



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک

گرایش حالت جامد

بررسی خواص مغناطیسی SiC:Mn

نگارش :

سمیرا حسینی

اساتید راهنما:

دکتر محمد ابراهیم قاضی - دکتر مرتضی ایزدی فرد

تیر ۱۳۸۷

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

تقدیم به

پدر و مادر مهربانم

و

همسر عزیزم

تشکر و قدردانی

اکنون که دوره ای دیگر از تحصیل را پشت سر می گذارم خداوند متعال را بخاطر لطف و عنایت بی دریغش شاکرم که مرا یاری کرد تا در برابر مشکلات و سختی ها، مقاومت کرده و چه بسا بسیاری از آنها را بر من هموار نمود تا بدین مرحله رسیدم.

در این راستا دلسوزی 'فداکاری و راهنماییهای عزیزانی دخیل بود که بی شک بدون حضور ایشان نمی توانستم این مسیر را طی کنم و در این جا لازم می دانم از زحمات آنها تشکر نمایم.

از خانواده عزیزم به خصوص پدر و مادرم که در تمام مراحل تحصیل همواره مشوق 'راهنما و حامی من بودند و زحمات فراوانی برای من کشیدند از صمیم قلب تشکر و قدردانی می کنم و بر دستانشان بوسه می زنم.

از همسر عزیز 'فداکار و دلسوزم که در این مرحله از تحصیل با تشویقها 'همکاری و همفکری اش راه را بر من آسان نمود کمال تشکر را دارم.

از اساتید بزرگوارم جناب آقای دکتر قاضی و دکتر ایزدی فرد به خاطر رهنمودهای استادانه و نیز درک شرایط حقیر در طول این تحقیق نهایت قدردانی و تشکر را دارم و به خاطر نواقصی که در طول کار داشتم عذر خواهی می نمایم.

همچنین از دوست بزرگوار جناب آقای حضرتی 'دانشجوی کارشناسی ارشد دانشگاه صنعتی اصفهان که مرا در آموختن نرم افزار مربوط به پروژه یاری کردند کمال تشکر را دارم و امیدوارم در مراحل دیگر تحصیل موفق باشند. و در نهایت از هیئت محترم داوران که زحمت نقد و بررسی این پایان نامه را کشیدند کمال تشکر و قدردانی را می کنم.

چکیده:

در سالهای اخیر نیمرساناهای مغناطیسی رقیق به دلیل توانایی بالا در تولید جریان قطبیده اسپینی و کاربرد آنها در اسپینترونیک مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته اند. تحقیقات نشان داده است که آلایش عناصر واسطه در نیمرساناهای با گاف نواری بزرگ باعث ایجاد دمای گذار فرومغناطیسی بالاتری می شود. SiC یکی از این نیمرساناها است که کاندیدای خوبی برای استفاده در صنعت اسپینترونیک می باشد. در این پروژه به بررسی برخی از خواص این نیمرسانا و اثر آلایش منگنز در آن می پردازیم. محاسبات با استفاده از نرم افزار PWscf که بر مبنای نظریه تابع چگالی می باشد، انجام شده است. ابتدا به محاسبه نوارهای انرژی و چگالی حالات نیمرسانای β -SiC پرداخته و سپس محاسبات را برای β -SiC آلایش یافته با عنصر منگنز در غلظتهای مختلف ۳/۱۳٪ / ۶/۲۵٪ و ۲۵٪ انجام داده ایم. با آلایش منگنز و محاسبه چگالی حالتها وجود حالت فرومغناطیسی پایا با گشتاور مغناطیسی نسبتاً بزرگ در ماده تایید شد. همچنین مشاهده قطبش اسپینی در انرژی فرمی به خصوص در غلظت ۶/۲۵٪ دلیل خوبی برای نیمه فلزی بودن این ترکیب و کاربرد آن در وسایل اسپینترونیک می باشد.

فهرست مطالب

۴-۱- نیمرساناهای مغناطیسی رقیق	۴
۴-۱-۱- تزریق یک صفحه مغناطیسی به نیمرسانا	۴
۴-۲- نیمرسانای مغناطیس رقیق شده	۶
۴-۳-۱- DMS های بر پایه ترکیبات گروه II-IV	۹
۴-۳-۱-۱- بررسی خواص ZnO	۱۰
۴-۴-۱- DMS های بر پایه ترکیبات گروه III-V	۱۶
۴-۴-۱-۲- بررسی خواص (Ca,Mn)AS	۱۶
۴-۵-۱- مکانیسم حالت فرومغناطیس در DMS های گروه III-V	۲۰
منابع	۲۱
۴-۲- بررسی خواص نیمرسانای SiC	۲۳
۴-۱-۲- خواص عمومی	۲۳
۴-۱-۲-۱- خواص شیمیایی و مکانیکی	۲۵
۴-۲-۲- ساختار بلوری	۲۵
۴-۲-۲-۱- گاف نواری	۲۹
۴-۲-۳-۲- روشهای رشد بلور	۲۹
۴-۳-۲-۱- رشد بلور به شکل حجمی	۲۹
۴-۱-۳-۲-۱- فرایند آچسون	۳۰
۴-۱-۳-۲-۱- فرایند للی	۳۱
۴-۳-۲-۲- رشد بلور به شکل رو آراستی	۳۳

- ۳۴..... ۱-۲-۳-۲- رسوب گذاری بخار شیمیایی
- ۳۵..... ۳-۳-۲- رشد به روش MBE
- ۳۷..... منابع
- ۳۹..... ۳- نظریه تابعی چگالی به عنوان راهی برای حل مسئله بس ذره کوانتومی
- ۴۰..... ۱-۳- تقریب بورن- اوپنهاইمر
- ۴۱..... ۲-۳- نظریه تابعی چگالی
- ۴۱..... ۱-۲-۳- قضایای هوهنبرگ و کوهن
- ۴۲..... ۲-۲-۳- معادلات کوهن شم
- ۴۵..... ۳-۲-۳- تابعی تبادلی- همبستگی
- ۴۶..... ۳-۳- حل معادلات
- ۴۷..... ۱-۳-۳- انتخاب امواج تخت به عنوان توابع پایه
- ۴۸..... ۴-۳- روش شبه پتانسیل
- ۵۰..... ۱-۴-۳- شرایط لازم برای یک شبه پتانسیل خوب
- ۵۱..... ۲-۴-۳- روش تولید شبه پتانسیل
- ۵۳..... ۳-۴-۳- شبه پتانسیل های نرم- پایسته و فوق نرم
- ۵۹..... ۴-۴-۳- انتخاب شبه پتانسیل
- ۶۰..... منابع
- ۶۲..... ۴- بررسی ساختاری نیمرسانای خالص β -SiC
- ۶۶۳..... ۱-۴- معرفی نرم افزار محاسباتی PWscf
- ۶۳..... ۲-۴- بهینه سازی پارامترهای محاسباتی
- ۶۴..... ۱-۲-۴- تعداد نقاط K

۶۵.....	۴-۲-۲- انرژی قطع
۶۷.....	۴-۲-۳- محاسبه پارامتر شبکه تعادلی
۶۹.....	۴-۳- بررسی برخی ویژگیهای β -SiC
۷۰.....	۴-۳-۱- مطالعه ساختار نواری
۷۲.....	۴-۳-۲- محاسبه چگالی حالتها
۷۵.....	۴-۴- بررسی اثر شبه پتانسیل
۷۷.....	۴-۴- خلاصه نتایج
۷۸.....	منابع
۸۰.....	۵- بررسی نیمرسانای مغناطیسی آرایش شده β -SiC:Mn
۸۰.....	۵-۱- برتری جایگاه Si یا C
۸۱.....	۵-۲- نحوه انجام محاسبات
۸۲.....	۵-۳- محاسبه چگالی حالتها β -SiC:Mn
۸۹.....	۵-۴- خلاصه نتایج
۹۱.....	منابع
۹۲.....	پیوست
۹۲.....	الف- شبه پتانسیل های فوق نرم
۹۳.....	الف.۱- شبه پتانسیل مورد استفاده برای اتم C
۹۴.....	الف.۲- شبه پتانسیل مورد استفاده برای اتم Si
۹۵.....	الف.۳- شبه پتانسیل مورد استفاده برای اتم Mn
۹۶.....	ب- شبه پتانسیلهای نرم پایسته

ب.۱- شبه پتانسیل مورد استفاده برای اتم C.....۹۶

ب.۲- شبه پتانسیل مورد استفاده برای اتم Si.....۹۷

فهرست شکل ها

- شکل ۱-۱: رابطه گاف نواری با دمای کوری ۷
- شکل ۲-۱: مقایسه دمای کوری در ترکیبات مختلف ۷
- شکل ۳-۱: نمودار مغناطش بر حسب دما در دو نمونه A و B در میدان Koe ۱۰ و ۳۰ و ۵۰ ۱۱
- شکل ۴-۱: نمودار حلقه پسماند A و B در دمای ۳۰۰ K و $T = 3K$ ۱۲
- شکل ۵-۱: منحنی مغناطش بر حسب میدان مغناطیسی برای نمونه ای که تا $500^{\circ}C$ باز پخت شده است در دماهای مختلف ۱۳
- شکل ۶-۱: منحنی مغناطش بر حسب میدان مغناطیسی برای نمونه ای که تا $900^{\circ}C$ باز پخت شده است در دماهای مختلف ۱۴
- شکل ۷-۱: منحنی M-H برای نمونه های ZnO با آلایش Mn و باز پخت در $500^{\circ}C$ ۱۵
- شکل ۸-۱: منحنی M-H برای نمونه های ZnO با آلایش Mn و باز پخت در $900^{\circ}C$ ۱۵
- شکل ۹-۱: رابطه دمای کوری با غلظت Mn در (Ga, Mn) As ۱۷
- شکل ۱۰-۱: دمای کوری در (Ga, Mn) As ۱۸
- شکل ۱۱-۱: رابطه میدان مغناطیسی و مغناطش در (Ga, Mn) As ۱۸
- شکل ۱۲-۱: گذار از حالت فرومغناطیسی به حالت پارامغناطیس در (Ga, Mn) As ۱۹
- شکل ۱۳-۱: منحنی M-H در (Ga, Mn) As ۱۹
- شکل ۱-۲: بلوک چهار وجهی سازنده ساختار SiC ۲۶
- شکل ۲-۲: انواع ساختار بلوری SiC ۲۷
- شکل ۳-۲: دنباله رویهم چینی ساختارهای 6H-SiC, 4H-SiC, 3C-SiC ۲۷
- شکل ۴-۲: ساختار تنگ پکیده ۲۸

- شکل ۲-۵: فرایند آپسون ۳۱
- شکل ۲-۶: فرایند للی ۳۳
- شکل ۲-۷: شمائی از رشد بلور به روش MBE ۳۵
- شکل ۳-۱: نمایشی از شبه پتانسیل و شبه تابع موج در مقایسه با پتانسیل و تابع موج اصلی الکترونها ۴۹
- شکل ۴-۱: انرژی هر یاخته بلور β -SiC بر حسب تعداد نقاط K در هر راستا ۶۵
- شکل ۴-۲: انرژی هر یاخته بلور β -SiC بر حسب انرژی قطع تابع موج ۶۷
- شکل ۴-۳: انرژی کل هر یاخته به ازای ثابت شبکه مختلف در β -SiC خالص ۶۸
- شکل ۴-۴: انرژی کل هر یاخته به ازای ثابت شبکه مختلف در SiC:Mn با آرایش ۲۵٪ منگنز ۶۹
- شکل ۴-۵: ساختار بلوری و منطقه اول بریلوئن در SiC مکعبی ۷۰
- شکل ۴-۶: ساختار نواری β -SiC با استفاده از محاسبات شبیه سازی ۷۱
- شکل ۴-۷: چگالی حالات کلی برای نمونه β -SiC ۷۲
- شکل ۴-۸: چگالی حالات جزئی برای ترازهای Si: 3P و Si: 3C ۷۴
- شکل ۴-۹: چگالی حالات جزئی برای ترازهای C: 2P و C: 2S ۷۴
- شکل ۴-۱۰: چگالی حالت‌های کلی الکترونها با شبه پتانسیل های نرم-پایسته ۷۶
- شکل ۴-۱۱: ساختار نواری 3C-SiC با شبه پتانسیل های نرم-پایسته ۷۶
- شکل ۵-۱: چگالی حالات SiC:Mn با آرایش ۲۵٪ منگنز ۸۳
- شکل ۵-۲: چگالی حالات SiC:Mn با آرایش ۳/۱۳٪ منگنز ۸۴
- شکل ۵-۳: چگالی حالات SiC:Mn با آرایش ۶/۲۵٪ منگنز ۸۴
- شکل ۵-۴: مقایسه چگالی حالت‌های اسپین بالا و پایین نیم فلزات با فلزات و نیمرساناها ۸۵
- شکل ۵-۵: چگالی حالات موضعی تراز 3d برای غلظت ۲۵٪ ۸۶

