آرایش ۸٪ در لبه در وضعیت نزدیک و) آرایش ۸٪ در لبه در وضعیت دور ی) آرایش ۸٪ در وسط در وضعیت نزدیک ر) آرایش ۸٪ در وسط در وضعیت دور

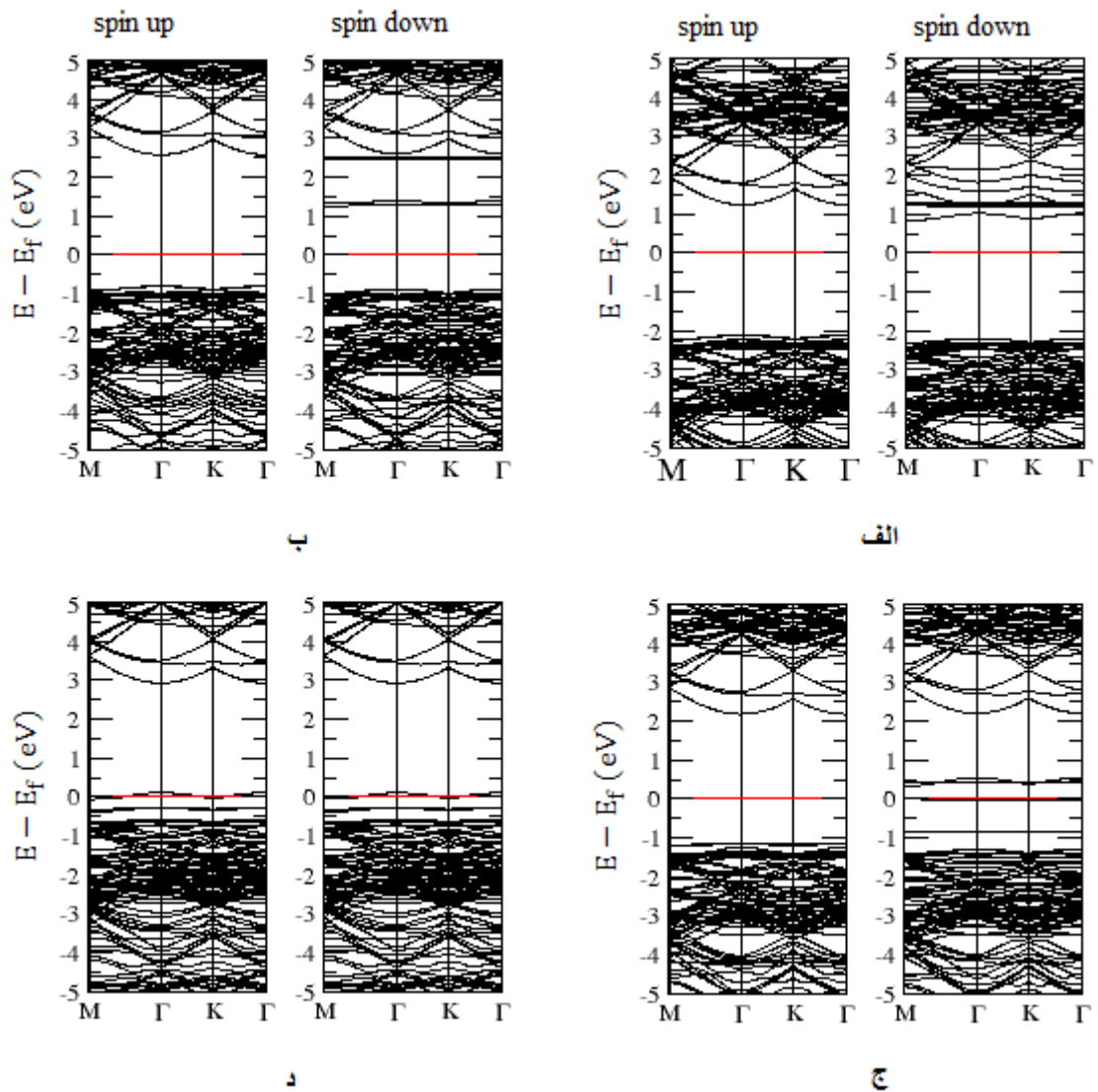
#### ۴-۵-۱-۱ ساختار نواری نانوصفحه $\text{AlN}(4,4)$ آرایش یافته

ساختار نواری نمونه‌های آرایش یافته ۴ و ۸ درصد آرایش در دو وضعیت دور و نزدیک بررسی شده است. پس از بهینه‌سازی ساختارها و تعیین نانوصفحه‌های پایدار، با قرار دادن پارامترهای ساختاری بهینه شده از جمله موقعیت‌های اتمی، ثابت شبکه بهینه شده و انرژی قطع بهینه شده به مطالعه خواص فیزیکی این ساختارها مثل خواص الکترونی نانوصفحه‌های پایدار که شامل ساختار نواری و چگالی حالت‌ها می‌باشد پرداخته می‌شود. پس از انجام محاسبات و با توجه به بررسی ساختار نواری نانوصفحه‌های دسته‌سندلی آرایش یافته ابر سلول  $(4,4)$  و مقایسه آن با ساختار نواری خالص مشاهده شد که یک سری نوارهایی در میان گاف نواری خالص ایجاد شده، باعث تغییر شکل ساختار نواری و

تغییر گاف انرژی شده است. ساختار نواری نمونه‌های ۸ درصد آلیش در وضعیت‌های دور و نزدیک در دو حالت لبه و وسط و به دلیل زوج بودن تعداد آلاینده‌ها محاسبات در دو فاز فرومغناطیس و آنتی-فرومغناطیسی با عناصر واسطه‌ی مغناطیسی (Ti, Ni, Cr, V, Mn, Co, Fe, Cu) انجام شده است. در شکل‌های ۴-۶ و ۷-۴ ساختار نواری نانوصفحه (۴,۴) در وضعیت لبه با آلیش ۴٪ رسم گردیده است. تغییر شکل نوارهای انرژی اطراف تراز فرمی در فاز فرومغناطیس به ازای آلیش Ti, Mn, Cr, V در نوارهای اسپینی بالا و در نمونه‌های آلیش یافته Ni, Co, Fe در نوارهای اسپینی پایین اتفاق افتاده است.



شکل ۴-۶: ساختار نواری نانوصفحه‌ی آلیش یافته (۴,۴) با درصد آلیش ۴٪ در لبه الف(Ti, ب V, ج Cr, د Mn)



شکل ۴-۷: ساختار نواری نانوصفحه‌ی آلایش یافته (۴،۴) با درصد آلایش ۴٪ در لبه الف (Fe، ب Co، ج Ni، د Cu)

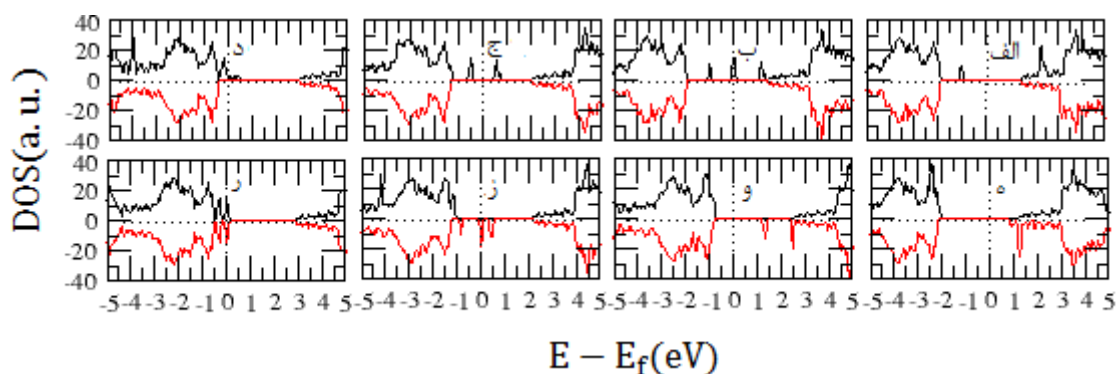
#### ۴-۵-۱-۲ بررسی چگالی حالات نانوصفحه آلایش یافته AlN (۴،۴)

در این قسمت به بررسی چگالی حالت‌های نانوصفحه AlN دسته‌سندلی (۴،۴)، آلایش یافته ۴٪ و

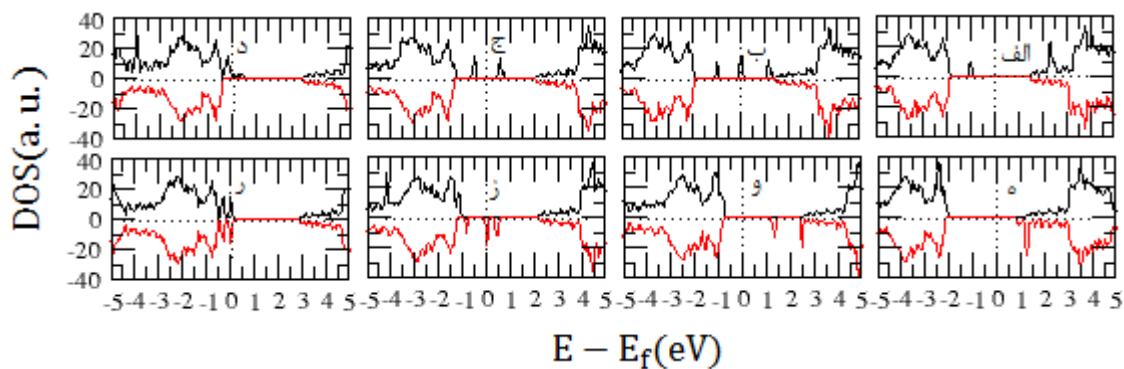
۸٪ که در دو وضعیت لبه و وسط در دو حالت دور و نزدیک در دو فاز فرومغناطیسی و آنتی‌فرومغناطیسی

می‌پردازیم. حالت‌های ایجاد شده اطراف تراز فرمی باعث قطبش اسپینی می‌گردد که این قطبش اسپینی

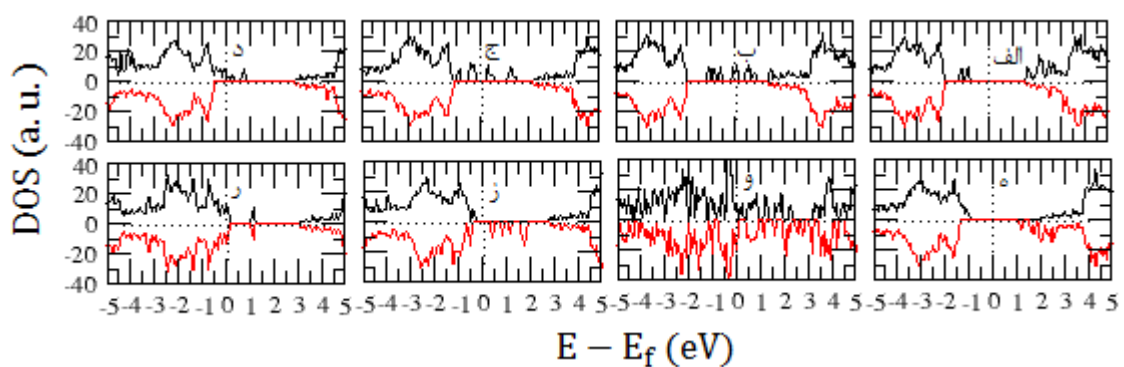
ناشی از هیبریداسیون بین حالت‌های اوربیتالی  $TM-3d$  لایه ظرفیت عناصر واسطه و  $N-2p$  های اطراف آن می‌باشد که بیشترین سهم را در اطراف تراز فرمی ایجاد کرده است. نمودار چگالی حالتها برای هر یک از ساختارهای شکل ۴-۵ محاسبه و در شکل‌های ۴-۸ تا ۴-۱۷ رسم شده است. در شکل ۴-۴ (الف) که برای نمونه خالص است مشاهده شد که در اسپین بالا و اسپین پایین نمودار کاملا متقارن است. در این حالت مشاهده می‌شود که گشتاور مغناطیسی کل آن صفر است. بررسی‌ها نشان می‌دهد که با آرایش عناصر واسطه نانو صفحه  $AIN$  دسته صندلی (۴،۴) شاهد عدم تقارن در چگالی حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین اطراف تراز فرمی می‌باشیم. این عدم تقارن با توجه به گشتاورهای ایجاد شده بیانگر ایجاد یک قطبش اسپینی می‌باشد این حالت‌های قطبش در آرایش عناصر واسطه در نوار ظرفیت در حالت‌های اسپینی بالا و در نوار رسانش در حالت‌های اسپین پایین ایجاد می‌شود. چگالی حالت‌های اسپینی قطبیده نشان می‌دهد که نانو صفحه دسته صندلی (۴،۴) خالص نیم‌رسانای غیر مغناطیسی است در حالیکه نانو صفحه آرایش یافته با عناصر واسطه دارای رفتارهای متفاوتی می‌باشد.



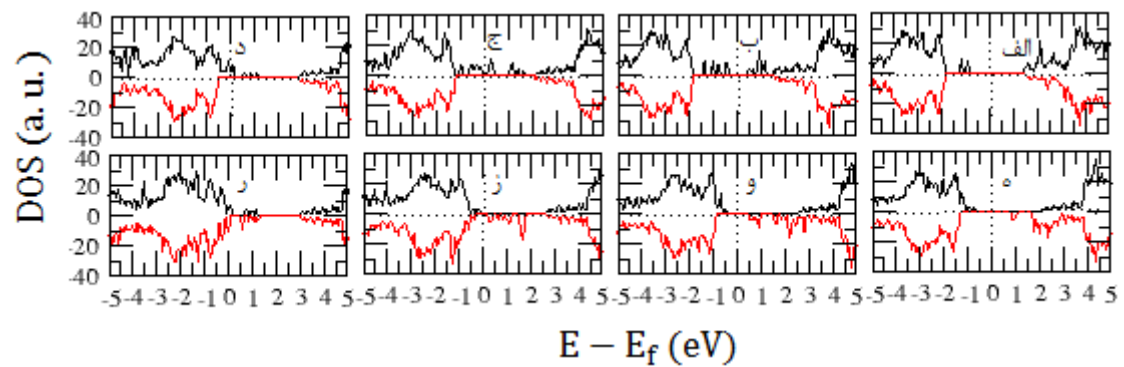
شکل ۴-۸: چگالی حالت‌های نانو صفحه  $AIN$  آرایش یافته با ۴٪ عناصر واسطه در وضعیت لبه الف (Ti)، ب (V)، ج (Cr)، د (Mn)، ه (Fe)، و (Co)، ز (Ni)، ر (Cu)



شکل ۴-۹: چگالی حالت‌های نانوصفحه AlN آلاینش یافته با ۴٪ عناصر واسطه در وضعیت وسط (الف) Ti، (ب) V، (ج) Cr، (د) Mn، (ه) Fe، (و) Co، (ز) Ni، (ر) Cu

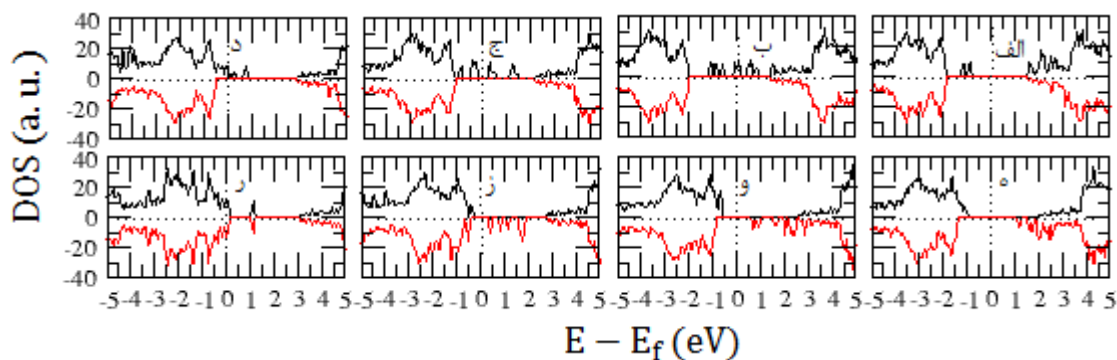


شکل ۴-۱۰: چگالی حالت‌های نانوصفحه AlN آلاینش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت لبه دور فرومغناطیس (الف) Ti، (ب) V، (ج) Cr، (د) Mn، (ه) Fe، (و) Co، (ز) Ni، (ر) Cu



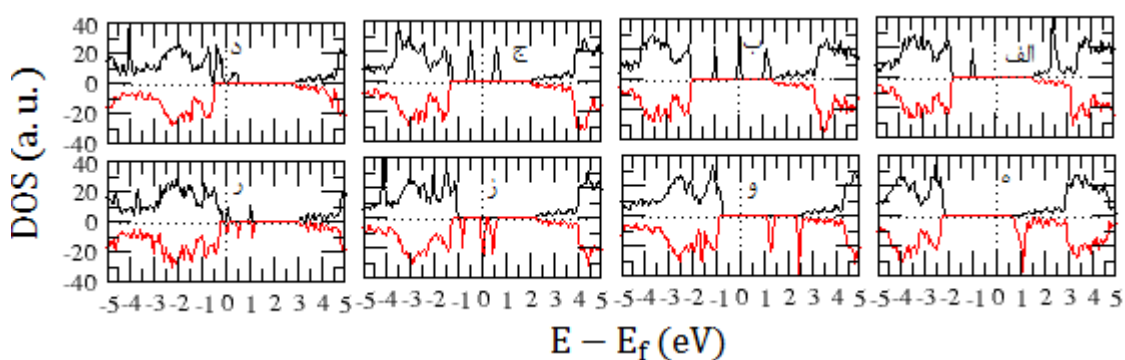
شکل ۴-۱۱: چگالی حالت‌های نانوصفحه AlN آلاینش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت لبه نزدیک فرومغناطیس (الف) Ti، (ب) V، (ج) Cr، (د) Mn، (ه) Fe، (و) Co، (ز) Ni، (ر) Cu





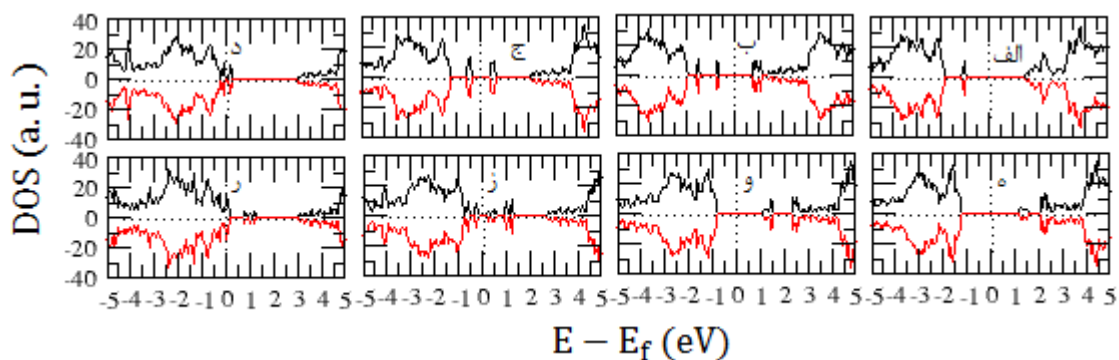
شکل ۴-۱۲: چگالی حالت‌های نانوصفحه AlN آلاینش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت وسط نزدیک فرومغناطیس

الف(Ti ، ب(V ، ج(Cr ، د(Mn ، ه(Fe ، و(Co ، ز(Ni ، ر(Cu)



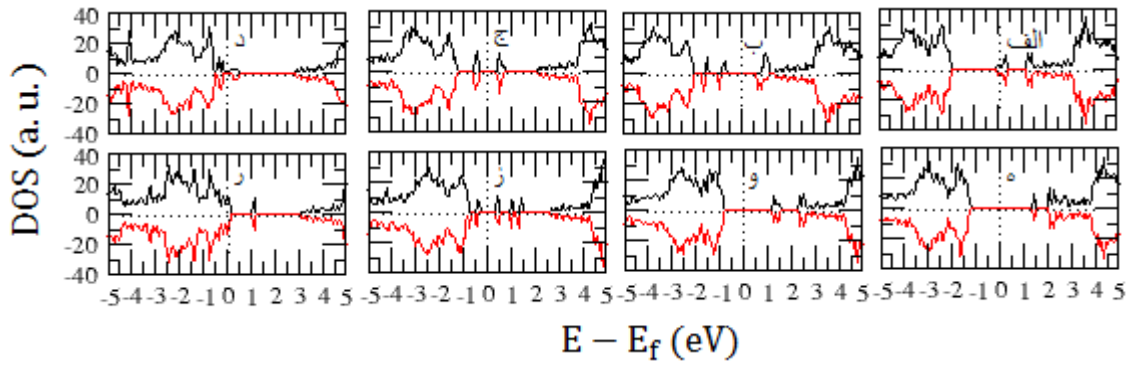
شکل ۴-۱۳: چگالی حالت‌های نانوصفحه AlN آلاینش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت وسط دور فرومغناطیس

الف(Ti ، ب(V ، ج(Cr ، د(Mn ، ه(Fe ، و(Co ، ز(Ni ، ر(Cu)

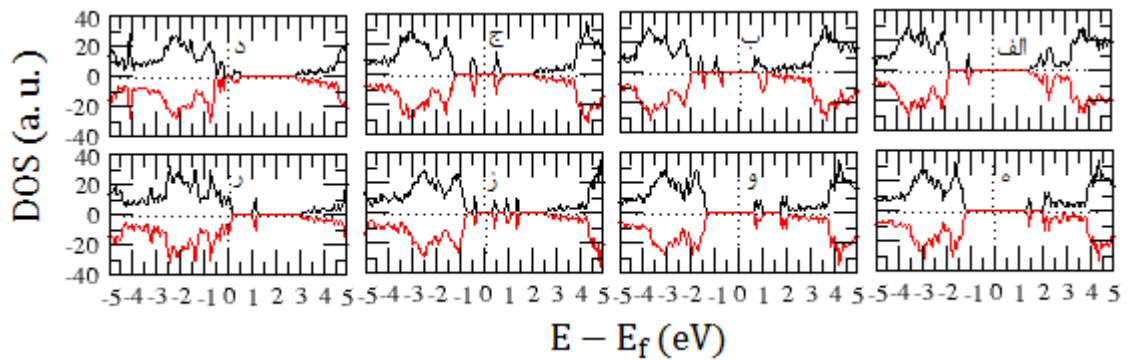


شکل ۴-۱۴: چگالی حالت‌های نانوصفحه AlN آلاینش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت لبه نزدیک

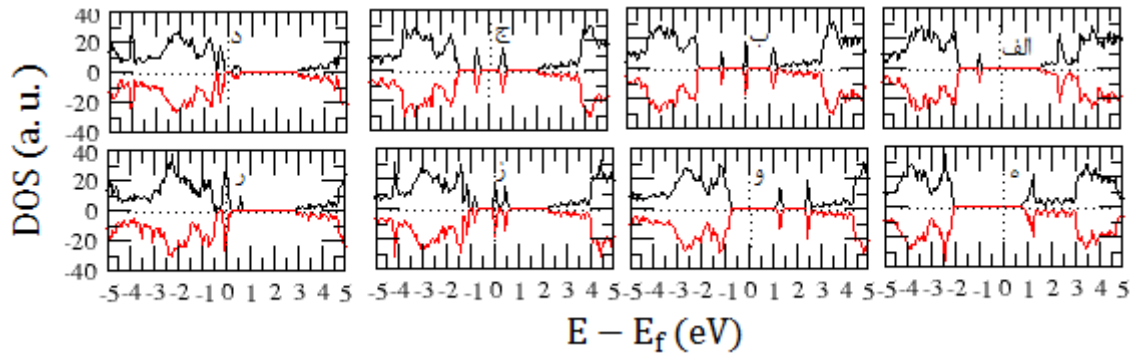
آنتی فرومغناطیس الف(Ti ، ب(V ، ج(Cr ، د(Mn ، ه(Fe ، و(Co ، ز(Ni ، ر(Cu)



شکل ۴-۱۵: چگالی حالت‌های نانوصفحه AIN آلاینش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت لبه دور آنتی‌فرومغناطیس (الف) Ti، (ب) V، (ج) Cr، (د) Mn، (ه) Fe، (و) Co، (ز) Ni، (ح) Cu



شکل ۴-۱۶: چگالی حالت‌های نانوصفحه AIN آلاینش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت وسط نزدیک آنتی‌فرومغناطیس (الف) Ti، (ب) V، (ج) Cr، (د) Mn، (ه) Fe، (و) Co، (ز) Ni، (ح) Cu



شکل ۴-۱۷: چگالی حالت‌های نانوصفحه AIN آلاینش یافته با ۸٪ عناصر واسطه در وضعیت وسط دور آنتی‌فرومغناطیس (الف) Ti، (ب) V، (ج) Cr، (د) Mn، (ه) Fe، (و) Co، (ز) Ni، (ح) Cu

با توجه به منحنی چگالی حالت‌های نمونه‌های آلیش یافته ۴٪ و ۸٪ در هر دو وضعیت دور و نزدیک و در هر دو حالت لبه و وسط به صورت فاز فرومغناطیس، شاهد یک عدم تقارن در چگالی حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین اطراف تراز فرمی می‌باشیم. این عدم تقارن با توجه به گشتاورهای ایجاد شده، بیانگر ایجاد یک قطبش اسپینی می‌باشد. این حالت‌های قطبشی در آلیش  $\text{Ti}$ ،  $\text{V}$ ،  $\text{Cr}$ ،  $\text{Mn}$  به ازای نوار ظرفیت و نوار رسانش در حالت اسپین بالا و در آلیش  $\text{Fe}$ ،  $\text{Co}$ ،  $\text{Ni}$  در نوار رسانش به ازای اسپین پایین ایجاد شده است. با توجه به آلیش اتم  $\text{Cu}$  در فاز فرومغناطیسی در موقعیت‌های مختلف چون شاهد چگالی حالت‌های کاملاً متقارن بودیم پس می‌توان نتیجه گرفت آلیش  $\text{Cu}$  بر روی نانوصفحه با توجه به اینکه هیچ گاف نواری نه در اسپین بالا و نه در اسپین پایین ایجاد نمی‌کند پس خاصیت مغناطیسی هم در این ماده ایجاد نمی‌کند و فلز غیر مغناطیسی می‌باشد. با بررسی نمودار چگالی حالت‌ها در آلیش ۸٪ عناصر واسطه فاز آنتی‌فرومغناطیس در وضعیت‌های وسط نزدیک و لبه دور آلیش  $\text{V}$  شاهد یک عدم تقارن اندکی در چگالی حالت اسپین بالا و اسپین پایین نسبت به دیگر وضعیت آلیش‌های کاملاً متقارن هستیم. این می‌تواند ناشی از عدم تقارن موقعیتی آلاینده‌ها در ساختار و طول پیوند متفاوتی که در  $\text{TM}$  با  $\text{N}$ های همسایه اطراف خود برقرار کرده‌اند باشد.

