

ویژگی‌های الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی نانولایه GaAs خالص و آلاییده شده

با ناخالصی‌های Mn و Fe واقع بر سطح [001]

زهرا نوربخش

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه اصفهان، اصفهان، ایران

دریافت: 1396/12/22 ویرایش نهایی: 1397/07/01 پذیرش: 1398/04/16

چکیده

انبوه و نانولایه GaAs به دلیل کاربردهای وسیع مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفته‌اند. به دلیل اهمیت نانولایه GaAs، در این مقاله با استفاده از دو ناخالصی Mn و Fe احتمال ایجاد گذار فاز رسانا به نیم‌رسانا و برعکس همچنین چگونگی جابه‌جایی سستی‌های ضرایب اپتیکی این نانولایه‌ها مورد بررسی قرار می‌گیرد. به این منظور ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و مغناطیسی نانولایه GaAs خالص و آلاییده شده با ناخالصی‌های Mn (GaAs+Mn) و Fe (GaAs+Fe) با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد مطالعه قرار می‌گیرند. چگالی حالت‌های الکترونی، ضریب خطی گرمای ویژه، ساختار نوراری و گشتاور مغناطیسی کل و موضعی حاصل از ناخالصی‌ها محاسبه و مقایسه می‌شوند. بخش حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، تابع دی‌الکتریک استاتیکی، ناهمسانگردی تک محوری، ضرایب بازتابش، ضرایب جذب، تابع اتلاف انرژی و رسانندگی اپتیکی نانولایه‌های GaAs خالص، GaAs+Fe و GaAs+Mn برای میدان الکتریکی موازی و عمود بر سطح نانولایه‌ها با استفاده از تقریب‌های چگالی شیب تعمیم‌یافته و انگل-وسکو بررسی و مقایسه می‌شوند.

کلیدواژگان: نظریه تابعی چگالی، نانولایه GaAs خالص و ناخالص، گشتاور مغناطیسی، ساختار نواری، ویژگی‌ها اپتیکی

مقدمه

بر سطح نانولایه GaAs را مطالعه کردند. چگونگی جذب CH_3SH ، [11] AsH_3 ، [10] NH_3 ، [۸،۹] H_2O [13 و 12]، H_2S ، [14-16]، $\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}$ ، [17] و $\text{C}_3\text{H}_7\text{SH}$ [18] بر سطح GaAs نیز مطالعه شده است علاوه بر این شرایط شکل‌گیری و انتشار Zn در GaAs مورد مطالعه قرار گرفته است [19].

در این مقاله ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و مغناطیسی نانولایه GaAs خالص و آلاییده شده با ناخالصی‌های مغناطیسی منگنز (GaAs+Mn) و آهن (GaAs+Fe) بررسی و مقایسه می‌شوند. علاوه بر این، اثر ناخالصی‌های منیزیم و آهن بر ویژگی‌ها اپتیکی نانولایه GaAs با ضخامت $13,88\text{\AA}$ مورد بررسی قرار می‌گیرد. تاکنون، ویژگی‌ها فیزیکی نانولایه GaAs با این ضخامت و ناخالصی‌های Mn و Fe به صورت تجربی و نظری مطالعه نشده است.

GaAs به دلیل گاف نواری بهینه و رفتار گرمایی مطلوب یک نیم‌رسانای خوب برای فتوکاتد است [1] و در فن‌آوری‌های پیشرفته به ویژه تکنولوژی دید در شب با نور کم و شتاب دهنده‌های الکترونی [2 و 3] استفاده می‌شود. واسلنکو و همکاران [4] چگونگی تشکیل نانو ساختار GaAs در دماها و درصدهای متفاوت آرسنیک را مورد بررسی و مطالعه قرار دادند. شان و همکاران [5] ضمن طراحی مبدل فوتووالکتریک تک‌رنگ GaAs، ساختار و ضخامت نانولایه آن را جهت استفاده پرتوهای لیزر، بهینه کردند. برخی از اتم‌های ناخالصی و مولکول‌ها می‌توانند روی سطح GaAs جذب شوند. اتم‌ها و مولکول‌های جذب شده بر عملکرد GaAs تأثیر می‌گذارند [6]. چونگ و همکاران [7] با استفاده از دفع گرمایی و طیف سنجی الکترونی، چگونگی جذب و تجزیه برخی از مولکول‌ها را



روش انجام محاسبه‌ها

نظریه تابعی چگالی (DFT) یک نظریه موفق برای بررسی ویژگی‌های فیزیکی سامانه‌ها با ابعاد مختلف است. محاسبه‌های این مقاله در چارچوب DFT با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی (FP-LAPW) انجام شده است. در این مقاله، پتانسیل تبادل همبستگی با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) [20] و تقریب شیب تعمیم یافته به اضافه اصلاح انگل-وسکو (GGA-EV) [21] محاسبه می‌شود. محاسبات با استفاده از کد محاسباتی وین [22] انجام شده است.

انبوهه GaAs دارای ساختار بلوری بلند روی با گروه فضایی $F\bar{4}3m$ می‌باشد. ساختار بلوری نانولایه GaAs از ابریاخته $2 \times 2 \times 2$ و خلاء مناسب در راستای Z تشکیل شده است ضخامت خلاء با بهینه کردن انرژی نانولایه حدود $21/99 \text{ a.u.}$ (برای جلوگیری از برهم‌کنش بین نانولایه‌های مجاور) به دست آمد که به طور متقارن بالا و پایین ابر یاخته $2 \times 2 \times 2$ قرار دارد. نانولایه GaAs در جهت Z از دو نوع صفحه بلوری شامل اتم‌های Ga و As تشکیل شده است. محاسبات انرژی کل و انرژی هم‌دوسی این دو نوع نانولایه نشان می‌دهند که نانولایه GaAs با سطح متشکل از اتم‌های Ga پایدارتر است. لذا برای مطالعه خواص فیزیکی این نانو لایه‌ها از پایدارترین ابریاخته استفاده می‌شود.