شکل ۵-۶: چگالی حالات موضعی تراز 3d برای غلظت ۳/۱۳٪ ۸۶

شکل ۵-۸ : چگالی حالت‌های حاصل از محاسبات یون کیم و همکارانش ۸۷

فهرست جداول

- جدول ۱-۱: دمای کوری چند نیمرسانا همراه با گاف انرژی ۸
- جدول ۲-۱: ویژگیهای مهم گروه II-VI ۹
- جدول ۱-۲: خواص فیزیکی SiC ۲۳
- جدول ۲-۲: مقایسه خواص SiC با نیمرساناهای رایج ۲۴
- جدول ۱-۴: مقایسه برخی پارامترهای 3C-SiC ۷۵
- جدول ۱-۵: مشخصات اتمهای Mn, Si, C ۸۱
- جدول ۲-۵: مقایسه انرژی و مغناطش در غلظت های مختلف ۸۹

مقدمه :

امروزه با پیشرفت تکنولوژی ، ذخیره سازی اطلاعات و سرعت انتقال آنها و همچنین صنعت IC بر پایه سیلیکون اهمیت زیادی یافته است . در مدارات IC نقش اصلی در تراورد الکتریکی را حاملهای بار (الکترون وحفره) برعهده دارند. از مشخصات IC داشتن قدرت پردازشگری با سرعت بالا است اما المانهای حافظه فرارند یعنی با خاموش شدن منبع اطلاعات از بین خواهد رفت، اما با استفاده از تکنولوژی حافظه مغناطیسی این مشکل حل خواهد شد. در اینجا پارامتر اصلی اسپین الکترون است زیرا اسپین دارای ممان مغناطیسی ذاتی است و برای ذخیره اطلاعات بسیار مناسب می باشد. بنابراین استفاده از اسپین حاملهای بار در نیمرساناها شاخه جدیدی به نام اسپین – الکترونیک یا اسپینترونیک (Spintronics) را ایجاد کرده است . منشاء استفاده از اسپینترونیک، بر این پایه استوار است که چون تک قطبی های مغناطیسی وجود ندارند، میدان مغناطیسی تصادفی به طور قابل توجهی ضعیف تر از میدان های الکتریکی تصادفی هستند، به این دلیل حافظه های مغناطیسی غیر فرار هستند، در حالیکه حافظه ها بر مبنای بار الکتریکی تجمع یافته یا (DRAM)، نیاز به بازسازی مداوم دارند . اسپینترونیک به مطالعه نقش اسپین الکترون، حفره و حتی هسته و نیز مطالعه دستگاه هایی که از خواص اسپینی و درجه آزادی اسپین علاوه بر خواص و درجه آزادی ذرات باردار استفاده می کنند می پردازد، و اگر بتوان تزریق، انتقال و تشخیص اسپین را در دمای بالا در نیمرسانا (دمای اتاق) کنترل کرد می توان ترکیبی از خواص فوتونی، الکترونیکی و مغناطیسی را داشت . مسئله مهم دیگر توسعه روشهایی برای تزریق حاملهای قطبیده اسپینی به نیمرساناهاست.

اما نیمرساناهایی که برای صنعت اسپینترونیک استفاده می شوند باید اولاً دارای دمای گذار فرو مغناطیسی (دمای کوری) در حدود دمای اتاق باشند و ثانیاً تکنولوژی مورد نیاز در بکارگیری این نیمرسانا وجود داشته باشد . بیشترین تحقیقات در گذشته بر روی $(Ga,Mn)As$ و $(In,Mn)As$ صورت گرفته است که بالاترین دماهای کوری گزارش شده برای این ترکیبات به ترتیب 173K و 35K بوده است که تلاش می شود این دما را بالا ببرند. امروزه محققین در تلاشند با تزریق یک

عنصر فلز واسطه در نیمرساناهای با گاف نواری بزرگ، مانند SiC ، GaN ، ZnO نیمرساناهای مغناطیسی رقیق با دمای گذار فرو مغناطیسی بالا بسازند.

در این پروژه در فصل اول کلیاتی راجع به نیمرساناهای مغناطیسی رقیق ارائه شده و در فصل دوم به بررسی خواص نیمرسانای SiC می پردازیم. در فصل سوم مختصری راجع به نظریه تابع چگالی و تقریبها و معادلات مربوطه توضیح می دهیم. نتایج کارهای محاسباتی انجام شده بر روی SiC مکعبی بدون آرایش و با آرایش منگنز با درصدهای مختلف در فصل های چهارم و پنجم ارائه خواهد شد.

فصل اول

نیمرساناهای مغناطیسی رقیق

- ۱-۱ تزریق یک عنصر مغناطیسی به نیمرسانا
- ۲-۱ نیمرسانای مغناطیسی رقیق شده
- ۳-۱ DMS های بر پایه ترکیبات گروه II-IV
- ۴-۱ DMS های بر پایه ترکیبات گروه III-V

فصل اول

نیمرساناهای مغناطیسی رقیق

برخی از نیمرساناها به طور طبیعی از خود خواص مغناطیسی نشان می دهند. به عنوان مثال با استفاده از اتمهای مغناطیسی خاکیهای کمیاب مثل (Eu,Gd,Er) نیمرساناهای مغناطیسی از جمله EuS ($T_c = 16.5 \text{ K}$), EuO ($T_c = 77 \text{ K}$) و همچنین در اسپینلهای Cr مثل CdCr_2S_4 , CdCr_2Se_4 ($T_c = 129 \text{ K}$) و منگنایدها $(\text{La,X})\text{MnO}_3$ حالت فرومغناطیسی مشاهده شده است. اما به دلیل اینکه رشد آنها دشوار می باشد در صنعت کاربرد چندانی ندارند. البته نیمرساناهایی که بیشتر مورد توجه می باشند معمولاً خاصیت مغناطیسی ندارند. امروزه محققان با روشهایی توانسته اند نیمرساناهایی تولید کنند که دارای خواص مغناطیسی باشند [۱]. در این فصل به توضیح این روشها و نیمرساناهای مغناطیسی تولید شده می پردازیم.

۱-۱ تزریق یک عنصر مغناطیسی به نیمرسانا

همانطور که می دانیم تزریق یک ناخالصی باردار یا یک یون مغناطیسی به نیمرسانا را در اصطلاح آرایش^۱ نیمرسانا می گویند. به عنوان مثال وقتی در GaAs به جای اتمهای سه ظرفیتی Ga اتمهای چهار ظرفیتی Si جانشین می شوند^۲ در واقع اتمهای Si دهنده الکترون^۳ هستند و اگر اتمهای Ga را با اتمهای دو ظرفیتی Zn جایگزین کنیم در آن صورت اتمهای Zn تولید کننده حفره بوده و به آن پذیرنده^۳ الکترون گفته می شود.

^۱-Doping

^۲-Donor

^۳-Acceptor

یک ماده نیمرسانای غیر مغناطیسی در حالت عادی خنثی است^۱ یعنی تعداد اسپین های بالا و پایین آن برابر است و بنابراین در آنها مغناطش وجود ندارد اما با آرایش یونهای مغناطیسی که دارای یک اسپین خالص هستند در واقع یک اسپین خالص به ماده تزریق کرده و ماده از نظر اسپینی قطبیده می شود و این بدین معنی است که یک جهت خاص اسپینی به جهت های دیگر برتری پیدا می کند . بنابراین یونهای مغناطیسی روی تعداد حاملها اثر نمی گذارند و تنها باعث به وجود آمدن یک اسپین خالص جایگزیده در ماده نیمرسانا می شوند که این اساس صنعت اسپینترونیک^۱ می باشد.

۱-۲ نیمرسانای مغناطیسی رقیق شده

دسته ای از مواد نیمرسانا وجود دارند که اگر در آنها برخی اتمهای اصلی توسط یکسری اتمهای مغناطیسی جایگزین شوند خاصیت فرو مغناطیسی از خود نشان می دهند. این مواد را نیمرساناهای نیمه مغناطیسی^۲ (SMSC) یا بطور رایج تر نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده^۳ (DMS) می نامند . فلزات واسطه مرسوم که اوربیتال 3d آنها در حال کامل شدن است ، مانند Fe, Co, Ni, Mn و گاهی نیز از عناصر خاکی کمیاب (Eu, Gd, Er) به عنوان اتمهای مغناطیسی در DMS ها استفاده می شوند. بنابراین برای تغییر خواص مغناطیسی نیمرساناها و کاربرد بیشتر آنها ، می توان ناخالصی هایی به نیمرساناهای نوع n و یا نوع p آنها تزریق کرد^۴ بنابراین DMS ها بصورت آلیاژی از نیمرسانای غیر مغناطیسی و عناصر مغناطیسی هستند [۲].

مطالعات در زمینه DMS ها ابتدا در ترکیبات نیمرسانای گروه II-VI در دهه ۷۰ و ۸۰ میلادی آغاز شد. از سوی دیگر DMS های حاصل از ترکیبات نیمرسانای گروه III-V بعلت امکان کاربرد آنها در اسپینترونیک ، توجه بسیاری از محققین را به خود جلب کرده است . اثبات بارز این ادعا، وجود انواع مقالات تحقیقاتی در مورد خواص فیزیکی این نوع نیمرساناها از جمله خواص

^۱-Spintronics

^۲- Semi-Magnetic Semiconductor

^۳- Diluted Magnetic Semiconductors

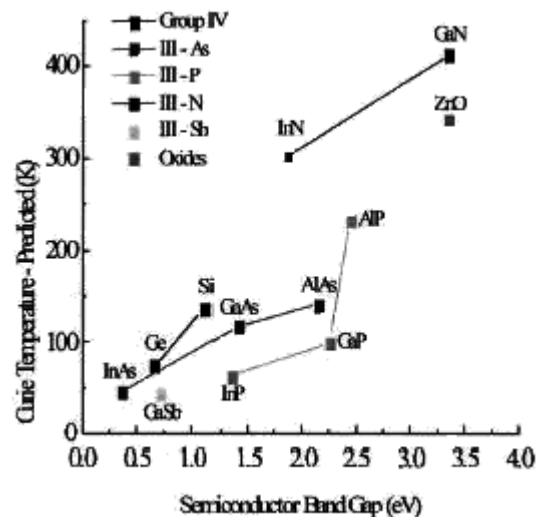
الکتریکی، مغناطیسی و اسپینی است. این مقالات نه تنها در برگیرنده موضوعات تجربی و تئوری در مورد منشأ DMS هاست بلکه در برگیرنده چگونگی کاربرد آنها در اسپینترونیک نیز می باشد [۴].

اگرچه مزایای فراوانی برای استفاده از نیمرساناها در صنایع اسپینترونیک وجود دارد، اما هنوز مسائل فراوانی نیز از جمله چگونگی انتخاب ترکیبات مواد مغناطیسی در نیمرساناها وجود دارد. زیرا به دلیل غیر مغناطیسی بودن این مواد ایجاد جریان اسپینی در آنها مشکل می باشد [۴].

