

بررسی بعضی از خواص نیم‌فلزی ترکیب CrAs در راستای (001) منتهی به As و Cr

منوچهر بابائی پور^{۱،۲*}، جعفر جلیلیان^۱ و آرش بوچانی^۳
^۱گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه بوعلی سینا همدان
^۲گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد تاکستان
^۳گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد کرمانشاه

چکیده

در این مطالعه ابتدا خواص ساختاری و الکترونی بلور CrAs کپه‌ای در دو ساختار مکعبی بلند-روی (ZB) و شش‌گوشی NiAs با استفاده از محاسبات تابعی چگالی و با تقریب GGA مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که ساختار NiAs پایدار و ساختار ZB ناپایدار است. در ادامه خواص ساختاری، برای فیلم CrAs در ساختار ZB در دو سطح (001) Cr و (001) As مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان داد که فیلم منتهی به As دارای ساختاری پایدارتری از فیلم منتهی به Cr است. هم‌چنین در ساختار منتهی به Cr گاف انرژی بزرگ‌تری نسبت به ساختار منتهی به As در کانال اسپین پایین دیده می‌شود. این اثر به دلیل وجود باندهای آویزان اتم‌های سطحی است که دو همسایه‌ی خود را از دست داده‌اند. همین مطلب باعث ایجاد یک چگالی بار اضافی در سطح می‌شود که خود سبب افزایش پتانسیل در سطح می‌شود.

واژه‌های کلیدی: نیم‌فلز، اندازه‌ی حرکت مغناطیسی، CrAs، نظریه‌ی تابعی چگالی

مقدمه

بلندروی ترکیبات عناصر واسطه با عناصر گروه V,VI جدول تناوبی می‌باشد. دمای کوری بالا (در حدود ۴۰۰K) زمینه‌ی رشد چندلایه‌ی مناسب این ترکیبات را به صورت برآرستی^۲ بر روی ترکیبات بلندروی نیم‌رسانا فراهم آورده است (مانند ترکیبات [V] CrAs, SrSb). این دسته از مواد اغلب در سه ساختار بلندروی، NiAs گونه و ورتسایت متبلور می‌شوند. این ترکیبات معمولاً در ساختار NiAs گونه پایدارند اما در این ساختار از خود خاصیت نیم‌فلزی نشان نمی‌دهند [۸]. از طرفی در ساختار بلندروی ناپایدار پایدار هستند اما اکثراً خاصیت نیم‌فلزی دارند [۹]. از این ترکیبات برای تزریق اسپینی^۳ از الکترون فرومغناطیس به نیم‌رسانا با جریان قطبیده اسپینی ۱۰۰٪

امروزه در جهت افزایش حافظه‌ها و اطلاعات کامپیوتری، از اسپین حامل‌های جریان در سطح فرمی استفاده می‌شود. به این ترتیب که در نیم‌فلز الکترون‌های یک کانال اسپینی سطح فرمی را قطع کرده و شبیه‌فلز رفتار می‌کنند و در کانال اسپینی دیگر شبیه یک ماده‌ی نیم‌رسانا رفتار کرده و اطراف سطح فرمی گاف انرژی وجود دارد [۱]. در سال‌های اخیر از ترکیباتی نظیر آلایزهای هویسلر [۲]، ترکیبات CrO₂ [۳]، La_{0.7} Sr_{0.3} MnO₃ [۴]، Fe₃O₄ مغناطیسی [۵] یا برخی نیم‌رساناهای رقیق شده^۱ [۶] برای انتقال اسپینی الکترون استفاده شده است. یکی دیگر از دسته ترکیبات مناسب نیم‌فلزی ساختار

2- Epitaxial
3- Spin Injection

*نویسنده‌ی مسئول (Babaei@basu.ac.ir)

1- Dilute magnetic semiconductor

صورت است که پارامتر شبکه‌ی درون صفحه‌ی (a,b) مربوط به زیرلایه‌ی InP و پارامتر شبکه در راستای رشد لایه‌ی نازک (c) باید بهینه شود که این کار توسط کمینه کردن نیروها در راستای z انجام می‌شود. خلاء در نظر گرفته شده برای مطالعات سطح برابر با ۱۵ آنگستروم در نظر گرفته شده است، به گونه‌ای که لایه‌های سطحی دو سطح متوالی هیچ برهم کنشی با هم ندارند (شکل چگالی الکترونی دوبعدی گویای این حقیقت است). اندازه‌ی حرکت مغناطیسی برای اتم کروم لایه‌ی میانی ۲/۹۷ مگنتون بوهر به دست آمد که با مقدار مشابه انبوهه‌ی آن کاملاً یکسان می‌باشد.