مقدار و نوع گاف به ازای اسپین بالا و پایین و موقعیت تراز فرمی و رفتار الکترونیکی نمونه آلیش یافته در جداول ۴-۸ و ۴-۹ و ۴-۱۰ و ۴-۱۱ آمده است در این جداول (م-گاف نواری مستقیم، غم‌گاف نواری غیر مستقیم)، ( $\text{DMS}^1$ )-نیم‌رسانای مغناطیسی رقیق شده، ( $\text{NMS}^2$ )-نیم‌رسانای غیرمغناطیسی، ( $\text{HM}^3$ )-نیم فلز، ( $\text{MM}^4$ )-فلز مغناطیسی و ( $\text{NMM}^5$ )-فلز غیر مغناطیسی اشاره دارد.

<sup>1</sup>Diluted Magnetic Semiconductor

<sup>2</sup>Non Magnetic Semiconductor

<sup>3</sup>Half Metal

<sup>4</sup>Magnetic Metal

<sup>5</sup>Non Magnetic Metal

جدول ۴-۸: گاف نواری و موقعیت تراز فرمی بر حسب eV در آلیش ۴٪ نانوصفحه AlN (۴،۴)

آلیش	گاف اسپین بالا	گاف اسپین پایین	موقعیت تراز فرمی	رفتار الکترونی
در لبه ۴٪ - Ti	م ۲/۴	م ۳/۳	-۳/۶۰۹	DMS
در لبه ۴٪ - V	۰	م ۳/۴	-۳/۵۷۴	HM
در لبه ۴٪ - Cr	م ۰/۹	م ۳/۴	-۴/۱۴۱	DMS
در لبه ۴٪ - Mn	م ۰/۱۴	م ۳/۳	-۵/۰۹۵	DMS
در لبه ۴٪ - Fe	م ۳/۳	م ۳	-۳/۳۳۲	DMS
در لبه ۴٪ - Co	م ۳/۳	م ۳/۱	-۴/۶۸۲	DMS
در لبه ۴٪ - Ni	م ۳/۱	۰	-۴/۲۹۴	HM
در لبه ۴٪ - Cu	۰	۰	-۵/۰۴۷۰	NMM
دروسط ۴٪ - Ti	م ۲/۴	م ۳/۳	-۳/۶۰۹	DMS
دروسط ۴٪ - V	۰	م ۳/۴	-۳/۵۷۴	HM
دروسط ۴٪ - Cr	م ۰/۹	م ۳/۴	-۴/۱۴۱	DMS
دروسط ۴٪ - Mn	م ۰/۱	م ۳/۳	-۵/۰۹۵	DMS
دروسط ۴٪ - Fe	م ۳/۲	م ۳	-۳/۳۳۲	DMS
دروسط ۴٪ - Co	م ۳/۳	م ۳/۱	-۴/۶۸۲	DMS
دروسط ۴٪ - Ni	م ۳/۲	۰	-۴/۲۹۴	HM
دروسط ۴٪ - Cu	۰	۰	-۵/۰۴۷۳	NMM

جدول ۴-۹: گاف نواری و موقعیت تراز فرمی بر حسب eV در آلیش ۸٪ نانوصفحه AIN (۴,۴) در فاز فرومغناطیس

رفتار الکترونی	موقعیت تراز فرمی	گاف اسپین پایین	گاف اسپین بالا	آلیش
DMS	-۳/۶۵۵	م ۳/۳	م ۲/۴	در وسط نزدیک Ti - ٪ ۸
HM	-۳/۵۲۵	م ۳/۳	۰	دروسط نزدیک ۸ V - ٪
DMS	-۴/۲۹۴	م ۳/۳	م ۰/۵	در وسط نزدیک Cr - ٪ ۸
HM	-۴/۹۴۰	م ۳/۳	۰	در وسط نزدیک Mn - ٪ ۸
DMS	-۴/۰۶۸	م ۲/۵	م ۳/۱	در وسط نزدیک Fe - ٪ ۸
DMS	-۴/۶۵۶	م ۱/۵	م ۳/۱	در وسط نزدیک Co - ٪ ۸
DMS	-۴/۸۳۶	م ۰/۷	م ۳ غ	در وسط نزدیک Ni - ٪ ۸
NMM	-۵/۰۹۰۴	۰	۰	در وسط نزدیک Cu - ٪ ۸
DMS	-۳/۷۳۶	م ۳/۳	م ۲/۵	در وسط دور ۸ Ti - ٪
HM	-۳/۵۸۸	م ۳/۴	۰	در وسط دور ۸ V
DMS	-۴/۱۵۶	م ۳/۴	م ۰/۸	وسط دور ۸ Cr ٪
DMS	-۴/۹۸۷	م ۳/۳	م ۰/۳۸	وسط دور ۸ Mn٪
DMS	-۳/۲۴۱	م ۳ غ	م ۳/۲۳	در وسط دور ۸ Fe
DMS	-۴/۶۳۷	م ۲/۰۹	م ۳/۳	دروسط دور ۸ Co
HM	-۴/۳۰۸	۰	م ۳/۳	دروسط دور ۸ Ni -
NMM	-۵/۰۸۰۹	۰	۰	در وسط دور ۸ Cu -

جدول ۴-۱۰: گاف نواری و موقعیت تراز فرمی بر حسب eV در آرایش ۸٪ نانوصفحه AIN (۴,۴) در فاز فرومغناطیس

رفتار الکترونی	موقعیت تراز فرمی	گاف اسپین پایین	گاف اسپین بالا	آرایش
DMS	-۳/۶۵۶	م ۳/۳	م ۲/۴	در لبه دور ۸٪ Ti
HM	-۳/۵۲۵	م ۳/۳	۰	در لبه دور ۸٪ V
DMS	-۴/۲۹۴	م ۳/۳	م ۰/۵	در لبه دور ۸٪ - Cr
HM	-۴/۹۴۰	م ۳/۴	۰	در لبه دور ۸٪ - Mn
DMS	-۴/۰۶۸	م ۲/۵ غ	م ۲/۹	در لبه دور ۸٪ - Fe
MM	-۴/۵۳۵۵	۰	۰	در لبه دور ۸٪ - Co
DMS	-۴/۸۳۶	م ۰/۷	م ۳	در لبه دور ۸٪ - Ni
NMM	-۵/۱۵۹	۰	۰	در لبه دور ۸٪ - Cu
DMS	-۳/۶۳۹	م ۳/۳	م ۲/۳	در لبه نزدیک ۸٪ Ti
DMS	-۳/۶۵۶	م ۳/۴	م ۰/۸۲ غ	در لبه نزدیک ۸٪ V -
DMS	-۴/۱۸۹	م ۳/۳	م ۰/۲ غ	در لبه نزدیک ۸٪ Cr -
HM	-۴/۹۳۰	م ۳/۴	۰	در لبه نزدیک ۸٪ Mn -
DMS	-۴/۱۰۰	م ۲/۲	م ۲/۶	در لبه نزدیک ۸٪ Fe -
DMS	-۴/۶۱۲	م ۱/۳	م ۲/۸	در لبه نزدیک ۸٪ Co -
DMS	-۴/۷۵۹	م ۰/۴ غ	م ۲/۷	در لبه نزدیک ۸٪ Ni -
NMM	-۵/۱۲۷	۰	۰	در لبه نزدیک ۸٪ Cu -

جدول ۴-۱۱: گاف نواری و موقعیت تراز فرمی بر حسب eV در آلیش ۸٪ نانوصفحه AIN (۴,۴) در فاز آنتی فرومغناطیس

رفتار الکترونی	موقعیت تراز فرمی	گاف اسپین پایین	گاف اسپین بالا	آلیش
NMM	-۳/۶۵۶	۰	۰	در لبه دور ۸٪ - Ti
NMS	-۳/۴۷۲	۱/۵ م	۱/۵ م	لبه دور ۸٪ - V
NMS	-۴/۱۶۵	۰/۹ م	۰/۸ م	در لبه دور ۸٪ - Cr
NMS	-۴/۹۴۸	۰/۵ م	۰/۴۱ م	در لبه دور ۸٪ - Mn
NMS	-۴/۱۰۹	۲/۶ م	۲/۶ م	در لبه دور ۸٪ - Fe
NMS	-۴/۵۹۷	۲/۱ م	۲/۱ م	در لبه دور ۸٪ - Co
NMS	-۴/۶۸۹	۰/۸۳ م	۰/۷۴ م	در لبه دور ۸٪ - Ni
NMM	-۵/۱۵۷۰	۰	۰	لبه دور ۸٪ - Cu
NMS	-۴/۴۸۷	۳/۳ م	۳/۳ م	در لبه نزدیک Ti - ۸٪
NMS	-۴/۱۷۶	۱/۴ م	۱/۴ م	در لبه نزدیک V - ۸٪
NMS	-۵/۰۵	۰/۸ م	۰/۸ م	در لبه نزدیک Cr - ۸٪
NMM	-۴/۱۳۱	۰	۰	در لبه نزدیک Mn - ۸٪
NMS	-۴/۶۱۲	۲/۵ م	۲/۵ م	در لبه نزدیک Fe - ۸٪
NMS	-۴/۷۵۸	۲ م	۲ م	در لبه نزدیک Co - ۸٪
NMM	-۴/۷۵۸	۰	۰	در لبه نزدیک Ni - ۸٪
NMM	-۵/۱۰۸	۰	۰	در لبه نزدیک Cu - ۸٪

تفاوت اندازه انرژی بین اسپین بالا و اسپین پایین ناشی از شکافتگی اسپینی تبادلی می‌باشد. این تفاوت در نمونه‌های آلیش یافته با V، Cr، Mn، Ni بیشتر از نمونه‌هایی است که با Fe، Co، Ti آلیش یافته‌اند. که حاکی از میزان شکافتگی اسپینی بیشتری در ساختار مورد نظر با V، Cr، Mn، Ni است. اختلاف گاف نواری اسپین بالا و اسپین پایین در اطراف تراز فرمی و گشتاور مغناطیسی غیر صفر باعث ایجاد یک قطبش اسپینی می‌شود، نشان دهنده سهم متفاوت الکترون‌ها با اسپین بالا و اسپین پایین می‌باشد. با توجه به مقادیر محاسبه شده گاف نواری در جدول ۴-۸ مشاهده می‌شود V در آلیش ۴٪ در وضعیت لبه و وسط با توجه به اینکه در حالت اسپین بالا گاف نواری آن صفر است از خود رفتار نیم‌فلزی نشان می‌دهد. در آلیش ۸٪ در فاز فرومغناطیس در جدول ۴-۹، V، Ni در وضعیت وسط دور و V، Mn در وضعیت وسط نزدیک از خود رفتاری نیم‌فلزی نشان می‌دهند. در آلیش ۸٪ در فاز فرومغناطیس در جدول ۴-۱۰، Mn در وضعیت لبه نزدیک و V، Mn در وضعیت لبه دور بدلیل اینکه در حالت اسپین بالا گاف نواری آن صفر است از خود رفتار نیم‌فلزی نشان می‌دهد. Co در وضعیت لبه دور، رفتاری که از خود نشان می‌دهد فلز مغناطیسی و Cu فلز غیر مغناطیسی می‌باشد. ما بقی آلیش‌ها نیم‌رسانای رقیق شده مغناطیسی می‌باشد. اما در فاز آنتی‌فرومغناطیس در جدول ۴-۱۱، Cu، Mn در وضعیت لبه نزدیک و Ti در وضعیت لبه دور از خود رفتار فلز غیرمغناطیسی را نشان می‌دهند. در آلیش ۸٪ و ۴٪، در دو فاز فرومغناطیس و آنتی‌فرومغناطیسی در جداول ۴-۸ و ۴-۹ و ۴-۱۰ و ۴-۱۱ در دو وضعیت لبه و وسط و در دو حالت دور و نزدیک، رفتاری که از خود نشان می‌دهد فلز غیرمغناطیسی می‌باشد. و در ما بقی آلیش‌ها در فاز آنتی‌فرومغناطیسی رفتار آن‌ها بصورت نیم‌رسانای غیر مغناطیسی می‌باشد. با توجه به موقعیت تراز فرمی گزارش شده در جداول ۴-۸ و ۴-۹ و ۴-۱۰ و ۴-۱۱ و مقایسه تراز فرمی با نمونه خالص (۳/۵۰۷۲-)، که در تمامی نمونه‌ها موقعیت تراز فرمی با افزایش عدد اتمی، به سمت انرژی پایین‌تر شیفت پیدا کرده است.



## ۴-۵-۲ بررسی خواص مغناطیسی نانوصفحه‌ی دسته‌سندلی آلایش یافته AIN (۴,۴)

آلایش عناصر واسطه‌ی مغناطیسی باعث ایجاد حالت‌هایی در میان گاف نواری نانوصفحه‌ی خالص به واسطه‌ی هیبریداسیون اوربیتالی گردید. این حالت‌های ایجاد شده ساختار نواری و اندازه گاف نانوصفحه را تغییر داد. در حضور آلاینده‌ها به ازای اسپین بالا و اسپین پایین گاف‌های نواری متفاوتی بدست آمد که این تفاوت باعث عدم تقارن در چگالی حالت‌های اسپینی و ایجاد حالت‌های قطبشی اطراف تراز فرمی شد و به ساختار خاصیت مغناطیسی داد. در این بخش به بررسی خواص مغناطیسی ساختار مورد نظر که شامل شناسایی فاز پایدار مغناطیسی و محاسبه‌ی گشتاورهای مغناطیسی در حضور ناخالصی‌ها است پرداخته خواهد شد.

## ۴-۵-۲-۱ بررسی فاز پایدار مغناطیسی نانو صفحه‌ی آلایش یافته AIN دسته‌سندلی (۴,۴)

به منظور شناسایی فاز پایدار مغناطیسی، مقادیر انرژی کل حالت‌های آلایش شده محاسبه و مقایسه می‌شوند. حالت پایدار حالتی است که دارای کمترین انرژی کل است. آلایش ۸٪ در دو وضعیت دور و نزدیک و در دو حالت لبه و وسط در دو فاز فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیسی می‌باشد.

در هر دو وضعیت لبه و وسط در هر دو حالت دور و نزدیک و در هر دو فاز فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیسی آلایش ۸٪ شاهد افزایش انرژی کل با افزایش عدد اتمی از Ti به سمت Cu می‌باشیم. اختلاف انرژی محاسبه شده در جداول ۴-۱۲ و ۴-۱۳ اختلاف انرژی فازهای فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس می‌باشد که به صورت  $E_{\text{فرو}} - E_{\text{آنتی}}$  تعریف شده است. اختلاف انرژی مثبت بیانگر فاز پایدار فرومغناطیس و اختلاف انرژی منفی بیانگر فاز پایدار آنتی فرومغناطیس می‌باشد. این اختلاف انرژی برای دو وضعیت آلایش ۸٪ محاسبه شده است.

جدول ۴-۱۲: مقادیر اختلاف انرژی و فاز پایدار مغناطیسی نانوصفحه (۴,۴) AIN آلایش یافته در دو وضعیت لبه دور و لبه نزدیک با غلظت ۸٪ با عناصر واسطه

موقعیت آلاینده	دور		نزدیک	
	اختلاف انرژی	فاز پایدار	اختلاف انرژی	فاز پایدار
Ti	-۰/۰۰۷	AFM	-۰/۰۰۸	AFM
V	-۰/۱۶۴	AFM	۰/۱۶۵	FM
Cr	۰/۴۳۴	FM	۰/۳۸۱	FM
Mn	۰/۳۷۴	FM	۰/۵۲۱	FM
Fe	-۰/۲۹۸	AFM	-۰/۳۳۸	AFM
Co	-۰/۴۰۲	AFM	-۰/۴۲۸	AFM
Ni	۰/۰۰۷	FM	۰/۰۹	FM
Cu	۰/۰۰۴	FM	۰/۱۷۶	FM

جدول ۴-۱۳: مقادیر اختلاف انرژی و فاز پایدار مغناطیسی نانوصفحه (۴,۴) AIN آلایش یافته در دو وضعیت وسط دور و وسط نزدیک با غلظت ۸٪ با عناصر واسطه

موقعیت آلاینده	دور		نزدیک	
	اختلاف انرژی	فاز پایدار	اختلاف انرژی	فاز پایدار
Ti	۰/۰۰۰۹	FM	-۰/۰۰۷	AFM
V	۰/۰۰۰۶	FM	-۰/۱۶۴	AFM
Cr	-۰/۰۰۰۳	AFM	۰/۴۳۳	FM
Mn	۰/۰۱۷	FM	۰/۳۷۴	FM
Fe	-۰/۰۰۰۰۴	AFM	-۰/۲۹۸	AFM
Co	-۰/۰۰۰۰۶	AFM	-۰/۴۰۱	AFM
Ni	۰/۰۱۰	FM	۰/۰۱۸	FM
Cu	۰/۰۳۱	FM	-۰/۰۰۰۱	AFM

با توجه به مقادیر ذکر شده در جداول ۴-۱۲ و ۴-۱۳ و اختلاف انرژی‌های بدست آمده فاز پایدار مغناطیسی در ساختار مورد نظر به لحاظ انرژی در آلایش Ni، Mn به صورت فرومغناطیسی و در آلایش Co و Fe به صورت آنتی فرومغناطیس به دست آمده است. فاز پایدار مغناطیسی در آلایش عناصر یاد شده در دو وضعیت متفاوت لبه و وسط و در دو حالت دور و نزدیک وابسته به فاصله TMها از یکدیگر نبود و در هر دو وضعیت به یک صورت بدست آمد. اما در مورد آلایش Cu، Cr، Ti، V شاهد این بودیم

که موقعیت و مکان آرایش بر نوع فاز مغناطیسی ساختار اثر می‌گذارد. به این صورت که فاز پایدار ساختار در آرایش آن با V در وضعیت‌های لبه دور و وسط نزدیک به صورت آنتی‌فررومغناطیسی و در وضعیت‌های لبه نزدیک و وسط دور به صورت فررومغناطیسی به دست آمد. فاز پایدار ساختار در آرایش آن با Ti در وضعیت وسط دور به صورت فررومغناطیسی و در وضعیت‌های لبه نزدیک، لبه دور و وسط نزدیک به صورت آنتی‌فررومغناطیسی به دست آمد. به این صورت که فاز پایدار ساختار در آرایش آن با Cr در وضعیت‌های لبه دور، لبه نزدیک و وسط نزدیک به صورت فررومغناطیسی و در وضعیت‌های وسط دور به صورت آنتی‌فررومغناطیسی به دست آمد. به این صورت که فاز پایدار ساختار در آرایش آن با Cu در وضعیت‌های لبه دور، لبه نزدیک و وسط دور به صورت فررومغناطیسی و در وضعیت وسط نزدیک به صورت آنتی‌فررومغناطیسی به دست آمد. نظم مغناطیسی توسط جفت‌شدگی گشتاورهای مغناطیسی مربوط به یون‌های مغناطیسی تعیین می‌شود. این جفت‌شدگی بر اساس مدل‌های تبدالی که در فصل‌های گذشته به آن‌ها اشاره شد مربوط می‌شود.

در نتیجه رفتار فررومغناطیسی در حضور آرایش Mn، Ni و می‌تواند برهم‌کنش ابر تبدالی غیر مستقیم، و رفتار آنتی‌فررومغناطیسی در حضور آرایش Co و Fe توسط برهم‌کنش ابر تبدالی مستقیم توجیه می‌شود. در آرایش Cu، Ti، Co، V به دلیل اینکه فاز مغناطیسی، با توجه به فاصله و موقعیت اتم‌های ناخالصی نسبت به هم تغییر کرده است، نوع برهم‌کنش در این مورد می‌تواند توسط مدل RKKY توجیه گردد.

#### ۴-۵-۲-۲ بررسی گشتاورهای مغناطیسی در نانو صفحه‌ی AIN (۴،۴) آرایش یافته

با توجه به آنچه در مبحث شناسایی فاز مغناطیسی بیان شد، نظم مغناطیسی توسط جفت‌شدگی گشتاورهای مغناطیسی (عناصر مغناطیسی) عناصر واسطه تعیین می‌شود که این جفت‌شدگی توسط مدل‌های تبدالی توجیه می‌شود. بر این اساس به منظور توصیف دقیق‌تر نظم مغناطیسی در ساختارهای آرایش یافته نانو صفحه AIN دسته‌بندی با غلظت ۴٪ و ۸٪ در دو وضعیت لبه و وسط و آرایش

۸٪ در دو حالت دور و نزدیک و در دو فاز فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیسی گشتاورهای کلی ایجاد شده TMها در جداول ۴-۱۴ الی ۴-۱۸ گزارش شده است. با توجه به نتایج و مقادیر محاسبه شده در جداول مذکور در تمامی آرایشها در فاز فرومغناطیس شاهد افزایش گشتاور کل مغناطیسی در ساختار هستیم. در فاز فرومغناطیسی بیشترین سهم در گشتاور مغناطیسی کل ساختار ناشی از گشتاورهای جزئی TMها می باشد. در فاز فرومغناطیس شاهد هستیم که در حضور آرایشهای Ti، V، Cr، Mn گشتاور کل ایجاد شده از مجموع گشتاورهای TMها کمتر و در نمونههای آرایش یافته Ni، Fe، Co در موقعیت‌های مختلف با غلظت ۸٪ گشتاور کل ایجاد شده در ساختار از مجموع گشتاورهای TMها بیشتر است. در فاز آنتی فرومغناطیسی یکسان نبودن اندازه گشتاورهای V، Co در وضعیت لبه نزدیک و همچنین یکسان نبودن گشتاورهای Co، V، Cr، Mn، Ni در وضعیت‌های لبه دور و وسط نزدیک و یکسان نبودن گشتاورهای Cr، Mn در وضعیت وسط دور این موضوع می تواند ناشی از عدم تقارن موقعیتی آرایش و طول پیوند متفاوت آنها با Nهای همسایه باشد، که این تفاوت میزان هیبریداسیون اوربیتالی و جفت‌شدگی آنها را تحت تاثیر قرار می دهد و به ازای آرایش Cu در وضعیت لبه نزدیک باعث ایجاد یک گشتاور کل منفی به مقدار ناچیز (۰/۰۰۱۶-) در ساختار شده است و به ازای آرایش عناصر واسطه در موقعیت لبه دور در فاز آنتی فرومغناطیسی شاهد ایجاد گشتاورهای کل منفی ناچیز در ساختار شده است.