برای اضافه کردن ناخالصی‌های مغناطیسی Mn و Fe بر روی سطح نانولایه GaAs خالص با ضخامت $13/88 \text{ \AA}$ ، ابریاخته $2 \times 2 \times 2$ حاوی 32 مولکول GaAs و خلاء با ضخامت $21/99 \text{ a.u.}$ در جهت Z استفاده شده است. ابعاد ابریاخته با بهینه کردن فاصله بین ناخالصی‌ها برحسب انرژی کل برای جلوگیری از برهم‌کنش ناخالصی-ناخالصی به دست آمده است. سپس یکی از اتم‌های Ga واقع بر سطح نانولایه با اتم ناخالص جایگزین شده است. برای نمونه ابریاخته نانولایه GaAs با ناخالصی Mn در شکل 1 آورده

شده است. غلظت ناخالصی منیزیم و آهن در نانولایه $3/1 \text{ GaAs}$ درصد و فاصله ناخالصی-ناخالصی $11/49 \text{ \AA}$ (به اندازه کافی بزرگ است تا مانع برهم‌کنش بین ناخالصی‌ها شود) است. با واهلش اتم‌های نانولایه نیروی کل وارد بر هر یک از اتم‌های نانولایه به کمتر از $m\text{Ry/a.u.}$ 1 کاهش یافت. فاصله Fe-As و Mn-As پس از واهلش به $2/25 \text{ \AA}$ و $2/23 \text{ \AA}$ که کوتاه‌تر از فاصله Ga-As ($2/55 \text{ \AA}$) در نانولایه GaAs خالص است، رسید.

در روش FP-LAPW یاخته یکه به دو ناحیه کره‌های موفین-تین با شعاع R_{MT} حول هر یک از اتم‌ها و ناحیه بین جایگاهی تقسیم می‌شود. چگالی الکترونی و پتانسیل داخل کره‌های موفین-تین برحسب هماهنگی‌های کروی تا شعاع قطع $l_{\max} = 10$ و خارج کره‌های موفین-تین برحسب امواج تخت تا شعاع $G_{\max} = 14 (R)^{1/2}$ بسط داده شده است. همچنین بیشینه بردار موج شبکه وارون برابر $K_{\max} = 8/R_{MT}$ انتخاب شده است که در آن R_{MT} کوچکترین شعاع کره‌های موفین-تین است. در این مقاله شعاع کره موفین-تین اتم‌های Mn و Fe $R_{MT_{Fe, Mn}} = 2.2 \text{ a.u.}$ و اتم‌های Ga $R_{MT_{Ga, As}} = 2 \text{ a.u.}$ انتخاب شده است. این پارامترها با استفاده از همگرایی انرژی کل به دست آمده است.

ویژگی‌ها ساختاری

برای بررسی ویژگی‌های ساختاری نانولایه‌های GaAs خالص، GaAs+Mn و GaAs+Fe ، انرژی کل برحسب حجم یاخته یکه این نانولایه‌ها در فازهای غیر مغناطیسی و فرو مغناطیسی با استفاده از رهیافت GGA محاسبه و نتایج حاصل با معادله حالت مورناگان برازش داده شده است. منحنی‌های انرژی-حجم نشان می‌دهند که در حالت پایه نانولایه GaAs خالص غیرمغناطیسی و نانولایه‌های GaAs+Mn و GaAs+Fe فرومغناطیس‌اند. حجم یاخته یکه و مدول حجمی این نانولایه‌ها محاسبه و نتایج حاصل در جدول 1 آورده شده است. این نانولایه‌ها

وسییی از جامدات به‌کار برده شده و منجر به بهبود گاف انرژی جامدات شده است [23-25].

برای محاسبه گاف انرژی این نانولایه‌ها، ساختار نواری آنها، علاوه بر رهیافت GGA با استفاده از رهیافت GGA-EV نیز محاسبه شده است. رفتار ساختار نواری این نانولایه‌ها در دو رهیافت با اندکی تفاوت در شکاف‌های نواری مشابه‌اند. با توجه به شباهت نزدیک بین ساختارهای نواری محاسبه شده با استفاده از این دو رهیافت، فقط نتایج حاصل از رهیافت GGA-EV در شکل 2 نشان داده شده است. ساختار نواری این نانولایه‌ها به‌ویژه گاف انرژی و پهنای نوارهای انرژی اطراف انرژی فرمی با یکدیگر متفاوت‌اند. مقایسه ساختار نواری این نانولایه‌ها نشان می‌دهد که نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Fe رسانا و نانولایه GaAs+Mn نیم‌رسانا با گاف نواری کوچک‌اند لذا با جایگزین کردن ناخالصی Mn روی سطح نانولایه GaAs یک گذار فاز رسانا به نیم‌رسانا اتفاق افتاده است. لازم به‌ذکر است که انبوهه GaAs نیم‌رسانا با گاف انرژی کوچک است.

گاف انرژی نانولایه GaAs+Mn برای الکترون‌ها با اسپین بالا و پایین با استفاده از رهیافت‌های GGA و GGA-EV در جدول 2 آورده شده است. گاف انرژی این نانولایه که با استفاده از رهیافت GGA-EV محاسبه شده بزرگتر از مقدار متناظر در رهیافت GGA است. مطالعات انجام شده روی برخی از نیم‌رساناها [23-25] نشان می‌دهد که برای بعضی از نیم‌رساناها گاف انرژی محاسبه شده در رهیافت GGA-EV نسبت به GGA به‌مقادیر تجربی نزدیک‌تر است. از آنجا که تاکنون ویژگی‌های فیزیکی نانولایه GaAs+Mn به‌صورت نظری و تجربی مطالعه نشده لذا انتظار می‌رود که گاف انرژی این نانولایه با استفاده از رهیافت GGA-EV به‌مقدار واقعی نزدیک‌تر باشد و این نتیجه می‌تواند به‌عنوان مرجع برای مطالعه ویژگی‌های فیزیکی این نانولایه در آینده استفاده شود.

پیوندهای یونی و کووالانسی متفاوتی از خود نشان می‌دهند. پیوند یونی ضعیفی بین As-Mn، As-Fe و As-Ge وجود دارد. برهم‌کنش کووالانسی بین ناخالصی و نزدیکترین همسایه ناخالصی (As-Mn) و (As-Fe) ناشی از اوربیتال d ناخالصی و 4p اتم As است قدرت این پیوند کووالانسی به‌میزان برهم‌کنش این اوربیتال‌ها بستگی دارد. پیوند یونی به‌دلیل کاهش چگالی بار پیوندی باعث کاهش مدول حجمی می‌شود، در حالی که پیوند کووالانس مدول حجمی را افزایش می‌دهد. مدول حجمی نانولایه GaAs هنگامی که یکی از اتم‌های Ga روی سطح نانولایه با Fe یا Mn جایگزین می‌شود افزایش می‌یابد که ناشی از افزایش شدت پیوند کووالانسی با کاهش فاصله نزدیکترین همسایه است.