نتایج شبیه‌سازی

ابتدا نتایج مطالعات ساختاری ترکیب در دو ساختار بلندروی (ZB) و شش‌گوشی ارائه می‌شود. با رسم منحنی انرژی بر حسب حجم یاخته‌ی (شکل ۱) مشاهده می‌شود که ترکیب در ساختار NiAs دارای ساختار پایدار و در ساختار ZB ناپایدار است. البته در حجم‌های بالاتر از 3 Bohr^3 ساختار ZB پایدارتر است. در جدول ۱ بعضی از نتایج به دست آمده این ترکیب در دو ساختار مورد مطالعه نشان داده شده است.

با رسم منحنی چگالی حالت‌ها برای ترکیب در دو ساختار مورد اشاره دیده می‌شود که در ساختار NiAs ترکیب فلز است، اما در ساختار ZB در دو کانال اسپینی رفتار ماده متفاوت است، در حالت اسپین بالا رفتار فلزی، و در حالت اسپین پایین رفتار نیم‌رسانا با گاف انرژی $E_g = 1/8 \text{ eV}$ دارد (شکل ۲).

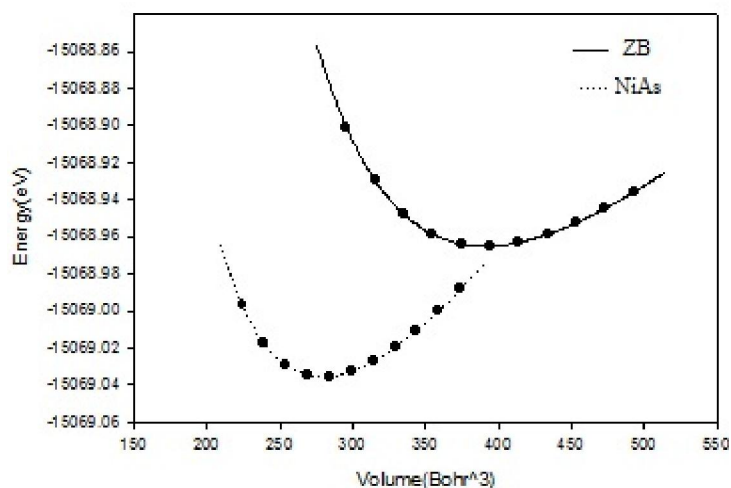
نیز می‌توان استفاده کرد. ترکیب جالب توجه دیگر که در ساختار بلندروی خاصیت نیم‌فلزی از خود نشان می‌دهد CrAs است [۱۰]. با رشد بلور این ترکیبات بر روی پایه‌های نیم‌رساناهایی با ثابت شبکه‌ی بزرگ‌تر از حالت تعادلی بلوری با خواص نیم‌فلزی به دست خواهد آمد [۱۱] و [۱۲]. در این مطالعه با استفاده از روش شبیه‌سازی، خواص ساختاری و الکترونی ساختارهای ZB و NiAs انبوهه‌ی CrAs مورد بررسی قرار خواهد گرفت و نیز خاصیت نیم‌فلزی آن مطالعه خواهد شد. در ادامه خواص نیم‌فلزی این ترکیب در سطوح مختلف فیلم سطحی CrAs در بر روی زیرلایه‌ی InP نیز مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