جدول ۴-۱۴: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت لبه نزدیک نانوصفحه دسته صندلی (۴,۴) AIN ۸٪.

	فاز	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
گشتاور آلومینیم ( $\mu_B$ )	FM	-۰/۰۸	-۰/۰۲	۰/۰۴	۰/۱۱	۰/۲۹	۰/۳۵	۰/۲۹	۰
	AFM	۰	۰	۰	-۰/۰۰۰۱	۰	-۰/۰۰۰۲	-۰/۰۰۰۱	۰
گشتاور نیتروژن ( $\mu_B$ )	FM	-۰/۵۰	-۱/۰۷	-۱/۵۲	-۱/۳۱	۰/۶۷	۱/۱۸	۱/۷۰	۰
	AFM	۰	۰	۰	۰	۰	-۰/۰۰۰۱	۰	۰
گشتاور ناخالصی (TM1)	FM	۱/۲۹	۲/۵۱	۳/۷۴	۴/۵۹	۴/۵۱	۳/۲۲	۱/۹۹	۰
	AFM	۱/۳۰	۲/۵۱	۳/۶۴	۴/۶۶	۴/۴۲	۳/۲۲	۱/۸۰	۰
گشتاور ناخالصی (TM2)	FM	۱/۲۹	۲/۵۸	۳/۷۴	۴/۵۹	۴/۵۱	۳/۲۲	۱/۹۹	۰
	AFM	-۱/۳۰	-۲/۴۰	-۳/۶۴	-۴/۶۶	-۴/۴۲	-۳/۴۵	-۱/۸۰	۰
گشتاور کل ساختار (AITMN) ( $\mu_B$ )	FM	۲	۴	۶	۸	۱۰	۸	۶	۰
	AFM	۰	۰	۰	۰	۰	۰	۰	-۰/۰۰۱۶

جدول ۴-۱۵: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت لبه دور نانوصفحه دسته صندلی (۴,۴) AIN ۸٪.

	فاز	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
گشتاور آلومینیم ( $\mu_B$ )	FM	-۰/۰۸	-۰/۰۵	۰/۰۳	۰/۱۱	۰/۳۰	۰/۳۶	۰/۲۹	۰
	AFM	-۰/۰۰۳	۰/۰۰۹	۰/۰۰۳	-۰/۰۱۱	-۰/۰۰۱	۰/۰۱۹	۰	۰
گشتاور نیتروژن ( $\mu_B$ )	FM	-۰/۵۰	-۱/۳۱	-۱/۵۴	-۱/۲۹	۰/۶۵	۱/۱۸	۱/۷۱	۰
	AFM	۰/۰۰۰۳	-۰/۰۰۳	۰/۰۰۲	۰/۰۰۴	۰	۰/۰۰۲	۰/۰۰۰۱	۰
گشتاور ناخالصی (TM1)	FM	۱/۲۹	۲/۶۶	۳/۷۷	۴/۵۷	۴/۵۱	۳/۲۲	۱/۹۹	۰
	AFM	۱/۳۰	۲/۵۰	۳/۶۳۶	۴/۶۱	۴/۴۳	۳/۱۰	۱/۹۸	۰
گشتاور ناخالصی (TM2)	FM	۱/۲۹	۲/۶۹	۳/۷۷	۴/۶۰۹	۴/۵۱	۳/۲۲	۱/۹۹	۰
	AFM	-۱/۳۰	-۲/۵۱	-۳/۶۳	-۴/۶۱۱	-۴/۴۳	-۳/۱۱	-۱/۹۹	۰
گشتاور کل ساختار (AITMN) ( $\mu_B$ )	FM	۲	۴	۶	۸	۱۰	۸	۶	۰
	AFM	-۰/۰۰۲	-۰/۰۰۱	۰/۰۰۰۴	-۰/۰۰۵	-۰/۰۰۱	-۰/۰۰۵	-۰/۰۰۰۱	۰

جدول ۴-۱۶: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت وسط نزدیک نانوصفحه دسته صندلی (۴,۴) AIN ۸٪.

	فاز	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
گشتاور آلومینیم ( $\mu_B$ )	FM	۰/۰۸۳	-۰/۰۵۹	۰/۰۳	۰/۱۱	۰/۳۰	۰/۳۹	۰/۲۹	۰
	AFM	۰/۰۰۳	-۰/۰۰۸	-۰/۰۰۳	۰/۰۱	۰/۰۰۱	۰/۰۰۲	۰	۰
گشتاور نیتروژن ( $\mu_B$ )	FM	-۰/۵۰۲	-۱/۳۱	-۱/۵۴	-۱/۳۰	۰/۶۶	۱/۲۲	۱/۷۱	۰
	AFM	۰/۰۰۰۱	۰/۰۰۴	-۰/۰۰۳	-۰/۰۰۵	۰/۰۰۹	۰/۰۰۲	-۰/۰۰۸	۰
گشتاور ناخالصی (TM1)	FM	۱/۲۹۲	۲/۶۹	۳/۷۷	۴/۶۰	۴/۵۱	۳/۲۲	۱/۹۹	۰
	AFM	۱/۳۰۷	۲/۵۱	۳/۶۳	۴/۶۱۱	۴/۴۳	۳/۱۱	۱/۹۱	۰
گشتاور ناخالصی (TM2)	FM	۱/۲۹	۲/۶۶	۳/۷۳	۴/۵۷۲	۴/۵۱	۳/۲۲	۱/۹۹	۰
	AFM	-۱/۳۰	-۲/۵۰	-۳/۶۳	-۴/۵۹	-۴/۴۳	-۳/۱۰	-۱/۸۹	۰
گشتاور کل ساختار (AITMN) ( $\mu_B$ )	FM	۲	۴	۶	۸	۱۰	۸	۶	۰
	AFM	۰	۰	۰	۰	۰/۰۰۱	۰	۰	۰

جدول ۴-۱۷: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت وسط دور نانوصفحه دسته صندلی (۴,۴) AIN ۸٪.

	فاز	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
گشتاور آلومینیم ( $\mu_B$ )	FM	-۰/۱۰۱	۰/۰۰۱	۰/۰۸۹	۰/۱۴	۰/۳۵۶	۰/۴۲	۰/۳۷۲	۰
	AFM	۰/۰۰۱	-۰/۰۰۱	-۰/۰۰۲	۰/۰۰۴	۰/۰۰۰۹	-۰/۰۰۲	۰/۰۰۱	۰
گشتاور نیتروژن ( $\mu_B$ )	FM	-۰/۵۸	-۱/۳۱	۱/۸۷	-۱/۳۲	۰/۶۶	۱/۱۸	۱/۹۲	۰
	AFM	۰/۰۰۲	۰/۰۰۲	۰/۰۰۲	-۰/۰۰۵	-۰/۰۰۲	-۰/۰۰۱	۰/۰۰۲	۰
گشتاور ناخالصی (TM1)	FM	۱/۳۰	۲/۶۶	۳/۶۲	۴/۵۹	۴/۴۹	۳/۱۹	۱/۸۸	۰
	AFM	۱/۳۰	۲/۶۵	۳/۶۲	۴/۵۹	۴/۴۹	۳/۱۹	۱/۸۸	۰
گشتاور ناخالصی (TM2)	FM	۱/۳۰	۲/۶۵	۳/۶۳	۴/۵۹	۴/۴۹	۳/۱۹	۱/۸۸	۰
	AFM	-۱/۳۰	-۲/۶۵	-۳/۶۳	-۴/۵۱	-۴/۴۹	-۳/۱۹	-۱/۸۸	۰
گشتاور کل ساختار (AITMN) ( $\mu_B$ )	FM	۲	۴	۶	۸	۱۰	۸	۶	۰
	AFM	۰	۰	۰	۰	۰	۰	۰	۰

جدول ۴-۱۸: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن، در وضعیت لبه و وسط نانوصفحه دسته صندلی (۴,۴) AIN ۴٪.

	فاز	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
گشتاور آلومینیم ( $\mu_B$ )	لبه	۰/۰۴	۰/۰۰۲	۰/۰۴	۰/۰۵	۰/۰۹	۰/۲۱	۰/۱۹	۰
	وسط	-۰/۰۵	-۰/۰۰۲	۰/۰۵	۰/۰۵	۰/۱۷	۰/۲۱	۰/۱۹	۰
گشتاور نیتروژن ( $\mu_B$ )	لبه	-۰/۲۵	-۰/۶۵	-۰/۶۷	-۰/۶۷	۰/۳۳	۰/۵۹	۰/۰۷	۰
	وسط	-۰/۲۲	-۰/۶۵	-۰/۶۷	-۰/۶۶	۰/۳۴	۰/۵۸	۰/۹۲	۰
گشتاور ناخالصی (TM1)	لبه	۱/۳۰۱	۲/۶۵	۳/۶۲	۴/۶۰	۴/۴۸	۳/۱۹	۱/۸۸	۰
	وسط	۱/۳۰۱	۲/۶۵	۳/۶۲	۳/۹۹	۵/۰۰۸	۳/۱۹	۱/۸۸	۰
گشتاور کل ساختار (AITMN) ( $\mu_B$ )	لبه	۱	۲	۳	۴	۵	۴	۳	۰
	وسط	۱	۲	۳	۴	۵	۴	۳	۰

برای بررسی گشتاورهای مغناطیسی در آرایش ۴٪ نانوصفحه AIN دسته صندلی (۴,۴) در دو وضعیت لبه و وسط با عناصر واسطه با توجه به مقادیر محاسبه شده در جدول ۴-۱۸ بیشترین سهم گشتاور جزئی TMها و بیشترین سهم گشتاور کل مربوط به Fe می‌باشد. در آرایش ۸٪ فاز فرومغناطیس بیشترین سهم گشتاور جزئی TMها مربوط به Mn، و بیشترین سهم گشتاور کل مربوط به اتم Fe می‌باشد.

#### ۴-۵-۲-۳ بررسی پایداری ساختارها

برای بررسی پایداری ساختارهای آرایش یافته نانوصفحات AIN دسته صندلی در این قسمت انرژی پیوندی و انرژی تشکیل ساختارها بررسی شده است. برای پایداری نانوصفحه‌ی دسته صندلی AIN (۴,۴) در ابتدای مبحث انرژی پیوندی<sup>۱</sup> ( $E_b$ )، انرژی لازم برای جدا کردن اتم ناخالصی از نانوصفحه

<sup>۱</sup>Binding energy

دسته صندلی AIN را با استفاده از رابطه (۱-۴) برای هر یک از حالت‌های آلیش یافته با عناصر واسطه که در شکل ۴-۵ نشان داده شد، محاسبه می‌کنیم [۹۴].

$$E_b = E(TM - AINNS) - E(AINNS) - nE(TM) \quad (1-4)$$

در رابطه (۱-۴)  $E(TM-AINNS)$  انرژی کل مربوط به نانوصفحه دسته صندلی آلیش یافته با عناصر واسطه ( Ti , Ni , Cr , V , Mn , Co , Fe , Cu ) ،  $E(AINNS)$  انرژی کل مربوط به نانو صفحه دسته صندلی AIN خالص،  $E(TM)$  انرژی نهایی مربوط به یک تک اتم TM (عناصر واسطه) و  $n$  تعداد اتم‌هایی که در ساختار به عنوان ناخالصی می‌باشد. مقادیر به دست آمده برای انرژی پیوندی وقتی یک اتم TM جایگزین یک اتم آلومینیم در دو وضعیت لبه و وسط ساختار با غلظت ۴٪ می‌شود و همچنین مقادیر بدست آمده برای انرژی پیوندی زمانی که دو اتم ناخالصی (عناصر واسطه) TM جایگزین دو اتم آلومینیم، در دو وضعیت لبه و وسط و در دو حالت دور و نزدیک و در دو فاز فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیسی با آلیش ۸٪، مطابق شکل ۴-۵ آلیش می‌شود. در جداول ۴-۱۹ و ۴-۲۰ و ۴-۲۱ گزارش شده است. هر چه مقدار محاسبه شده این انرژی پیوندی طبق رابطه (۱-۴) در ساختارهای مورد نظر کمتر باشد پیوند بین اتم‌ها در آن ساختار قویتر و مستحکم‌تر خواهد بود.

برای بررسی پایداری نانوصفحات AIN دسته‌صندلی (AINANS) و اینکه کدام ساختار از نظر انرژی مناسب‌تر و پایدارتر است انرژی تشکیل<sup>۱</sup> ( $E_F$ ) با استفاده از رابطه (۲-۴) محاسبه شده است [۲۹]:

$$E_F = E_{T1} + nE(Al) - [ E_{T2} + nE_{TM} ] \quad (2-4)$$

که در رابطه فوق  $E_F$  انرژی تشکیل،  $E_{T1}$  انرژی نهایی ساختار ناخالص،  $E(Al)$  انرژی نهایی تک اتم آلومینیم،  $n$  تعداد اتم‌های جایگزین شده،  $E_{T2}$  انرژی نهایی ساختار خالص و  $E_{TM}$  انرژی نهایی اتم‌های جایگزین شده عناصر واسطه ( Ti , Ni , Cr , V , Mn , Co , Fe , Cu ) می‌باشد. در حضور ناخالصی ابر

<sup>۱</sup>Formation energy



سلول شامل ۴۸ اتم است. ۲۳ اتم Al و ۲۴ اتم N که یک جایگاه Al با ۴٪ آرایش ناخالصی مغناطیسی عناصر واسطه اشغال شده‌اند. با توجه به نتایج محاسبه شده انرژی تشکیل در جایگذاری ناخالصی در مکان اتم Al و همچنین در مکان اتم N به این نتیجه رسیدیم که مناسب‌ترین جایگاه برای آرایش ناخالصی جایگزاری ناخالصی در مکان اتم Al می‌باشد. زیرا مقادیر انرژی تشکیل کمتری بدست آمده است.

مقادیر بدست آمده برای انرژی تشکیل وقتی یک اتم TM جایگزین یک اتم آلومینیم می‌شود و وقتی دو اتم TM در وضعیت فرومغناطیس یا آنتی‌فرومغناطیس نسبت به هم قرار دارند جایگزین دو اتم آلومینیم می‌شود در جداول ۲۲-۴ و ۲۳-۴ آورده شده است. طبق رابطه‌ی (۲-۴) نیز ساختاری که دارای میزان انرژی تشکیل کمتری باشد پایدارتر است.

جدول ۴-۱۹: مقادیر انرژی پیوندی نانوصفحه دسته‌بندی (۴،۴) AIN باغلظت ۸٪ در موقعیت لبه نزدیک و لبه دور آرایش یافته با عناصر واسطه در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیس

موقعیت آلاینده	لبه دور		لبه نزدیک	
	FM	AFM	FM	AFM
Ti	۱۰۴/۶۴۰۴۶۶	۱۰۴/۶۳۳۰۵۹	۱۰۴/۶۵۱۹۵۲	۱۰۴/۶۴۳۴۳۶
V	۱۰۵/۶۴۹۴۹۴	۱۰۵/۴۸۵۲۰۵	۱۰۵/۳۵۴۶۲۹	۱۰۵/۵۲۰۰۰۹
Cr	۱۱۲/۴۷۰۹۳۷	۱۱۲/۹۰۵۰۷۸	۱۱۲/۵۲۸۸۵۱	۱۱۲/۹۱۰۲۱۷
Mn	۱۱۲/۳۲۰۴۰۴	۱۱۲/۶۹۴۶۲۲	۱۱۲/۳۰۹۵۹۸	۱۱۳/۱۰۱۱۹۶
Fe	۱۰۶/۷۰۰۴۲	۱۰۶/۴۰۱۹۱۶	۱۰۶/۷۱۵۴۳۸	۱۰۶/۳۷۶۵۶۴
Co	۱۰۷/۳۰۶۴۳۷	۱۰۶/۹۰۴۴۳۵	۱۰۷/۳۲۰۳۳۴	۱۰۶/۸۹۱۶۷
Ni	۱۰۶/۵۵۲۲۸۵	۱۰۶/۵۵۹۵۲۴	۱۰۶/۵۶۴۱۴۵	۱۰۶/۶۵۴۶۵۶
Cu	۱۱۱/۷۴۴۹۱۵	۱۱۱/۷۵۳۱۷	۱۱۱/۶۰۲۳	۱۱۱/۷۷۹۱۳

جدول ۴-۲۰: مقادیر انرژی پیوندی نانوصفحه دسته‌صندلی (۴,۴) AIN با غلظت ۸٪ در موقعیت وسط دور و وسط نزدیک آرایش یافته با عناصر واسطه در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیسی

موقعیت آلاینده	وسط دور		وسط نزدیک	
	FM	AFM	FM	AFM
Ti	۱۰۴/۶۲۷۲۹۱	۱۰۴/۶۳۳۶۵۷	۱۰۴/۶۴۰۴۳۶	۱۰۴/۶۳۲۹۲۳
V	۱۰۶/۱۷۸۸۳۹	۱۰۶/۱۸۵۲۶۴	۱۰۵/۶۴۹۶۷۶	۱۰۵/۴۸۵۱۹۲
Cr	۱۱۲/۸۱۹۵۵۹	۱۱۲/۸۱۹۲۳۸	۱۱۲/۴۷۰۹۶۹	۱۱۲/۹۰۴۹۳۶
Mn	۱۱۲/۷۷۶۸۸۷	۱۱۲/۷۹۴۳۵۳	۱۱۲/۳۱۹۸۸۸	۱۱۲/۶۹۴۷۱۴
Fe	۱۰۶/۵۰۴۳۰۱	۱۰۶/۵۰۴۲۵۸	۱۰۶/۷۰۰۳۲۶	۱۰۶/۴۰۱۷۱۱
Co	۱۰۷/۰۹۵۶۹	۱۰۷/۰۹۵۰۸	۱۰۷/۳۰۶۳۴۶	۱۰۶/۹۰۴۴۸۳
Ni	۱۰۷/۹۰۳۲۶	۱۰۷/۹۱۳۸۵۸	۱۰۶/۵۵۲۱۱۸	۱۰۶/۵۷۱۰۴
Cu	۱۱۲/۹۹۸۴	۱۱۲/۹۹۸۵	۱۱۱/۷۵۱۵۶	۱۱۱/۷۵۱۴۴

جدول ۴-۲۱: مقادیر انرژی پیوندی نانوصفحه دسته‌صندلی (۴,۴) AIN با غلظت ۴٪ در موقعیت لبه و وسط آرایش یافته با عناصر واسطه

موقعیت آلاینده	لبه	وسط
Ti	۵۲/۳۱۹۴۷۱	۵۲/۳۱۹۶۶۱
V	۵۳/۰۹۶۸۱۸	۵۳/۰۹۶۹۱۲
Cr	۵۶/۴۰۸۲۰۴	۵۶/۴۰۸۴۲۶
Mn	۵۶/۴۴۷۱۲۱	۵۶/۴۴۷۱۸۹
Fe	۵۳/۲۵۵۰۲۴	۵۳/۲۵۹۲
Co	۵۳/۵۴۳۶۷۳	۵۳/۵۴۳۴۵۷
Ni	۵۳/۹۵۵۸۳۲	۵۳/۹۵۵۳۹۷
Cu	۵۶/۶۴۶۲۲۷	۵۶/۶۴۵۹۳۸

با توجه به نتایج محاسبه شده، مقادیر انرژی پیوندی در جداول ۴-۱۹ و ۴-۲۰ در ساختار نانوصفحه دسته‌صندلی (۴,۴) آرایش یافته، با عناصر واسطه و با غلظت ۸٪، از Ti به سمت Cr شاهد روند افزایش اندازه انرژی پیوندی و از Mn به سمت Ni شاهد روند کاهشی مقادیر انرژی پیوندی می‌باشیم. طبق مقادیر محاسبه شده انرژی پیوندی برای نانوصفحه دسته‌صندلی (۴,۴) آرایش یافته با عناصر واسطه

طبق نتایج جدول ۴-۲۱ کمترین مقدار انرژی پیوندی در ساختار آلایش یافته با غلظت ۴٪ با آلایش Ti در موقعیت آلایش عناصر واسطه در لبه ساختار می‌باشد. در آلایش ۸٪ نیز کمترین انرژی پیوندی مربوط به آلایش ۸٪ اتم Ti در موقعیت وسط دور مربوط به فاز فرومغناطیسی می‌باشد که نشان از پایداری بیشتر این فاز دارد.

جدول ۴-۲۲: مقادیر انرژی تشکیل نانوصفحه دسته‌بندی (۴,۴) AIN با غلظت ۸٪ در موقعیت لبه نزدیک، لبه دور، وسط نزدیک و وسط دور آلایش یافته با عناصر واسطه در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیس

موقعیت آلینده	لبه دور		لبه نزدیک		وسط دور		وسط نزدیک	
	FM	AFM	FM	AFM	FM	AFM	FM	AFM
Ti	۰/۳۴۳۲۹۲	۰/۳۳۵۸۸	۰/۳۵۴۷۷	۰/۳۴۶۲۶	۰/۳۳۵۴۹	۰/۳۳۶۴۸	۰/۳۴۳۲۶	۰/۳۳۵۷۴
V	۱/۳۵۲۰	۱/۱۸۷۷۳	۱/۰۵۷۱۵	۱/۲۲۲۵۳	۱/۸۸۱۳۶	۱/۸۸۷۷۹	۱/۳۵۲۱۹	۱/۱۸۷۷۱
Cr	۸/۱۷۳۴۶	۸/۶۰۷۶۰	۸/۲۳۱۳۷	۸/۶۱۲۷۴	۸/۵۲۲۰۸	۸/۵۲۱۷۶	۸/۱۷۳۴۹	۸/۶۰۷۴۶
Mn	۸/۰۲۲۹	۸/۳۹۷۱۴	۸/۰۱۲۱۲	۸/۵۳۳۴۴	۸/۴۷۹۳۹	۸/۴۹۶۸۷	۸/۰۲۲۴۱	۸/۳۹۷۲۴
Fe	۲/۴۰۲۹	۲/۱۰۴۴۴	۲/۴۱۷۹۶	۲/۰۷۹۰۹	۲/۲۰۶۸۲	۲/۲۰۶۷۸	۲/۴۰۲۸۵	۲/۱۰۴۲۳
Co	۳/۰۰۴۴	۲/۶۰۹۶۶	۳/۰۲۲۸۶	۲/۵۹۴۱۳	۲/۷۹۸۲۱	۲/۷۹۷۶۰	۳/۰۰۸۸۷	۲/۶۰۷۰۰
Ni	۲/۲۵۴۸	۲/۲۵۴۹۵	۲/۲۶۶۵۹	۲/۳۵۷۱۸	۳/۶۰۵۷۸	۳/۶۱۶۳۷	۲/۲۵۴۶۴	۲/۲۵۷۰۶
Cu	۷/۴۵۱۶	۷/۴۵۵۶۹	۷/۳۰۴۸۲۳	۷/۴۸۱۶۴۷	۸/۷۰۰۹۱۷	۸/۷۱۱۲۲۵	۷/۴۵۴۰۸۴	۷/۴۵۳۹۶۲

با توجه به مقادیر محاسبه شده انرژی تشکیل در جداول ۴-۲۲ و ۴-۲۳ برای انرژی تشکیل در آلایش ۴٪ و ۸٪ اتم Ti پایداری است. در آلایش ۸٪ اتم Ti در موقعیت وسط دور در حالت فرومغناطیس پایداری است. و در آلایش ۴٪ اتم Ti به دلیل دارا بودن کمترین مقدار انرژی تشکیل در موقعیت لبه پایداری می‌باشد. این نتایج محاسبه شده با نتایج جداول ۴-۱۲ و ۴-۱۳ و همچنین با مقادیر انرژی پیوندی محاسبه شده در جداول ۴-۱۹ و ۴-۲۰ و ۴-۲۱ مطابقت دارد.