جدول 1. حجم یاخته یکه و مدول حجمی نانولایه‌های GaAs خالص، GaAs+Mn و GaAs+Fe با استفاده از رهیافت GGA.

مدول حجمی (GPa)	حجم یاخته یکه (a.u.) ³	نانولایه
33,51	511,69	GaAs خالص
42,31	508,17	GaAs+Mn
55,26	492,02	GaAs+Fe

ویژگی‌های الکترونی

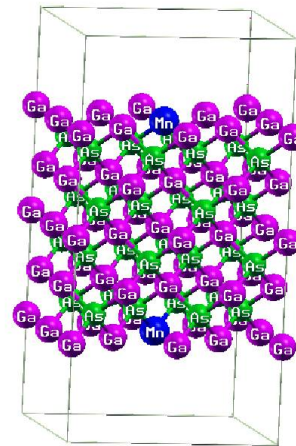
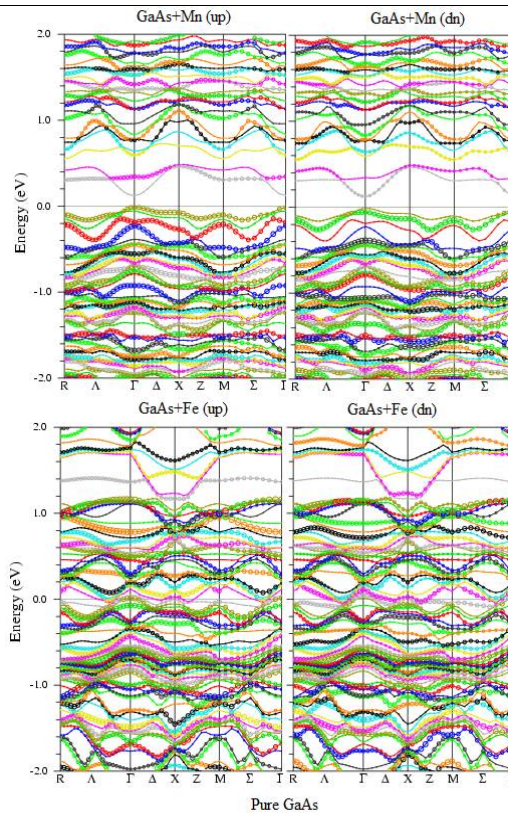
ساختار نواری

برای مطالعه ساختار نواری نانولایه‌های GaAs خالص، GaAs+Fe و GaAs+Mn باید انرژی تبادل همبستگی مناسبی انتخاب شود. معمولاً رهیافت GGA برای مطالعه ویژگی‌های ساختاری جامدات مناسب است اما یکی از ضعف‌های DFT با استفاده از رهیافت GGA خطا در محاسبه گاف انرژی و شکاف‌های بین نواری است که کمتر از مقدار تجربی به‌دست می‌آید. انگل و سکو [21] برای رفع این مشکل فرمول‌بندی دیگری از GGA که در آن پتانسیل تبادل V_x بهینه‌سازی می‌شود را معرفی کردند. تقریب انگل و سکو (GGA-EV) تاکنون برای طیف

جدول 2. گاف انرژی (eV) نانولایه GaAs+Mn برای الکترون‌ها با اسپین

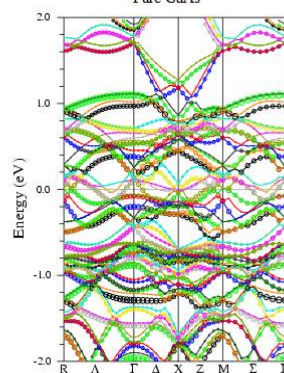
بالا و پایین با استفاده از رهیافت‌های GGA و GGA_EV

GGA_EV		GGA	
اسپین بالا	اسپین پایین	اسپین بالا	اسپین پایین
0,28	0,30	0,13	0,16



شکل 1. ابرباخته GaAs+Mn. لازم به ذکر است که مکان ناخالصی Fe در

ابریخته GaAs+Fe نیز به‌مشابه ابرباخته GaAs+Mn است.



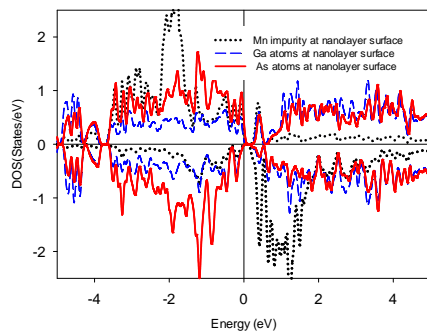
شکل 2. ساختار نواری و توزیع الکترون‌ها با اسپین بالا و پایین روی ساختار نواری نانولایه‌های GaAs خالص، GaAs+Mn و GaAs+Fe.

چگالی حالت‌های الکترونی

برای بررسی تأثیر ناخالصی‌های Mn و Fe بر چگونگی توزیع الکترون‌های نانولایه GaAs، چگالی حالت‌های الکترونی نانولایه‌های GaAs خالص، GaAs+Mn و GaAs+Fe با استفاده از رهیافت‌های GGA و GGA_EV محاسبه و مقایسه شده‌اند. نتایج حاصل نشان می‌دهند که چگالی حالت‌های الکترونی این نانولایه‌ها با استفاده از