روش محاسبات

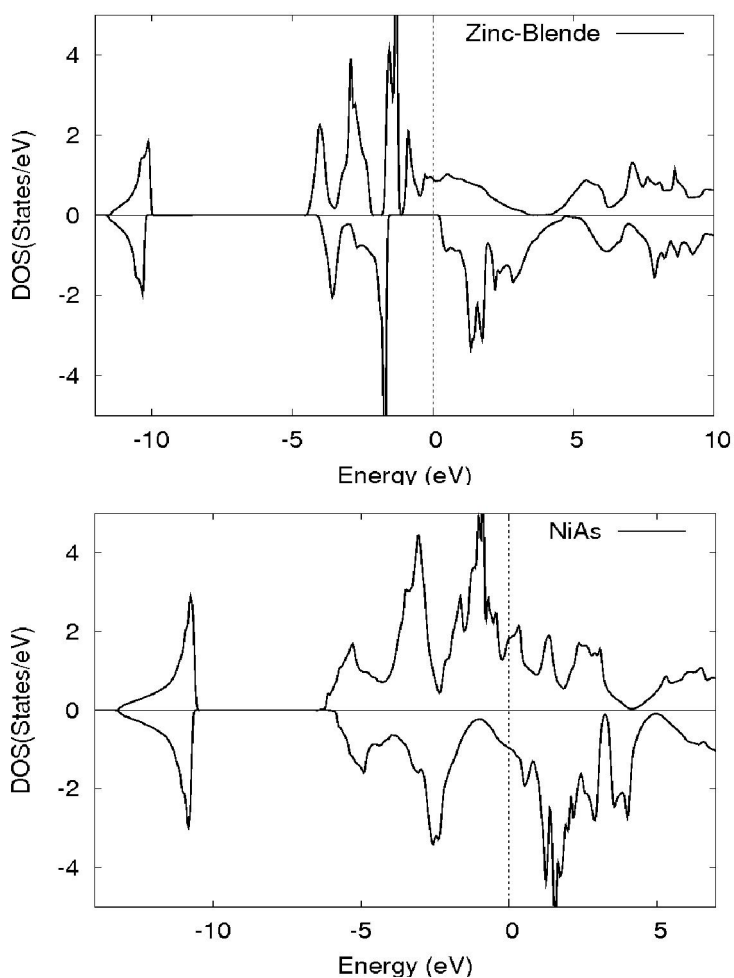
محاسبات حاضر بر پایه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی استوار است [۱۳] و برای حل معادلات بس‌ذره‌ای کوهن-شم نیز تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) مورد استفاده قرار گرفته است [۱۴]. پس از بهینه‌سازی انرژی، در فضای وارون تعداد نقاط K و برای منطقه‌ی اول بریلوئن برای انبوهه‌ی مش‌بندی نقطه و برای لایه‌ی نازک $1 \times 1 \times 8$ هم‌چنین نیز پارامتر $R_{\text{MT}} K_{\text{max}} = 1/5$ اختیار شده است. محاسبات با کد رایانه‌ی WIEN2k $8 \times 8 \times 8$ [۱۵] انجام شده است. به علت رشد این ترکیبات بر روی زیرلایه‌های نیم‌رسانا برای حفظ خاصیت نیم‌فلزی، پارامتر شبکه‌ای که برای رشد لایه‌ی نازک در نظر گرفته شده مربوط به نیم‌رسانای InP می‌باشد که برابر با $5/87$ [۱۶] آنگستروم می‌باشد که $0/6\%$ بزرگ‌تر از پارامتر شبکه CrAs ($5/65$ آنگستروم [۱۶]) است. طریقه‌ی رشد لایه‌ی نازک به این

جدول ۱- پارامترهای ساختاری و مغناطیسی CrAs

ساختار	a(Å)		c(Å)		B (GPa)	M (μ_B)	
	کار حاضر	کار دیگران	کار حاضر	کار دیگران		کار حاضر	کار دیگران
ZB	۵/۶۴	۵/۶۷ ^[۱۶]	-----		۴۹/۴۷	۳/۰۰	۳/۰۰ ^[۱۶و۱۷]
NiAs	۳/۶۱	۳/۶۳ ^[۱۸]	۵/۷۷	۵/۷۳ ^[۱۸]	۷۲/۱۰	۵/۰۷	



شکل ۱- منحنی E-V در ساختارهای ZB, NiAs



شکل ۲- منحنی چگالی حالت‌ها ترکیب CrAs برای دو ساختار ZB و NiAs (انرژی فرمی صفر در نظر گرفته شده است).

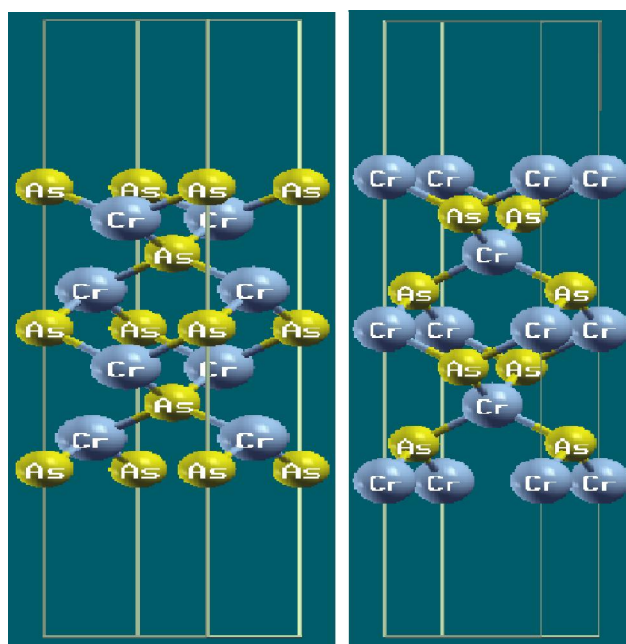
که انتظار می‌رود ترتیب لایه‌ها می‌تواند به صورت
 .../Cr/As/Cr/As/... باشد. لایه‌ی آخر هم می‌تواند هم
 به اتم Cr و هم به اتم As منتهی شود، در صورت منتهی