جدول ۴-۲۳ : مقادیر انرژی تشکیل نانوصفحه دسته صندلی AIN (۴,۴) باغلظت ۴٪ در موقعیت لبه و وسط آلیش یافته با عناصر واسطه

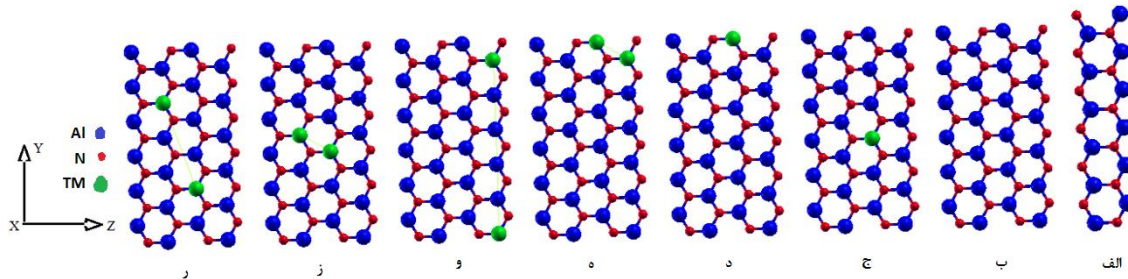
آلاینده	موقعیت	لبه	وسط
Ti		۰/۱۷۰۴۷	۰/۱۷۰۶۶
V		۰/۹۴۸۰۸۱	۰/۹۴۸۵۳۹
Cr		۴/۲۵۹۴۶۸	۴/۲۵۹۶۸
Mn		۴/۲۹۸۳۸۷	۴/۲۹۸۴۵۲
Fe		۱/۱۰۶۲۸	۱/۱۰۶۱۴۹
Co		۱/۳۹۷۱۷۶	۱/۳۹۶۹۶
Ni		۱/۸۰۷۳۹۵	۱/۸۰۶۶۶
Cu		۴/۴۹۷۵۲۴	۴/۴۹۷۲۰۱

#### ۴-۵-۲ نانوصفحه AIN زیگزاگ (۶,۰) آلیش یافته با عناصر واسطه

جهت بررسی آلیش نانوصفحه زیگزاگ AIN (۶,۰) توسط عناصر واسطه‌ی مغناطیسی (Cu, Fe, Co, Mn, V, Cr, Ni, Ti)، سلول واحد نانوصفحه (۶,۰) که در صفحه Y Z می‌باشد در راستای Z دو برابر شده است و از یک ابر سلول  $2 \times 1 \times 1$ ، استفاده شده است. برای اینکه از برهم کنش‌های بین صفحات جلوگیری شود در راستای غیر تناوبی X حدود  $12 \text{Å}$  خلا در نظر گرفته شده است.

این ابر سلول دارای ۲۴ اتم Al و ۲۴ اتم N می‌باشد و جایگزینی یک و دو اتم از عناصر واسطه در مکان Al در نانوصفحه (۶,۰) منجر به آلیش ۴٪ و ۸٪ در ابرسلول‌های انتخابی می‌شود. در حضور ناخالصی ابر سلول دارای ۴۸ اتم است. با آلیش ۴٪ دارای ۲۳ اتم Al و ۲۴ اتم N که یک جایگاه Al با ۴٪ آلیش ناخالصی مغناطیسی عناصر واسطه اشغال شده‌اند و با آلیش ۸٪ ابر سلول دارای ۴۸ اتم می‌باشد، ۲۲ اتم Al و ۲۴ اتم N که دو جایگاه Al با ۸٪ آلیش ناخالصی مغناطیسی عناصر واسطه اشغال شده‌اند. آلیش تک اتم در دو حالت وسط و لبه و آلیش دوتایی در دو فاز فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیسی در دو وضعیت لبه و وسط و در دو حالت دور و نزدیک انجام گرفته است. (شکل ۴-۱۸) به ترتیب ساختار خالص، ابر سلول افزایش یافته خالص و ابرسلول آلیش یافته ۴٪ و ۸٪ در دو وضعیت

نزدیک و دور در دو حالت لبه و وسط نانوصفحه را نمایش می‌دهد. موقعیت اتم‌های مغناطیسی با رنگ سبز مشخص گردیده است.



شکل ۴-۱۸: الف) ساختار خالص نانوصفحه زیگزاگ ( $(6,0)$  AlN ب) ساختار افزایش یافته خالص AlN ج) آلایش ۴٪ در وسط د) آلایش ۴٪ در لبه ه) آلایش ۸٪ در لبه در وضعیت نزدیک و) آلایش ۸٪ در لبه در وضعیت دور ز) آلایش ۸٪ در وسط در وضعیت نزدیک ر) آلایش ۸٪ در وسط در وضعیت دور

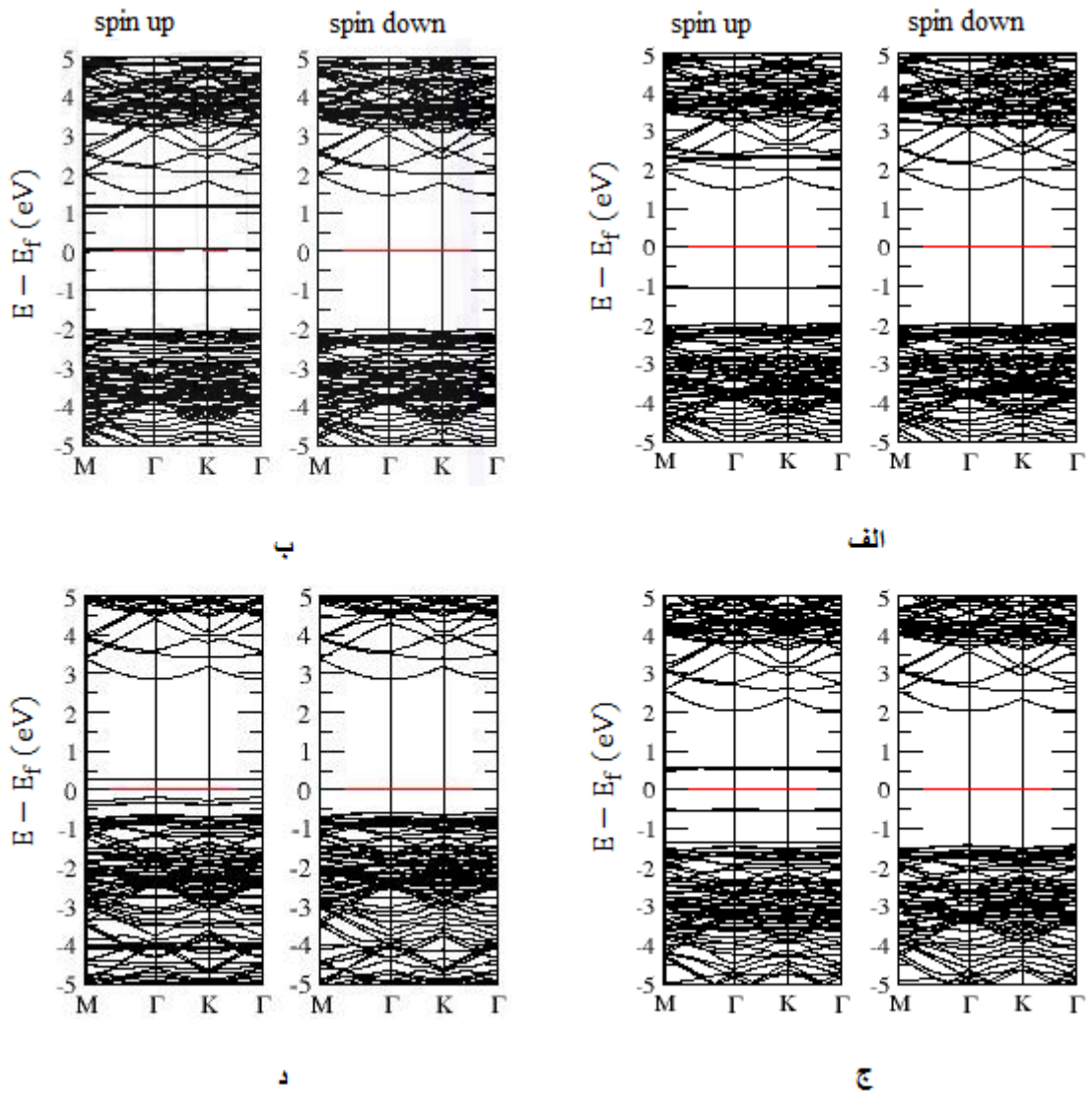
#### ۴-۵-۲-۱ بررسی خواص الکترونی نانوصفحه‌ی آلایش یافته $(6,0)$ AlN

ساختار نواری و چگالی حالت‌ها برای نانوصفحه‌ی  $(6,0)$  AlN خالص به ترتیب در شکل‌های ۳-۴ ب و ۴-۴ ب آمده است. بررسی‌ها نشان داد این ساختار یک نیم‌رسانا با گاف نواری مستقیم و مقدار گاف انرژی  $3.36$  eV به ازای هر دو اسپین بالا و اسپین پایین می‌باشد. موقعیت تراز فرمی برای نمونه خالص این نانوصفحه در انرژی  $-3.5242$  eV بدست آمده است. تقارن نمودار چگالی حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین همچنین مقدار گشتاور مغناطیسی کل ناچیز، بدست آمده ( $0.00002 \mu_B$ ) نشان دهنده غیر مغناطیسی بودن نمونه خالص می‌باشد.

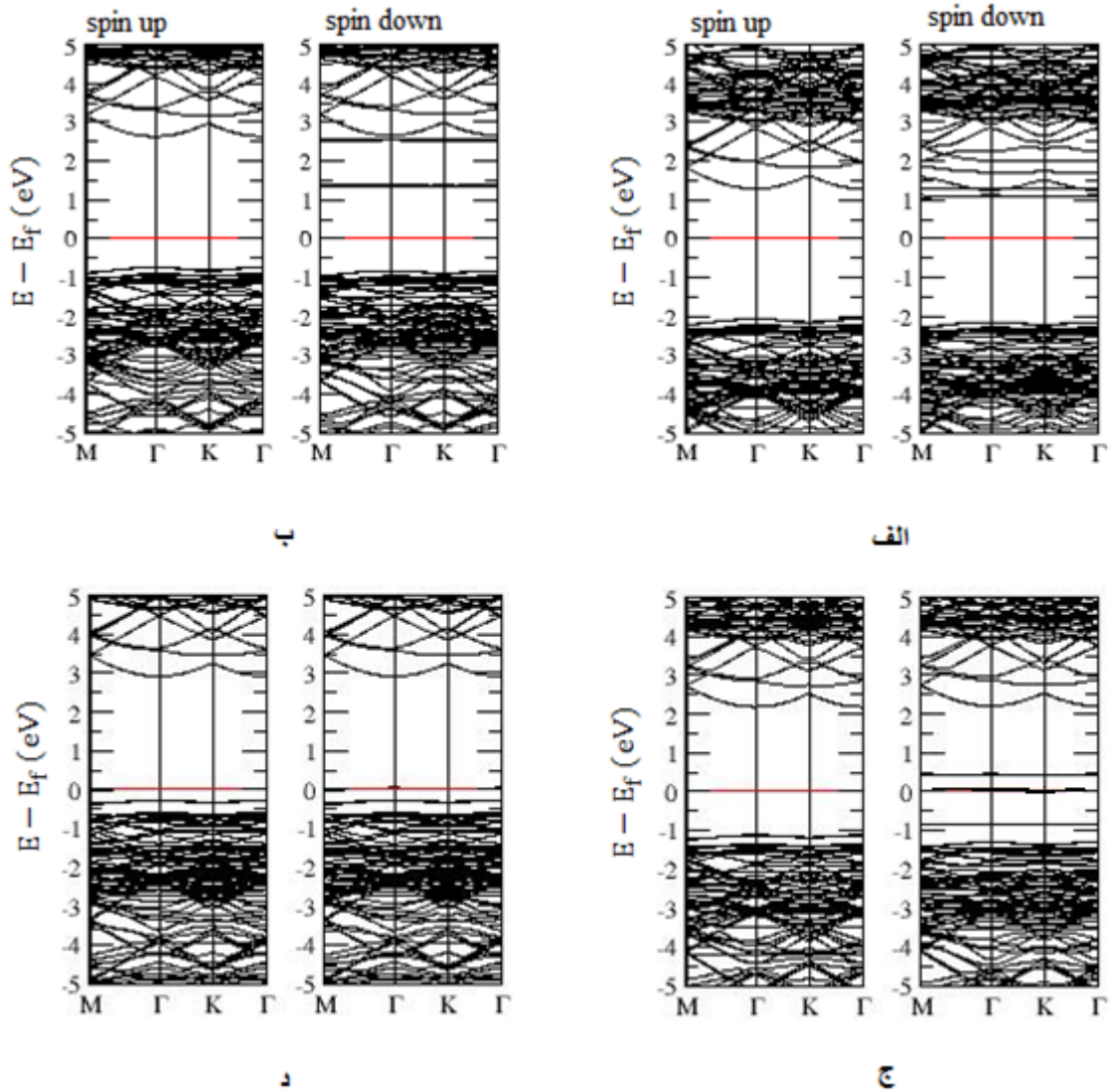
#### ۴-۵-۲-۱-۱ ساختار نواری نانوصفحه‌ی آلایش یافته $(6,0)$ AlN

با بررسی ساختار نواری نانوصفحه‌ی آلایش یافته  $(6,0)$  AlN با ۴٪ درصد آلایش در لبه و وسط و ۸٪ آلایش در دو موقعیت دور و نزدیک در دو حالت لبه و وسط و در دو فاز فرومغناطیسی و آنتی‌فرومغناطیسی و مقایسه آن با ساختار نواری نمونه خالص مشاهده شد که بعد از آلایش نوارهایی در میان گاف نواری خالص ایجاد شده و باعث تغییر شکل ساختار نواری و اندازه گاف انرژی شده است. مقدار و نوع گاف به ازای اسپین بالا و اسپین پایین و موقعیت تراز فرمی و رفتار الکترونی نمونه‌های

آلایش یافته در جداول ۴-۲۴، ۴-۲۵ و ۴-۲۶ گزارش شده است. ساختار نواری نانوصفحه‌ی آلایش یافته‌ی  $\text{AlN}$  (۶،۰) با ۴٪ آلایش در موقعیت وسط ساختار در شکل‌های ۴-۱۹ و ۴-۲۰ رسم شده است.



شکل ۴-۱۹: ساختار نواری نانوصفحه‌ی آلایش یافته (۶،۰) با درصد آلایش ۴٪ در وسط الف)  $\text{Ti}$ ، ب)  $\text{V}$ ، ج)  $\text{Cr}$ ، د)  $\text{Mn}$



شکل ۴-۲۰: ساختار نواری نانوصفحه‌ی آلایش یافته (۶,۰) با درصد آلایش ۴٪ در وسط الف (Fe، ب) Co، ج) Ni، د) Cu

جدول ۴-۲۴: گاف نواری و موقعیت تراز فرمی بر حسب  $eV$  در آلیش ۴٪ نانوصفحه AIN (۰،۶)

رفتار الکترونی	موقعیت تراز فرمی	گاف اسپین پایین	گاف اسپین بالا	آلیش
DMS	-۳/۶۲۰۳	م ۳/۳	م ۲/۴	در لبه ۴٪ - Ti
DMS	-۴/۶۲۹۲	م ۳/۳	م ۱/۸	در لبه ۴٪ - V
DMS	-۴/۱۳۲۴	م ۳/۴	م ۱	در لبه ۴٪ - Cr
DMS	-۴/۹۶۳۹	م ۳/۴	م ۰/۴	در لبه ۴٪ - Mn
DMS	-۳/۳۸۰۹	م ۳	م ۳/۲	در لبه ۴٪ - Fe
DMS	-۴/۷۳۸۶	م ۲/۱	م ۳/۲	در لبه ۴٪ - Co
HM	-۴/۲۹۳۶	۰	م ۳/۲	در لبه ۴٪ - Ni
NMM	-۵/۰۴۴۷	۰	۰	در لبه ۴٪ - Cu
DMS	-۳/۶۲۰۴	م ۳/۳	م ۲/۴	دروسط ۴٪ - Ti
HM	-۳/۵۸۰۱	م ۳/۴	۰	دروسط ۴٪ - V
DMS	-۴/۱۳۲۴	م ۳/۳	م ۱	دروسط ۴٪ - Cr
DMS	-۴/۹۶۵۴	م ۳/۳	م ۰/۴	دروسط ۴٪ - Mn
DMS	-۳/۳۸۱۰	م ۳/۱	م ۳/۲	دروسط ۴٪ - Fe
DMS	-۴/۷۳۸۶	م ۲/۱	م ۳/۲	دروسط ۴٪ - Co
HM	-۴/۲۹۳۶	۰	م ۳/۲	دروسط ۴٪ - Ni
NMM	-۵/۰۳۳۸	۰	۰	در وسط ۴٪ - Cu



جدول ۴-۲۵: گاف نواری و موقعیت تراز فرمی بر حسب eV در آلیش ۸٪ نانوصفحه AIN (۰,۶) در فاز فرومغناطیس

آلیش	گاف اسپین بالا	گاف اسپین پایین	موقعیت تراز فرمی	رفتار الکترونی
در لبه دور ۸٪ - Ti	م <sup>۲/۴</sup>	م <sup>۳/۳</sup>	-۳/۶۷۷۶	DMS
در لبه دور ۸٪ - V	۰	م <sup>۳/۳</sup>	-۳/۵۴۱۸	HM
در لبه دور ۸٪ - Cr	م <sup>۰/۴</sup>	م <sup>۳/۳</sup>	-۴/۳۱۰۵	DMS
در لبه دور ۸٪ - Mn	۰	م <sup>۳/۴</sup>	-۴/۹۱۴۸	HM
در لبه دور ۸٪ - Fe	م <sup>۳/۱</sup>	م <sup>۲/۶</sup>	-۴/۰۹۴۷	DMS
در لبه دور ۸٪ - Co	م <sup>۳/۱</sup>	م <sup>۱/۵</sup>	-۴/۶۷۱۴	DMS
در لبه دور ۸٪ - Ni	م <sup>۳/۱</sup>	م <sup>۰/۸ غم</sup>	-۴/۸۵۵۱	DMS
در لبه نزدیک ۸٪ - Ti -	م <sup>۲/۴</sup>	م <sup>۳/۳</sup>	-۳/۶۷۰۵	DMS
در لبه نزدیک ۸٪ - V -	۰	م <sup>۳/۳</sup>	-۳/۵۴۴۱	HM
در لبه نزدیک ۸٪ - Cr -	م <sup>۰/۴</sup>	م <sup>۳/۳</sup>	-۴/۲۸۰۸	DMS
در لبه نزدیک ۸٪ - Mn -	۰	م <sup>۳/۳</sup>	-۴/۹۱۳۷	HM
در لبه نزدیک ۸٪ - Fe -	م <sup>۳/۰۴</sup>	م <sup>۲/۵</sup>	-۴/۰۹۶۹	DMS
در لبه نزدیک ۸٪ - Co -	م <sup>۳/۱</sup>	م <sup>۱/۵</sup>	-۴/۶۷۶۳	DMS
در لبه نزدیک ۸٪ - Ni -	م <sup>۳</sup>	م <sup>۰/۸</sup>	-۴/۸۵۵۷	DMS

جدول ۴-۲۶: گاف نواری و موقعیت تراز فرمی بر حسب eV در آرایش ۸٪ نانوصفحه AIN (۰,۶) در فاز فرومغناطیس

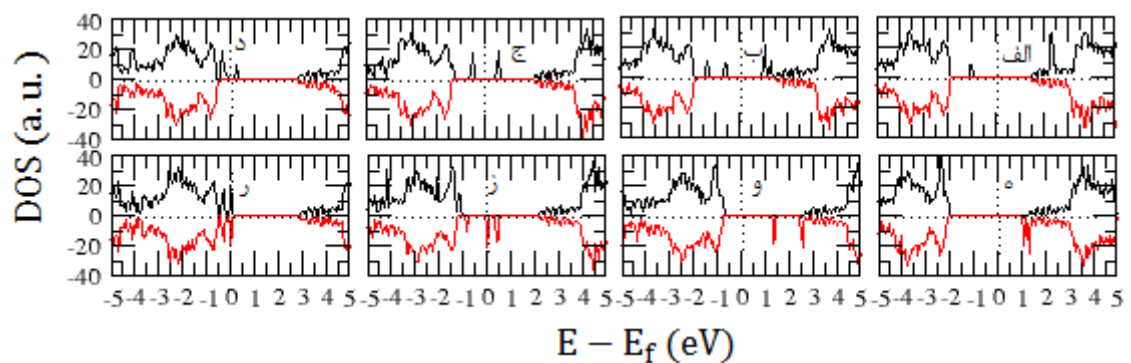
آرایش	گاف اسپین بالا	گاف اسپین پایین	موقعیت تراز فرمی	رفتار الکترونی
دروسط نزدیک Ti - ٪۸	۲/۴ م	۳/۲ م	-۳/۶۷۰۶	DMS
دروسط نزدیک V - ٪۸	۰	۳/۱ م	-۳/۵۴۳۱	HM
دروسط نزدیک Cr - ٪۸	۰/۴ م	۳/۳ م	-۴/۲۸۰۶	DMS
دروسط نزدیک Mn - ٪۸	۰	۳/۴ م	-۴/۹۱۳۷	HM
دروسط نزدیک Fe - ٪۸	۳/۴ م	۲/۵ م	-۴/۰۹۶۳	DMS
دروسط نزدیک Co - ٪۸	۳/۱ م	۱/۵ م	-۴/۶۷۶۳	DMS
دروسط نزدیک Ni- ٪۸	۳ م	۰/۸ م	-۴/۸۵۶۶	DMS
دروسط دور ٪۸ - Ti	۲/۴ م	۳/۳ م	-۲/۵۷۷۴	DMS
دروسط دور ٪۸ - V	۰	۳/۲ م	-۳/۵۹۸۰	HM
دروسط دور ٪۸ - Cr	۰/۸ م	۳/۳ م	-۴/۱۳۸۶	DMS
دروسط دور ٪۸ - Mn	۰/۳۵ م	۳/۳ م	-۴/۹۸۸۵	DMS
دروسط دور ٪۸ - Fe	۳/۲ م	۳/۱ م	-۳/۲۹۴۶	DMS
دروسط دور ٪۸ - Co	۳/۲ م	۲/۱ م	-۴/۶۸۸۸	DMS
دروسط دور ٪۸ - Ni	۳/۲ م	۰	-۴/۳۰۸۶	HM

با توجه به جداول ۴-۲۴، ۴-۲۵ و ۴-۲۶ افزایش آلایش در فاز فرو مغناطیس باعث کاهش گاف نواری اسپین بالا و اسپین پایین می‌شود. نتیجه اختلاف گاف بین دو حالت اسپینی، باعث ایجاد یک قطبش اسپینی اطراف تراز فرمی می‌شود. بیشترین اختلاف در آلایش ۸٪ Mn و به صورت فرومغناطیس و در وضعیت لبه دور و در وضعیت وسط نزدیک می‌باشد. در جدول ۴-۲۴ در آلایش ۴٪ Ni در وضعیت لبه و وسط و V در وضعیت وسط با توجه به اینکه گاف اسپین پایین Ni و گاف اسپین بالای V صفر است از خود رفتار نیم‌فلزی نشان می‌دهند. و در آلایش ۸٪ در فاز فرومغناطیس Ni در وضعیت وسط دور، گاف اسپین پایین Ni صفر است و در فاز فرو مغناطیس V در تمام وضعیت‌ها، و Mn در موقعیت‌های لبه دور و نزدیک و وسط نزدیک از خود رفتار نیم‌فلزی نشان می‌دهند. ما بقی نمونه‌های آلایش یافته در جداول ۴-۲۵ و ۴-۲۶ نیم‌رسانای مغناطیسی رقیق شده‌اند. در نمونه‌های آلایش یافته موقعیت تراز فرمی در مقایسه با نمونه‌ی خالص (۳/۵۲۴۲-) بجز در Fe در آلایش ۴٪ در موقعیت وسط و در آلایش ۸٪ Fe و Ti در موقعیت وسط دور ما بقی نمونه‌های آلایش یافته، افزایش یافته است.