تنوع وسیع بلور میزبان و اتمهای مغناطیسی موادی را با گاف نواری کوچک تا مقادیر بزرگ آماده می سازد که بر همکنشهای مختلف مغناطیسی را آشکار می سازند. بعضی از خواص این مواد به غلظت یونهای مغناطیسی بستگی دارد. بطور کلی ترکیبات مورد استفاده در DMS ها را می توان بر حسب پهنای گاف نواری به دو دسته گاف نواری بزرگ^۱ و گاف نواری کوچک^۲ تقسیم کرد. محاسبات تئوری و نتایج تجربی نشان می دهد هنگامی که مواد با گاف نواری بزرگتر با عناصر واسطه آلایش می یابند دمای کوری بالاتری را از خود نشان می دهند. شکل (۱-۱) رابطه دمای کوری با گاف نواری را برای گروهی از ترکیبات نیمرسانای متداول نشان می دهد [۵، ۶].

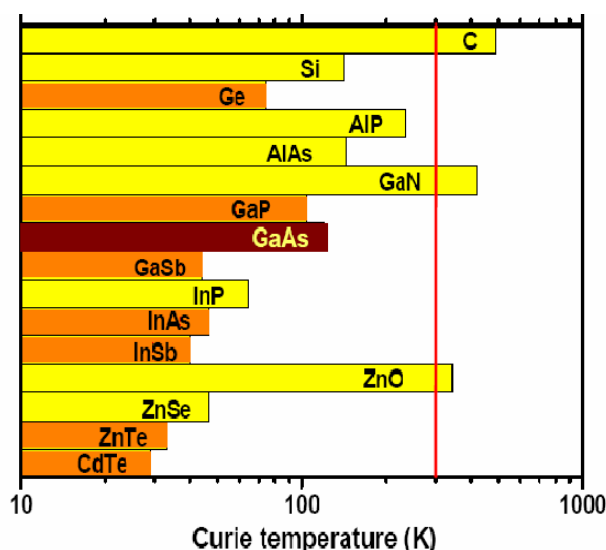
^۱-Wide Band Gap

^۲-Narrow Band Gap



شکل (۱-۱) رابطه گاف نواری با دمای کوری [۵].

امروزه بیش از بیست نوع ترکیب مختلف کشف شده که برهمکنشهای مغناطیسی در آنها مشاهده شده است. طبق آخرین تحقیقات تا سال ۲۰۰۰، دایتل^۱ توانست نمودار (۲-۱) را برای ترکیبات نیمرسانا با آرایش ۰.۰۵ عنصر Mn و با غلظت حفره ی حدوداً $n_p = 3.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ رسم کند. طبق آنچه در نمودار مشاهده می شود تنها ترکیبات ZnO، GaN و C هستند که دمای کوری آنها بیش از دمای اتاق است و بنابراین در محدوده دماهای آزمایشگاهی حالت فرومغناطیسی خود را حفظ نموده و قابل کاربرد هستند [۵ و ۷].



شکل (۲-۱) مقایسه دمای کوری در ترکیبات مختلف [۵ و ۷].

^۱-T.Deitel

در جدول (۱-۱) بعضی از ویژگیهای DMS های گروه II-VI و III-V و همچنین سایر مواد ترکیبی را آورده ایم.

جدول (۱-۱): دمای کوری چند نیمرسانا همراه با گاف انرژی [6].

Material	Bandgap (eV)	Synthesis	$T_c(k)$
$Cd_{1-x}Mn_xGeP_2$	1.72	Solid-phase reaction of evaporated Mn	>300
(Ga,Mn)N	3.4	Mn incorporated by diffusion	228-370
(Ga,Mn)N	3.4	Mn incorporated during MBE n-type	>300
(Ga,Mn)N	3.4	Mn incorporated during MBE	940
(Ga,Cr)N	3.4	Cr incorporated during MBE	>400
(Ga,Mn)P:C	2.2	Mn incorporated by implant or MBE $p \sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$	>330
$(Zn_{1-x},Mn_x)GeP_2$	1.83-2.8	Scaled ampule growth insulating: 5.6% Mn	312
$(ZnMn)GeP_2$	<2.8	Mn incorporated by diffusion	350
$ZnSnAs_2$	0.65	Bridgman bulk growth	329
$ZnSiGeN_2$	3.52	Mn-implanted epi	~300

۳-۱ DMS های بر پایه ترکیبات گروه II-VI

در ابتدای مطالعه روی DMS ها و ساختار های مختلف آنها ترکیبات II-VI مورد توجه قرار گرفتند. رشد این گروه از مواد از سال ۱۹۷۹ آغاز شده است [۳]. بیشتر DMS های گروه II-VI در جدول (۲-۱) لیست شده اند [۸].

جدول (۲-۱): ویژگیهای مهم گروه II-VI [۸]

Material	Crystal Structure	X range
$\text{Hg}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$	Zinc-blende	$x < 0.30$
$\text{Hg}_{1-x}\text{Mn}_x\text{-Se}$	Zinc- blende	$x < 0.30$
$\text{Cd}_x\text{-Mn}_x\text{Te}$	Zinc- blende	$x < 0.75$
$\text{Cd}_x\text{-Mn}_x\text{Se}$	Wurtzite	$x < 0.05$
$\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$	Zine- blende	$x < 0.75$

ویژگیهای مهم این ترکیبات درصد آرایش آنها با یونهای مغناطیسی است که در جدول فوق ذکر شده است. اگر این درصد از مقدار داده شده بیشتر شود کیفیت ساختاری بلور را کاهش میدهد. تنوع وسیع بلورهای میزبان و نیز اتمهای مغناطیسی، ترکیباتی با گافهای نواری مختلف را فراهم می آورند، که دارای انواع برهمکنشهای مغناطیسی هستند که برخی از خواص فیزیکی آنها را می توان با تغییر دادن چگالی یونهای مغناطیسی بهینه کرد [۹].

به دلیل اینکه آرایش این گروه از DMS ها برای ایجاد نیمرسانای نوع n و یا نوع p مشکل می باشد لذا کاربرد ترکیبات این گروه به منظور استفاده از آنها در این خصوص کاهش یافته است. برهمکنش تبادلی پاد فرومغناطیسی بین یونهای عناصر واسطه (مثلاً Mn-Mn) بر برهمکنش مغناطیسی غالب است که در نتیجه این منجر به مشاهده رفتارهای پاد فرومغناطیسی و Spin-galss می شود.

۱-۳-۱ بررسی خواص ZnO

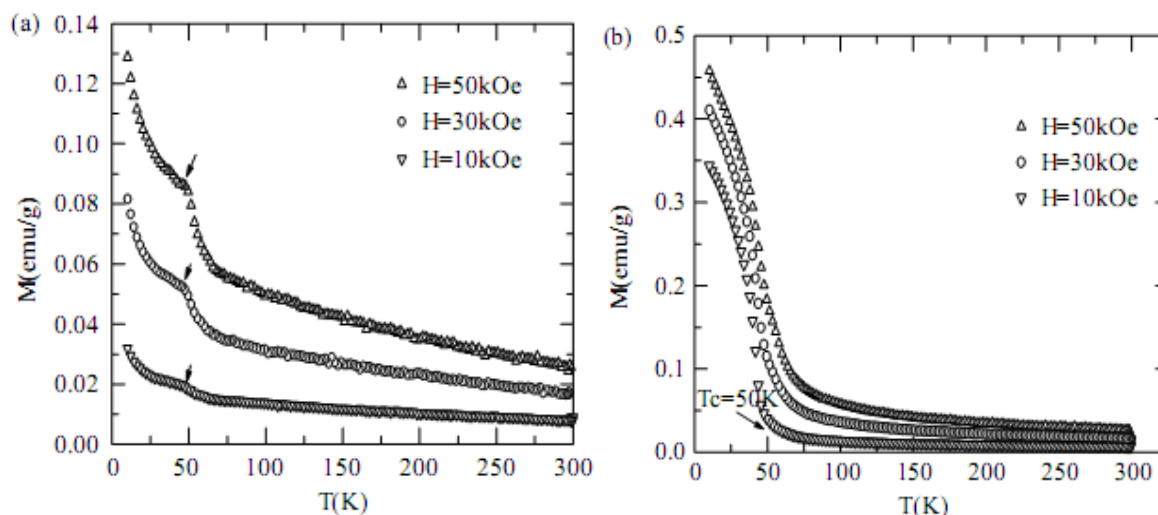
یکی از نیمرساناهای گروه II-VI، ZnO است که یک نیمرسانا با گاف نواری مستقیم بوده و دارای ساختار بلوری ورتساید^۱، است. ZnO به علت داشتن ویژگیهای همچون گاف انرژی بزرگ، انرژی بستگی اکسیتونی بالا (60 meV) و همچنین ویژگیهای اکوستو الکتریکی و پیزو الکتریکی در صنایع اپتو الکترونیک و اسپینترونیک مورد توجه قرار گرفته است. محاسبات تئوری امکان دسترسی به حالت فرومغناطیس را در دمای اتاق برای این ترکیب که با عناصر واسطه آلایش یافته باشد پیش بینی می کند. این پیش بینی تنها در برخی گروههای تحقیقاتی بر پایه اندازه گیریهایی که روی خواص مغناطیسی لایه نازک ZnO آلایش یافته با عناصر واسطه به اثبات رسیده است [۱۲-۱۰]. البته در پاره ای از موارد نیز تولید فرومغناطیس در نمونه های ZnO با شکست مواجه شده است. حتی گروههایی که حالت فرومغناطیسی را مشاهده کرده اند نتایج متفاوتی گزارش کرده اند [۱۳].

نتایج تحقیقات چن^۲ و همکارانش نشان داد که طرح پراش XRD^۳ دو نمونه از ZnO آلایش یافته با Mn که یکی در گاز آرگون رسوب داده شده (نمونه B) و دیگری در هوا (نمونه A)، یکسان است [۱۳]. اما با مقایسه نمودار M-H هریک از نمونه ها که در شکل (۱-۳) آمده است، مشاهده می شود که برای میدانهای 10 و 30 و 50 KOe با کاهش دما از 300K تا 50K مغناطش به آرامی افزایش می یابد و در زیر 50K مغناطش با سرعت افزایش می یابد. نمونه A رفتار نزدیک به پارامغناطیس دارد. در حالیکه در نمونه B دمای گذار فرومغناطیس (دمای کوری) حدود 50K در میدان خارجی 10KOe است و با افزایش میدان خارجی، مغناطش همه نمونه ها افزایش می یابد.