خواص لایه‌ی نازک CrAs در راستای (001)
 در این بخش نتایج مربوط به خواص لایه‌ی نازک
 CrAs بر روی نیم‌رسانای InP ارائه می‌گردد. همان‌طور

این بخش از محاسبات با کمینه کردن نیروها در راستای رشد لایه‌ی نازک صورت گرفت. دیده شد که فاصله‌ی بین سطوح با رفتن از مرکز به سطح کاهش می‌یابد. مقادیر انرژی بستگی و فاصله‌ی بین سطوح برای هر دو پایانش در جدول ۲ نشان داده شده است. ملاحظه می‌شود که لایه‌ی منتهی به As پایدارتر است و فاصله‌ی صفحات سطحی در آن کم‌تر است.

اتم موجود در سطح به علت از دست دادن دو همسایه‌ی نزدیک‌تر خود و داشتن دو بازوی آویزان^۳ (شکل ۳)، یک چگالی بار اضافی را در سطح ایجاد می‌کند. این چگالی بار باعث افزایش پتانسیل در سطوح

شدن به هر اتم دو حالت پایانش Cr^1 و پایانش As^2 را تعریف می‌کنند (شکل ۳). برای بررسی خواص لایه‌ی نازک، تعداد لایه‌ها نقش مهمی دارد. در این مطالعه تعداد لایه‌ها طوری انتخاب شدند که اتم موجود در مرکز لایه‌ی نازک، خواصی مشابه همان اتم در حالت کپه‌ای (انبوهه) را دارا باشد. مقایسه‌ی مقادیر اندازه‌ی حرکت مغناطیسی برای اتم Cr انبوهه و لایه‌ی مرکزی لایه‌ی نازک بیان‌گر این مطلب است که اتم‌های لایه‌ی مرکزی رفتاری شبیه به اتم‌های مشابه انبوهه را دارند. به همین منظور تعداد لایه‌ها ۸ و با تکرار لایه‌ی اول جمعاً ۹ لایه در نظر گرفته شد.



ب

الف

شکل ۳- الف) لایه‌ی منتهی به Cr (پایانش Cr) و ب) لایه‌ی منتهی به As (پایانش As^2).

جدول ۲- مقادیر انرژی بستگی و فاصله‌ی بین سطوح برای هر دو پایانش

	$d_{center} (\text{Å})$	$d_{surface-subsurface} (\text{Å})$	Cohesive energy (Ry)
Cr Termination	۱/۳۱	۱/۲۶	-۲/۴۷
As Termination	۱/۳۱	۱/۰۶	-۲/۶۴

3- Dangling bond

1- As Termination
2- Cr Termination

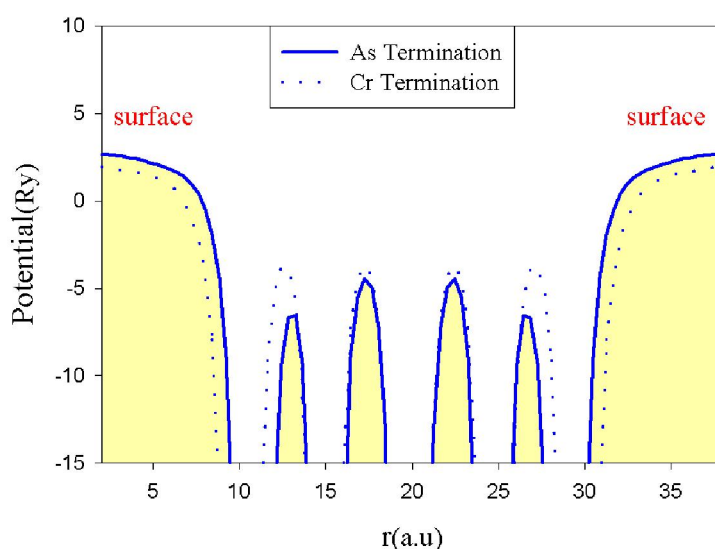
همان طور که در شکل ۶ دیده می‌شود، برای لایه‌ی نازک در حالت منتهی به As گاف انرژی کوچک‌تر است، زیرا هم‌پوشانی ابر الکترونی بیشتر است، در نتیجه در این حالت تبهگنی ترازهای انرژی کاهش یافته، باعث جابجایی تعدادی حالات در نزدیکی انرژی فرمی می‌شود، که نهایتاً منجر به کوچک‌تر شدن گاف انرژی می‌شود.

