بررسی رفتار نیمه‌فلزی و هم‌ترازی نوارهای مرز مشترک $Mn_2FeAl/GaAs(001)$ بر پایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی

آرش بوچانی*، ملیحه امیری

گروه فیزیک، واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران

دریافت: 1396/08/06 ویرایش نهائی: 1397/12/06 پذیرش: 1397/12/25

چکیده

ویژگی‌های الکترونی، انحراف نواری و مغناطیسی مرز مشترک $Mn_2FeAl/GaAs$ توسط محاسبات اصول اولیه با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی و تقریب گرادیان تعمیم‌یافته (GGA) مورد بررسی قرارگرفت. محاسبات نشان دادند که مرز مشترک Mn-Mn/Ga از نظر انرژی پایدارتر از دیگر مرز مشترک‌های قابل بررسی بود.مطالعهٔ هم‌زمان سد شاتکی و پتانسیل الکتروستاتیکی برای این ساختار نشان‌دهندهٔ هم‌ترازی نواری نوع III(شکسته)می‌باشد، جایی‌که لبهٔ نوار ظرفیت Mn_2FeAl بالاتر از لبهٔ نوار رسانش گالیوم آرسناید می‌باشد. ما یک انحراف نوار ظرفیت 1/54الکترون‌ولت و یک انحراف نوار رسانش 1/39الکترون‌ولت را یافتیم.از این‌رو $Mn_2FeAl/GaAs(001)$ برای کاربردهای GMR و TMR پیشنهاد می‌شود. در این مرز مشترک شاهد بروز یک اختلاف به‌میزان 0/056میکروولت و نیز بروز رفتار نیمه‌فلزی هستیم.

کلیدواژگان: مرز مشترک،انحراف نواری، نظریهٔ تابعی چگالی، سد شاتکی، رفتار نیمه‌فلزی

مقدمه

گالیم‌آرسناید نیم‌رسانای مهمی که به‌سبب داشتن خواص فوتوالکتریک عالی توجهات بسیاری را به‌خود جلب نموده است. آلیاژهای هویسلر با ترکیب استوکیومتری X_2YZ به‌عنوان نیمه‌فلز[1] معرفی شده و بسیاری از خواص مغناطیسی و اسپینترونیکی آنها مورد مطالعه قرار گرفته است [1]. رفتار مرز مشترک بین دو مادهٔ نیمه‌فلز و نیم‌رسانا بسیار حائز اهمیت است چرا که مرز مشترک قادر به از بین‌بردن خاصیت نیمه‌فلزی می‌باشد. ثابت‌های شبکه ساختارهای Mn_2FeAl و GaAs به‌ترتیب مقادیر 5/7 و 5/65 آنگستروم گزارش شده‌است [2]. بنابراین گالیوم‌آرسناید زیرلایهٔ مناسبی برای رشد لایه‌های Mn_2FeAl خواهد بود. شناخت رفتار هم‌ترازی نواری[2] انرژی در مرز مشترک نیمه‌فلز/نیم‌رسانا طبق مدل اندرسون [3و4] یک نیاز برای طراحی دستگاه‌های با ساختار چندلایه‌ای مانند لیزرهای آبشاری و ترانزیستورهای با تحرک الکترونی بالا می‌باشد.

جزئیات محاسبات

محاسبات اصول اولیه بر مبنای نظریهٔ تابعی چگالی و تقریب گرادیان تعمیم‌یافته (GGA) در کد Wien2K به‌کار گرفته شد [5]. تعداد نقاط K در منطقهٔ اول

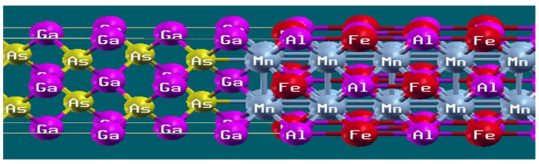
* نویسنده مسئول: arash_bch@gmail.com

[1] Half-metal
[2] Band Alignment

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

این مقاله تحت مجوز کریتیو کامنز تخصیص 4,0 بین‌المللی می‌باشد.