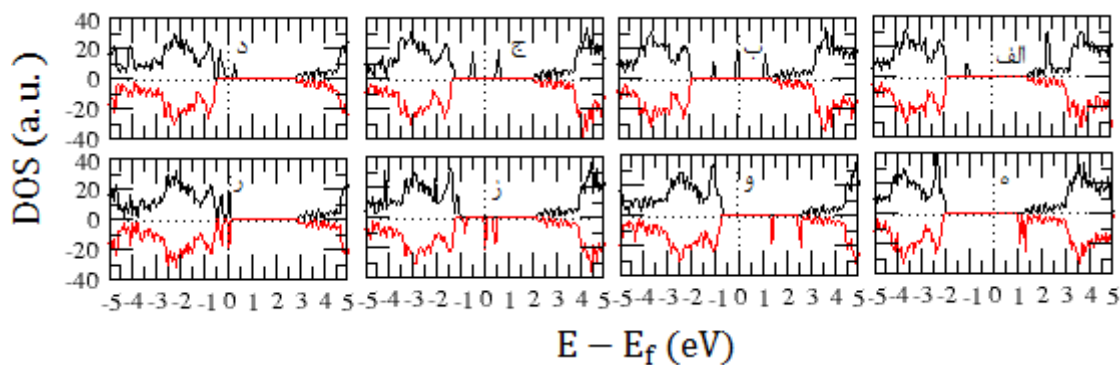
#### ۴-۵-۲-۱-۲ بررسی چگالی حالت‌های نانوصفحه‌ی آلایش یافته AIN زیگزاگ (۶,۰)

چگالی حالت‌های نانوصفحه‌ی (۶,۰) آلایش یافته با عناصر واسطه در دو موقعیت دور و نزدیک و در دو حالت لبه و وسط با آلایش ۸٪ و ۴٪ با عناصر واسطه بررسی شده است. در شکل ۴-۴ ب که برای نمونه خالص است مشاهده می‌شود که در اسپین بالا و اسپین پایین نمودار کاملا متقارن است. در این حالت می‌بینیم که گشتاور مغناطیسی کل آن صفر است. چگالی حالت‌های نانوصفحه AIN (۶,۰) آلایش یافته با عناصر واسطه در شکل‌های ۴-۲۱ تا ۴-۳۰ رسم شده است. نتایج حاصل همانند نانوصفحه (۴,۴) نشان دهنده سهم قابل ملاحظه‌ی هیبریداسیون اوربیتالی TM-۳d و N-۲P‌های همسایه‌ی اطراف آن است با نتایج حاصل از رسم نمودار چگالی حالت‌های کلی افزایش میزان آلایش TM در فاز فرومغناطیس باعث افزایش حالت‌ها در ما بین گاف نواری و باعث کاهش اندازه گاف می‌گردد. همچنین عدم تقارن در نمودارهای چگالی حالت‌ها در اسپین بالا و پایین و گشتاور مغناطیسی غیر صفر بدست

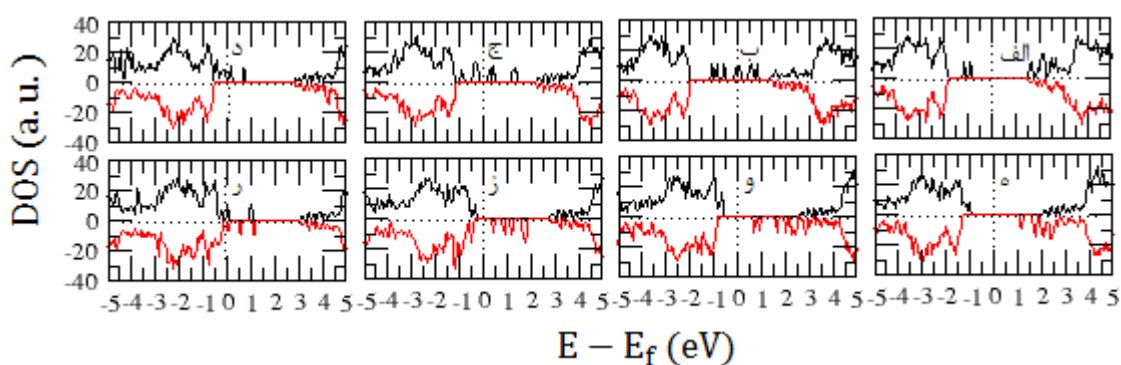
آمده نشان دهنده قطبش اسپینی اطراف تراز فرمی می‌باشد. با توجه به نمودار چگالی حالت‌ها، حالت‌های قطبشی ایجاد شده در فاز فرومغناطیس، همانند نانوصفحه (۴,۴) به ازای آرایش Cr, V, Ti, Mn در نوار ظرفیت و نوار رسانش در حالت اسپین بالا و در آرایش Ni, Co, Fe در نوار رسانش به ازای اسپین پایین ایجاد شده است، که بیشترین سهم در حالت‌های قطبشی ایجاد شده ناشی از هیبریداسیون بین حالت‌های اوربیتالی  $TM-3d$  و  $N-2p$ ‌های همسایه اطراف نزدیک آن می‌باشد. این موضوع می‌تواند ناشی از عدم تقارن موقعیتی آلاینده‌ها در ساختار و طول پیوند متفاوتی که دو TM با N‌های همسایه و اطراف خود برقرار کرده است باشد. با توجه به آرایش اتم Cu در نانوصفحه  $AIN$  زیگزاگ (۶,۰) در فاز فرومغناطیسی در موقعیت‌های مختلف با غلظت ۴٪ و ۸٪ چون شاهد چگالی حالت‌های کاملا متقارن بودیم پس می‌توان نتیجه گرفت آرایش Cu بر روی نانوصفحه با توجه به اینکه هیچ گاف نواری نه در اسپین بالا و نه در اسپین پایین ایجاد نمی‌کند پس خاصیت مغناطیسی هم در این ماده ایجاد نمی‌کند و فلز غیر مغناطیسی می‌باشد. چگالی حالت‌های کلی اسپینی قطبیده نشان می‌دهد که نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) خالص نیمرسانای غیر مغناطیسی است درحالی‌که نانوصفحه آرایش یافته با عناصر واسطه نیمرسانای مغناطیسی رقیق شده یا نیم‌فلزاند.



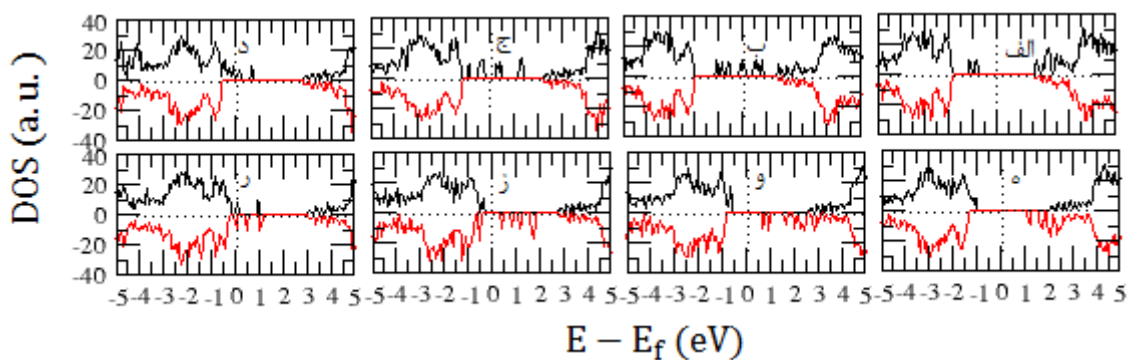
شکل ۴-۲۱: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ  $AIN$  (۶,۰) سهم عناصر واسطه با ۴٪ آرایش در وضعیت لبه الف(Ti)،  
 (ب) V، (ج) Cr، (د) Mn، (ه) Fe، (و) Co، (ز) Ni، (ر) Cu



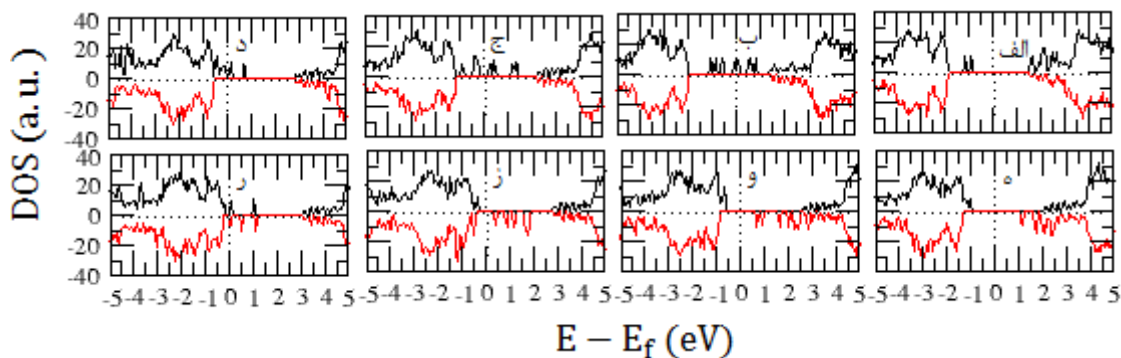
شکل ۴-۲۲: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ AlN (۶,۰) سهم عناصر واسطه با ۴٪ آرایش در وضعیت وسط الف)  
 (Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ح) Cu



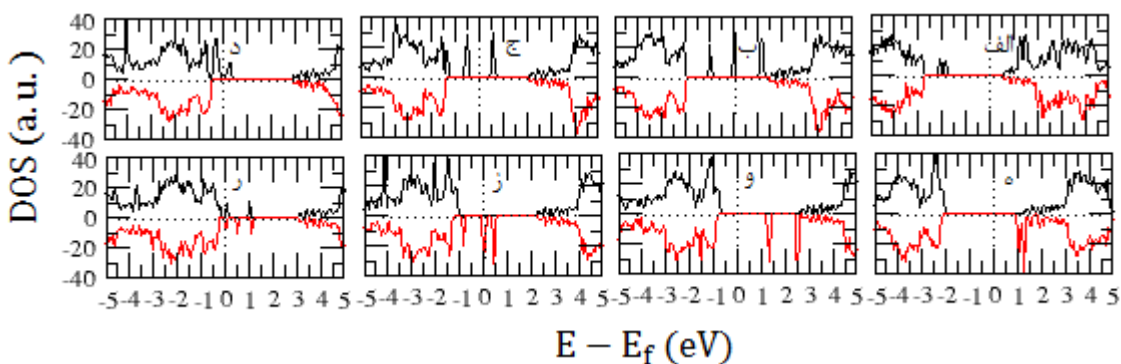
شکل ۴-۲۳: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ AlN (۶,۰) سهم عناصر واسطه با ۸٪ آرایش لبه نزدیک  
 فرومغناطیس الف) Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ح) Cu



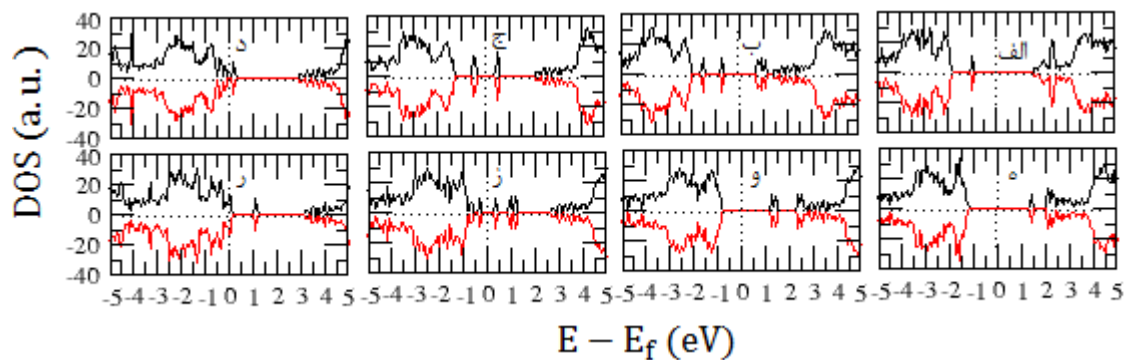
شکل ۴-۲۴: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ AlN (۶,۰) سهم عناصر واسطه با ۸٪ آرایش لبه دور  
 فرومغناطیس الف) Ti، ب) V، ج) Cr، د) Mn، ه) Fe، و) Co، ز) Ni، ح) Cu



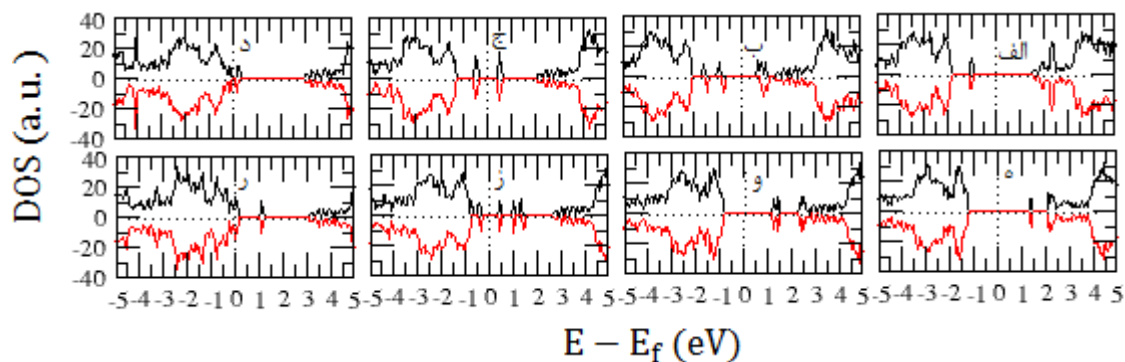
شکل ۴-۲۵: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ AlN (۶,۰) سهم عناصر واسطه با آرایش ۸٪ در وضعیت وسط نزدیک فرومغناطیس الف(Ti، ب، V، ج، Cr، د، Mn، ه، Fe، و، Co، ز، Ni، ر، Cu)



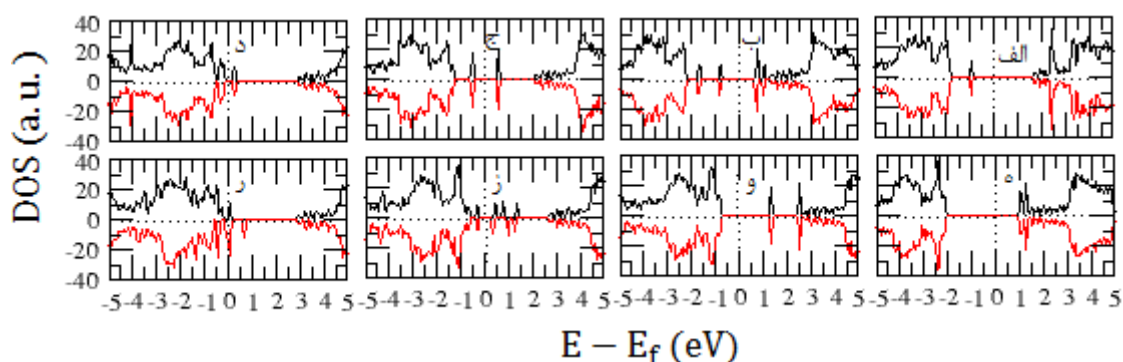
شکل ۴-۲۶: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ AlN (۶,۰) سهم عناصر واسطه با آرایش ۸٪ در وضعیت دور فرومغناطیس الف(Ti، ب، V، ج، Cr، د، Mn، ه، Fe، و، Co، ز، Ni، ر، Cu)



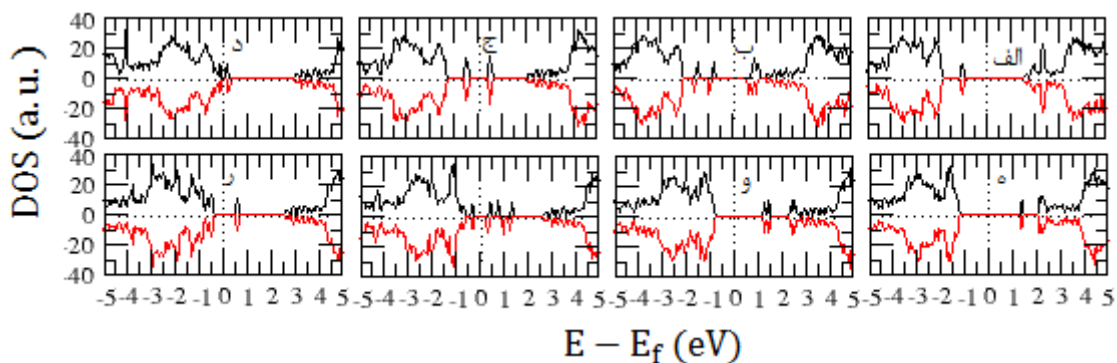
شکل ۴-۲۷: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ AlN (۶,۰) سهم عناصر واسطه با آرایش ۸٪ در وضعیت لبه دور آنتی فرومغناطیس الف(Ti، ب، V، ج، Cr، د، Mn، ه، Fe، و، Co، ز، Ni، ر، Cu)



شکل ۴-۲۸: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ AlN (۶,۰) سهم عناصر واسطه با آرایش ۸٪ در وضعیت لبه نزدیک آنتی‌فررومغناطیس (الف) Ti، (ب) V، (ج) Cr، (د) Mn، (ه) Fe، (و) Co، (ز) Ni، (ر) Cu



شکل ۴-۲۹: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ AlN (۶,۰) سهم عناصر واسطه با آرایش ۸٪ در وضعیت وسط دور آنتی‌فررومغناطیس (الف) Ti، (ب) V، (ج) Cr، (د) Mn، (ه) Fe، (و) Co، (ز) Ni، (ر) Cu



شکل ۴-۳۰: چگالی حالت‌های نانوصفحه زیگزاگ AlN (۶,۰) سهم عناصر واسطه با آرایش ۸٪ در وضعیت وسط نزدیک آنتی‌فررومغناطیس (الف) Ti، (ب) V، (ج) Cr، (د) Mn، (ه) Fe، (و) Co، (ز) Ni، (ر) Cu

#### ۴-۵-۲-۲ بررسی خواص مغناطیسی نانوصفحه‌ی آلایش یافته AIN زیگزاگ (۶,۰)

در این قسمت همانند نانوصفحه (۴,۴) قصد داریم به مطالعه خواص مغناطیسی نانوصفحه‌ی AIN (۶,۰) آلایش یافته بپردازیم مطالعه‌ی ما شامل محاسبه گشتاورهای مغناطیسی و شناسایی فاز پایدار مغناطیسی در نمونه‌ها می‌شود.

#### ۴-۵-۲-۱ شناسایی فاز پایدار مغناطیسی نانوصفحه‌ی آلایش یافته AIN (۶,۰)

اختلاف انرژی کل فاز فرومغناطیسی و فاز آنتی‌فرومغناطیسی در آلایش ۸٪ در حضور آلایش عناصر واسطه (Ti, Ni, Cr, V, Mn, Co, Fe, Cu) در نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) محاسبه گردید و نتایج آن در جداول ۴-۲۷ و ۴-۲۸ گزارش شده است. اختلاف انرژی بین دو فاز و فاز پایدار مغناطیسی نیز در جداول ۴-۲۷ و ۴-۲۸ گزارش شده است. اختلاف انرژی به صورت  $E_{\text{فرو}} - E_{\text{آنتی}}$  محاسبه شده است. انرژی کل ابر سلول نانوصفحه‌ی AIN (۶,۰) خالص برابر با (۷۸۷۹/۳۱۲۸۰۳ eV) بدست آمد.

جدول ۴-۲۷: مقادیر اختلاف انرژی و فاز پایدار مغناطیسی نانوصفحه (۶,۰) AIN آلایش یافته در دو وضعیت لبه دور و لبه نزدیک باغلظت ۸٪ با عناصر واسطه

موقعیت آلایند	دور		نزدیک	
	اختلاف انرژی	فاز پایدار	اختلاف انرژی	فاز پایدار
Ti	-۰/۰۰۸	AFM	-۰/۰۰۷	AFM
V	-۰/۱۳۲	AFM	-۰/۱۷۷	AFM
Cr	۰/۴۲۷	FM	۰/۴۱۲	FM
Mn	۰/۵۸۵	FM	۰/۵۳۲	FM
Fe	-۰/۳۰۳	AFM	-۰/۳۰۹	AFM
Co	-۰/۴۶۵	AFM	-۰/۴۰۶	AFM
Ni	۰/۱۱۶	FM	۰/۰۰۷	FM
Cu	۰/۲۴۸	FM	۰/۲۳۱	FM



جدول ۴-۲۸: مقادیر اختلاف انرژی و فاز پایدار مغناطیسی نانوصفحه (۶,۰) AIN آرایش یافته در دو وضعیت وسط دور و وسط نزدیک با غلظت ۸٪ با عناصر واسطه

موقعیت آلاینده	دور		نزدیک	
	اختلاف انرژی	فاز پایدار	اختلاف انرژی	فاز پایدار
Ti	۰/۰۰۰۱	FM	-۰/۰۰۷	AFM
V	-۰/۶۳۶	AFM	-۰/۱۷۸	AFM
Cr	۰/۰۰۱	FM	۰/۴۱۰	FM
Mn	۰/۰۰۷	FM	۰/۵۳۱	FM
Fe	۰/۰۰۰۰۶	FM	-۰/۳۰۹	AFM
Co	-۰/۰۰۰۰۶	AFM	-۰/۴۰۷	AFM
Ni	-۰/۹۲۸	AFM	۰/۰۰۶	FM
Cu	۰/۰۴۴	FM	۰/۲۴۵	FM

با توجه به مقادیر گزارش شده در جداول مذکور و اختلاف انرژی‌های بدست آمده فاز پایدار مغناطیسی نانوصفحه (۶,۰) آرایش یافته با Cu, Mn, Cr به صورت فاز فرومغناطیسی و در آرایش V و Co به صورت آنتی‌فرومغناطیسی به دست آمد. فاز پایدار مغناطیسی در آرایش عناصر یاد شده در دو وضعیت متفاوت لبه و وسط و در دو حالت دور و نزدیک وابسته به فاصله TMها از یکدیگر نبود و مستقل از مکان آرایش می‌باشد و در هر وضعیت به یک صورت بدست آمد. اما در مورد آرایش Ni, Fe, Ti شاهد این بودیم که فاصله‌ی آنها از یکدیگر، بر نوع فاز مغناطیسی ساختار اثر می‌گذارد. به این صورت که فاز پایدار ساختار در آرایش Fe در وضعیت وسط دور به صورت فرومغناطیسی و در وضعیت لبه دور، لبه نزدیک و وسط نزدیک به صورت آنتی‌فرومغناطیسی می‌باشد.

#### ۴-۵-۲-۲-۲ بررسی گشتاورهای مغناطیسی در نانو صفحه‌ی AIN (۶,۰) آرایش یافته

نانوصفحه‌ی AIN (۶,۰) با عناصر واسطه (Ti, Ni, Cr, V, Mn, Co, Fe, Cu) با آرایش ۴٪ در لبه و وسط و با آرایش ۸٪ در وضعیت‌های مختلف در دو فاز فرومغناطیسی و آنتی‌فرومغناطیسی بررسی

شده است. پس از محاسبه گشتاورهای مغناطیسی که مقادیر آن در جداول ۴-۲۹ الی ۴-۳۳ گزارش شده است، نتیجه به صورت نمودارهایی در شکل‌های ۴-۳۰ و ۴-۳۱ ترسیم شده است.