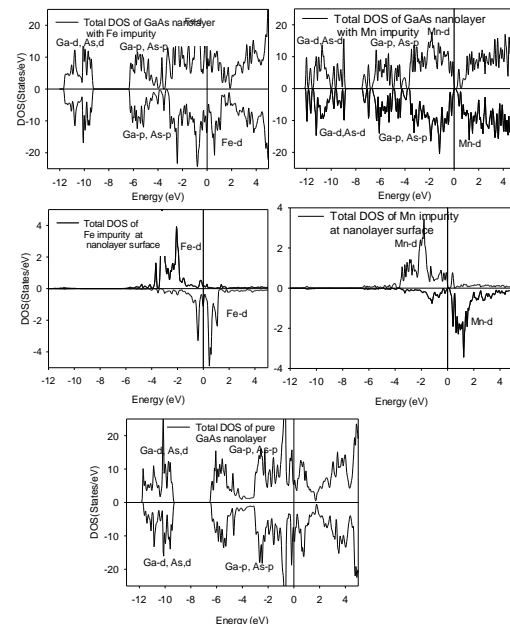
الکترونی اشغال شده اطراف انرژی فرمی ناشی از اوربیتال p اتم‌های Ga و As و اوربیتال d اتم‌های ناخالص Fe و Mn است. چگالی حالت‌های الکترونی دور از انرژی فرمی شامل ستیغ‌هایی است که بین 9- تا 12- الکترون‌ولت قرار دارند. این ستیغ‌ها از اوربیتال d اتم‌های ناخالصی، Ga و As ناشی می‌شوند. چگالی حالت‌های الکترونی بالای انرژی فرمی، به‌طور عمده ناشی از اوربیتال p اتم‌های Ga و As اند که به‌طور جزئی با اوربیتال d اتم‌های ناخالص Mn و Fe هیبرید شده‌اند.

هنگامی که اتم Ga در سطح نانولایه GaAs خالص توسط Mn جایگزین می‌شود، ستیغ چگالی حالت‌های الکترونی واقع بر انرژی فرمی به‌دو ستیغ مجزا شکافته می‌شود و یک گذار فاز رسانا به نیم‌رسانا اتفاق می‌افتد. بنابراین چگالی حالت‌های الکترونی اکثریت (اسپین بالا) و اقلیت (اسپین پایین) در نانولایه GaAs+Mn گاف انرژی کوچکی را نشان می‌دهند. برای بررسی علت این گذار فاز، چگالی حالت‌های الکترونی ناخالصی Mn واقع در سطوح نانولایه GaAs-Mn با چگالی حالت‌های الکترونی نزدیکترین همسایه‌های (Ga و As) اتم Mn در شکل 4 مقایسه شده‌اند. چگالی حالت‌های الکترونی اوربیتال 3d اتم Mn به‌علت هیبریدشدگی با 4p اتم‌های Ga و As به دو بخش تقسیم می‌شوند بنابراین انتقال فاز رسانا به نیم‌رسانا به‌دلیل این هیبریدشدگی اتفاق می‌افتد.



شکل 4. مقایسه چگالی حالت‌های الکترونی ناخالصی Mn و نزدیکترین همسایه‌های آن واقع بر سطح نانولایه GaAs+Mn.

رهیافت‌های GGA و GGA_EV با اندکی تفاوت در موقعیت و پهنای ستیغ‌ها تقریباً مشابه‌اند لذا فقط نتایج حاصل از رهیافت GGA_EV در شکل 3 نشان داده شده است.



شکل 3. چگالی حالت‌های الکترونی نانولایه‌های GaAs خالص، GaAs+Mn و GaAs+Fe با استفاده از رهیافت GGA_EV.

مقایسه چگالی حالت‌های الکترونی این نانولایه‌ها نشان می‌دهد که:

- نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Fe رسانا هستند. چگالی حالت‌های الکترونی این نانولایه‌ها اطراف انرژی فرمی بیشتر ناشی از اتم‌های Ga واقع بر سطح نانولایه‌ها و اتم ناخالص‌اند که نشان‌دهنده نقش این اتم در ویژگی‌های ترابردی این نانولایه‌ها است.

- چگالی حالت‌های الکترونی نانولایه GaAs خالص زمانی که یکی از اتم‌های Ga در سطح نانولایه توسط Fe یا Mn جایگزین می‌شود به سمت انرژی‌های کمتر جابه‌جا می‌شوند.

- بررسی توزیع الکترون‌های اوربیتال‌های مختلف نشان می‌دهد که سهم عمده در چگالی حالت‌های

جدول 4. گشتاور مغناطیسی کل، سهم اتم‌های ناخالصی و سهم ناحیه بین

جایگاهی در گشتاور مغناطیسی نانولایه‌های GaAs+Mn و GaAs+Fe

گشتاور مغناطیسی کل (μ_B)		سهم ناحیه بین جایگاهی در گشتاور مغناطیسی (μ_B)		گشتاور مغناطیسی موضعی در محل اتم ناخالصی (μ_B)		نانولایه
GGA_	GG	GGA_	GG	GGA_	GG	
EV	A	EV	A	EV	A	GaAs+Fe
2,82	2,63	0,17	0,08	2,75	2,61	
0,24	0,19	0,14	0,12	0,07	0,04	GaAs+Mn

ویژگی‌های اپتیکی

ویژگی‌های اپتیکی جامدات با استفاده از تابع دی‌الکتریک آنها مورد مطالعه قرار می‌گیرد. تابع دی‌الکتریک دارای دو سهم درون نواری که تنها برای فلزات مهم است و سهم مربوط به انتقال بین نواری که به دو دسته مستقیم و غیرمستقیم تقسیم می‌شوند، است. انتقال‌های بین نواری غیرمستقیم (شامل پراکندگی فونون‌ها) سهم کوچکی در تابع دی‌الکتریک در دماهای پایین [26] دارند و در این پژوهش نادیده گرفته می‌شوند. لذا برای محاسبه تابع دی‌الکتریک این نانولایه‌ها، سهم تمام انتقال‌های بین نواری مستقیم و دورن نواری در نظر گرفته می‌شود. بخش موهومی تابع دی‌الکتریک، $\varepsilon_2(\omega)$ توسط رابطه زیر محاسبه می‌شود [27]

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{Ve^2}{2\pi^2 m^2 \omega^2} \int d^3k \sum_{mm'} \langle \bar{K}_n | \bar{p} | \bar{K}_m \rangle \langle \bar{K}_m | \bar{p} | \bar{K}_n \rangle [1 - f(\bar{K}_n)] \delta(E_{\bar{K}_n} - E_{\bar{K}_m} - \hbar\omega)$$