در ادامه چگالی حالت‌ها برای اتم‌های Cr و As موجود در سطح لایه و انبوهه، و زیر سطح و انبوهه با هم مقایسه شده‌اند. در سطح منتهی به Cr دیده می‌شود که

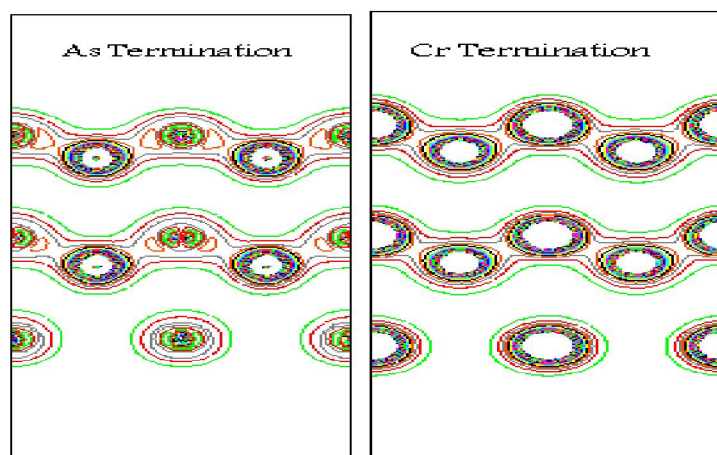
می‌شود (شکل ۴)، به طبع نیروی حاصل از این پتانسیل اضافی لایه‌های رویی را به سمت پایین می‌راند و فاصله‌ی سطوح را کاهش می‌دهد. از نمودار چگالی الکترونی دوبعدی (شکل ۵) دیده می‌شود که فاصله‌ی بین سطح و زیر سطح برای لایه‌ی نازک منتهی به As کم‌تر است و هم‌پوشانی بین ابرهای الکترونی بیشتر است.

چگالی حالت‌های کل

چگالی حالت‌های الکترونی کل بیان‌گر حفظ خاصیت نیم‌فلزی در هر لایه‌ی نازک منتهی به As و Cr است، اما