با توجه به فاز پایدار مغناطیسی نظم مغناطیسی حالت پایه توسط جفت‌شدگی گشتاورهای مغناطیسی عناصر مغناطیسی تعیین می‌گردد که این جفت‌شدگی توسط مدل‌های تبادلی صورت می‌گیرد. بر این اساس به منظور توصیف دقیق‌تر نظم مغناطیسی در ساختارهای آلیس یافته، گشتاورهای کلی ایجاد شده در ساختار و سهم گشتاور TMها در آلیس‌ها و فازهای بررسی شده در جداول ۴-۲۹ الی ۴-۳۳ گزارش شده است. گشتاور مغناطیسی هر یک از اتم‌ها در ساختار و هم‌چنین مقدار گشتاور مغناطیسی کل ساختار در نمونه‌های آلیس یافته با عناصر واسطه ۸٪ (دو اتم ناخالصی) نانوصفحه‌ی AIN (۶,۰) در دو حالت دور و نزدیک در دو وضعیت لبه و وسط در دو فاز فرومغناطیس و آنتی-فرومغناطیس و هم‌چنین گشتاور مغناطیسی اتم‌ها در ساختار و مقدار گشتاور مغناطیسی کل ساختار در نمونه‌های آلیس یافته با عناصر واسطه ۴٪ (یک اتم ناخالصی) نانوصفحه‌ی AIN (۶,۰) در دو وضعیت لبه و وسط در جدول ۴-۳۳ گزارش شده است. با توجه به جداول مذکور در تمامی ساختارها با افزایش آلیس در فاز فرومغناطیس شاهد افزایش گشتاور کل در ساختار می‌باشیم. بیشترین گشتاور مغناطیسی کلی و جزئی به ترتیب مربوط به حالت آلیس با اتم Fe، Mn در فاز فرومغناطیسی بیشترین سهم گشتاورهای جزئی مربوط به TMها می‌باشند. در آلیس ۴٪ بیشترین مقدار گشتاور مغناطیسی کل مربوط به Fe و کمترین آن مربوط به Ti می‌باشد. اما کمترین مقدار گشتاور مغناطیسی جزئی TM مربوط به اتم Ti و بیشترین گشتاور مغناطیسی جزئی مربوط به اتم Mn می‌باشد. در آلیس ۸٪ بیشترین گشتاور مغناطیسی کل مربوط به اتم Fe و کمترین مقدار گشتاور مغناطیسی کل مربوط به اتم Ti و V می‌باشد.

جدول ۴-۲۹: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت لبه نزدیک نانوصفحه دسته صندلی (۶,۰) AIN ۸٪.

	فاز	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
گشتاور آلومینیم ( $\mu_B$ )	FM	-۰/۰۸	-۰/۰۵	۰/۰۳	۰/۱۱	۰/۳۰	۰/۳۶	۰/۳۰
	AFM	۰/۰۰۰۹	-۰/۰۱	-۰/۰۰۲	۰/۰۰۵	۰/۰۰۲	-۰/۰۰۹	-۰/۰۰۹
گشتاور نیتروژن ( $\mu_B$ )	FM	۰۰/۵۰۴	۱۰/۳۰	-۱/۵۴	-۱/۳۰	۰/۶۵	۱/۱۸	۱/۷۰
	AFM	.	.	.	.	.	۰/۰۰۱	۰/۰۴
گشتاور ناخالصی (TM1)	FM	۱/۲۹	۲/۶۸	۳/۷۵	۴/۵۹	۴/۵۱	۳/۲۲	۱/۹۹
	AFM	۱/۳۱	۲/۵۲	۳/۶۴	۴/۶۴	۴/۵۰	۳/۱۱	۱/۸۹
گشتاور ناخالصی (TM2)	FM	۱/۲۹	۲/۶۸	۳/۷۵	۴/۵۹	۴/۵۱	۳/۲۲	۱/۹۹
	AFM	-۱/۳۱	-۲/۵۲	-۳/۶۴	-۴/۶۵	-۴/۴۲	-۳/۱۱	-۱/۹۳
گشتاور کل ساختار (AITMN) ( $\mu_B$ )	FM	۲	۴	۶	۸	۱۰	۸	۶
	AFM	.	.	.	.	.	.	.

جدول ۴-۳۰: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت لبه دور نانوصفحه دسته صندلی (۶,۰) AIN ۸٪.

	فاز	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
گشتاور آلومینیم ( $\mu_B$ )	FM	-۰/۰۰۸	-۰/۰۵	۰/۰۲	۰/۱۱	۰/۳۰	۰/۳۵	۰/۲۹
	AFM	.	.	.	.	.	.	.
گشتاور نیتروژن ( $\mu_B$ )	FM	-۰/۵	-۱/۳	-۱/۵	-۱/۲	۰/۶۶	۱/۱	۱/۷
	AFM	.	.	.	.	.	.	.
گشتاور ناخالصی (TM1)	FM	۱/۲۹	۲/۶۸	۳/۷۵	۴/۵۹	۴/۵۱	۳/۲۲	۱/۹۹
	AFM	۱/۳۰۸	۲/۵۰۹	۳/۶۴	۴/۶۳۱	۴/۴۳	۳/۱۰	۱/۹۳
گشتاور ناخالصی (TM2)	FM	۱/۲۹	۲/۶۸	۳/۷۵	۴/۵۹	۴/۵۱	۳/۲۲	۱/۹۹
	AFM	-۱/۳۰	-۲/۵۰	-۳/۶۴	-۴/۶۳	-۴/۴۳	-۳/۱۰	-۱/۹۳
گشتاور کل ساختار (AITMN) ( $\mu_B$ )	FM	۲	۴	۶	۸	۱۰	۸	۶
	AFM	.	.	.	.	.	.	.

جدول ۴-۳۱: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت وسط نزدیک نانوصفحه دسته صندلی (۶,۰) AIN ٪ ۸.

	فاز	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
گشتاور آلومینیم ( $\mu_B$ )	FM	-۰/۰۸	-۰/۰۵	۰/۰۳	۰/۱۱	۰/۳	۰/۳۶	۰/۳
	AFM	-۰/۰۰۱	۰/۰۱	۰/۰۰۳	-۰/۰۰۴	-۰/۰۰۲	۰/۰۰۰۹	۰
گشتاور نیتروژن ( $\mu_B$ )	FM	-۰/۵	-۱/۳	-۱/۵	-۱/۳	۰/۶۵	۱/۱۸	۱/۷
	AFM	-۰/۰۰۰۹	-۰/۰۱	۰/۰۰۲	۰/۰۰۰۹	۰	-۰/۰۰۱	۰
گشتاور ناخالصی (TM1)	FM	۱/۲۹	۲/۶۸	۳/۷۶	۴/۵۹	۴/۵۱	۳/۲۲۶	۱/۹۹
	AFM	۱/۳۱	۲/۵۱۹	۳/۶۴	۴/۶۵۸	۴/۴۳۲	۳/۱۱	۱/۹۲
گشتاور ناخالصی (TM2)	FM	۱/۲۹	۲/۶۸	۳/۷۵	۴/۵۹	۴/۵۱	۳/۲۲	۱/۹۹
	AFM	-۱/۳۱	-۲/۵۲	-۳/۶۴	-۴/۶۴۶	-۴/۴۳۳	-۳/۱۱	-۱/۹۱
گشتاور کل ساختار (AITMN) ( $\mu_B$ )	FM	۲	۴	۶	۸	۱۰	۸	۶
	AFM	۰	۰	۰	۰/۰۰۶	۰	۰	۰

جدول ۴-۳۲: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در ساختار، در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس در وضعیت وسط دور نانوصفحه دسته صندلی (۶,۰) AIN ٪ ۸.

	فاز	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
گشتاور آلومینیم ( $\mu_B$ )	FM	-۰/۱	-۰/۰۰۷	۰/۰۹	۰/۱۳	۰/۳۵	۰/۴۲	۰/۳۷
	AFM	-۰/۰۰۰۰۰۳	۰/۰۰۰۰۹	۰	-۰/۰۰۳	۰/۰۰۲	-۰/۰۰۱	۰/۰۰۲
گشتاور نیتروژن ( $\mu_B$ )	FM	-۰/۵	-۱/۳	-۱/۳	-۱/۳	۰/۶۵	۱/۱۸	۱/۸
	AFM	۰/۰۰۲	۰/۰۰۳	۰	۰/۰۰۱	-۰/۰۰۲	-۰/۰۰۰۹	۰/۰۰۳
گشتاور ناخالصی (TM1)	FM	۱/۳۰	۲/۶۶	۳/۶۳	۴/۵۹	۴/۴۹	۳/۱۹	۱/۸۸
	AFM	۱/۳۰	۲/۴۸	۳/۶۳	۴/۵۹	۴/۴۹	۳/۱۹	۲/۰۶
گشتاور ناخالصی (TM2)	FM	۱/۳۰	۲/۶۶	۳/۶۳	۴/۶۰	۴/۴۹	۳/۱۹	۱/۸۸
	AFM	۱/۳۰	-۲/۴۸	-۳/۶۳	-۴/۵۹	-۴/۴۹	-۳/۱۹	-۲/۰۶
گشتاور کل ساختار (AITMN) ( $\mu_B$ )	FM	۲	۴	۶	۸	۱۰	۸	۶
	AFM	۰	۰	۰	۰	۰	۰	۰

در فاز فرومغناطیس مشاهده می‌شود در حضور آلیش‌های Ti، V، Cr و Mn گشتاور کل ایجاد شده در ساختار از مجموع گشتاورهای TM کمتر و در نمونه‌های آلیش یافته با Fe، Co و Ni گشتاور کل ایجاد شده در ساختار از مجموع گشتاورهای TMها بیشتر می‌باشد. بررسی‌ها بر روی گشتاورهای موضعی Nهای همسایه TMها بیانگر این موضوع است که تمایل دارند در آلیش Ti، V، Cr و Mn به صورت آنتی‌فرومغناطیس و در آلیش Fe، Co و Ni به صورت فرومغناطیس به TM جفت شوند. در نتیجه Nهای همسایه TMها در مورد اول سهم گشتاور مغناطیسی منفی‌تر و در مورد دوم سهم گشتاور مغناطیسی مثبت‌تری در ساختار ایجاد می‌کند.

گشتاور مغناطیسی و سهم گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه در ساختارهای مختلف ۴٪ لبه و وسط ساختار بررسی و محاسبه شد. گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه برای آلیش Ti، Cr، V، Mn افزایش یافته و بیشینه‌ی مقدار آلیش Fe نشان می‌دهد. درحالی که با افزایش عدد اتمی از Fe به سمت Ni گشتاور مغناطیسی کل کاهش می‌یابد.

جدول ۴-۳۳: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیتريد، سهم گشتاور مغناطیس عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن، در وضعیت لبه و وسط نانوصفحه دسته صندلی (۶,۰) AlN ۴٪

	فاز	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
گشتاور آلومینیم ( $\mu_B$ )	لبه	-۰/۰۵	-۰/۰۰۴	۰/۰۴	۰/۰۶	۰/۱۸	۰/۲۱	۰/۱۹
	وسط	-۰/۰۵	-۰/۰۰۵	۰/۰۴	۰/۰۶	۰/۱۸	۰/۲۱	۰/۱۹
گشتاور نیتروژن ( $\mu_B$ )	لبه	-۰/۲۵	-۰/۴۸	-۰/۶۷	-۰/۶۵	۰/۳۳	۰/۵۹	۰/۹۲
	وسط	-۰/۲۵	-۰/۶۴	-۰/۶۷	-۰/۶۵	۰/۳۳	۰/۵۹	۰/۹۲
گشتاور ناخالصی (TM1)	لبه	۱/۳۰	۲/۴۹	۳/۶۳	۴/۵۸	۴/۴۹	۳/۱۹	۱/۸۸
	وسط	۱/۳۰۲	۲/۶۵	۳/۶۳	۴/۵۸	۴/۴۹	۳/۱۹	۱/۸۸
گشتاور کل ساختار (AITMN) ( $\mu_B$ )	لبه	۱	۲	۳	۴	۵	۴	۳
	وسط	۱	۲	۳	۴	۵	۴	۳

#### ۴-۵-۲-۲ بررسی پایداری ساختار نانوصفحه‌ی آلایش یافته AIN زیگزاگ (۶,۰)

همانطور که در قسمت قبل برای نانوصفحه (۴,۴) پایداری ساختار را بررسی کردیم برای ساختار (AINNS) نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) نیز با توجه به رابطه (۱-۴) و (۲-۴) پایداری نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) را با توجه به انرژی پیوندی و انرژی تشکیل مورد بررسی قرار می‌دهیم.

جدول ۴-۳۴: مقادیر انرژی پیوندی نانوصفحه دسته‌بندی (۶,۰) AIN با غلظت ۸٪ در موقعیت لبه دور و لبه نزدیک آلایش یافته با عناصر واسطه در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیس

موقعیت آلاینده	لبه دور		لبه نزدیک	
	FM	AFM	FM	AFM
Ti	۱۰۴/۶۳۲۰۹۸	۱۰۴/۶۲۳۶۶۵	۱۰۴/۶۲۸۲۵۲	۱۰۴/۶۲۰۵۳۶
V	۱۰۵/۶۴۲۵۳۴	۱۰۵/۵۱۰۵۰۴	۱۰۵/۶۴۲۷۷۶	۱۰۵/۶۴۵۳۴۶
Cr	۱۱۲/۴۶۸۳۷۶	۱۱۲/۸۹۶۳۶۸	۱۱۲/۴۸۳۷۸۶	۱۱۲/۸۹۶۷۷۳
Mn	۱۱۲/۲۹۲۹۵۳	۱۱۲/۸۷۸۳۶	۱۱۲/۲۸۹۴۰۳	۱۱۲/۸۲۱۶۴۶
Fe	۱۰۶/۶۹۳۹۴۲	۱۰۶/۳۹۰۷۹۲	۱۰۶/۶۹۰۳۱۴	۱۰۶/۳۸۰۹۶۲
Co	۱۰۷/۳۶۰۵۰۴	۱۰۶/۸۹۴۸۳۹	۱۰۷/۲۹۸۷۲۷	۱۰۶/۸۹۱۶۴۱
Ni	۱۰۶/۵۴۱۴۱۳	۱۰۶/۶۵۷۹۲۳	۱۰۶/۵۴۸۳۸۶	۱۰۶/۵۵۵۴۰۶
Cu	۱۱۱/۵۲۹۶۹	۱۱۱/۷۷۸۰۷	۱۱۱/۴۵۴۲۴	۱۱۱/۶۸۵۹۱

جدول ۴-۳۵: مقادیر انرژی پیوندی نانوصفحه دسته‌بندی (۶,۰) AIN با غلظت ۸٪ در موقعیت وسط دور و وسط نزدیک آلایش یافته با عناصر واسطه در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیس

موقعیت آلاینده	وسط دور		وسط نزدیک	
	FM	AFM	FM	AFM
Ti	۱۰۴/۶۱۹۵۲۳	۱۰۴/۶۱۹۶۰۵	۱۰۴/۶۲۸۲۸۴	۱۰۴/۶۲۰۵۵
V	۱۰۶/۱۸۶۱۶۲	۱۰۵/۵۴۹۷۸۳	۱۰۵/۶۴۳۲۰۹	۱۰۵/۴۶۴۵۳۲
Cr	۱۱۲/۸۱۰۶۹۳	۱۱۲/۸۱۲۳۴۱	۱۱۲/۴۸۵۸۹۸	۱۱۳/۱۵۳۶۸
Mn	۱۱۲/۸۳۳۰۶۵	۱۱۲/۸۴۰۶۰۳	۱۱۲/۲۸۹۳۴۲	۱۱۲/۸۲۱۰۱۴
Fe	۱۰۶/۴۹۲۸۶۱	۱۰۶/۴۹۲۹۲۱	۱۰۶/۶۹۰۲۷۳	۱۰۶/۳۸۰۸۵۸
Co	۱۰۷/۰۸۶۶۶۶	۱۰۷/۰۸۶۰۰۹	۱۰۷/۲۹۸۷۴۸	۱۰۶/۸۹۱۶۷۷
Ni	۱۰۷/۹۰۹۲۵۹	۱۰۶/۹۸۱۱۲۲	۱۰۶/۵۴۸۳	۱۰۶/۵۰۸۳
Cu	۱۱۱/۵۸۰۹	۱۱۲/۷۶۲۷۵	۱۱۱/۴۴۱۰۱	۱۱۱/۶۸۶۰۸

جدول ۴-۳۶: مقادیر انرژی پیوندی نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) AIN با غلظت ۴٪ در موقعیت لبه و وسط آرایش یافته با عناصر واسطه

آلاینده \ موقعیت	لبه	وسط
Ti	۵۲/۳۱۱۳۸۳	۵۲/۳۱۱۳۸۳
V	۵۲/۷۰۴۹۰۵۱	۵۳/۰۹۹۵۵۱
Cr	۵۶/۴۰۴۱۹	۵۶/۴۰۴۳۲۲
Mn	۵۶/۴۱۴۴۲۵	۵۶/۴۱۶۳۳
Fe	۵۳/۲۴۹۲۲۷	۵۳/۲۴۹۲۳
Co	۵۳/۵۴۱۸۳۷	۵۳/۵۴۱۵۵
Ni	۵۳/۹۵۹۴۳۱	۵۳/۹۶۰۰۹
Cu	۵۶/۶۸۳۳۲۹	۵۶/۶۸۲۷۴۲

در جداول ۴-۳۴ و ۴-۳۵ و ۴-۳۶ مقادیر انرژی پیوندی محاسبه شده برای ساختار زیگزاگ (۶,۰) آرایش یافته با عناصر واسطه در موقعیت‌های مختلف با غلظت‌های ۴٪ در دو حالت لبه و وسط، و با غلظت ۸٪ در دو حالت لبه و وسط در دو موقعیت دور و نزدیک و در دو فاز فرومغناطیسی و آنتی‌فرومغناطیسی آورده شده است. در آرایش ۴٪، در دو موقعیت وسط و لبه مطلوبترین و پایدارترین ساختار مربوط به آرایش ۴٪ اتم Ti، به دلیل دارا بودن کمترین مقدار انرژی پیوندی می‌باشد. در آرایش ۸٪، اتم‌های Co، V، در موقعیت وسط دور در فاز آنتی‌فرومغناطیسی و اتم‌های Mn، Cr، Cu، در موقعیت وسط نزدیک در فاز فرومغناطیسی پایدار می‌باشند. مطلوبترین و پایدارترین ساختار مربوط به آرایش ۸٪ اتم Ti در حالت فرومغناطیسی در موقعیت وسط دور به دلیل دارا بودن کمترین مقدار انرژی پیوندی می‌باشد.

جدول ۴-۳۷: مقادیر انرژی تشکیل نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) AIN با غلظت ۸٪ در موقعیت لبه نزدیک، لبه دور، وسط نزدیک و وسط دور آرایش یافته با عناصر واسطه در دو حالت فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیسی

موقعیت آلاینده	لبه دور		لبه نزدیک		وسط دور		وسط نزدیک	
	FM	AFM	FM	AFM	FM	AFM	FM	AFM
Ti	۰/۳۳۴۶۲	۰/۳۲۶۱۹	۰/۳۳۰۷۷	۰/۳۲۳۰۶	۰/۳۲۲۰۴	۰/۳۲۲۱۷	۰/۳۳۰۸۱	۰/۳۲۲۸۰
V	۱/۳۴۵۰۶	۱/۲۱۳۰۳	۱/۳۴۵۳۰	۱/۱۷۰۱۸	۱/۳۴۵۷۳	۱/۲۵۲۳۰	۱/۳۴۵۷۳	۱/۱۶۶۷۸
Cr	۸/۱۷۰۹۰	۸/۵۹۸۸۹	۸/۱۸۶۳۱	۸/۵۹۹۲۹	۸/۵۱۳۲۱	۸/۵۱۴۸۶	۸/۱۸۸۴۲	۸/۵۹۸۹۷
Mn	۷/۹۹۵۶۷	۸/۵۸۱۰۸	۷/۹۹۲۱۲	۸/۵۲۴۳۷	۸/۵۳۵۷۹	۸/۵۴۳۳۲	۷/۹۹۱۷۹	۸/۵۲۳۴۶
Fe	۲/۳۹۴۶۶	۲/۰۹۳۳۱	۲/۳۹۲۸۴	۲/۰۸۳۴۸	۲/۱۹۵۳۸	۲/۷۸۷۸۶	۲/۳۹۲۵۲	۲/۰۸۳۱۱
Co	۳/۰۶۳۰۳	۲/۵۹۷۳۶	۳/۰۰۱۲۵	۲/۵۹۴۱۶	۲/۷۸۹۱۹	۲/۶۸۳۶۴	۳/۰۰۱۰۰	۲/۵۹۳۹۳
Ni	۲/۲۴۳۹۳	۲/۳۶۰۴۴	۲/۲۵۰۹۱	۲/۲۵۷۹۳	۳/۶۱۱۷۸	۲/۶۸۳۶۴	۲/۲۵۰۵۵	۲/۲۵۷۴۱
Cu	۷/۲۳۲۲۱	۷/۴۸۰۵۹۱	۷/۱۵۶۷۶	۷/۳۸۸۴۳	۸/۴۲۱۱۲	۸/۴۶۵۲۷	۷/۱۴۳۲۶	۷/۳۸۸۶

باتوجه به مقادیر محاسبه شده انرژی تشکیل در جدول ۴-۳۷ در نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) و آرایش این ساختار با عناصر واسطه با غلظت ۸٪ (دو اتم ناخالصی) در موقعیت‌های مختلف در دو فاز فرومغناطیسی و آنتی فرومغناطیسی ساختاری که دارای انرژی تشکیل کمتری باشد، پایدارتر است. در حالت فرومغناطیسی در موقعیت وسط دور اتم Ti پایدارتر است. Cu، Mn، Ni و Cr در موقعیت لبه دور فرومغناطیسی پایدارتر هستند. Fe، Ti، Co و V در موقعیت وسط نزدیک آنتی فرومغناطیسی پایدارتر می‌باشند. و Mn در موقعیت وسط نزدیک فرومغناطیسی پایدارتر است. با توجه به تمامی آرایش‌ها و مقایسه مقادیر بدست آمده در آرایش ۸٪ می‌توان نتیجه گرفت که با آرایش اتم Fe در موقعیت وسط نزدیک در فاز آنتی فرومغناطیسی ساختار پایدارتر می‌باشد. و همچنین مشاهده می‌شود که پایداری و خواص مغناطیسی سیستم وابسته به مکان آرایش می‌باشد.

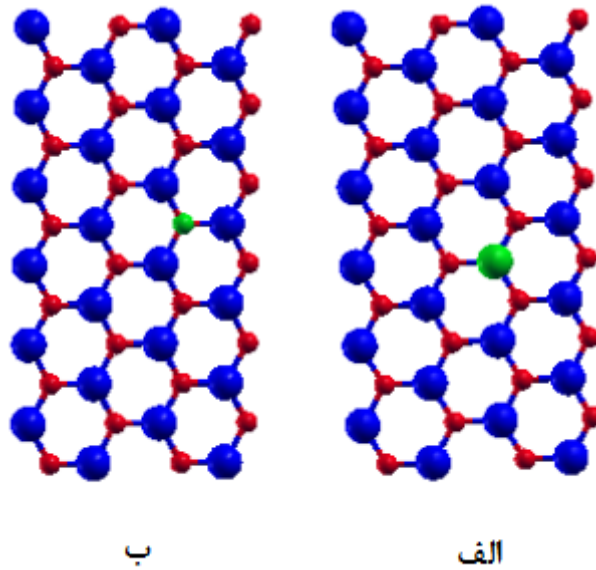


جدول ۴-۳۸: مقادیر انرژی تشکیل نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) AIN با غلظت ۴٪ در موقعیت لبه و وسط آرایش یافته با عناصر واسطه

موقعیت آلاینده	لبه	وسط
Ti	۰/۱۶۲۶	۰/۱۶۲۶
V	۰/۶۰۰۳	۰/۹۵۰۸
Cr	۴/۲۵۵۴	۴/۲۵۵۵
Mn	۴/۲۶۶۰	۴/۲۶۷۵
Fe	۱/۱۰۰۴	۱/۱۰۰۴
Co	۱/۳۹۳۱	۱/۳۹۲۸
Ni	۱/۸۱۰۶	۱/۸۱۱۱
Cu	۴/۵۳۵۴	۴/۵۳۴۰

مقادیر به دست آمده برای انرژی تشکیل نانوصفحه زیگزاگ AIN (۶,۰) آرایش یافته با عناصر واسطه با غلظت ۴٪ (یک اتم ناخالصی) در موقعیت‌های لبه و وسط ساختار در جدول ۴-۳۸ ذکر شده است. با توجه به مقادیر محاسبه شده انرژی تشکیل برای ساختار آرایش یافته با عناصر واسطه، در این آرایش ها پایدارترین ساختار، مربوط به آرایش نانوصفحه با اتم Ti است که دارای مقدار انرژی تشکیل کمتری می‌باشد.