^۱- Wurtzite

^۲-Chen

^۳-X-Ray Diffraction

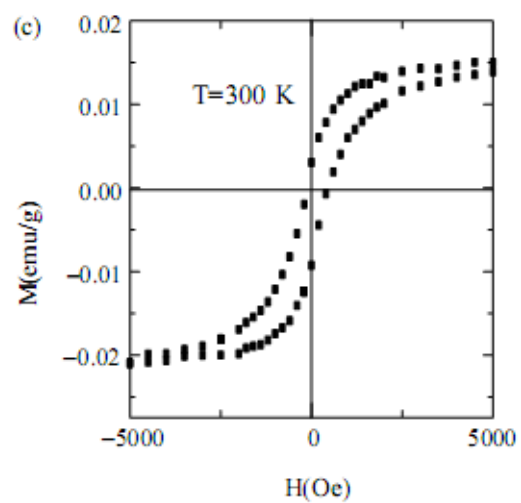
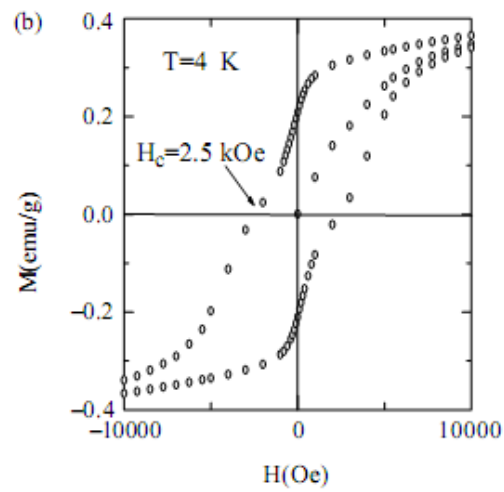
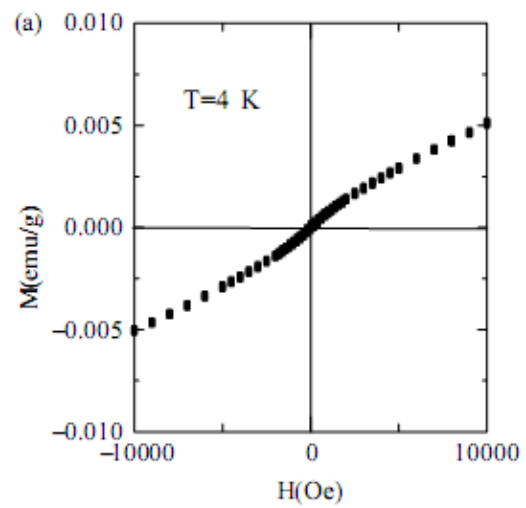


شکل (۳-۱): نمودار مغناطش بر حسب دما در دو نمونه **A** (سمت چپ) و **B** (سمت راست) در میدانهای ۱۰، ۳۰ و ۵۰ Koe.

همچنین مقایسه حلقه پسماند در این نمونه ها نشان داد که در نمونه **A** در دمای $T=4K$ که مغناطش در حد اشباع است، هیچ حلقه پسماند واضحی وجود ندارد و این با تحقیقات گروه شارما^۱ در سال ۲۰۰۳، سازگاری ندارد [۱۴]. زیرا آنها برای نمونه $Zn_{1-x}Mn_xO$ ($x=0.02$) که در هوا رسوب داده شده حلقه پسماند واضحی در دمای اتاق گزارش کرده اند. و این در حالیست که برای نمونه **B** مطابق شکل (۴-۱) در دمای 4K یک نیروی وادارندگی مغناطیسی^۲ در حدود 2.5 koe موجود است و تا دمای 300 K هنوز مرتبه فرومغناطیسی وجود دارد.

^۱-Sharma

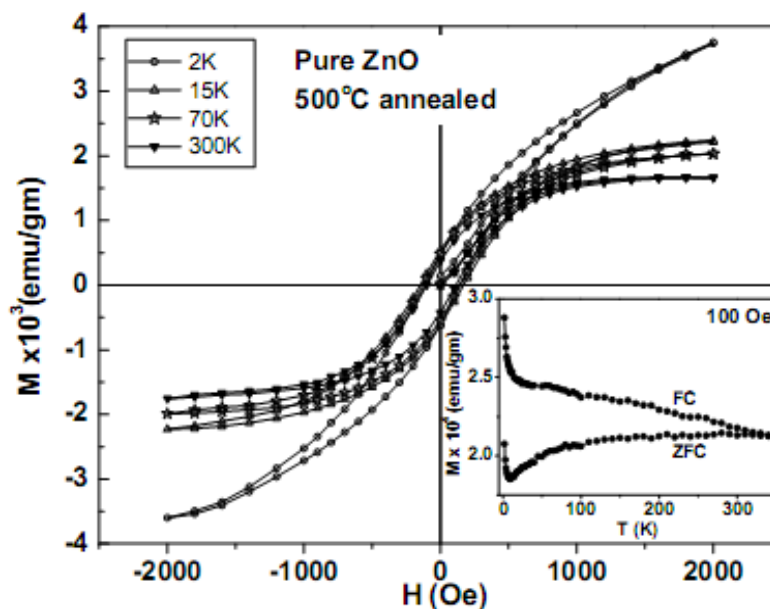
^۲-Coercive Force



شکل (۴-۱) (a) حلقه پسماند نمونه A در دمای $T=4\text{ K}$ (b) حلقه پسماند نمونه B در دمای $T=4\text{ K}$ (c) حلقه پسماند نمونه B در دمای $T=300\text{ K}$

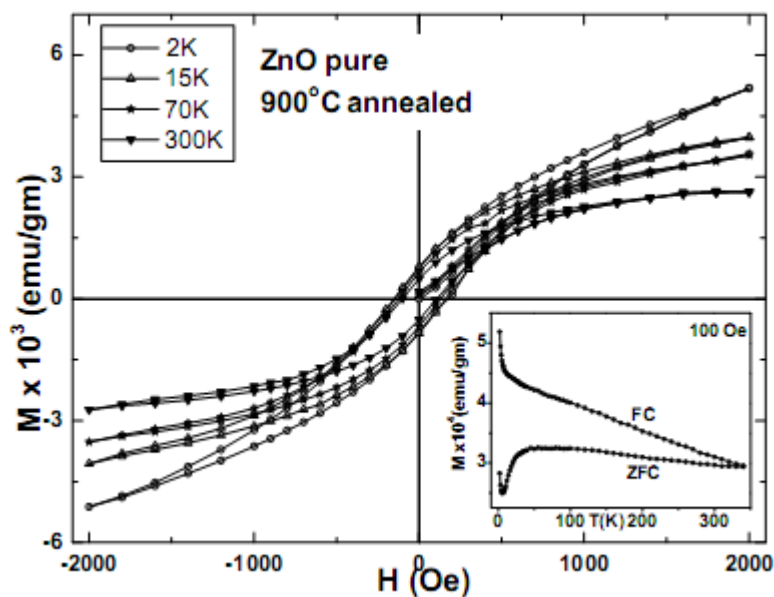
با افزایش میدان اعمالی مغناطش همه نمونه ها افزایش می یابد. ولی مغناطش نمونه های A و B کمتر از مقدار پیش بینی شده تئوری است که علت اختلاف در مقادیر تجربی و تئوری توسط گروه های مختلف ناشی از روش های تکنیکی متفاوت برای ساخت نمونه ها گزارش شده است .

نکته جالب اینکه تحقیقات جدید انجام شده نشان می دهد که حالت فرومغناطیسی مشاهده شده در ترکیب ZnO آلوده با Mn در دمای بالاتر از دمای اتاق صفر می گردد [۱۵]. در این تحقیق چهار نمونه مختلف، ZnO خالص و ZnO آلوده با ۱٪ و ۲٪ و ۳٪ عنصر Mn که به روش Sol-gel تهیه و در دماهای 500°C و 900°C باز پخت^۱ شده اند مورد ارزیابی قرار گرفته اند. در شکل (۵-۱) حلقه پسماند در دماهای مختلف برای نمونه ZnO خالص که تا 500°C باز پخت شده است را نشان داده ایم. همانطور که در این شکل می بینیم اشباع مغناطیسی در همه دماها (بجز 2K) وجود دارد و در دمای اتاق هم حلقه پسماند بطور واضح مشاهده می شود. در حالیکه طبق شکل (۱-۶) هنگامی که همین نمونه در دمای 900°C باز پخت می شود، اشباع مغناطیسی فقط برای دمای 300K قابل مشاهده است [۱۵] و هیچ اشباع مغناطیسی تا 2000Oe مشاهده نمی شود.



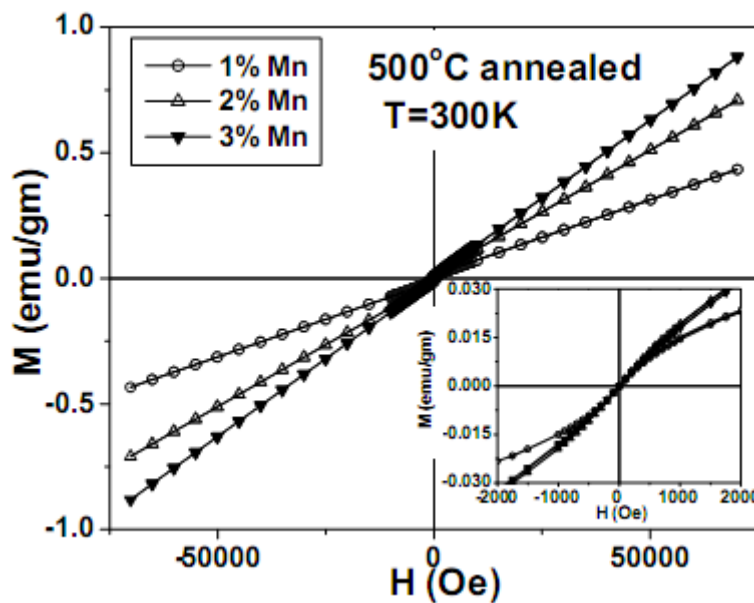
شکل (۵-۱): منحنی مغناطش بر حسب میدان مغناطیسی برای نمونه ای که در دمای 500°C باز پخت شده است در دماهای مختلف [۱۵]

^۱-Annealing

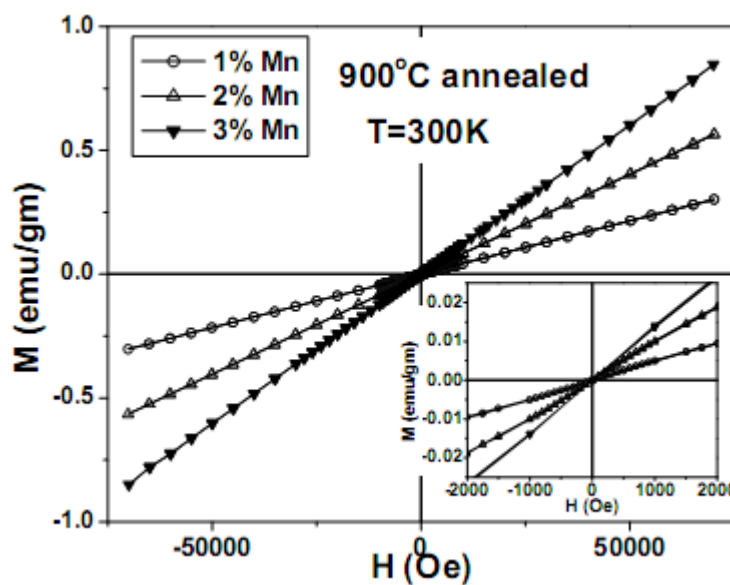


شکل (۱-۶): منحنی مغناطش برحسب میدان مغناطیسی برای نمونه ای که در دمای 900°C بازپخت شده است در دماهای مختلف [۱۵].

از مقایسه این نمودارها در می یابیم اشباع مغناطیسی برای نمونه ای در دمای 900°C بازپخت شده است در همه دماها بیشتر از اشباع مغناطیسی برای نمونه باز پخت شده در 500°C است. برای نمونه های آلایش یافته با Mn منحنی مغناطش برحسب میدان در شکل (۱-۷) و (۱-۸) نشان داده شده است.



شکل (۷-۱): منحنی M-H برای نمونه های ZnO آلايش یافته با ۱٪، ۲٪ و ۳٪ Mn و بازپخت در دمای 500°C . در دمای ۳۰۰K رفتار غیر خطی تنها در میدانهای کم مشاهده می شود و اشباع مغناطیسی مشاهده نمی شود [۱۵]



شکل (۸-۱): منحنی M-H در دمای اتاق برای نمونه های ZnO آلايش یافته با ۱٪، ۲٪ و ۳٪ Mn که در دمای 900°C بازپخت شده است. نمودار بطور کلی خطی است و اشباع مغناطیسی مشاهده نمی شود [۱۵]

بامقایسه منحنی M-H برای همه نمونه ها در دمای $T=300\text{K}$ در می یابیم که ZnO خالص یک حلقه پسماند عریض با نیروی وادارندگی مغناطیسی محدود دارد در حالیکه در ZnO آلايش یافته با Mn این نیروی وادارندگی صفر است و حلقه ای مشاهده نمی شود.