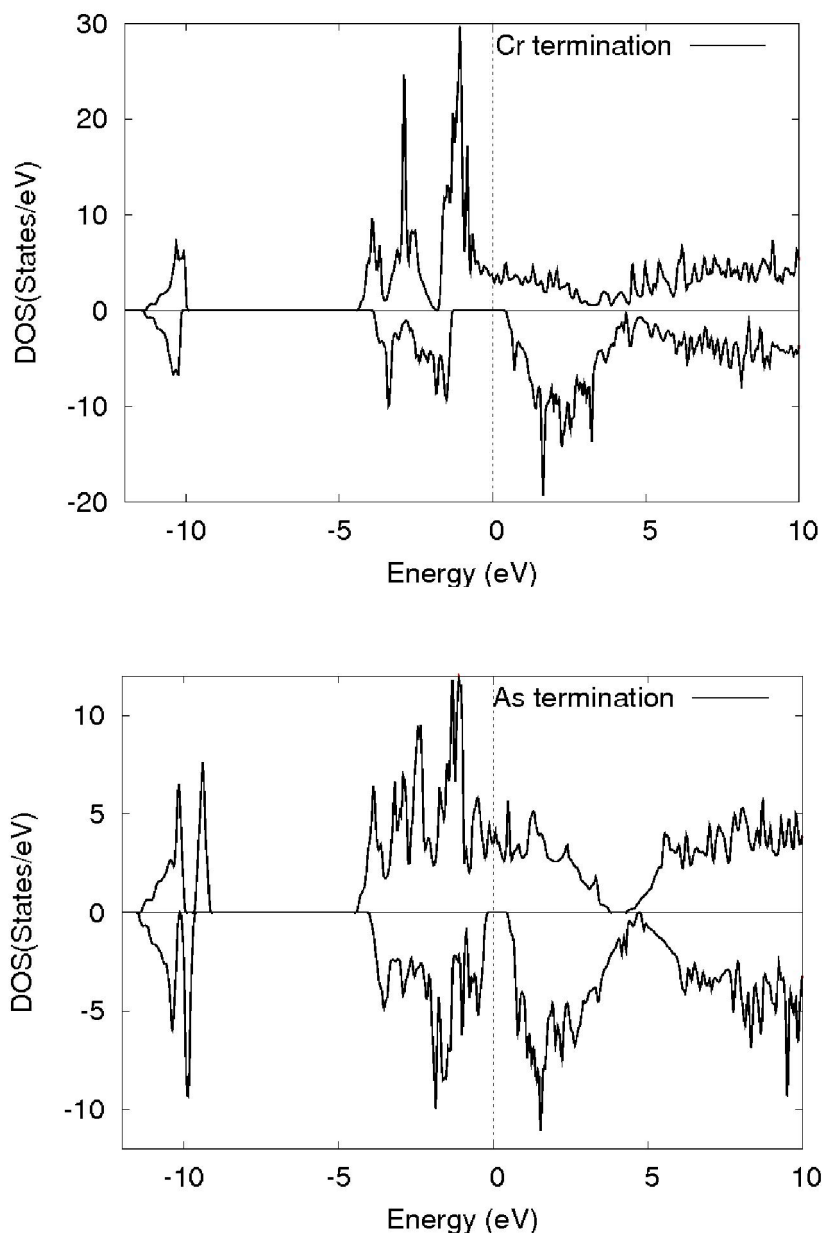
شکل ۴- پتانسیل الکترواستاتیکی.



ب

الف

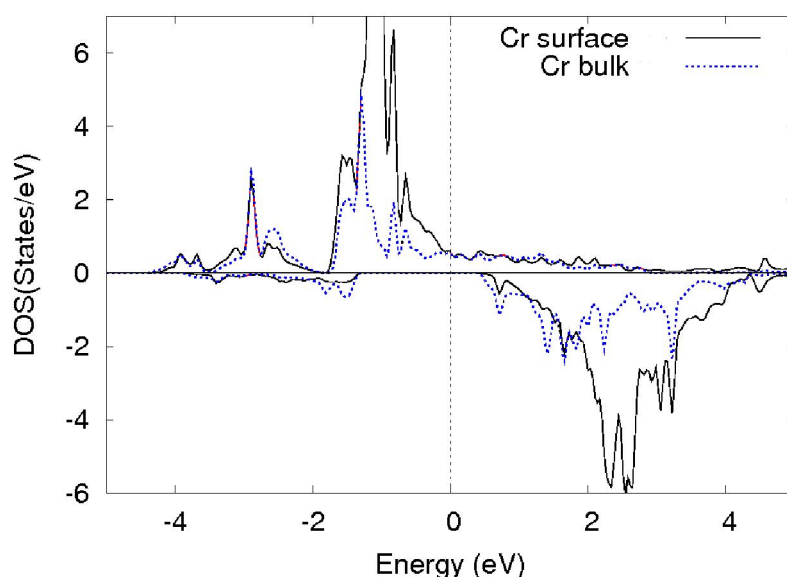
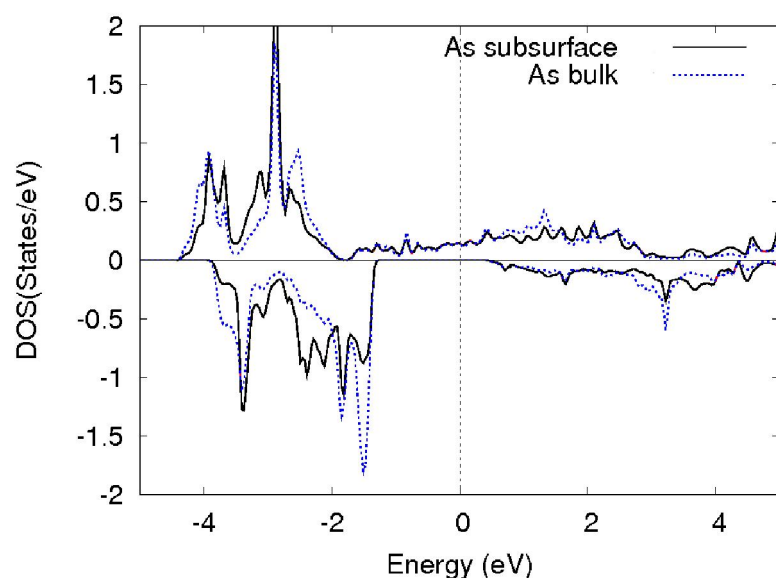
شکل ۵- چگالی بار منتهی به As و ب) منتهی به Cr.