در این رابطه $\hbar\omega$ انرژی فوتون فرودی، $|K_n\rangle$ ویژه تابع با ویژه‌مقدار E_{kn} ، $P(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x})$ عملگر تکانه و $f(\bar{k}n)$ تابع توزیع فرمی دیراک هستند. بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک، $\varepsilon_1(\omega)$ با استفاده از بخش موهومی آن توسط تبدیلات کرامرز-کرونیکر به صورت زیر به دست می‌آید

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_2(\omega') \omega' d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}$$

پاسخ‌های اپتیکی نانولایه‌های GaAs خالص، GaAs+Fe، GaAs+Mn، به موج الکترومغناطیس در صفحه XY (موازی سطح نانولایه) و عمود بر صفحه XY

علاوه بر این، با استفاده از چگالی حالت‌های الکترونی روی انرژی فرمی، D (Ef) ضریب خطی گرمای ویژه الکترونی (γ) نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Fe برای الکترون با اسپین بالا و پایین با استفاده از رهیافت‌های GGA و GGA_EV محاسبه و نتایج حاصل در جدول 3 آورده شده است. ضریب خطی گرمای ویژه الکترونی نانولایه GaAs خالص با جایگزینی Ga با Fe اندکی افزایش می‌یابد. که الکترون‌ها با اسپین بالا سهم بیشتر در ویژگی‌های تراپردی نانولایه GaAs+Fe دارند.

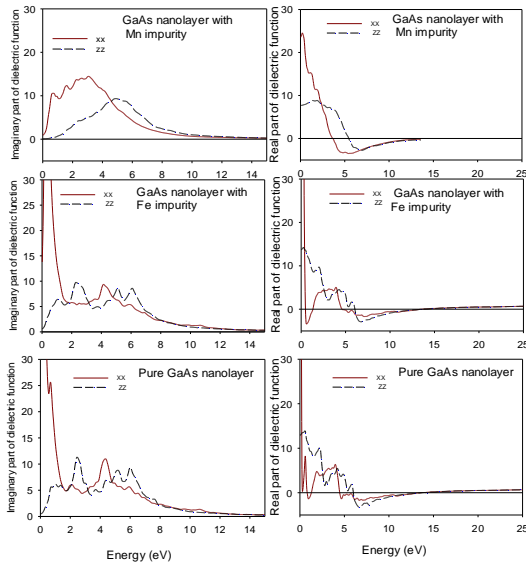
جدول 3. ضریب خطی گرمای ویژه الکترونی (γ) نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Fe برای الکترون با اسپین بالا و پایین با استفاده از رهیافت‌های GGA و GGA_EV.

GaAs خالص	GaAs+Fe		GGA	ضریب خطی گرمای ویژه $\gamma (mJmol^{-1}K^{-2})$
	اسپین بالا	اسپین پایین		
33,75	12,24	28,03	GGA	
43,30	13,99	20,44	GGA_EV	

ویژگی‌های مغناطیسی

برای بررسی ویژگی‌های مغناطیسی نانولایه‌های GaAs+Mn و GaAs+Fe، گشتاور مغناطیسی موضعی در محل اتم‌های این نانولایه‌ها محاسبه و مقایسه می‌شود. گشتاور مغناطیسی کل، سهم اتم‌های ناخالصی و سهم ناحیه بین جایگاهی در گشتاور مغناطیسی این نانولایه‌ها محاسبه و نتایج حاصل در جدول 4 آورده شده است. گشتاور مغناطیسی در محل اتم ناخالصی Fe بسیار بزرگتر از مقدار متناظر در GaAs+Mn هست. همان‌گونه که قبلاً اشاره شد مطالعات تجربی و نظری روی ویژگی‌های مغناطیسی این نانولایه‌ها برای مقایسه نتایج وجود ندارد.

بزرگتر از 7 eV $\epsilon_2^{xx}(\omega)$ و $\epsilon_2^{zz}(\omega)$ به یکدیگر نزدیک می‌شوند.



شکل 5. بخش حقیقی $(\epsilon_1^{xx}(\omega), \epsilon_1^{zz}(\omega))$ و موهومی $(\epsilon_2^{xx}(\omega), \epsilon_2^{zz}(\omega))$ تابع دی‌الکتریک نانولایه‌های GaAs خالص، GaAs+Mn و GaAs+Fe با استفاده از رهیافت GGA-EV.

تابع دی‌الکتریک استاتیک با محاسبه تابع دی‌الکتریک در حد انرژی‌های پایین به دست می‌آید. بخش حقیقی $(\epsilon_1^{xx}(0), \epsilon_1^{zz}(0))$ و موهومی $(\epsilon_2^{xx}(0), \epsilon_2^{zz}(0))$ تابع دی‌الکتریک استاتیک و ناهمسانگردی تک‌محوری در جدول 5 آورده شده‌اند. $\epsilon_1^{xx}(0)$ و $\epsilon_2^{xx}(0)$ این نانولایه‌ها به مراتب بزرگتر از $\epsilon_1^{zz}(0)$ و $\epsilon_2^{zz}(0)$ هستند. این رفتار نشان می‌دهد که رسانندگی این نانولایه‌ها در صفحه xy بیشتر از امتداد عمود بر این صفحه است. $\epsilon_1^{xx}(0), \epsilon_2^{zz}(0)$ و $\epsilon_1^{zz}(0)$ نانولایه GaAs+Mn به مراتب کوچکتر از مقادیر متناظر برای نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Fe هستند. بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک استاتیک $(\epsilon^{xx}(0)$ و $\epsilon^{zz}(0))$ نانولایه GaAs خالص وقتی با ناخالصی Fe آلائیده می‌شود به ترتیب کاهش قابل ملاحظه و اندکی افزایش می‌یابند.

عمود بر سطح نانولایه متفاوت است. لذا تانسور تابع دی‌الکتریک این نانولایه‌ها دو مؤلفه مستقل

$$\epsilon^{xx}(\omega) = \epsilon_1^{xx}(\omega) + i\epsilon_2^{xx}(\omega)$$

$$\epsilon^{zz}(\omega) = \epsilon_1^{zz}(\omega) + i\epsilon_2^{zz}(\omega)$$

و متناظر با میدان الکتریکی موازی و عمود بر سطح نانولایه دارد. بخش‌های حقیقی $(\epsilon_1^{xx}(\omega), \epsilon_1^{zz}(\omega))$ و موهومی

$$(\epsilon_2^{xx}(\omega), \epsilon_2^{zz}(\omega))$$
 تابع دی‌الکتریک نانولایه‌های GaAs

خالص، GaAs+Mn، GaAs+Fe با استفاده از رهیافت‌های GGA-EV و محاسبه شده‌اند که

به دلیل تشابه نتایج حاصل از دو رهیافت فقط نتایج حاصل از رهیافت GGA-EV در شکل 5 آورده شده است.