در مرجع [۲۹] با توجه به محاسبه مقادیر انرژی تشکیل در نانوصفحه زیگزاگ AIN آرایش یافته با عناصر واسطه (Cr، Mn، Fe، Co، Ni) شکل ۴-۳۱ در موقعیت وسط ساختار (یک اتم ناخالصی) جایگزین شده در مکان Al مطابق شکل ۴-۳۱ الف و همچنین (یک اتم ناخالصی) جایگزین شده در مکان N، مطابق شکل ۴-۳۱ ب، نتایج جدول ۴-۳۹ بدست آمده است که مقادیر بدست آمده از ساختار آرایش یافته با عناصر واسطه جایگزین شده در مکان Al دارای کمترین مقادیر انرژی تشکیل می‌باشند. بنابراین با توجه به نتایج حاصل مناسب‌ترین مکان آرایش در ساختار، آرایش عناصر واسطه جایگزین شده در مکان Al می‌باشد. این نتایج تقریباً با روند محاسبات انرژی تشکیل در این تحقیق مطابقت دارد.



شکل ۴-۳۱: نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) AlN، آرایش یافته با عناصر واسطه در موقعیت وسط با غلظت ۴٪ (الف) در

مکان Al (ب) در مکان N

جدول ۴-۳۹: مقادیر انرژی تشکیل نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) AlN، در موقعیت وسط آرایش یافته با غلظت ۴٪ با

عناصر واسطه

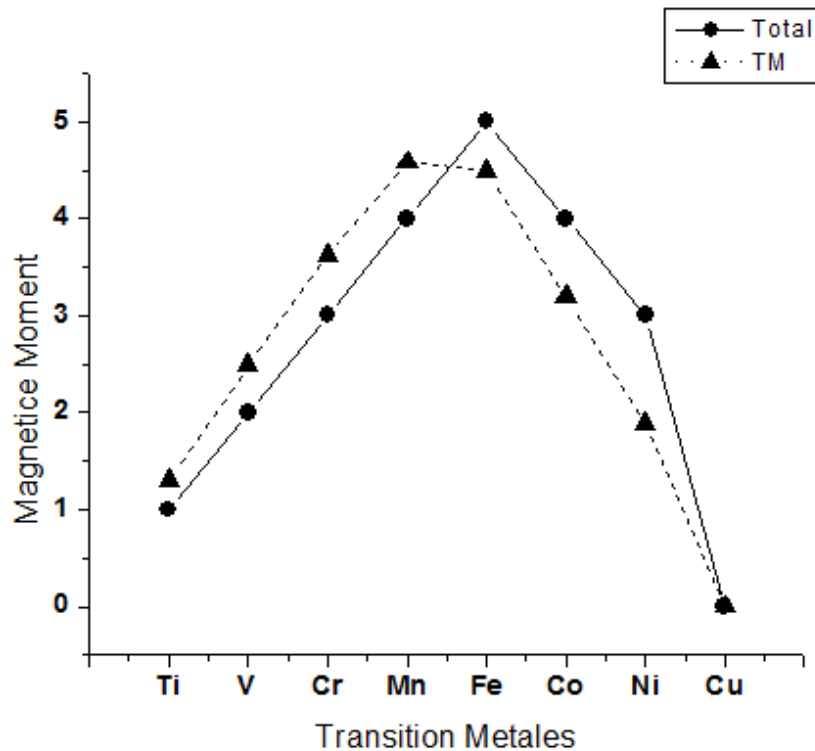
عناصر واسطه	جایگزین در مکان N این پژوهش	جایگزین در مکان Al این پژوهش	جایگزین در مکان [۲۹] Al	جایگزین در مکان [۲۹] N
Ti	----	۰/۱۶۲۶	----	----
V	۸/۳۲۱۳۰۱	۰/۹۵۰۸	----	----
Cr	۱۱/۸۸۶۴۷۶	۴/۲۵۵۵	۱/۸۶۹	۱/۸۶۹
Mn	۱۱/۵۵۵۷۳۳	۴/۲۶۷۵	۱/۷۷۶	۳/۱۴۴
Fe	----	۱/۱۰۰۴	۱/۷۵۱	۳/۱۱۸
Co	----	۱/۳۹۲۸	۲/۳۷۵	۲/۳۷۵
Ni	۶/۳۷۲۱۰۵	۱/۸۱۱۱	۲/۵۳۹	۲/۵۳۹
Cu	۶/۷۷۴۱۵۷	۴/۵۳۴۰	----	----

### ۳-۵-۴ بررسی گشتاورهای مغناطیسی نانو صفحه AIN (۶,۰) آلیش یافته با عناصر واسطه

سهم گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه (TM) (Cu, Fe, Co, Mn, V, Cr, Ni, Ti) به ازای هر اتم در گشتاور مغناطیسی کل ساختار، سهم آلومینیم و سهم نیتروژن در جدول ۴-۴۱ در وضعیت لبه و وسط، خلاصه و مقایسه شده است و در شکل ۴-۳۲ رسم شده است. گشتاور مغناطیسی کل ساختار که حاصل جمع گشتاور مغناطیسی اتم‌های (آلومینیم و نیتروژن و عناصر واسطه) می‌باشد و سهم گشتاور مغناطیسی جزیی و گشتاور مغناطیسی کلی اتم‌های عناصر واسطه برای هر دو فاز فرو مغناطیس و آنتی‌فرومغناطیس در وضعیت لبه نزدیک در جدول ۴-۴۱ گزارش و مقادیر گشتاور مغناطیسی بر حسب عدد اتمی عناصر واسطه در شکل ۴-۳۳ رسم شده است.

جدول ۴-۴۰: مقادیر گشتاور مغناطیسی کل و گشتاور مغناطیسی جزئی فلزات واسطه در نانوصفحه آلیش یافته AIN (۶,۰) با غلظت ۴٪

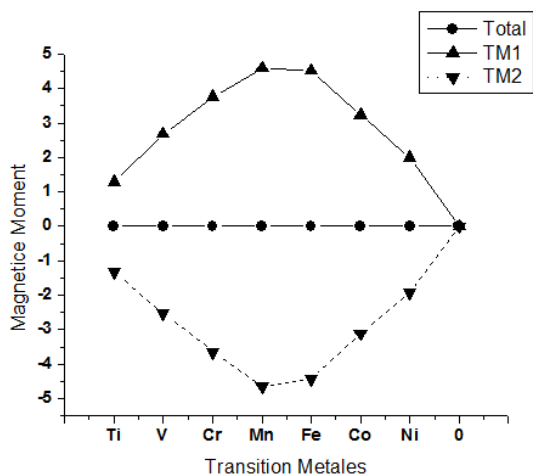
	فاز	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
گشتاور آلومینیم ( $\mu_B$ )	لبه	-۰/۰۵	-۰/۰۰۴	۰/۰۴	۰/۰۶	۰/۱۸	۰/۲۱	۰/۱۹	۰
	وسط	-۰/۰۵	-۰/۰۰۵	۰/۰۴	۰/۰۶	۰/۱۸	۰/۲۱	۰/۱۹	۰/۰۰۲
گشتاور نیتروژن ( $\mu_B$ )	لبه	-۰/۲۵	-۰/۴۸	-۰/۶۷	-۰/۶۵	۰/۳۳	۰/۵۹	۰/۹۲	۰
	وسط	-۰/۲۵	-۰/۶۴	-۰/۶۷	-۰/۶۵	۰/۳۳	۰/۵۹	۰/۹۲	۰/۰۰۵
گشتاور ناخالصی (TM1)	لبه	۱/۳۰۲	۲/۴۹	۳/۶۳	۴/۵۸	۴/۴۹	۳/۱۹	۱/۸۸	۰
	وسط	۱/۳۰۲	۲/۶۵	۳/۶۳	۴/۵۸	۴/۴۹	۳/۱۹	۱/۸۸	-۰/۰۰۷
گشتاور کل ساختار (AITMN) ( $\mu_B$ )	لبه	۱	۲	۳	۴	۵	۴	۳	۰
	وسط	۱	۲	۳	۴	۵	۴	۳	۰



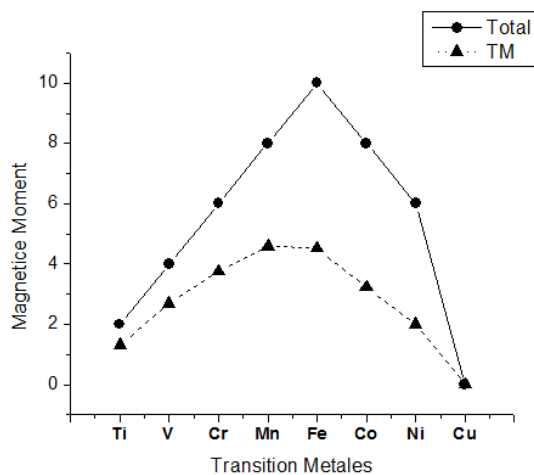
شکل ۴-۳۲: گشتاور مغناطیسی کل (خطوط توپر) و گشتاور مغناطیسی جزئی فلزات واسطه (خطوط خط چین) در نانوصفحه آلایش یافته AIN (۶,۰) با غلظت ۴٪.

جدول ۴-۴۱: گشتاور مغناطیسی کل ساختار آلومینیم نیترید در دو حالت فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس، سهم گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه و اتم‌های آلومینیم و نیتروژن در وضعیت لبه نزدیک نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) AIN آلایش یافته با غلظت ۸٪.

	فاز	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
گشتاور آلومینیم (μ <sub>B</sub> )	FM	-۰/۰۸	-۰/۰۵	۰/۰۳	۰/۱۱	۰/۳۰	۰/۳۶	۰/۳۰۱	۰/۰۵
	AFM	۰/۰۰۰۹	-۰/۰۱	-۰/۰۰۲	۰/۰۰۵	۰/۰۰۲	-۰/۰۰۰۹	-۰/۰۰۰۹	۰
گشتاور نیتروژن (μ <sub>B</sub> )	FM	-۰/۵۰	-۱/۳۰	-۱/۵۴	-۱/۳۰	۰/۶۵	۱/۱۸	۱/۷۰	۰/۰۷
	AFM	۰/۰۰۰۹	۰/۰۱	-۰/۰۰۲	۰/۰۰۰۷	۰/۰۰۰۷	۰/۰۰۱	۰/۰۴	۰
گشتاور ناخالصی (TM1)	FM	۱/۲۹	۲/۶۸	۳/۷۵	۴/۵۹	۴/۵۱	۳/۲۲	۱/۹۹	-۰/۰۰۸
	AFM	۱/۳۱	۲/۵۲۱	۳/۶۴	۴/۶۴	۴/۵۰	۳/۱۱	۱/۸۹	۰
گشتاور ناخالصی (TM2)	FM	۱/۲۹	۲/۶۸	۳/۷۵	۴/۵۹	۴/۵۱	۳/۲۲	۱/۹۹	۰/۰۰۲
	AFM	-۱/۳۱	-۲/۵۲	-۳/۶۴	-۴/۶۵	-۴/۴۲	-۳/۱۱	-۱/۹۳	-۰/۰۰۱
گشتاور کل ساختار (AITMN) (μ <sub>B</sub> )	FM	۲	۴	۶	۸	۱۰	۸	۶	۰
	AFM	۰	۰	۰	-۰/۰۰۶	۰	۰	۰	-۰/۰۰۱



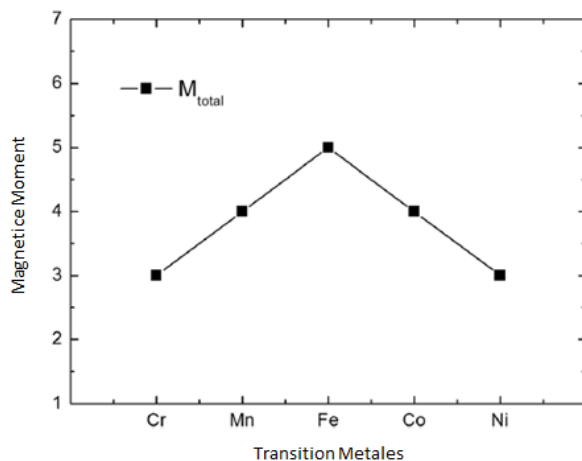
ب



الف

شکل ۴-۳۳: گشتاور مغناطیسی کل ساختار AlN ( $\mu_B$ ) و سهم گشتاور مغناطیسی در اتم اول و دوم ( $\mu_B$ ) عناصر واسطه در نانوصفحه AlN ( $6, 0$ ) آرایش یافته با غلظت ۸٪ در دو حالت الف) فرومغناطیس ب) آنتی فرومغناطیس در وضعیت لبه نزدیک

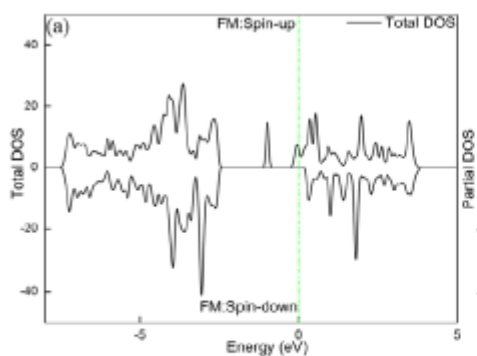
در فاز فرومغناطیس بیشترین سهم در گشتاور مغناطیسی کلی ایجاد شده در ساختار، ناشی از گشتاورهای موضعی TMها است. در جدول ۴-۴ برای حالت فرومغناطیس در وضعیت نزدیک، از Ti به سمت Fe شاهد افزایش گشتاور مغناطیسی کل و از Fe به سمت Cu شاهد کاهش گشتاور مغناطیسی کل هستیم. Fe بیشترین مقدار سهم گشتاور مغناطیسی کل را در بین دیگر عناصر واسطه دارد. Mn بیشترین مقدار گشتاور مغناطیسی جزئی را در بین دیگر عناصر واسطه به خود اختصاص داده است.



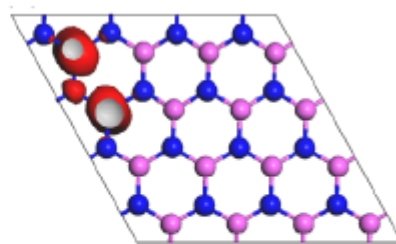
شکل ۴-۳۴: گشتاور مغناطیسی کل در نانوصفحه AlN زیگزاگ ( $8, 0$ ) آرایش یافته با عناصر واسطه [۲۹]

با توجه به جداول ۴-۴۰ و ۴-۴۱ و شکل‌های ۴-۳۲ و ۴-۳۳ مشاهده می‌کنیم که وقتی از Ti به سمت Cu می‌رویم هم گشتاور کل و هم گشتاور جزئی فلزات واسطه ابتدا روند افزایشی و سپس روند کاهشی دارد. در شکل‌ها قله‌ای وجود دارد که مربوط به ماکزیمم مقدار گشتاور مغناطیسی اتم Fe می‌باشد. کمترین مقدار گشتاور مربوط به اتم Cu می‌باشد. با توجه به اینکه آرایش Cu بر روی نانو صفحه هیچ گشتاور مغناطیسی ایجاد نمی‌کند پس خاصیت مغناطیسی هم در ماده ایجاد نمی‌کند. روند تغییرات گشتاور مغناطیسی محاسبات در این پژوهش با مرجع [۲۹] که در شکل ۴-۳۴ نشان داده شده مطابقت دارد.

در مرجع [۹۵] ابر سلول نانوصفحه AIN زیگزاگ (۴,۰) دارای ۱۶ اتم Al و ۱۶ اتم N می‌باشد. در مرجع مذکور با آرایش (دو اتم ناخالصی V) جایگزین شده در مکان Al، در موقعیت لبه نزدیک در فاز فرومغناطیسی شکل ۴-۳۵ ب)، آرایش اتم، V به دلیل صفر بودن گاف اسپین بالا از خود خاصیت نیم‌فلزی نشان می‌دهد، که این نتایج تقریباً با نتایج چگالی حالات آرایش V با غلظت ۸٪ در موقعیت لبه نزدیک، در فاز فرومغناطیسی شکل ۴-۲۳ ب مطابقت دارد.



ب



الف

شکل ۴-۳۵: الف) ساختار نانوصفحه زیگزاگ AIN (۴,۰) آرایش یافته با (دو اتم ناخالصی V) ب) چگالی حالت نانوصفحه زیگزاگ AIN (۴,۰) با آرایش در وضعیت لبه نزدیک [۹۵].

#### ۴-۵-۴ بررسی گشتاور مغناطیسی نانو صفحه AIN (۶,۰) آلایش یافته با Cu

اتم Cu را بر روی نانوصفحه مورد نظر در موقعیت‌های مختلف به صورت تک اتم ۴٪ و دو اتم ۸٪ در دو فاز فرومغناطیس و آنتی‌فرومغناطیس آلایش داده‌ایم که نتیجه در جدول ۴-۴۲ گزارش شده است. با توجه به نتایج محاسبه شده در جدول ۴-۴۲ آلایش Cu بر روی نانوصفحه AIN، هیچ‌گونه گشتاور مغناطیسی و خاصیت مغناطیسی در این ماده ایجاد نمی‌کند.

جدول ۴-۴۲: مقادیر گشتاور مغناطیسی Cu، N و Al و مقدار گشتاور کل به ازای آلایش Cu در نانو صفحه زیگزاگ AIN (۶,۰)

موقعیت‌های آلایش اتم Cu	فاز	لبه ۴٪	وسط ۴٪	آلایش ۸٪ در وسط نزدیک	آلایش ۸٪ در لبه نزدیک	آلایش ۸٪ در لبه دور
گشتاور آلومینیم ( $\mu_B$ )	FM AFM	۰ ----	۰/۰۰۲ ----	۰/۰۳ ۰	---- ۰	۰/۰۴ ۰
گشتاور نیتروژن ( $\mu_B$ )	FM AFM	۰ ----	۰/۰۰۵ ----	۰/۴ ۰/۰۰۰۹	---- ۰	۰/۳ ۰
گشتاور Cu ( $\mu_B$ )	FM AFM	۰ ----	-۰/۰۰۷ ----	-۰/۱ ۰	---- ۰	۰/۲ ۰
گشتاور کل ( $\mu_B$ )	FM AFM	۰ ----	۰ ----	۰/۳ -۰/۰۰۱	---- -۰/۰۰۰۱	۰/۵ ۰

در مرجع [۹۶]، محققان با بررسی خواص الکترونیکی AIN آلایش یافته با اتم Cu با استفاده از نظریه تابع چگالی DFT و کد VASP دریافتند که نانوصفحه AIN آلایش یافته با Cu غیر مغناطیسی است که با نتایج حاصل از این تحقیق مطابقت دارد.

## نتیجه گیری

در این پژوهش خواص الکترونی و مغناطیسی نانوصفحات خالص و آرایش یافته آلومینیم نیتريد AIN مورد بررسی قرار گرفت.

در دو نمونه خالص، نانو صفحه دسته‌صندلی (۴,۴) و نانوصفحه زیگزاک (۶,۰) مورد تحقیق و بررسی قرار گرفت. با بررسی ساختار نواری و چگالی حالت‌ها نتایج زیر برای نانو صفحات خالص بدست آمد.

❖ نانوصفحات دسته‌صندلی (۴,۴) و زیگزاک (۶,۰) AIN خالص هر دو نیم‌رسانا غیرمغناطیسی‌اند.

❖ در هر دو نانو صفحات دسته‌صندلی (۴,۴) و زیگزاک (۶,۰) گاف نواری بصورت مستقیم می‌باشد.

❖ با توجه به نمودار چگالی حالت‌ها در هر دو ساختار دسته‌صندلی (۴,۴) و زیگزاک (۶,۰) در هر دو اسپین بالا و اسپین پایین مشخص گردید که این دو نمونه نانو صفحات در حالت خالص کاملاً دارای چگالی حالات متقارن می‌باشند و دارای هیچ‌گونه خاصیت مغناطیسی نمی‌باشد.

در نمونه‌های آرایش یافته با عناصر واسطه خواص الکترونی و مغناطیسی نانوصفحات دسته‌صندلی (۴,۴) و زیگزاک (۶,۰) بررسی شد. آرایش این عناصر با جایگزینی عناصر واسطه به جای اتم Al در ساختار انجام گرفت. نتایج حاصل از آرایش به صورت زیر می‌باشد.

❖ آرایش در نمونه‌ها منجر به کاهش گاف نواری نسبت به نمونه خالص و متفاوت بودن آن به ازای هر دو اسپین بالا و اسپین پایین شد که این موضوع منجر به قطبش اسپینی گردید.

❖ در آرایش نانوصفحه دسته‌صندلی (۴,۴) عناصر  $\text{Cu}$ ،  $\text{Cr}$ ،  $\text{V}$ ،  $\text{Ti}$  بسته به موقعیت و فاصله آرایش به صورت فرومغناطیسی و در برخی موارد به صورت آنتی‌فرومغناطیسی مشاهده شد که این رفتار توسط مدل RKKY توجیه می‌شود.

❖ اما در نانوصفحه دسته‌صندلی (۴,۴) آرایش یافته با عناصر  $\text{Mn}$ ،  $\text{Ni}$  در تمام موقعیت‌ها فاز پایدار به صورت فرومغناطیسی و در آرایش عناصر  $\text{Co}$ ،  $\text{Fe}$  فاز پایدار به صورت آنتی‌فرومغناطیس به دست آمد که وابسته به فاصله و موقعیت اتم‌های  $\text{Mn}$ ،  $\text{Ni}$ ،  $\text{Co}$ ،  $\text{Fe}$  از یکدیگر نبوده و این رفتار توسط برهم‌کنش ابر تبادلی مستقیم توجیه می‌شود.

❖ در نانوصفحه زیگزاک (۶,۰) آرایش یافته با عناصر  $\text{Mn}$ ،  $\text{Cr}$ ،  $\text{Cu}$  در تمام موقعیت‌ها فاز پایدار به صورت فرومغناطیسی و در آرایش عناصر  $\text{Co}$ ،  $\text{V}$  فاز پایدار به صورت آنتی‌فرومغناطیس به دست آمد که وابسته به فاصله و موقعیت اتم‌های  $\text{Mn}$ ،  $\text{Cr}$ ،  $\text{Co}$ ،  $\text{V}$  از یکدیگر نبوده و این رفتار توسط برهم‌کنش ابر تبادلی مستقیم توجیه می‌شود.



❖ اما در آرایش نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) عناصر Ni, Fe, Ti بسته به موقعیت و فاصله آرایش به صورت فرومغناطیسی و در برخی موارد به صورت آنتی فرومغناطیسی مشاهده شد که این رفتار توسط مدل RKKY توجیه می شود.

❖ در آرایش نانوصفحه دسته صندلی و زیگزاگ (۴,۴) و (۶,۰) عناصر Mn, Co در هر دو ساختار زیگزاگ و دسته صندلی آرایش یافته، مستقل از فاصله و مکان آرایش می باشد. Co بصورت فاز پایدار آنتی فرومغناطیس در هر دو ساختار و Mn بصورت فاز پایدار فرومغناطیس در هر دو ساختار مشاهده شد این رفتار توسط برهم کنش ابر تبادلی مستقیم توجیه می شود.

❖ در هر دو نانوصفحه زیگزاگ و دسته صندلی، آرایش یافته با عناصر واسطه بیشترین گشتاور جزئی در موقعیت های لبه و وسط با غلظت ۴٪، و در موقعیت های لبه و وسط و در دو حالت دور و نزدیک با غلظت ۸٪، مربوط به اتم Mn می باشد.

نانوصفحه زیگزاگ (۶,۰) را در موقعیت لبه و وسط با آرایش ۴٪، و در موقعیت لبه نزدیک در فاز فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس با غلظت ۸٪ با عناصر واسطه (Ti, Ni, Cr, V, Mn, Co, Fe, Cu) آرایش دادیم و خواص مغناطیسی آن را بررسی کردیم نتایج حاصل به قرار زیر است:

❖ بیشترین گشتاور جزئی در هر دو وضعیت با غلظت های ۴٪ و ۸٪، مربوط به اتم Mn و بیشترین گشتاور کلی در هر دو وضعیت مربوط به اتم Fe می باشد.

❖ کمترین گشتاور جزئی و کلی مربوط در هر دو وضعیت با غلظت ۴٪ و ۸٪ مربوط به اتم Cu می باشد.

❖ در هر دو وضعیت با غلظت های ۴٪ و ۸٪ شاهد روند افزایشی گشتاور کلی از سمت Ti به سمت Mn، و از سمت Fe به سمت Cu شاهد روند کاهشی گشتاور کلی هستیم.