این گزارشات نشان می دهد که آلاینش یک نیمرسانا با اتمهای مغناطیسی الزاما منجر به بروز افزایش رفتار فرومغناطیسی نخواهد شد.

۱-۴- DMS های بر پایه ترکیبات گروه III-V

آلاینش ترکیبات گروه III-V با یونهای مغناطیسی نیز از موضوعات قابل توجه در مطالعات محققان در زمینه DMS هاست. همانطور که می دانیم این ترکیبات به دلیل ویژگیهای منحصر به فرد آنها از محبوبیت زیادی در ساخت قطعات اپتوالکترونیکی برخوردار هستند. بنابراین معرفی نیمرساناهای مغناطیسی گروه III-V آلاینش یافته با عناصر مغناطیسی برای استفاده از پدیده های مغناطیسی که در نیمرساناهای غیر مغناطیسی وجود ندارد را فراهم می آورد. که امکان استفاده از این ترکیبات را در صنایع اپتوالکترونیک و اسپینترونیک میسر می سازد. مانع اصلی در ساخت نیمرساناهای مغناطیسی بر پایه ترکیبات گروه III-V، حلالیت پذیری پایین عناصر مغناطیسی مثل Mn در این ترکیبات است. بنابراین اثرات مغناطیسی تقریباً متناسب با غلظت یونهای مغناطیسی است. اگر قابلیت حل یونهای مغناطیسی از مرتبه 10^{18} cm^{-3} یا کمتر باشد نباید انتظار یک تغییر اساسی در ویژگیهای ماده میزبان را داشت. استفاده از روش رو آراستی پرتو مولکولی^۱ (MBE) برای تولید یک فیلم نازک^۲ از این ترکیبات در خلأ راه مناسبی برای داشتن نمونه هایی با کیفیت بسیار خوب برای این بررسی است [۱۶].

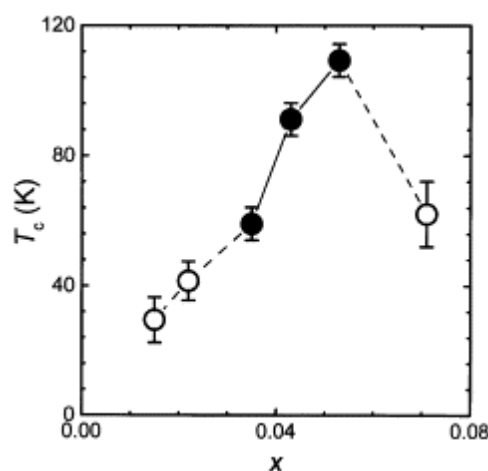
۱-۴-۱ بررسی خواص (Ga,Mn)As

ترکیب GaAs از اولین نیمرساناهای گروه III-V است که به منظور استفاده در DMS ها مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است. GaAs بعنوان یک نیمرسانای با گاف نواری کوچک استفاده های فراوانی در کاربردهای اپتوالکترونیکی داشته است و به همین دلیل محققین علاقمند بودند که با تزریق یک عنصر واسطه به این نیمرسانا بتوانند از خواص مگنتوالکترونیکی نیز در کنار خواص اپتوالکترونیکی آن استفاده کنند.

^۱ - Molecular Beam Epitaxy

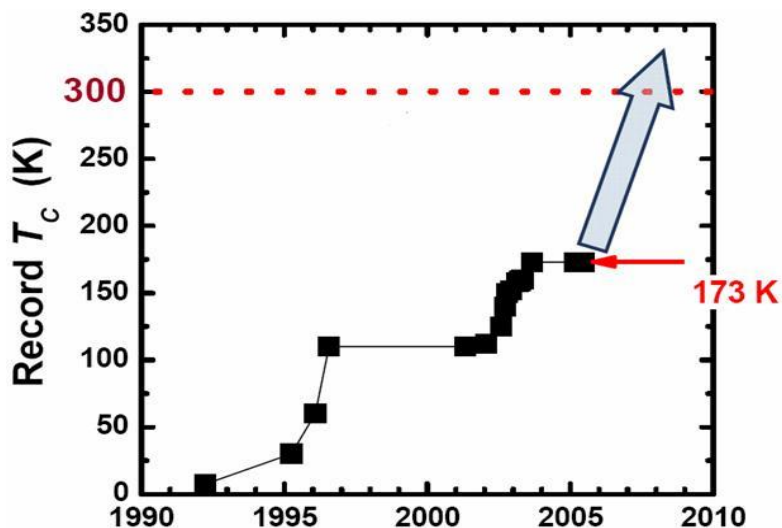
^۲ - Thin Film

مطالعات انجام شده بر روی ترکیب (Ga,Mn)As دمای کوری این ترکیب وابسته به تعداد حاملهای بار آن است مطالعات تجربی نشان می دهد که غلظت حفره ها در (Ga,Mn)As کمتر از غلظت اتمهای Mn است [۱۶] یکی از فاکتورهایی که باعث این مطلب است حضور جایگاه As است که دو الکترون بیشتر از Ga دارد و هر جایگاه As کمبود این حفره ها را با اتم های Mn جبران می کند. بنابراین دمای کوری به غلظت Mn وابسته است [۱۷]. آزمایشات نشان می دهد با افزایش غلظت Mn دمای کوری افزایش می یابد. شکل (۹-۱) نشانگر این مطلب است [۱۷].



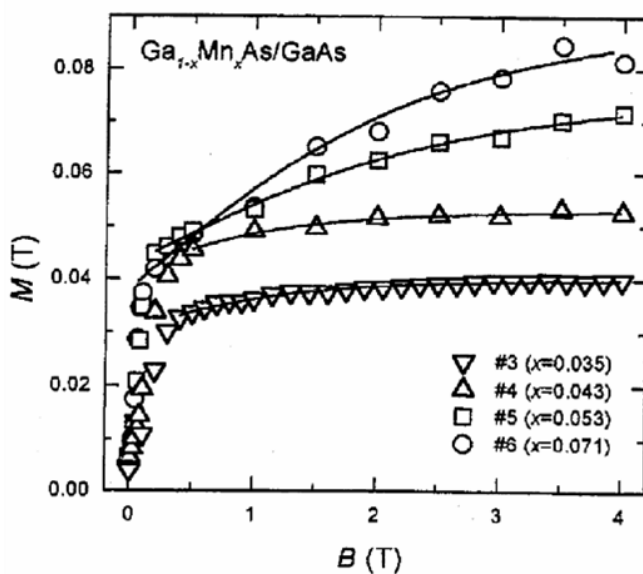
شکل (۹-۱) رابطه دمای کوری با غلظت Mn. به ازای Mn=3% رفتار فلزی مشاهده میشود.

از دهه نود که تحقیقات روی ترکیب (Ga,Mn)As آغاز شده است دانشمندان همواره سعی کرده اند که دمای کوری این ترکیب را با روشهای مختلفی از جمله افزایش غلظت Mn' با بکارگیری روشهای مختلف در رشد بلور و انجام عملیات باز پخت افزایش دهند. در سال ۲۰۰۵ محققان موفق شده اند این دما را به 173K برسانند. پیش بینی می شود تا سال ۲۰۱۰ بتوان دمای کوری این ترکیب را به بیشتر از 300K یعنی دمای اتاق هم رسانید. (شکل ۱۰-۱)

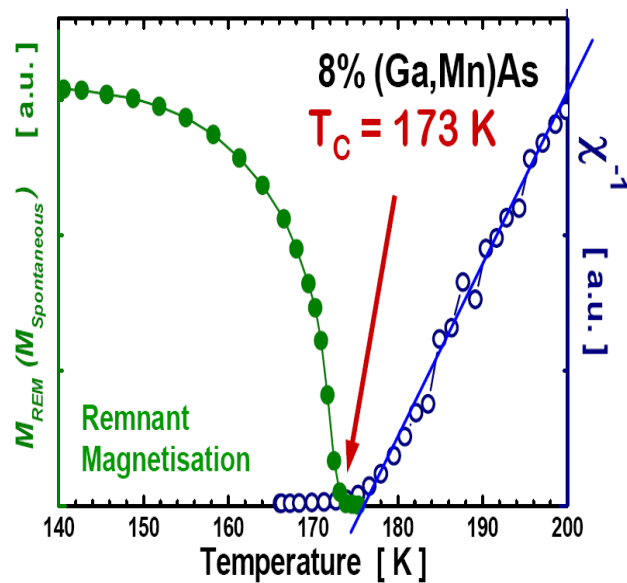


شکل (۱-۱۰) دمای کوری در $(\text{Ga,Mn})\text{As}$.

نمودارهای (۱-۱۱) و (۱-۱۲) به ترتیب افزایش مغناطش، با افزایش غلظت منگنز و تغییر فاز از حالت فرو مغناطیس به پارامغناطیس را (وقتی که غلظت Mn حدود ۸٪ باشد) نشان می‌دهند [۱۸]. همانطور که در این شکل مشاهده می‌شود در دمای کوری ماده حالت فرومغناطیس خود را از دست می‌دهد.

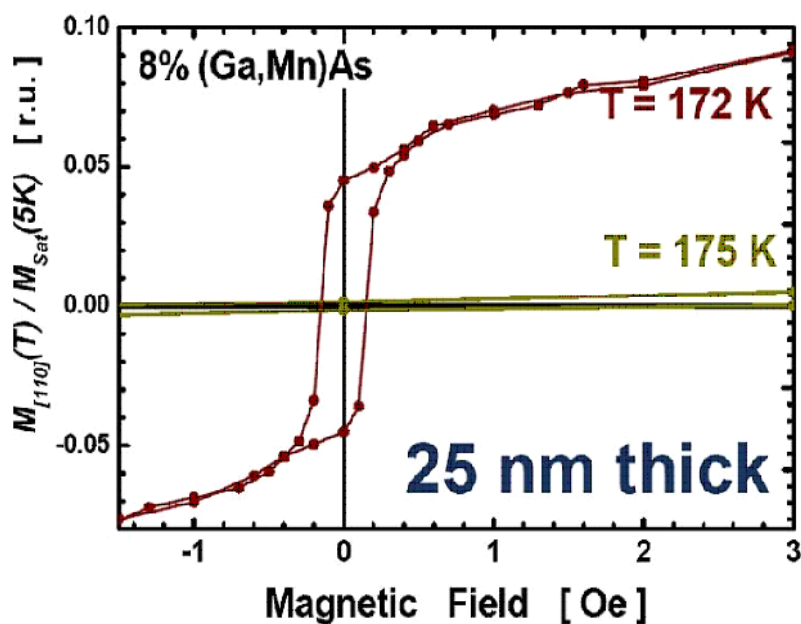


شکل (۱-۱۱) رابطه میدان مغناطیسی و مغناطش.



شکل (۱۲-۱) گذار از حالت فرومغناطیسی به حالت پارامغناطیس در دمای کوری.

در شکل (۱۳-۱) حلقه پسماند این DMS در دمای $T=172\text{ K}$ رسم شده است که ملاحظه می‌شود در دمای $T=175\text{ K}$ که ماده حالت پارامغناطیسی دارد این حلقه تشکیل نمی‌شود [۱۹].



شکل (۱۳-۱) منحنی M-H در (Ga,Mn)As.

بنابراین در می یابیم که می توان جهت مغناطش و حالت فرو مغناطیسی را با اعمال میدان خارجی تغییر داد و در نهایت مطالعه (Ga,Mn)As شروع خوبی برای رسیدن به DMS های با دمای کوری بالا است.

۵-۱ مکانیسم حالت فرومغناطیسی در DMS ها

طبق مطالعات انجام شده روی DMS های بر پایه ترکیبات II-VI و III-V این DMS ها رفتارهای مغناطیسی تقریباً مشابهی دارند.