ناهمسانگردی قابل توجهی بین $\epsilon^{xx}(\omega)$ و $\epsilon^{zz}(\omega)$ وجود دارد. تابع دی‌الکتریک نانولایه‌های GaAs خالص و

GaAs+Mn با اندکی تفاوت در محل و ارتفاع ستیغ‌ها مشابه‌اند در حالی که تابع دی‌الکتریک نانولایه GaAs+Fe

با تابع دی‌الکتریک نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Mn کاملاً متفاوت است. این تفاوت ناشی از

تفاوت ساختار نواری این نانولایه‌ها است. بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک این نانولایه‌ها برای

میدان الکتریکی موازی و عمود بر سطح نانولایه از صفر تا 8eV متفاوت و بیشتر از 8eV مشابه هستند. بزرگ شدن

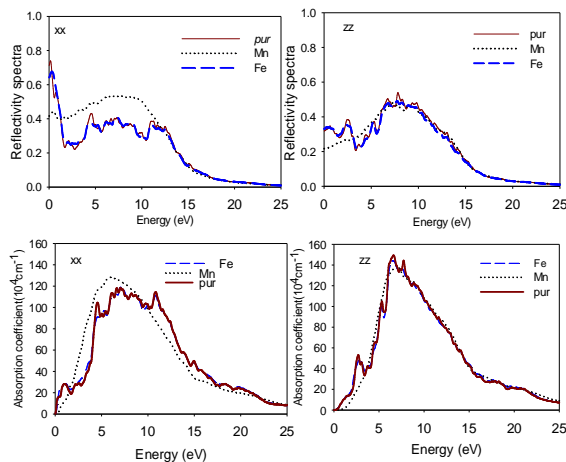
$\epsilon_1^{xx}(\omega)$ و $\epsilon_2^{xx}(\omega)$ در انرژی‌های کم ناشی از رفتار فلزی نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Mn است. ستیغ‌های

بخش حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک GaAs خالص با اضافه شدن ناخالصی Fe پهن‌تر و به سمت انرژی‌های

بیشتر جابه‌جا می‌شوند. اولین ستیغ اصلی $\epsilon_2^{xx}(\omega)$ و $\epsilon_2^{zz}(\omega)$ نانولایه GaAs+Mn به ترتیب در 0/6eV و

5/1eV قرار دارد. $\epsilon_1^{xx}(\omega)$ نانولایه GaAs+Mn یک ستیغ اصلی در 0/35eV دارد. $\epsilon_2^{xx}(\omega)$ نانولایه GaAs+Mn

کمتر از 4eV و $\epsilon_2^{xx}(\omega)$ نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Fe کمتر از 2eV بزرگتر از $\epsilon_2^{zz}(\omega)$ هستند و



شکل 6. ضرایب جذب و بازتاب نانولایه‌های GaAs، GaAs+Mn، GaAs+Fe و در صفحه xy ($R^{xx}(\omega), I^{xx}(\omega)$) و عمود بر صفحه xy ($R^{zz}(\omega), I^{zz}(\omega)$)

ستیف اصلی ضریب بازتاب این نانولایه‌ها ناشی از انتقال‌های بین نواری است. $R^{xx}(\omega)$ و $R^{zz}(\omega)$ نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Fe یک ستیف اصلی در 0,4 eV و به ترتیب یک ستیف پهن در فاصله 5-8eV و 7-10eV دارند. ضریب بازتاب نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Fe برای میدان الکتریکی موازی سطح نانولایه و در انرژی 0-1eV به مراتب از مقدار متناظر برای میدان الکتریکی عمود بر سطح نانولایه‌ها بزرگتر است. به گونه‌ای که $R^{xx}(0)$ نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Fe به ترتیب 70 و 80 درصد است در حالی که $R^{zz}(0)$ این دو نانولایه به ترتیب 18 و 48 درصد است. لذا در این بازه از انرژی ضریب بازتاب این نانولایه‌ها برای میدان الکتریک موازی با سطح نانولایه کمتر از راستای عمود بر سطح نانولایه است. $R^{xx}(\omega)$ و $R^{zz}(\omega)$ نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Fe بالاتر از 10,9 eV تقریباً مساویند. لذا ناهمسانگردی این نانولایه‌ها به ازای انرژی بزرگتر از 10,9eV از بین می‌رود. $R^{xx}(\omega)$ و $R^{zz}(\omega)$ نانولایه GaAs+Mn تعدادی ستیف اصلی به ترتیب بین 4/1-10eV و 5/9-9/8eV دارند. این نانولایه بین 0-12/1eV کمتر و بین 12/1-15/1eV بیشتر از $R^{xx}(\omega)$ است. بیشتر

ناهمسانگردی تک‌محور نانولایه GaAs خالص وقتی با Fe

و Mn آلاینده می‌شود کاهش می‌یابد.

جدول 5. بخش حقیقی ($\epsilon_1^{xx}(0), \epsilon_1^{zz}(0)$) و موهومی ($\epsilon_2^{xx}(0), \epsilon_2^{zz}(0)$) تابع دی‌الکتریک استاتیک و ناهمسانگردی تک‌محوری ($\frac{\epsilon_2^{zz}(0) - \epsilon_2^{xx}(0)}{\epsilon_2^{zz}(0) + \epsilon_2^{xx}(0)}$)