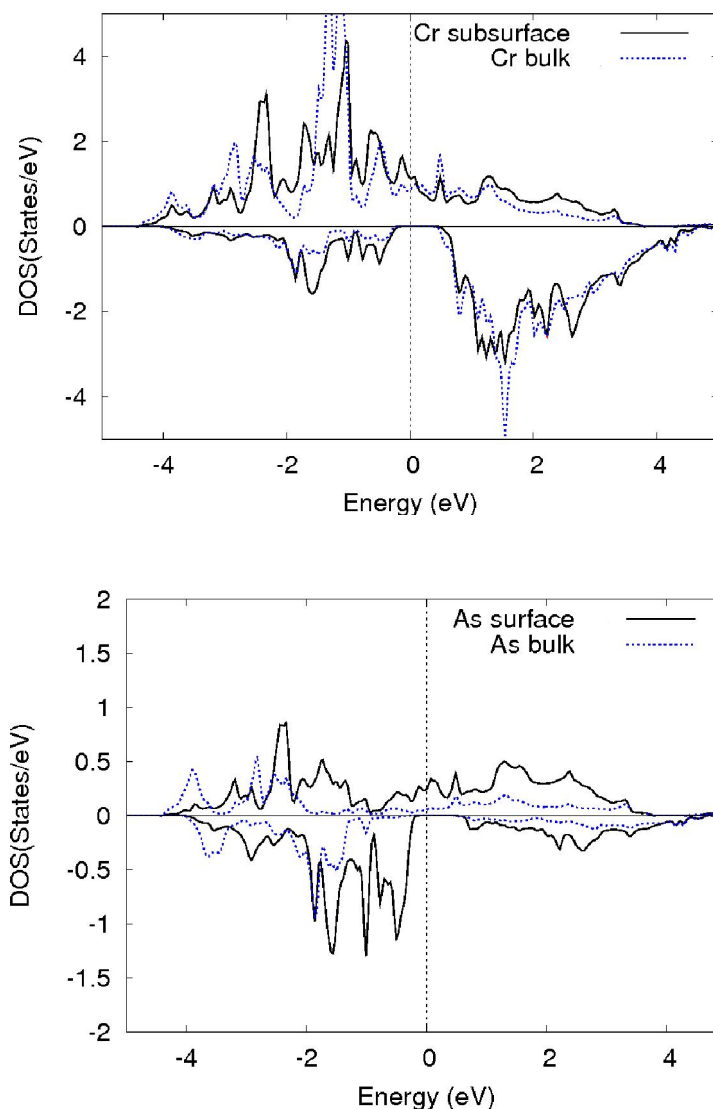
شکل ۶- چگالی حالت‌های الکترونی کل لایه‌ی نازک منتهی به Cr و As.

سطحی است. اما در چگالی اتم زیر سطح و انبوهه AS تفاوت چندانی مشاهده نمی‌شود که این امر بیان می‌دارد که تغییرات ناشی از اثرات سطح بیش‌تر به لایه‌ی اول برمی‌گردد (شکل ۷). برای لایه‌ی نازک منتهی به اتم AS هم همین موضوع مشهود است (شکل ۸).

چگالی حالات اتم Cr موجود در سطح نسبت به انبوهه هم جابجا شده و هم مقدار آن افزایش یافته. این جابجایی به سمت انرژی‌های بالاتر به سبب پتانسیل اضافی ایجاد شده در سطح و افزایش مقدار چگالی حالات به خاطر حالت‌های الکترونی ناشی از پیوندهای آویزان اتم‌های



شکل ۷- مقایسه‌ی چگالی حالت‌های موجود در سطح و انبوهه در لایه‌ی منتهی به Cr.



شکل ۸- مقایسه‌ی چگالی حالت‌های موجود در سطح و انبوه در لایه‌ی منتهی به As.