رفتار مغناطیسی DMS ها به تعداد الکترونهای اوربیتال d عنصر مغناطیسی بستگی دارد. برای آرایش های کمتر از نیمه پر حالت فرو مغناطیس پایدار است و برای آرایشهای بیشتر از نیمه پر حالت Spin-glass حالت پایه سیستم خواهد بود. پایداری حالت فرو مغناطیس بستگی به مکانیزم تبدالی - دوگانه دارد [۲].

- [1] T. Subokawa , J. Phys. Soc. Jpn. 15 ,1664 ,1960 .
- [2] K. Sato , H. Katayama-Yoshida , Semicond. Sci. Technol. 17 , 367-376 , 2002 .
- [3] R. R.Galazka. Inst. Phys . Conf . Ser. 43: 133 , 1979 .
- [4] Binach, et.al., Phys. Rev. B39 , 4828 , 1989 .
- [5] T. Ditel , H. Ohno , F. Matsukura , J. Cibert , D. Ferrand , Science 287 , 1019 , 2000 .
- [6] S. J. Pearton, Y. D. Park, C. R. Abernathy , M. E. Overberg , et.al, Appl. Phys. 93, 1 ,2003 .
- 2001 . B63, 195-205 , Rev. [7] T. Ditel, H. Ohno, F.Matsukura , Phys.
- [8] A. Pajaczowska , prog. Cryst. Growth and Char , 1: 289, 1978 .
- [9] G. Bastard , C. Rigaux , Y. Guldner , A. Mycielski , J. K. Furdyna , D. P. Mullin. Phys. Rev. B, 24: 1964 , 1981 .
- [10] K. Ueda , H. Tabata , T. Kawai , Magnetic and electric properties of transition metal doped ZnO films , Appl. Phys. Lett. 79 , 988 , 2001 .
- [11] Z. W. Jin , T. Fukumura , M. Kawasaki , et al , Appl. Phys. Lett. 78 , 3824, 2001.
- [12] Y. M . Cho , W. K. Choo, et.al , Appl. Phys. Lett. 80 , 3358 , 2002 .
- [13] W. Chen , L. F. Zhao , Y. Q. Wang , J. Miao , S. Llu ,Z. C. Xia , S. L. Yuan,134 , 827-830 , 2005 .
- [14] P. Sharma,A , Gupta,K.V.Rao , et al, Nat Mater , Z , 3829 , 2003 .
- [15] S. Banerjee , K. Rajendran , N. Gayathri , M. Sardar , S . Senthilkumar , V. Sengodan , Cond-Mat. Mtrl-Sci ,0704.3541v1 , 2007 .
- [16] H.Ohno, J. Magn , Master .Zoo 110(1999)
- [17]L. M. Sandratslii, P. Bruno ,Max-planck Institut , arxiv : Cond-mat / 0303172V3, 2003
- [18] F. Matsukura , et.al. , Phys. Rev. B, 1998
- [19] K. Y. Wang , et.al., J A P, 04 , LCS , 27,

فصل دوم

بررسی خواص نیمرسانای SiC

۲-۱ خواص عمومی

۲-۲ ساختار بلوری

۲-۳ روشهای رشد بلور

فصل دوم

بررسی خواص نیمرسانای SiC

۱-۲ خواص عمومی

یکی از نیمرساناهایی که امروزه توجه محققین را به خود جلب کرده است، نیمرسانای SiC می باشد که کاربرد فراوانی در علوم مهندسی بخصوص الکترونیک و اسپینترونیک دارد. SiC بطور طبیعی در زمین یافت می شود و حتی در ترکیبات شهاب سنگها نیز دیده شده است. جدول (۱-۲) برخی از خواص فیزیکی SiC را در حالات مختلف نشان می دهد.

جدول (۱-۲): خواص فیزیکی SiC [۱]

SiC type	SiC content	Density (g/cm ³)	Young's modulus (GPa)	Thermal expansion coefficient (10.C ⁻¹)	Thermal conductivity (W/m-k)	Flexural strength (MPa)
Cramic bonded	Up to 95%	2.55	100	5.8	16	30
Recrystallized	100%	2.55	240	5.0	28	100
Sintered	95%	2.55	410	4.9	50	450
Hot-pressed	98%	2.55	450	4.5	55	650

SiC با رسانندگی بالا^۱ سرعت سوق اشباع بالای الکترون^۱ و میدان الکتریکی شکست بزرگ^۲ یک ماده نیمرسانا با خواص بسیار خوب برای کاربردهای فرکانس بالا^۱، توان بالا^۲ و دمای بالا^۳ است. در

^۱- High saturated electron drift velocity

^۲- High break down electric field

سالهای اخیر کار روی این ماده به دلیل نیازی که در ساخت و تولید وسایل الکترونیکی برای کار در توان های و دما های بالا وجود دارد به طور چشمگیری افزایش یافته است. جدول (۲-۲) برخی ویژگیهای نیمرساناهای رایج را با SiC مقایسه می کند.

جدول (۲-۲) مقایسه خواص SiC با نیمرساناهای رایج . مقادیری که با اندیس ۱ نشان داده شده در امتداد محور C اندازه گیری شده اند [۲].

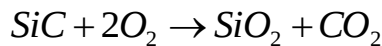
Material	E_g at 300K (eV)	μ_a [cm ² (Vs) ⁻¹]	E_c [×10 ⁶ Vcm ⁻³]	V_{sat} [×10 ⁷ cms ⁻¹]	λ [W (cmK) ⁻⁴]
Si	1.1	1350	0.3	1.0	1.5
GaAs	1.4	8500	0.4	2.0	0.5
GaN	3.43	1000	4	2.7	1.3
3C-SiC	2.3	900	1.2	2.0	4.5
4H-SiC	3.26	720 ^۱	2.0	2.0	4.5
6H-SiC	3.0	370 ^۱	2.4	2.0	4.5
AlN	6.2	1100	11.7	1.8	2.5
Diamond	5.45	1900	5.6	2.7	20

دمای تفکیک SiC حدود ۲۸۳۰°C است و در این دما SiC تبدیل به گرافیت و سیلیکون مذاب غنی شده می شود. در دمای بیش از ۶۰۰°C اکسید می شود و همانند سیلیکون حالت پایدار آن SiO_۲ می باشد.

^۱- High- frequency device

^۲- High- power device

^۳- High- temperture device



کاربرد صنعتی SiC با دیود گسیل کننده نور آبی^۱ (LED) که به دلیل گاف نواری غیر مستقیم آن بسیار ضعیف بود شروع شد زیرا تنها چشمه نور آبی الکترولومینسانس^۲ در آن زمان (۱۹۰۷) بود [۳]. اما خیلی زود LED های ساخته شده بر پایه گالیم نیتراید (GaN) از نظر شدت از آن پیشی گرفت این LED ناشی از گاف نواری مستقیم نیترایدهای گروه III بود. ولی به هر حال بیشترین استفاده نیمرسانای SiC در LED ها است [۴].

۲-۱-۱ خواص شیمیایی و مکانیکی

SiC ماده بسیار سختی است که مدول یانگ^۳ آن ۴۲۴ GPa است [۵]. از لحاظ شیمیایی بی اثر^۴ است و بطور ضعیفی با مواد شناخته شده در دمای اتاق واکنش نشان می دهد. تقریباً نفوذ هر چیزی در SiC غیر ممکن است. مواد آلاینش یافته بایستی در آن کاشته یا رشد داده شوند. علاوه بر این SiC فاز مایع ندارد و به جای آن در دماهای بالاتر از ۱۸۰۰°C تصعید می شود و بخار تشکیل شده در طول فرایند تصعید اساساً شامل SiC_x , Si_xC , Si در نسبت های خاصی که وابسته به دما است می باشد [۴].

۲-۲ ساختار بلوری

SiC بعنوان یک نیمرسانای با گاف نواری بزرگ در ساختارهای مختلفی بلوری می شود. بلوک سازنده همه آنها یک چهار وجهی است که شامل یک اتم کربن (سیلیکون) است که با چهار اتم سیلیکون (کربن) پیوند برقرار کرده است. شکل (۲-۱) این ساختار چهار وجهی را نشان می دهد. فاصله بین اتم های سیلیکون و یا کربن تقریباً $3.56 \text{ \AA}$ می باشد. اتم کربن در مرکز جرم یک چهار وجهی تشکیل شده از اتم های Si قرار دارد. فاصله بین اتم های کربن و اتم های

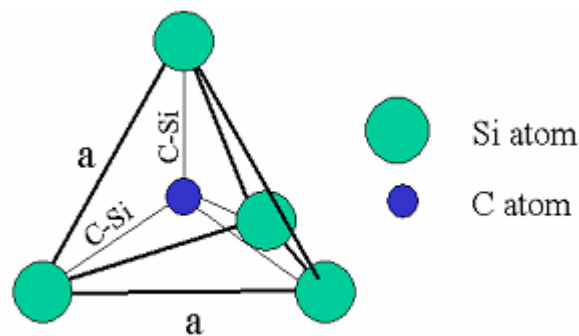
^۱ - Blue Light Emitting Diode (LED)

^۲ - Electroluminescent

^۳ - Yong's Modulus

^۴ - Inert

سیلیکون که در شکل دیده می‌شود $1/89 \text{ \AA}$ است و انرژی پیوندشان حدود $4/53 \text{ eV}$ می‌باشد [۶،۴].



شکل ۱-۲: بلوک چهار وجهی سازنده ساختار SiC [۶].

ارتفاع یک سلول واحد یعنی اندازه C در ساختارهای مختلف، فرق می‌کند و بنابراین نسبت

از $\frac{c}{a}$ یک ساختار به ساختار دیگر تغییر می‌کند. این نسبت برای ساختارهای

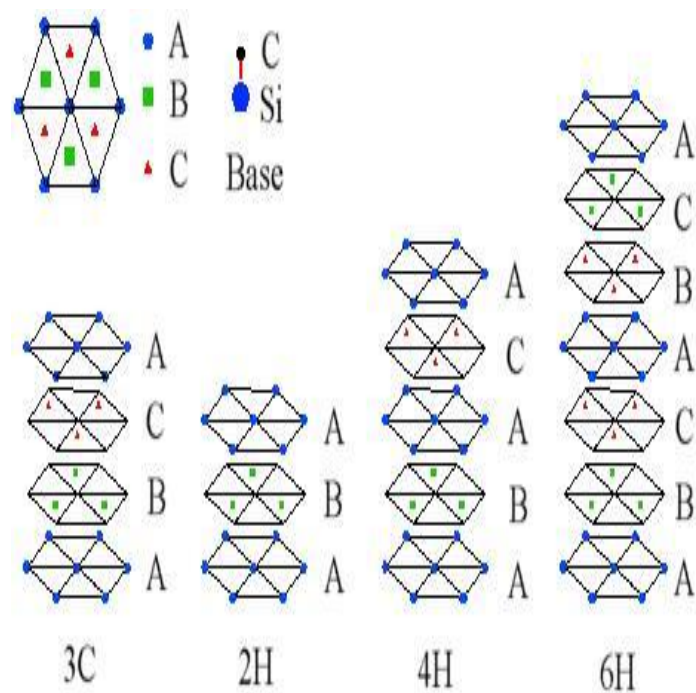
6H-SiC, 4H-SiC, 2H-SiC به ترتیب برابر $1/641$ و $3/271$ و $4/908$ است [۶].

تفاوت بین ساختارها در دنباله رویهم چینی^۱ لایه های دوتایی کربن و سیلیکون است. در شکل (۲-۲) توالی قرار گرفتن این لایه ها برای سه ساختار رایج 3C-SiC , 4H-SiC , 6H-SiC نشان داده شده است.