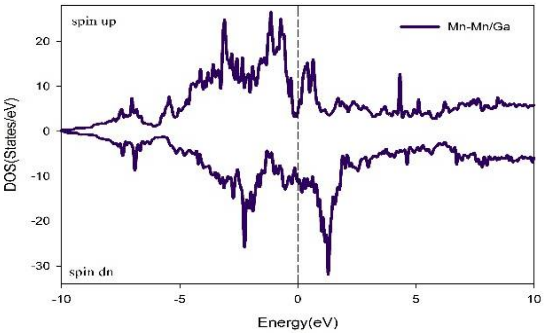
بریلوئن 1000 و پارامتر قطع 6-ریدبرگ انتخاب شد. نیروهای وارد بر اتم‌ها تا (1(dy/a.u. بهینه شده است.



شکل1. ساختار مرز مشترک $Mn_2FeAl/GaAs(001)$ در پایانش Mn_Mn/Ga

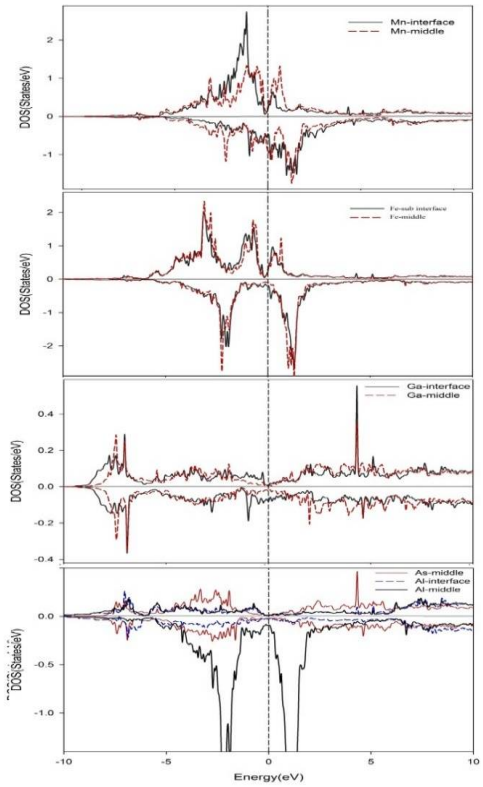
نتایج

در ابریاخته $Mn_2FeAl/GaAs(001)$ چهار مرز مشترک شامل: Mn-Mn/Ga، Mn-Mn/A، Fe-Al/Ga، Fe-Al/Al وجود دارد. هدف ما بررسی مرز مشترکی است که بالاترین پایداری را داشته باشد، پس از بهینه‌سازی نیروهای وارد بر اتم‌ها در ابریاخته‌ها انرژی چسبندگی هرکدام از مرز مشترک‌های ذکرشده به‌ترتیب: 6/78-، 4/32-،3/49- و 2/61- الکترون‌ولت به‌دست آمده‌اند. لذا پایدارترین مرز مشترک یعنی Mn-Mn/Ga را به‌عنوان ساختار هدف برگزیدیم. منحنی‌های چگالی حالات الکترونی کلی و جزئی[1] اتم‌های سهیم در لایهٔ مرز مشترک[2] و لایه‌های میانی[3] فیلم و زیرلایه[4] در شکل‌های2و3 نشان داده شده‌اند. ممان مغناطیسی کل برای مرز مشترک مقدار 19/2 مگنتون‌بوهر و قطبش اسپینی از رابطهٔ $P=(N^{up}-N^{dn})/(N^{up}+N^{dn})$ حدود 70% است. در شکل3 حالات الکترونی در محدودهٔ سطح فرمی اتم منگنز در اسپین بالا به‌صورت یک پیک تیز است و در بالای سطح فرمی نسبت به‌لایه‌های میانی آن کاهش نشان می‌دهد. منحنی چگالی حالات آهن در لایه‌های میانی و زیر مرز مشترک تقریباً یکسان است. از منحنی حالات الکترونی گالیوم نیز ملاحظه می‌شود که در مرز مشترک، رفتار یک نیمه‌فلز با قطبش اسپینی 100% دارند اما در لایه‌های میانی رفتار کاملاً غیرمغناطیسی دارند. اتم‌های آلومنیوم رفتار غیرمغناطیسی در ناحیهٔ فرمی را نشان می‌دهند. چگالی حالات اتم‌های آرسنیک نیز در ناحیهٔ زیرسطح فرمی اندکی مغناطیسی است. شکل4 منحنی مغناطش جزئی اتم‌ها در زیرلایهٔ گالیوم‌آرسناید و فیلم Mn_2FeAl را نشان می‌دهد. ممان مغناطیسی اتم‌های گالیوم، آرسنید و آلومنیوم صفر است. اما برای آهن 1/5 مگنتون بوهر و منگنز با نزدیک شدن به مرزمشترک افزایش و از 0/5 به 2/2 مگنتون بوهر رسیده است.