نانولایه‌های GaAs خالص، GaAs+Mn و GaAs+Fe

GaAs + Fe		GaAs + Mn		خالص-GaAs		نانولایه
GGA_EV	GGA	GG_A_E V	GG A	GGA_EV	GGA	
80,06	78,06	23,55	21,49	130,01	125,36	$\epsilon_1^{xx}(0)$
13,71	13,75	7,68	7,53	12,92	12,70	$\epsilon_1^{zz}(0)$
13,80	12,75	1,31	0,91	41,16	38,36	$\epsilon_2^{xx}(0)$
0,56	0,61	0,11	0,10	0,44	0,38	$\epsilon_2^{zz}(0)$
-0,70	-0,70	-0,50	-0,48	-0,81	-0,81	$\frac{\epsilon_1^{zz}(0) - \epsilon_1^{xx}(0)}{\epsilon_1^{zz}(0) + \epsilon_1^{xx}(0)}$
-0,92	-0,90	-0,84	-0,80	-0,97	-0,98	$\frac{\epsilon_2^{zz}(0) - \epsilon_2^{xx}(0)}{\epsilon_2^{zz}(0) + \epsilon_2^{xx}(0)}$

ضرایب بازتاب $R(\omega)$ ، جذب $I(\omega)$ ، تابع کاهش انرژی الکترون $L(\omega)$ و رسانندگی اپتیکی $\sigma(\omega)$ با استفاده از بخش حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک به کمک روابط زیر قابل محاسبه‌اند:

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\epsilon(\omega)} - 1}{\sqrt{\epsilon(\omega)} + 1} \right|^2,$$

$$I(\omega) = \frac{\sqrt{2}\omega}{c} \left(\sqrt{\epsilon_1(\omega)^2 + \epsilon_2(\omega)^2} - \epsilon_1(\omega) \right)^{1/2},$$

$$L(\omega) = \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_1(\omega)^2 + \epsilon_2(\omega)^2}$$

$$\text{Re} \sigma(\omega) = \frac{\omega}{4\pi} \epsilon_2(\omega)$$

ضرایب جذب و بازتاب این نانولایه‌ها در صفحه xy ($R^{xx}(\omega), I^{xx}(\omega)$) و عمود بر صفحه xy ($R^{zz}(\omega), I^{zz}(\omega)$) محاسبه و نتایج حاصل در نمودارهای شکل 6 با هم مقایسه شده‌اند.

As-Ge و برهم‌کنش کووالانسی بین ناخالصی و نزدیکترین همسایه ناخالصی وجود دارد. ویژگی‌های الکترونی این نانولایه‌ها نشان می‌دهند که نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Fe رسانا هستند و ضریب خطی گرمای ویژه الکترونی نانولایه GaAs خالص با جایگزینی Ga با Fe اندکی افزایش می‌یابد. به گونه‌ای که الکترون‌ها با اسپین بالا سهم بیشتری در ویژگی‌های ترابردی نانولایه GaAs+Fe دارند. در حالیکه نانولایه GaAs+Mn نیم‌رسانا است. در واقع هنگامی که اتم Ga در سطح نانولایه GaAs خالص توسط Mn جایگزین می‌شود یک گذار فاز رسانا به نیم‌رسانا اتفاق می‌افتد.

گشتاور مغناطیسی موضعی ناخالصی Fe واقع بر سطح نانولایه GaAs+Fe بسیار بزرگتر از مقدار متناظر در نانولایه GaAs+Mn است.

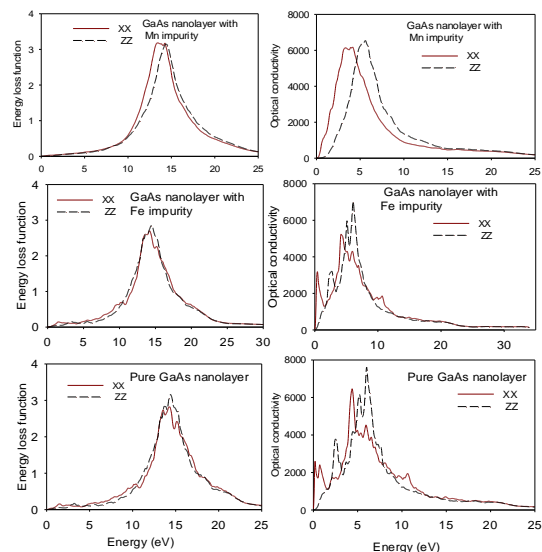
بررسی خواص اپتیکی این نانولایه‌ها نشان می‌دهد که تابع دی‌الکتریک نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Mn با اندکی تفاوت در محل و ارتفاع ستیج‌ها مشابه‌اند و با تابع دی‌الکتریک نانولایه GaAs+Fe کاملاً متفاوت‌اند. علاوه بر این، این نانولایه‌ها ناهمسانگرد اپتیکی اند به گونه‌ای که رسانندگی اپتیکی این نانولایه‌ها در صفحه xy (سطح نانولایه‌ها) بیشتر از امتداد عمود بر این صفحه است. علاوه بر این ناهمسانگردی تک‌محور نانولایه GaAs خالص وقتی با Fe و Mn آلائیده می‌شود کاهش می‌یابد.

مرجع‌ها

[1] K.M. Song, D.C. Khan, A.K. Ray, Correlation study of sodium-atom chemisorption on the GaAs (110) surface, *Physical Review B* **49** (1994) 1818-1826.

[2] Y.J. Zhang, B.K. Chang, Z. Yang, J. Niu, J.J. Zou, Distribution of carriers in gradient-doping transmission-mode GaAs photocathodes grown by molecular beam epitaxy, *Chinese Physics B* **18** (2009) 4541-4546.

از 20eV ضریب بازتاب نانولایه‌های GaAs خالص، GaAs+Mn و GaAs+Fe تقریباً صفر است و این نانولایه‌ها انتقال دهنده امواج الکترو مغناطیس برای هر دو جهت قطبش می‌شوند. ضرایب جذب نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Fe برای صفحه xy و جهت عمود بر صفحه xy ($I^{xx}(\omega)$ و $I^{zz}(\omega)$) تقریباً مشابه‌اند در حالی که برای نانولایه GaAs+Mn به دلیل وجود گاف انرژی در این نانولایه کاملاً متفاوت‌اند. $I^{zz}(\omega)$ این نانولایه‌ها یک ستیج اصلی بین 6-7 eV دارد که بیشینه مقدار آن به 150 برای نانولایه‌های GaAs خالص و GaAs+Fe و به 140 برای لایه GaAs+Mn می‌رسد.



شکل 6. تابع اتلاف انرژی و بخش حقیقی رسانندگی اپتیکی نانولایه‌های GaAs خالص، GaAs+Mn و GaAs+Fe.