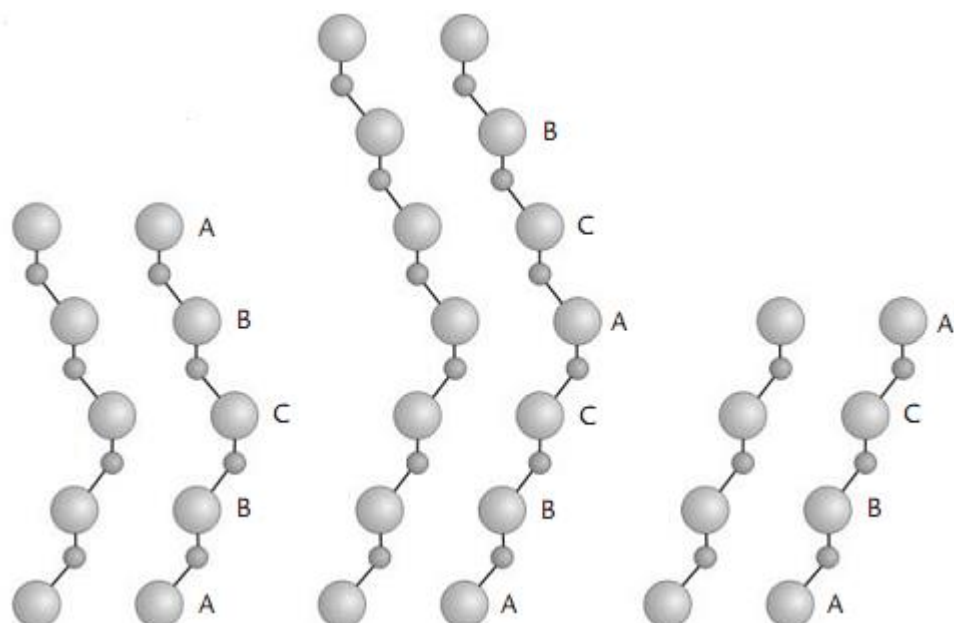
اگر اولین لایه دوگانه جایگاه A نامیده شود، لایه بعدی بر اساس ساختار تنگ پکیده^۲ در روی مکانهای B و یا C قرار می‌گیرد. بطور دقیق تر چهارچوب چهار وجهی باید بصورت صفحاتی از کره هایی با شعاع یکسان در نظر گرفته شود همانطور که در شکل (۲-۳) نشان داده شده است. صفحات برای همه سطوح شبکه یکسان هستند. اگرچه مکان نسبی سطوح مستقیماً به بالا یا پایین جابجا می‌شوند تا جایی که حفره های سطح مجاور در یک ساختار به هم پکیده جای گیرند [۳].

^۱ - Stacking Sequence

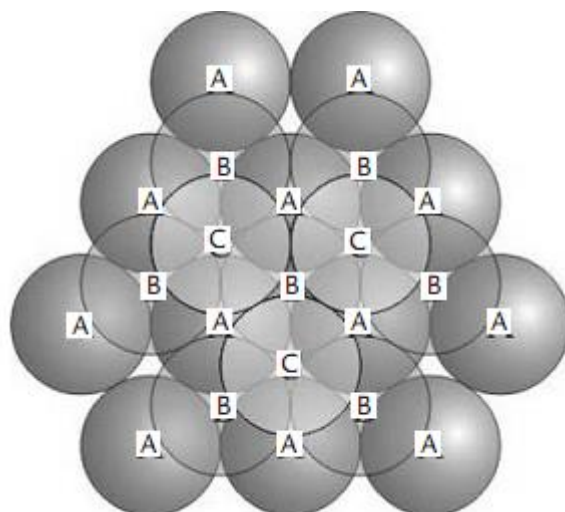
^۲ - Close- packed



شکل ۲-۲: انواع ساختار بلوری SiC [۶]



شکل ۲-۳: دنباله رویهم چینی ساختارهای (از راست به چپ) 3C-SiC, 4H-SiC, 6H-SiC [۴].



شکل ۲-۴: ساختار تنگ پکیده [۴].

ساختارهای مختلف با تغییر جایگاه های A و B و C شکل می گیرند. هر ترتیبی از حروف A و B و C بدون دو حرف مشابه نماینده یک وضعیت ممکن از کره های یکسان تنگچین می باشد. در این چینش فشرده سه بعدی هر کره با ۱۲ کره دیگر در تماس بوده و در واقع محاصره شده است. این بیشترین تعداد کره هایی است که می توان آنها را به گونه ای چید تا با یک کره دیگر در تماس باشد^۱ و بیشترین چگالی چینش را برای یک شبکه نامحدود ارائه می کند. دوره تناوب^۱ سلول واحد در یک ساختار تنگچین سه بعدی توسط تعداد لایه هایی که بعد از آن ترتیب رویهم چینی خودش را تکرار می کند مشخص می شود. ساختار 2H-SiC با دنباله ... ABAB پشت سر هم قرار می گیرد که عدد ۲ دوره تناوب را نشان می دهد. ساختار 3C-SiC تنها ساختار مکعبی است که دنباله رویهم چینی بصورت ... ABCABC... یا ... ACBACB... دارد و دو ساختار مهم 4H-SiC و 6H-SiC دارای دنباله رویهم چینی به فرم ... ABCBABC... و ... ABCACBABC... می باشند [۳ و ۵]. ساختار 3C-SiC را به صورت β -SiC و ساختارهای هگزاگونال را به صورت α -SiC نیز نشان می دهند. بیش از دویست نوع بس بلور مختلف برای SiC وجود دارد. بس بلورها با توجه به حالت تناوبی این لایه ها نامگذاری می شوند^۱ که بعضی از آنها بعد از رویهم چینی صد لایه تکرار می شوند. خواص فیزیکی دقیق SiC وابسته به ساختار بلوری اختیار شده دارد. اما همه آنها کاملاً بی اثر هستند و رسانش گرمایی بالایی دارند.

^۱ -Identity Period

همانطور که اشاره شد در همه ساختارهای SiC، نسبت سیلیکون و کربن یکسان است اما دنباله رویهم چینی سطوح با هم فرق می‌کند و همین سبب ایجاد خواص الکترونیکی و اپتیکی متفاوتی می‌شود.

۲-۲-۱ گاف نواری

SiC دارای گاف نواری غیرمستقیم است که مقادیر مختلفی برای بس بلورهای آن گزارش شده است. مثلاً برای ساختارهای رایج 3C-SiC گاف نواری 2.39eV^۱ برای 2H-SiC گاف نواری 3.33eV [۷] و 4H-SiC گاف نواری 3.265eV می‌باشد [۷]. همانطور که اشاره شد گاف نواری بزرگ باعث کاربرد این ترکیبات در ساختن قطعات اپتوالکترونیکی مورد استفاده در فرایندهای دمای بالا می‌شود. یونش گرمایی الکترون‌ها از نوار ظرفیت به نوار رسانش، که محدودیت اولیه قطعات بر پایه Si در طول عملکرد در دمای بالا است^۲ در قطعات بر پایه SiC به خاطر گاف نواری بزرگ آن ایجاد مشکل نمی‌کند.

۲-۳ روشهای رشد بلور

در حالت عمومی بلورهای حالت جامد به دو شکل حجمی^۱ و روآراستی^۲ رشد داده می‌شوند.

۲-۳-۱ رشد بلور به شکل حجمی

در رشد بلور به شکل حجمی می‌توان از روش چوکراسکی^۳ و بریجمن^۴ استفاده کرد که از شکل مذاب بلور برای رشد استفاده می‌کنند. چیزی در حدود ۹۰٪ بلورهای سیلیکون در صنعت نیمرسانا به روش چوکراسکی رشد داده میشوند. این روشها، روش موثری برای رشد واقعی مدارات مجتمع که از بلور سیلیکون استفاده می‌شود، است. از جمله فرایندهای رشد حجمی بلور میتوان فرایند آپسون^۵ و فرایند للی^۱ را نام برد که توضیحاتی راجع به آنها می‌دهیم [۸].

^۱ - Bulk

^۲ - Epitaxy

^۳ - Czochralski

^۴ - Bridgeman

^۵ - Acheson process

۲-۳-۱-۱ فرایند آچسون

بیشترین ماده SiC که در تمام دوره ها به وسیله فرایند آچسون تولید شده است. این فرایند نامش را از مخترعش آچسون گرفته است. سادگی این فرایند آنرا برای تولید مقادیر زیادی از SiC مناسب ساخته است. SiC که به این روش ساخته می شود برای اهداف برشی و سمباده زنی مفید می باشد. با این حال بعضی از موادی که به وسیله فرایند آچسون تولید میشوند ممکن است کیفیت کافی را برای تولید قطعات الکترونیکی نیز دارا باشند.

مخلوطی از سیلیس^۱ 'کربن' خاک اره^۲ و نمک معمولی (مثلا ۵۰٪ سیلیس^۱ ۴۰٪ کک^۳ ۷٪ خاک اره^۲ ۳٪ نمک معمولی) در یک کوره الکتریکی حرارت داده می شوند. حرارت دادن توسط هسته ای از گرافیت و کک که در مرکز کوره قرار داده شده است^۳ انجام می شود. مخلوط به گونه ای حرارت داده می شود تا به حد اکثر دمای تقریبی ۲۷۰۰ °C برسد. پس از آن دما به طور تدریجی کاهش می یابد.

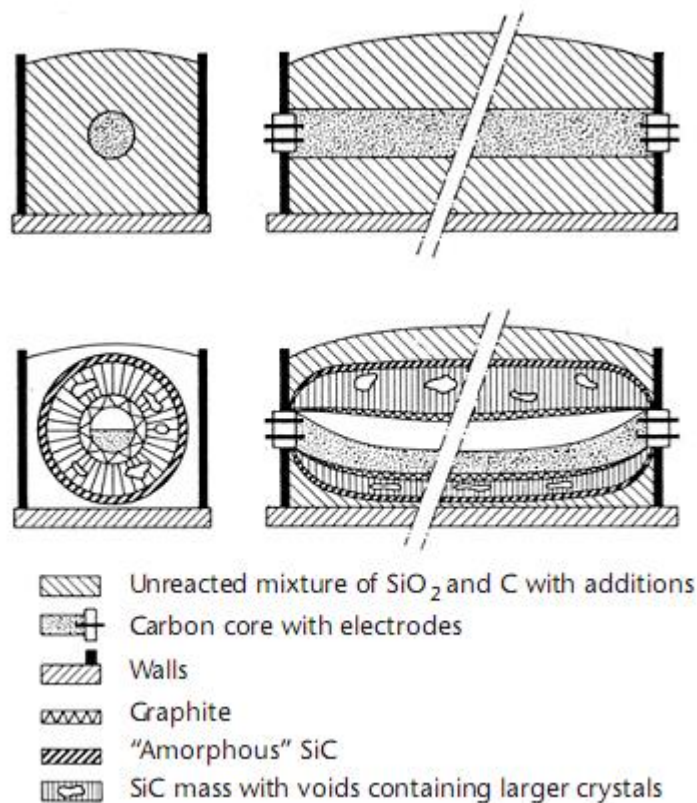
بعد از آنکه کوره روشن شد^۳ 'دورترین حجم' که دمای بالایی به آن نمی رسد^۳ شامل مخلوط واکنش نداده ای است. اینجا حجمی است که دمای آن به ۱۸۰۰ C نرسیده است. در این حجم مخلوط طوری واکنش داده است تا SiC را به صورت آمورف تشکیل دهد. نزدیک هسته^۳ جایی که بالاترین دماها بدست می آیند^۳ ابتدا SiC تولید شده و هنگامی که دما در کوره افزایش پیدا می کند دوباره به گرافیت و Si تجزیه می شود. گرافیت در هسته باقی خواهد ماند^۳ اما Si با کربن واکنش می دهد و در بعضی قسمتهای سرد تر کوره SiC تشکیل می دهد. بیرون لایه گرافیتی تشکیل شده^۳ SiC مفید به شکل رگه هایی از بلورکهای^۳ که از هسته متشعشع می شوند^۳ یافت می شود. اندازه بلورکها با افزایش فاصله کاهش می یابد.