نتیجه‌گیری

به وجود آمدن چگالی حالت‌های الکترونی در نزدیکی سطح فرمی می‌شود که گاف انرژی را نسبت به حالت انبوه کوچک‌تر می‌کند، که این تغییر در فیلم منتهی به As بیش‌تر قابل مشاهده بود.

تشکر و قدردانی

در پایان از جناب آقای دکتر فرامرز کنجوری و دکتر محمدرضا ابوالحسنی، به خاطر زحمات و راهنمایی‌های بی‌دریغشان کمال تشکر و قدردانی را داریم.

نیم‌رسانای InP یک زیرلایه‌ی مناسب برای رشد نیم‌فلز CrAs در صنعت اسپین-ترونیک است. همان‌طور که دیده شد هر دو لایه‌ی منتهی به Cr و منتهی به As خاصیت نیم‌فلزی از خود نشان می‌دهند که این به نوبه‌ی خود حائز اهمیت است. با محاسبه‌ی انرژی بستگی سطحی مشخص شد که حالت منتهی به As پایدارتر است. از دست دادن همسایگان اتم سطحی و ایجاد پیوندهای آویزان، یک چگالی بار اضافی را در سطح ایجاد می‌کند که باعث

منابع

- [11] Mizuguchi, M.; Akinaga, H.; Manago, T.; Ono, K.; Oshima, M.; Shirai, M.; Yuri, M.; Lin, H.J.; Hsieh, H.H.; Chen, C.T.; “Growth of ferromagnetic semiconductor: (Ga, Cr)As”, *Journal of Applied Physics* 91 (2002) 7917.
- [12] Galanakis, I.; Mavropoulos, P.; *Condense Matter* 23 (2002) 6329-6338.
- [13] Hohenberg, P.; Kohb, W.; “Inhomogeneous Electron Gas”, *Physical Review B* 136 (1964) B864-B871.
- [14] Perdew, J.; Wang, Y.; “Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy”, *Physical Review B* 45 (1992) 13244-13249.
- [15] Blaha, P.; Schwarz, K.; Madsen, G.K.H.; Kavanicka, D.; Luitz, J.; WIEN2k, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Vienna University of Technology, Austria, (2010).
- [16] Pask, J.E.; Yang, L.H.; Fong, C.Y.; Pickett, W.E.; Dag, S.; “Six An low-strain zinc-blende half-metals: *ab initio* investigation”, *Physical Review B* 67 (2003) 224420-224427.
- [17] Kubler, J.; “Curie temperatures of zinc-blende half-metallic ferromagnets”, *Physical Review B* 67 (2003) 220403-220407.
- [18] Zhao, Yu-Jun; Zunger, A.; “Zinc-blende half-metallic ferromagnets are rarely stabilized by coherent epitaxy”, *Physical Review B* 71 (2005) 132403-132407.
- [1] Prinz, G.A.; “Magnetoelectronics”, *Science* 282 (1998) 1660-1663.
- [2] De Groot, R.A.; Muller, F.M.; “New class of materials: half-metallic ferromagnets”, *Physical Review Letter* 50 (1983) 2024-2027.
- [3] Schwarz, K.; “CrO₂ predicted as a half-metallic ferromagnet”, *Journal Physics Fluid Metal Physics* 16 (1986) L211.
- [4] Park, J.H.; Vescovo, E.; Kim, H.J.; “Direct evidence for a half-metallic ferromagnet”, *Nature (London)* 392 (1998) 749-796.
- [5] Kamper, K.P.; Schmitt, W.; Ruf, R.; “CrO₂-A New Half-Metallic Ferromagnet”, *Physical Review Letters* 59 (1987) 2788-2791.
- [6] Ohno, Y.; Young, D.K.; Beschoten, B.; *Nature (London)* 402 (1999) 790-792.
- [7] Zaho, J.H.; Matsukara, F.; “Room-temperature ferromagnetism in zincblende CrSb grown by molecular-beam epitaxy”, *Applied Physics Letters* 79 (2001) 2776.
- [8] Sanyal, B.; Erikson, O.; “Ferromagnetic materials in the zinc-blende structure”, *Physical Review B* 68 (2003) 054417-054424.
- [9] Przewdzieka, E.; Dynowska, E.; “MnTe and ZnTe grown on sapphire by molecular beam epitaxy”, *Thin Solid Film* (2008) 4313-4318.
- [10] Akinaga, H.; Manago, T.; Shirai, M.; Jpn. “Epitaxial growth of zinc-blende CrAs/GaAs multilayer”, *Journal of Applied Physics Part 2* 39 (2002) L1118.