با آرایش Cu بر روی نانوصفحات دسته صندلی (۴,۴) و زیگزاگ (۶,۰) هیچ خاصیت مغناطیسی در این ماده ایجاد نشده است.

با توجه به اهمیت AIN در صنایع اپتوالکترونیکی و همچنین روند کوچک سازی قطعات الکترونی خواص به دست آمده در نانوصفحات خالص می تواند کاربرد بسیار بالایی در حوزه های یاد شده داشته باشد. همچنین شاهد خاصیت فرومغناطیس AIN آرایش یافته در دمای اتاق با عناصر واسطه، کاربردهایی را در الکترونیک جدید به نام اسپین ترونیک نیم رساناها ایجاد می کند.

## پیشنهادات برای آینده

۱. بررسی خواص تراپردی نانو صفحات دسته‌صندلی و زیگزآگ AIN خالص و آرایش یافته با عناصر واسطه
۲. بررسی خواص اپتیکی و مکانیکی نانو صفحات AIN خالص و آرایش یافته
۳. بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نانو لوله‌ها و نانو روبان‌های AIN خالص و آرایش یافته با عناصر واسطه
۴. بررسی خواص ترابرد نانو روبان‌ها و نانو لوله‌های AIN خالص و آرایش یافته با عناصر واسطه
۵. بررسی خواص اپتیکی و مکانیکی نانو روبان‌ها و نانو لوله‌های خالص و آرایش یافته

## References:

- [1] Luo, B., J. W. Johnson, O. Kryliouk, F. Ren, S. J. Pearton, S. N. G. Chu, A. E. Nikolaev, Yu V. Melnik, V. A. Dmitriev, and T. J. Anderson. "High breakdown M–I–M structures on bulk AlN." *Solid-State Electronics* 46, no. 4 (2002): 573-576.
- [2] Du, Ai Jun, Zhong Hua Zhu, Yong Chen, G. Q. Lu, and Sean C. Smith. "First principle studies of zigzag AlN nanoribbon." *Chemical physics letters* 469, no. 1-3 (2009): 183-185.
- [3] Faghihzadeh.S, Shahtahmasebi.N, Roknabadi.M.R, *Physica E:Low-dimensional Systems and Nanostructures* (2017),1-19.
- [4] J. Khanderi., PhD. thesis, "Group-III Nitrides: Contribution to precursor chemistry, MOCVD, nanostructures and multiscale simulation studies", Ruhr-University Bochum, Germany (2005).
- [5] Ambacher, Oliver. "Growth and applications of group III-nitrides." *Journal of Physics D: Applied Physics* 31, no. 20 (1998): 2653.
- [6] J. I. Pankove, "GaN: from fundamentals to applications", *Mat. Sci. Eng. B*, 61, (1999) : pp 305.
- [7] S. Nakamura, "III-V nitride-based light-emitting diodes", *Diamond and Related Materials*, 5, (1996): pp 496.
- [8] Nakamura, Shuji. "III–V nitride based light-emitting devices." *Solid State Communications* 102, no. 2-3 (1997): 237-248.
- [9] Nakamura, Shuji. "Blue light emitting laser diodes." *Thin Solid Films* 343 (1999): 345-349.
- [10] S. Nakamura, (1997) "blue laser diode: GaN based light emitters and lasers", *MRS Bull*, 2, pp 29.
- [11] Morkoc, H., S. Strite, G. B. Gao, M. E. Lin, B. Sverdlov, and M. Burns. "Large-band-gap SiC, III-V nitride, and II-VI ZnSe-based semiconductor device technologies." *Journal of Applied Physics* 76, no. 3 (1994): 1363-1398.
- [12] Slack, G. At. "Nonmetallic crystals with high thermal conductivity." *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 34, no. 2 (1973): 321-335.
- [13] Strite, S. and H. Morkoc, Gallium Nitride, Aluminum Nitride and Indium Nitride: A Review. *J. Vac. Sci Technol. B*, 10(4) (1992) 1237-1266.
- [14] Bacaksiz, C., H. Sahin, H. D. Ozaydin, S. Horzum, Ramazan Tuğrul Senger, and François M. Peeters. "Hexagonal AlN: Dimensional-crossover-driven band-gap transition." *Physical Review B* 91, no. 8 (2015): 085430.

- [15] Zhang, Chang-wen, and Pei-ji Wang. "Tuning electronic and magnetic properties of AlN nanosheets with hydrogen and fluorine: First-principles prediction." *Physics Letters A* 375, no. 41 (2011): 3583-3587.
- [16] Zhang, Chang-wen. "First-principles study on electronic structures and magnetic properties of AlN nanosheets and nanoribbons." *Journal of Applied Physics* 111, no. 4 (2012): 043702.
- [17] Yazdi, Gholamreza. "Growth and Characterization of AlN: From Nano Structures to Bulk Material." PhD diss., Linköping University Electronic Press, 2008.
- [18] Zhang, Xitian, Zhuang Liu, and Suikong Hark. "Synthesis and optical characterization of single-crystalline AlN nanosheets." *Solid state communications* 143, no. 6-7 (2007): 317-320.
- [19] Zhang, Chang-wen, and Fu-bao Zheng. "First-principles prediction on electronic and magnetic properties of hydrogenated AlN nanosheets." *Journal of computational chemistry* 32, no. 14 (2011): 3122-3128.
- [20] Cao, Huawei, Pengfei Lu, Zhongyuan Yu, Jun Chen, and Shumin Wang. "Electronic and magnetic properties of vanadium doped AlN nanosheet under in-plane biaxial strains." *Superlattices and Microstructures* 73 (2014): 113-120.
- [21] Du, Xiu-Juan, Zheng Chen, Jing Zhang, Chuan-Sheng Yao, and Cheng Chen. "First-principles studies on stabilities and electronic properties of AlN nanostructures." *Superlattices and Microstructures* 52, no. 4 (2012): 662-668.
- [22] N. Pantha, M. Sc. thesis, "Epitaxial growth of III-Nitride nanostructures and applications for visible emitters and energy generation", Tribhuvan University, (2001).
- [23] Yeh, Chin-Yu, Z. W. Lu, S. Froyen, and Alex Zunger. "Predictions and systematizations of the zinc-blende-wurtzite structural energies in binary octet compounds." *Physical Review B* 45, no. 20 (1992): 12130.
- [24] Yeh, Chin-Yu, Z. W. Lu, S. Froyen, and Alex Zunger. "Zinc-blende-wurtzite polytypism in semiconductors." *Physical Review B* 46, no. 16 (1992): 10086.
- [25] H. Morkoc, S. Strite, G. B. Gao, M. E. Lim, B. Sverdlov, and M. Burns, *J. Appl. Phys.* **76**, 1363 (1994).
- [26] Vurgaftman, I., J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan. "Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys." *Journal of applied physics* 89, no. 11 (2001): 5815-5875.
- [27] Miwa, K., and A. Fukumoto. "First-principles calculation of the structural, electronic, and vibrational properties of gallium nitride and aluminum nitride." *Physical Review B* 48, no. 11 (1993): 7897.
- [28] Christensen, N. E., and I. Gorczyca. "Optical and structural properties of III-V nitrides under pressure." *Physical Review B* 50, no. 7 (1994): 4397.

- [ 29] Shi, Changmin, Hongwei Qin, Yongjia Zhang, Jifan Hu, and Lin Ju. "Magnetic properties of transition metal doped AlN nanosheet: First-principle studies." *Journal of Applied Physics* 115, no. 5 (2014): 053907.
- [30] Şahin, Hasan, Seymur Cahangirov, Mehmet Topsakal, E. Bekaroglu, E. Akturk, Ramazan Tuğrul Senger, and Salim Ciraci. "Monolayer honeycomb structures of group-IV elements and III-V binary compounds: First-principles calculations." *Physical Review B* 80, no. 15 (2009): 155453.
- [31] Tsipas, P., S. Kassavetis, D. Tsoutsou, E. Xenogiannopoulou, E. Golias, S. A. Giamini, C. Grazianetti et al. "Evidence for graphite-like hexagonal AlN nanosheets epitaxially grown on single crystal Ag (111)." *Applied Physics Letters* 103, no. 25 (2013): 251605.
- [32] Du, Xiu-Juan, Zheng Chen, Jing Zhang, Chuan-Sheng Yao, and Cheng Chen. "First-principles studies on stabilities and electronic properties of AlN nanostructures." *Superlattices and Microstructures* 52, no. 4 (2012): 662-668.
- [33] Zheng, Fang-Ling, Jian-Min Zhang, Yan Zhang, and Vincent Ji. "First-principles study of the perfect and vacancy defect AlN nanoribbon." *Physica B: Condensed Matter* 405, no. 17 (2010): 3775-3781.
- [34] De Almeida, E. F., F. de Brito Mota, C. M. C. De Castilho, A. Kakanakova-Georgieva, and Gueorgui Kostov Gueorguiev. "Defects in hexagonal-AlN sheets by first-principles calculations." *The European Physical Journal B* 85, no. 1 (2012): 48.
- [35] Chen, Qian, Rui Song, Changhua Chen, and Xiaojie Chen. "Tunable band gap of AlN, GaN nanoribbons and AlN/GaN nanoribbon heterojunctions: A first-principle study." *Solid State Communications* 172 (2013): 24-28.
- [36] Aghili, S., R. Beiranvand, S. M. Elahi, and M. R. Abolhasani. "Half-metallic ferromagnetism in Mn-doped zigzag AlN nanoribbon from first-principles." *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 420 (2016): 122-128.
- [37] Ohno, Hideo. "Making nonmagnetic semiconductors ferromagnetic." *science* 281, no. 5379 (1998): 951-956.
- [38] Ohno, Y., D. K. Young, B. al Beschoten, F. Matsukura, H. Ohno, and D. D. Awschalom. "Electrical spin injection in a ferromagnetic semiconductor heterostructure." *Nature* 402, no. 6763 (1999): 790.
- [39] Zhang, Chang-wen, and Pei-ji Wang. "Tuning electronic and magnetic properties of AlN nanosheets with hydrogen and fluorine: First-principles prediction." *Physics Letters A* 375, no. 41 (2011): 3583-3587.
- [40] Mott, Nevill Francis. "The electrical conductivity of transition metals." *Proc. R. Soc. Lond. A* 153, no. 880 (1936): 699-717.
- [41] Li, Zelong, Guanglan Li, Luhua Jiang, Jinlei Li, Gongquan Sun, Chungu Xia, and Fuwei Li. "Ionic Liquids as Precursors for Efficient Mesoporous Iron-Nitrogen-Doped Oxygen Reduction Electrocatalysts." *Angewandte Chemie International Edition* 54, no. 5 (2015): 1494-1498.
- [ 42] Naber, W. J. M., S. Faez, and Wilfred Gerard van der Wiel. "Organic spintronics." *Journal of Physics D: Applied Physics* 40, no. 12 (2007): R205.

- [43] Kikkawa, J. M., and D. D. Awschalom. "Resonant spin amplification in n-type GaAs." *Physical Review Letters* 80, no. 19 (1998): 4313.
- [44] Kikkawa, J. M., and D. D. Awschalom. "Lateral drag of spin coherence in gallium arsenide." *Nature* 397, no. 6715 (1999): 139.
- [45] Datta, Supriyo, and Biswajit Das. "Electronic analog of the electro-optic modulator." *Applied Physics Letters* 56, no. 7 (1990): 665-667.
- [46] Zutic, Igor, Jaroslav Fabian, and S. Das Sarma. "Spintronics: Fundamentals and applications." *Reviews of modern physics* 76, no. 2 (2004): 323.
- [47] Vina, L. "Spin relaxation in low-dimensional systems." *Journal of Physics: Condensed Matter* 11, no. 31 (1999): 5929.
- [48] <http://www.chiraltm.physics.at/ChiPrag.htm>
- [49] J. Furdyna, "Diluted magnetic semiconductors", J. Appl. Phys, (1986) 64, pp 29
- [50] Sato, Kazunori, and Hiroshi Katayama-Yoshida. "Material design for transparent ferromagnets with ZnO-based magnetic semiconductors." *Japanese Journal of Applied Physics* 39, no. 6B (2000): L555.
- [51] Sato, Kazunori, and Hiroshi Katayama-Yoshida. "Stabilization of ferromagnetic states by electron doping in Fe-, Co-or Ni-doped ZnO." *Japanese Journal of Applied Physics* 40, no. 4A (2001): L334.
- [52] C. Zener, "Interaction between the d-Shells in the Transition Metals. II. Ferromagnetic Compounds of Manganese with Perovskite Structure", Phys. Rev, 82, (1951), pp 403.
- [53] Sato, K., and H. Katayama-Yoshida. "First principles materials design for semiconductor spintronics." *Semiconductor Science and Technology* 17, no. 4 (2002): 367.
- [54] Spaldin, Nicola A. "Search for ferromagnetism in transition-metal-doped piezoelectric ZnO." *Physical Review B* 69, no. 12 (2004): 125201.
- [55] Chanier, Thomas, M. Sargolzaei, I. Opahle, R. Hayn, and K. Koepernik. "Nearest neighbor exchange in Co-and Mn-doped ZnO." *arXiv preprint cond-mat/0511050* (2005).
- [56] Zener, Clarence. "Interaction between the d shells in the transition metals." *Physical Review* 81, no. 3 (1951): 440.
- [57] Zener, Clarence. "Interaction between the d-shells in the transition metals. III. Calculation of the Weiss factors in Fe, Co, and Ni." *Physical Review* 83, no. 2 (1951): 299.
- [58] Anderson, P. W. "Antiferromagnetism. Theory of superexchange interaction." *Physical Review* 79, no. 2 (1950) : 350.
- [59] Yosida, Kei. *THEORY OF MAGNETISM.: Edition en anglais*. Vol. 122. Springer Science & Business Media, 1996.
- [60] M. Getzla., (2008) "Fundamentals of magnetism", Springer, Berlin Heidelberg.

- [61] Dietl, Tomasz, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, and E. D. Ferrand. "Zener model description of ferromagnetism in zinc-blende magnetic semiconductors." *science* 287, no. 5455 (2000): 1019-1022.
- [62] Han, Wei-Qiang, Lijun Wu, Yimei Zhu, Kenji Watanabe, and Takashi Taniguchi. "Structure of chemically derived mono- and few-atomic-layer boron nitride sheets." *Applied Physics Letters* 93, no. 22 (2008): 223103.
- [63] Strinati, G. "Effects of dynamical screening on resonances at inner-shell thresholds in semiconductors." *Physical Review B* 29, no. 10 (1984): 5718.
- [64] Marini, Andrea, Conor Hogan, Myrta Grüning, and Daniele Varsano. "Yambo: an ab initio tool for excited state calculations." *Computer Physics Communications* 180, no. 8 (2009): 1392-1403.
- [65] Blase, Xavier, Angel Rubio, Steven G. Louie, and Marvin L. Cohen. "Quasiparticle band structure of bulk hexagonal boron nitride and related systems." *Physical review B* 51, no. 11 (1995): 6868.
- [66] Cresti, Alessandro, Riccardo Farchioni, Giuseppe Grosso, and Giuseppe Pastori Parravicini. "Keldysh-Green function formalism for current profiles in mesoscopic systems." *Physical Review B* 68, no. 7 (2003): 075306.
- [67] Hohenberg, Pierre, and Walter Kohn. "Inhomogeneous electron gas." *Physical review* 136, no. 3B (1964): B864.
- [68] Mariani, Manuel Sebastian, Matúš Medo, and Yi-Cheng Zhang. "Identification of milestone papers through time-balanced network centrality." *Journal of Informetrics* 10, no. 4 (2016): 1207-1223.
- [69] Yan, Jun, Karsten W. Jacobsen, and Kristian S. Thygesen. "Optical properties of bulk semiconductors and graphene/boron nitride: The Bethe-Salpeter equation with derivative discontinuity-corrected density functional energies." *Physical Review B* 86, no. 4 (2012): 045208.
- [70] Parr, R. G., and W. Yang. "Density-Functional Theory of Atoms and Molecules Oxford Univ." *Press, New York* (1989).
- [71] Kohn, Walter, and Lu Jeu Sham. "Self-consistent equations including exchange and correlation effects." *Physical review* 140, no. 4A (1965): A1133.
- [72] Von Barth, Ulf, and Lars Hedin. "A local exchange-correlation potential for the spin polarized case. i." *Journal of Physics C: Solid State Physics* 5, no. 13 (1972): 1629.
- [73] Perdew, John P., Kieron Burke, and Matthias Ernzerhof. "Generalized gradient approximation made simple." *Physical review letters* 77, no. 18 (1996): 3865.
- [74] Soler, José M., Emilio Artacho, Julian D. Gale, Alberto García, Javier Junquera, Pablo Ordejón, and Daniel Sánchez-Portal. "The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation." *Journal of Physics: Condensed Matter* 14, no. 11 (2002): 2745.
- [75] Gonze, Xavier, J-M. Beuken, R. Caracas, F. Detraux, M. Fuchs, G-M. Rignanese, Luc Sindic et al. "First-principles computation of material properties: the ABINIT software project." *Computational Materials Science* 25, no. 3 (2002): 478-492.
- [76] Turbomole, URL <http://www.turbomole.com>.

- [77] Kittel, Charles, Paul McEuen, and Paul McEuen. *Introduction to solid state physics*. Vol. 8. New York: Wiley, 1996.
- [78] N. Troullier and J. Martins, (1991) Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations *Phys.Rev.B*,43,PP. (1993)
- [79] Troullier, N., and José Luís Martins. "Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations. II. Operators for fast iterative diagonalization." *Physical Review B* 43, no. 11 (1991): 8861.
- [80] Monkhorst, Hendrik J., and James D. Pack. "Special points for Brillouin-zone integrations." *Physical review B* 13, no. 12 (1976): 5188.
- [ 81] Treske, Uwe, Frank Ortmann, Björn Oetzel, Karsten Hannewald, and Friedhelm Bechstedt. "Electronic and transport properties of graphene nanoribbons." *physica status solidi (a)* 207, no. 2 (2010): 304-308.
- [ 82] Shiraishi, Masashi. "Graphene spintronics." In *Graphene*, pp. 324-340. 2014
- [83] Naber, W. J. M., S. Faez, and Wilfred Gerard van der Wiel. "Organic spintronics." *Journal of Physics D: Applied Physics* 40, no. 12 (2007): R205.
- [84] Elahi, Asmat, Mukhtar Ahmad, Ihsan Ali, and M. U. Rana. "Preparation and properties of sol-gel synthesized Mg-substituted Ni<sub>2</sub>Y hexagonal ferrites." *Ceramics International* 39, no. 2 (2013): 983-990.
- [85] Zhang, Chang-wen, and Pei-ji Wang. "Tuning electronic and magnetic properties of AlN nanosheets with hydrogen and fluorine: First-principles prediction." *Physics Letters A* 375, no. 41 (2011): 3583-3587.
- [86] Du, Ai Jun, Zhong Hua Zhu, Yong Chen, G. Q. Lu, and Sean C. Smith. "First principle studies of zigzag AlN nanoribbon." *Chemical physics letters* 469, no. 1-3 (2009): 183-185.
- [87] Somayeh Faghihzadeh, Nasser Shahtahmasebi, Mahmood Rezaee Roknabadi, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* (2017), 1-19.
- [88] Zozoulenko, I. V., Frank A. Miao, and E. H. Hauge. "Coherent magnetotransport in confined arrays of antidots. I. Dispersion relations and current densities." *Physical Review B* 53, no. 12 (1996): 7975.
- [89] Ihnatsenka, S., and I. V. Zozoulenko. "Spatial spin polarization and suppression of compressible edge channels in the integer quantum Hall regime." *Physical Review B* 73, no. 15 (2006): 155314.
- [90] Artacho, Emilio, Daniel Sánchez-Portal, Pablo Ordejón, Alberto Garcia, and José M. Soler. "Linear-scaling ab-initio calculations for large and complex systems." *arXiv preprint cond-mat* - (1999): 9904159.
- [91] MGetzla, "Fundamentals of Magnetism", Springer, Berlin Heidelberg (2008).
- [92] Liu, C., Fi Yun, and H. Morkoc. "Ferromagnetism of ZnO and GaN: a review." *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 16, no. 9 (2005): 555.



- [93] Li, Yafei, Zhenyu Yang, Zheng Chen, and Zhen Zhou. "Computational investigation on structural and physical properties of AlN nanosheets and nanoribbons." *Journal of nanoscience and nanotechnology* 10, no. 11 (2010): 7200-7203.
- [94] Sevinçli, H., M. Topsakal, E. Durgun, and S. Ciraci. "Electronic and magnetic properties of 3 d transition-metal atom adsorbed graphene and graphene nanoribbons." *Physical Review B* 77, no. 19 (2008): 195434.
- [95] Cao, Huawei, Pengfei Lu, Zhongyuan Yu, Jun Chen, and Shumin Wang. "Electronic and magnetic properties of vanadium doped AlN nanosheet under in-plane biaxial strains." *Superlattices and Microstructures* 73 (2014): 113-120.
- [96] Wu, Q. Y., Z. G. Huang, R. Wu, and L. J. Chen. "Cu-doped AlN: a dilute magnetic semiconductor free of magnetic cations from first-principles study." *Journal of Physics: Condensed Matter* 19, no. 5 (2007): 056209.

## Abstract

In this study, the electron and magnetic properties of pure AlN nanosheets and doped with transition metals (Cu, Fe, Co, Mn, V, Cr, Ni, Ti), is studied using the spin polarized density function theory (DFT) and the generalized gradient approximation (GGA) by SIESTA Computational code. Calculations are done on the armchair (4,4) and zigzag (6,0) nanosheets. The pure zigzag and armchairs nanosheets have a band gap of 3.36 and 3.38 eV, respectively. After the doping with the transition metals, variations of the band gap for both nanosheets are very small. At first, the electron and magnetic properties of pure and doped nanosheets have been studied and then the more stable state of the doped structure is investigated. The results of electronic computational describe semiconductor properties of this nanosheets. Electron structures shows that the pure zigzag and armchair nanosheets have a direct band gap and in both nanosheets by increasing the number of impurity atoms the value of band gap have been decreased. The symmetry of density of states describe nonmagnetic properties of pure nanosheets.

The spin polarized density of states shows that the doped AlN nanosheet with Cr, Fe, and Co in the ferromagnetic phase are dilute magnetic semiconductor independent of the number and location of the doping and doping with Cu is nonmagnetic metal. However, nanosheets doped with Ti, V, Mn and Ni depending on the number and position of the doping, maybe half metal or diluted magnetic semiconductor. In the antiferromagnetic phase, the doped nanosheets are nonmagnetic metals or nonmagnetic semiconductors. Doped nanosheets with Ti, V, Mn and Ni, which have a semi-metallic property, have a good application in spintronic industry, and in particular the spin filtering devices. The stable magnetic phase of the (4,4) AlN nanosheet doped with Mn and Ni atoms was obtained ferromagnetic and for doping with Co and Fe, antiferromagnetic independent of the impurity site, while the doping of this nanosheet with Cr, Cu, V, Ti depending on the location of the impurity, the stable magnetic phase would be AFM or FM.

In the (6,0) zigzag AlN nanosheet also the stable magnetic phase was obtained ferromagnetic for doping with Cr, Mn, Cu atoms independently of the impurity site and for the Co and V atoms, antiferromagnetic while the stable phase of the doped nanosheets with Ti, Fe and Ni depending on the impurity location would be FM or AFM. The total magnetic moment created in the structure from Ti to Fe is increased and the maximum value is given by Fe doping, and then decreases with increasing atomic number of Fe to Cu. In both zigzag and armchair nanosheets doped with transition metals the highest partial magnetic moment is related to the Mn impurity.

The results of this study can be useful for the future empirical studies on diluted magnetic semiconductors. According to the results of this research and the flexibility of the AlN nanosheets in the presence of doping and ferromagnetic properties, AlN nanosheets doped with transition metals are suitable candidates for use in spin polarized electron source for the spintronic devices in the future.

**Keywords:** AlN nanosheets, magnetic properties, density function theory, SIESTA, diluted magnetic semiconductor (DMS), spintronic.



Faculty physics and Nuclear Engineering

M.Sc.Thesis in solid state physics

**Investigation of electronic and magnetic properties of transition metals  
doped AlN nanosheets for the application in spintronic devices**

**Mehrzaad Beiranvand**

Supervisor:

**Dr: Tayebeh Movlarooy**

Advisor:

**Dr: Fatemeh Badieian Baghsiyahi**

July-2018