نتیجه‌گیری

منحنی‌های انرژی-حجم نانولایه‌های GaAs خالص، GaAs+Mn و GaAs+Fe نشان می‌دهند که نانولایه GaAs خالص در حالت پایه غیرمغناطیسی و در حضور ناخالصی‌های Mn و Fe فرومغناطیس‌اند. این نانولایه‌ها پیوندهای یونی و کووالانسی متفاوتی از خود نشان می‌دهند. پیوند یونی ضعیفی بین As-Mn، As-Fe و

- 4×2) surface, *Journal of Physical Chemistry B* **104** (2000) 5595-5602.
- [12] M.V. Lebedev, Methylthiol adsorption on GaAs (100)- (4×2) surface: ab initio quantum-chemical analysis, *Semiconductors* **42** (2008) 1048-1054.
- [13] M. Saavedra, A. Buljan, M. Muñoz, Theoretical study of methanethiol adsorbed on GaAs(100) surface, *Journal of Molecular Structure, THEOCHEM* **906** (2009) 72-77.
- [14] H.L. Lu, W. Chen, S.J. Ding, M. Xu, D.W. Zhang, L.K. Wang, Quantum chemical study of adsorption and dissociation of H₂S on the Gallium-rich GaAs (001)-(4×2) surface, *Journal of Physical Chemistry B* **110** (2006) 9529-9533.
- [15] M.V. Lebedev, Mechanism of H₂S molecule adsorption on the GaAs (100) surface: ab initio quantum-chemical analysis, *Physics of the Solid State* **48** (2006) 164-171.
- [16] D.S. Sholl, Using density functional theory to study hydrogen diffusion in metals: A brief overview, *Journal of Alloys Compounds* **446** (2007) 462-468.
- [17] M.V. Lebedev, Quantum-chemical study of adsorption of 2-propanol molecule on a GaAs (100) surface, *Semiconductors* **45** (2011) 1519-1523.
- [18] S. Tang, Z. Cao, Density functional characterization of adsorption and decomposition of 1-propanethiol on the Ga-rich GaAs (001) surface, *Journal of Physical Chemistry A* **113** (2009) 5685-5690.
- [19] H. Ye, L. Tang, Q. Ni, Identification of the dissociative and kick-out diffusion mechanisms of Zn diffusion in GaAs by photoluminescence analysis, *Material Science and Engineering: B* **197** (2015) 1-4.
- [20] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made
- [3] J.J. Zou, Y.J. Zhang, Z. Yang, B.K. Chang, Degradation model of GaAs vacuum electron sources, *Acta Physica Sinica* **60** (2011) 017902-017906.
- [4] M.A. Vasilenko, I.G. Neizvestny, N.L. Schwartz, Formation of GaAs nanostructures by droplet epitaxy—Monte Carlo Simulation, *Computational Materials Science* **102** (2015) 286-292.
- [5] T. Shan, X. Qi, Design and optimization of GaAs photovoltaic converter for laser power Beaming, *Infrared Physics and Technology* **71** (2015) 144-150.
- [6] W. Wang, G. Lee, M. Huang, R.M. Wallace, K. Cho, First-principles study of GaAs(001)-b2(2×4) surface oxidation and passivation with H, Cl, S, F and GaO, *Journal of Applied Physics* **107** (2010) 103720-103730.
- [7] C.H. Chung, S.I. Yi, W.H. Weinberg, Temperature-programmed desorption and high-resolution electron loss spectroscopy studies of the interaction of water with the GaAs (001)- (4×2) surface, *Journal of Vacuum Science and Technology A* **16** (1998) 1785-1789.
- [8] X. Zhang, S. Ptasinska, Dissociative adsorption of water on an H₂O/GaAs (100) interface: in situ near-ambient pressure XPS studies, *Journal of Physical Chemistry C* **118** (2014) 4259-4266.
- [9] J-S. Zhang, H-C Liu, F. Shi, F. Yu, Y. Liu, C. Xiao, Q. Lan, Adsorption and dissociation of H₂O on the Ga-rich GaAs(0 0 1)-(4×2) surface: DFT and DFT-D computations with a Ga₇As₈H₁₁ cluster model, *Computational and Theoretical Chemistry* **1064** (2015) 51-55.
- [10] H.L. Lu, W. Chen, S.J. Ding, D.W. Zhang, L.K. Wang, DFT calculations of NH₃ adsorption and dissociation on gallium-rich GaAs (001)- (4×2) surface, *Chemical Physics Letters* **445** (2007) 188-192.
- [11] Q. Fu, L. Li, C.H. Li, M.J. Begarney, D.C. Law, R.F. Hicks, Mechanism of arsine adsorption on the Gallium-rich GaAs (001)- (4×2) surface, *Journal of Physical Chemistry B* **104** (2000) 5595-5602.

Simple, *Physical Review Letters* **77** (1996) 3865-3868.

[21] E. Engel, S.H. Vosko, Fourth-order gradient corrections to the exchange-only energy functional: importance of $\nabla^2 n$ contributions, *Physical Review B* **50** (1994) 10498-10505.

[22] P. Blaha, K. Schwarz, J. Luitz, WIEN97, A full potential linearized augmented plane wave package for calculating crystal properties, Karlheinz Schwarz, Techn. Universitat Wien, Austria, 1999, ISBN 3-9501031r-r0-4.

[23] P. Dufek, P. Blaha, K. Schwarz, Applications of Engel and Vosko's generalized gradient approximation in solids, *Physical Review B* **50** (1994) 7279-7283.

[24] Z. Nourbakhsh, Structural, electronic and optical properties of ZnX and CdX compounds (X = Se, Te and S) under hydrostatic pressure, *Journal of Alloys Compounds* **505** (2010) 698-711.

[25] Z. Nourbakhsh, First principles study of the structural, electronic and optical properties of ZnS_xSe_{1-x} alloys, *Physica B* **405** (2010) 4173-4187.

[26] N.V. Smith, Photoelectron Energy Spectra and the Band Structures of the Noble Metals, *Physical Review B* **3** (1971) 1862-1878.

[27] C. Ambrosch-Draxl, J.A. Majewski, P. Vogl, G. Leising, First-principles studies of the structural and optical properties of crystalline poly(*para*-phenylene), *Physical Review B* **51** (1995) 9668-9679.