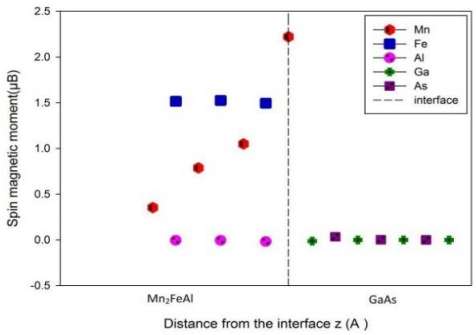


شکل2. منحنی چگالی حالات کل مرز مشترک Mn_Mn/Ga

[1] PDOS
[2] Interface
[3] Middle
[4] Sub-Interface

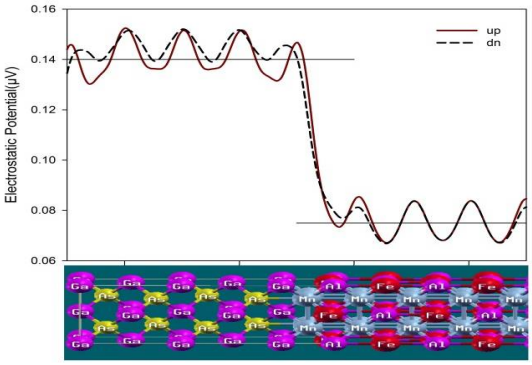


شکل3. چگالی حالات جزئی مرز مشترک Mn-Mn/Ga برای اتم‌های تشکیل‌دهندهٔ آن.



شکل4. ممان مغناطیسی لایه‌های اتمی در ابریاخته $Mn_2FeAl/GaAs(001)$ در پایانش Mn-Mn/Ga.

شکل5 منحنی پتانسیل الکتروستاتیک را زیر لایهٔ گالیوم آرسناید و فیلم Mn_2FeAl در دو حالت اسپینی بالا و پایین نشان داده است. در مرز مشترک شاهد یک افزایش پتانسیل الکتروستاتیکی خوب (0/065 میلی‌الکترون‌ولت) هستیم که این سد پتانسیل ضامن تزریق اسپینی الکترون است. در ناحیهٔ فیلم با توجه به رفتار اسپینی Mn_2FeAl مقدار پتانسیل در دو اسپین بالا و پایین کاملاً متفاوت است طوری که در اسپین اقلیت سد پتانسیل بالاتر از اسپین اکثریت است.



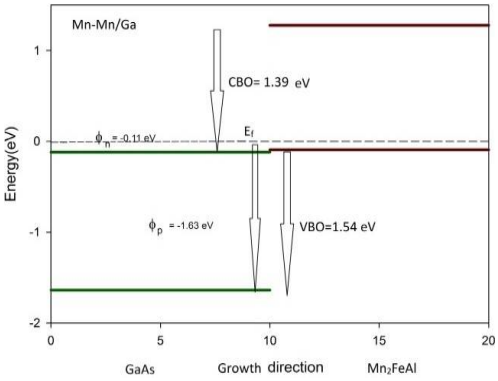
شکل5. پتانسیل الکتروستاتیکی مرز مشترک $Mn_2FeAl/GaAs(001)$ در پایانش Mn-Mn/Ga

وضعیت ساختار نواری $Mn_2FeAl/GaAs(001)$ در اسپین اکثریت به‌حالت مرز مشترک نیم‌رسانا/نیم‌رسانا شباهت دارد و مقدار انحراف نوار ظرفیت[1] قابل تعیین است. به‌طور مشابه در اسپین اقلیت این سیستم شبیه مرز مشترک فلز/نیم‌رسانا است و می‌توان مقدار سد-شاتکی اکثریت و اقلیت (ϕ_n,ϕ_p)را استخراج نمود. برای بررسی هم‌ترازی نواری مرز مشترک Mn-Mn/Ga به‌طور هم‌زمان ساختار نواری وپتانسیل الکتروستاتیکی را مطالعه نمودیم.طبق شکل7، نمودار هم‌ترازی نواری مرز مشترک Mn-Mn/Ga از نوع گاف شکسته است و دارای مقادیر بزرگی برای انحراف نوار رسانش[2] و ظرفیت است که قابل مقایسه با نتایج کارهای دیگر ذکرشده در جدول1 می‌باشد. با توجه به اینکه مقدار ماکزیمم نوار ظرفیت برای گالیوم‌آرسناید بزرگتر از

[1] VBO

[2] CBO

Mn_2FeAl است لذا مرز مشترکMn-Mn/Ga برای تزریق الکترون مناسب است.



شکل7. نمودار هم ترازی نواری مرز مشترک Mn-Mn/Ga

جدول1. مقادیر سد شاتکی (eV) و انحراف نوار(eV) برای $Mn_2FeAl/GaAs$ و مقایسه با کار دیگران.

	Φ_n	Φ_p	VBO	CBO
Mn-Mn/Ga	-0/11	-1/63	1/54	1/39
InAs/GaSb[a]	----	---	0/51	0/72
ZnGeN2 /GaN [b]	0/08	2/7	1/5	1/4
Sc_2CF_2/MoS_2[c]	---	---	1/75	1/51

[a]6، [b]7و [c]8

نتیجه‌گیری

ساختار الکترونیکی مرز مشترکMn-Mn/Ga با استفاده از محاسبات اصول اولیه DFT و بهره‌گیری از روش (FP-LAPW) مورد مطالعه قرار گرفت.مشاهده شد که مرز مشترک Mn-Mn/Ga به لحاظ ترمودینامیکی پایدار است. همچنین منحنی‌های چگالی حالات نشان دادند که خاصیت نیمه‌فلزی در سطح فرمی از بین نرفته ولی قطبش اسپینی آن کامل نیست و حدود 70% می‌باشد. بررسی نمودار پتانسیل الکتروستاتیکی به‌خوبی نشان می‌دهد که مرز مشترک $Mn_2FeAl/GaAs$ کاندید مناسبی برای تزریق الکترون می‌باشد. بررسی نمودار هم‌ترازی نواری بیانگر آن است که این اتصال مرز مشترک از نوع شکسته (type-III) است ومرز مشترکMn-Mn/Ga دارای مقادیر پتانسیل Φ_p و CBO مناسبی است.

مرجع‌ها

[1] De-ming Ma, Yong-yong Chai, Vei Wang, En-ling Li, Wei Shi, Electronic structure, magnetic and optical properties of Cr-doped GaAs using hybrid density functional, *Computational Materials Science* 113 (2016) 75–79.

[2] Kazutaka Nagao, Yoshio Miura, and Masafumi Shirai, Half-metallicity at the (110) interface between a full Heusler alloy and GaAs, PHYSICAL REVIEW B **73** (2006) 104447.

[3] Yiannis Karafyllidis, Prediction of band discontinuities in semiconductor heterojunctions: A simple model, *Microelectronics Journal* 22, 7–8(1991) 59-65.

[4] Sh. Khosravizadeh, S. Javad Hashemifar, and Hadi Akbarzadeh, First-principles study of the Co2FeSi(001) surface and Co2FeSi/GaAs(001) interface, *Physical Review B* 79(2009) 235203.

[5] J. Perdew, K. Burke and M. Enzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Physical Review Letters*, 77 (1996) 3865.

[6] Jheng-Sin Liu, Yan Zhu, Patrick S. Goley, and Mantu K. Hudait, Heterointerface Engineering of Broken-Gap InAs/GaSb Multilayer Structures, *ACS Applied Materials & Interfaces* 7 (2015) 2512−2517.

[7] Cheng-Tai Kuo, Karuppannan Balamurugan, Hung Wei Shiu, Hyun Ju Park, Soobin Sinn, Michael Neumann, Moonsup Han, Young Jun Chang, Chia-Hao Chen, Hyeong-Do Kim, Je-Geun Park, Tae Won Noh, The energy band alignment at the interface between mechanically exfoliated few-layer NiPS3 nanosheets and ZnO, *Current Applied Physics* 16 (2016) 404-408.

[8] S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, and S.-i. Nagahama, InGaN Multi-Quantum-Well-Structure Laser Diodes with Cleaved Mirror CavityFacets, *Journal of Applied Physics* 34 (1995)797.