در روی دیواره تهی جاها و کانالهایی که در طول فرایند تشکیل شده اند^۳ پلاکتهای تک بلوری تشکیل می شوند که ممکن است برای فراوری بیشتر در قطعه الکترونیکی مناسب باشد.

^۱- Lelly process

^۲-Sawdust

^۳-Platelet



شکل ۲-۵: فرایند آچسون [۴].

۲-۳-۱-۲ فرایند للی

پیشرفت بزرگی در فرایند آچسون^۴ فرایندی است که بوسیله للی در سال ۱۹۵۵ ایجاد شد. این فرایند شبیه چیزی است که در تهی جاها و کانالهای فرایند آچسون مشاهده می شود. کلوخه های SiC بین دو لوله گرافیتی هم محور بسته بندی شده اند. پس از آن لوله داخلی بیرون کشیده می شود و استوانه های از کلوخه های SiC را در داخل لوله گرافیتی خارجی که بوته نامیده می شود بر جای می گذارد این بوته به وسیله یک در پوش گرافیتی یا SiC پوشیده شده و درون یک کوره قرار گرفته است. این کوره تا حدود 2500°C در اتمسفری از ارگون و در فشار جو گرم می شود. در این دما SiC به طور قابل ملاحظه ای تصعید می شود و یک لایه گرافیتی در بخش خارجی استوانه برجای می گذارد و پلاکتهای کوچکی از قسمتهای داخلی استوانه SiC شروع به نمو می کنند^۵ این پلاکتهای به طور پی در پی تا اندازه های بزرگتری در طی یک فرایند گرمادهی ممتد

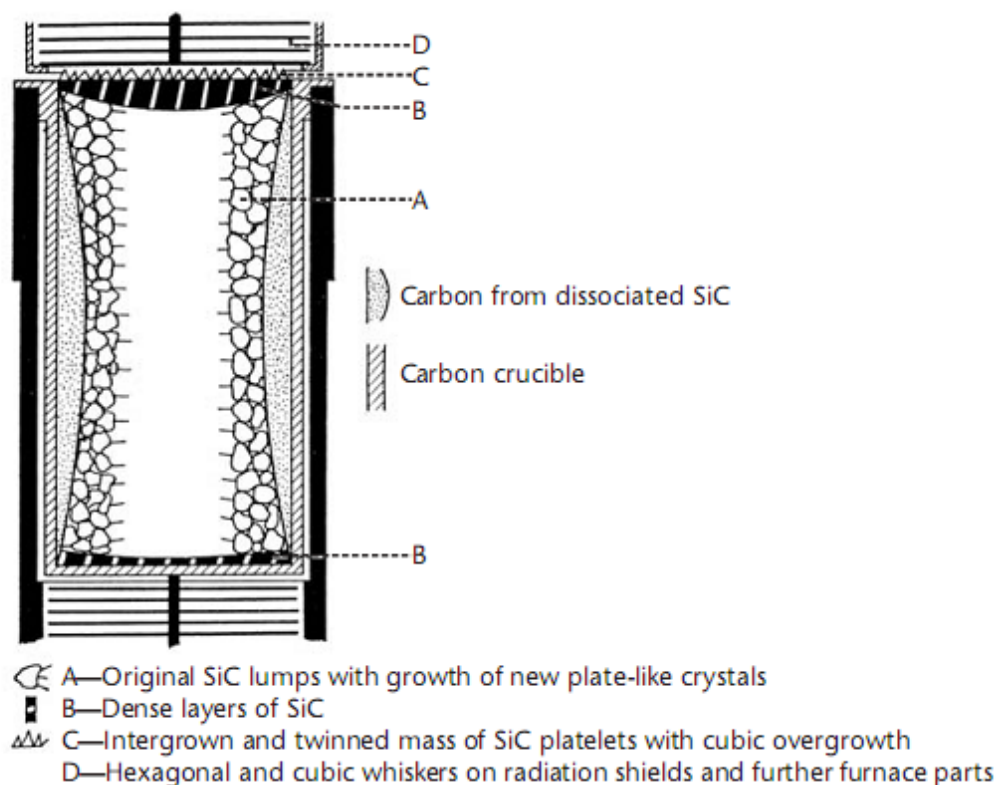
در این دما رشد می کنند. هر پلاکت از یک انتها به یک کلوخه اصلی SiC چسبیده است. در بالا و پایین استوانه یک لایه چگال ضخیم SiC تشکیل می شود.

در روش تصحیح شده للی پودر SiC یا کلوخه های SiC داخل یک بوته گرافیتی استوانه های شکل قرار می گیرند. بوته توسط یک در پوش گرافیتی که روی آن یک بلور بذر چسبیده شده ' بسته شده است. بوته تقریباً تا 2200°C در جوی از آرگون و فشاری کمتر از فشار جو حرارت داده می شود. یک گرادیان دما در طول بوته طوری اعمال می شود که پودر SiC انتهای بوته در دمای بالاتری از بلور بذر قرار گیرد. گرادیان دما نوعاً از مرتبه $20-40^{\circ}\text{C/cm}$ نگه داشته می شود.

پودر SiC در این دمای بالا تصعید می شود و حجم داخل بوته به وسیله بخاری از مولکولهای متفاوت سیلیکون و کربن مانند Si , Si_2 , SiC_2 , Si_2C پر میشود. از آنجا که گرادیان دمایی طوری انتخاب می شود که سردترین قسمت بوته در محل بذر است ' بخار در این نقطه متراکم می شود و بلور رشد می کند.

بدین ترتیب حجمهایی از SiC رشد پیدا می کنند که می توان کار بیشتری روی آنها انجام داد تا به ویفر تبدیل شوند. از دیدگاه تکنولوژیکی این مسئله خیلی مهم است ' به این دلیل که همه فرایندهای بیشتر را می توان برای سائز ویفر استاندارد کرد. مشکل این روش کیفیت بلوری نامرغوب این بلورها در مقایسه با بهترین بلورهای رشد داده شده به وسیله روش للی است. بیشترین مشکل مربوط به میکرو پایپ ها است که حفره های کوچکی با قطر تقریبی $1-5\text{ }\mu\text{m}$ هستند. که در زیر لایه ها نفوذ می کنند. چگالی این میکرو پایپ ها از مرتبه

$10^2 - 10^3\text{ cm}^2\text{ Micropipe}$ / برای ماده تجاری بدست آمده از انستیتوی تحقیقات کری است. با این حال این چگالی به سرعت کاهش می یابد و در آینده نزدیک می توانیم انتظار زیر لایه هایی با میکرو پایپ های خیلی کمتری را که به صورت تجاری عرضه می شوند ' داشته باشیم.



شکل ۲-۶: فرایند لیلی [۴].

۲-۳-۲ رشد به شکل روآراستی

در روش رشد روآراستی، با این تکنولوژی، یک لایه تک بلور را بر روی یک بلور دیگر رشد می‌دهند، در روشهای روآراستی کنترل ناخالصی در نیمرساناها بهتر صورت می‌گیرد، لذا می‌توان کارایی قطعات الکترونیکی را بهینه کرد. بعنوان مثال یک لایه نیمرسانای نوع n را می‌توان بر روی همان نیمرسانا از نوع p رشد داد. در این روش، مقاومت زیر لایه‌ها بطور چشمگیری کاهش می‌یابد خیلی از قطعات الکترونیکی بخصوص قطعاتی که با میکروویو و دستگاه‌های فوتونی کار می‌کنند با این روش رشد داده می‌شوند.

امروزه تکنیکهای مختلفی برای رشد رو آراستی وجود دارد^۱ که از جمله آنها روآراستی فاز بخار (VPE)^۱، فاز مایع (LPE)^۲، رو آراستی پرتو مولکولی (MBE)^۳، روش تصعید^۴ و تبخیر

^۱ - Vap- Phase Epitaxy

^۲ - Liquid- Phase Epitaxy

^۳ - Molecular Beam Epitaxy

^۴ - Sublimation

حرارتی در خلا را می توان نام برد. رسوب گذاری بخار شیمیایی (CVD)^۱ تنها روشی است که برای کاربردهای تجاری SiC استفاده می شود [۴].

۲-۳-۱ رسوب گذاری بخار شیمیایی CVD

چندین نوع مختلف از راکتورهای CVD وجود دارد. راکتورهایی با دیواره سرد انواع رایجی بود که استفاده می شد اما امروزه راکتورهایی با دیواره گرم جای آنها را پر کرده است. اختلاف اصلی بین این دو نوع راکتور در ترابرد مواد است که در ادامه به توضیح آن خواهیم پرداخت.

برای رشد SiC به روش CVD معمولاً از سر گروههای سیلان و پروپان به عنوان گاز پیشرو و یک گاز حامل هیدروژن استفاده می شود [۸].

اصل فرایند CVD ترابرد ترکیبات واکنشی (سر گروهها) به وسیله یک گاز حامل به یک منطقه داغ است که در آن سر گروهها به طور گرمایی به اتم یا رادیکالهای دو یا چند اتم تجزیه می شوند^۱ که می توانند روی یک زیر لایه پخش شوند و یک لایه رو آراستی را به وجود آورند. سرگروهها و گاز حامل باید به درستی انتخاب شوند^۲ جریان گازها باید لایه ای باشد و ماده استفاده شده برای قسمت داغ راکتور باید با دقت بسیار انتخاب شود تا سیستم آلوده نشود. بعلاوه واکنشهای فاز گازی و سطحی نیز اتفاق می افتند که باید در نظر گرفته شوند.

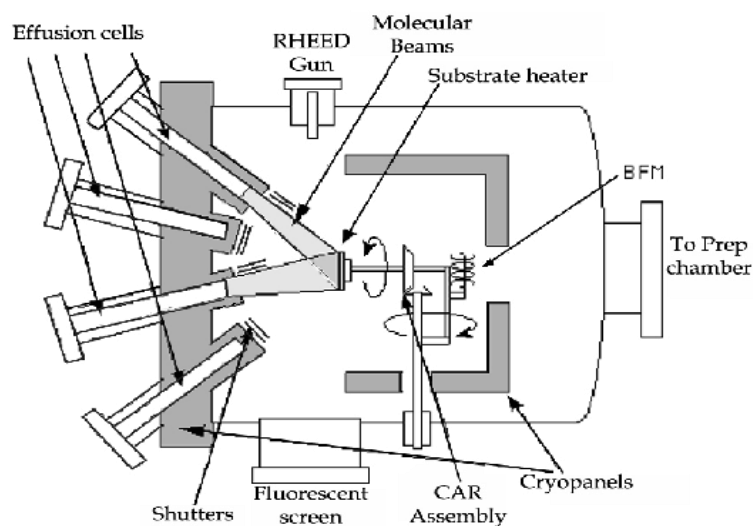
جریان باید به دو دلیل لایه ای باشد. ابتدا برای جلوگیری از در آمیخته شدن ترکیبات گازی دو نمونه یعنی هنگامی که نیاز به ساخت یک پیوندگاه p-n تیز یا یک پیوندگاه نا همگن باشد^۳ نیاز به تعویض سریع بین ترکیبات گازی مختلف است^۴ و در آمیزی در فاز گازی باید پایین نگه داشته شود. ثانیاً^۵ جریان متلاطم یک مبدل گرمایی موثر در مقابل جریان لایه ای است. در یک جریان لایه ای ترابرد گرما تحت تاثیر رسانش گرمایی و همرفت است که می توان آنرا به شکل صفحه های گازی با غلظت معین تصور کرد که توسط صفحه های مجاور که سرعت متفاوتی دارند سرد یا گرم می شوند.

^۱ -Chemical Vapor Deposition

۳-۳-۲ رشد به روش MBE

در روش MBE اتمها یا مولکولهای مواد مورد نظر تحت شرایط خلا بالا (10^{-10} Torr) به سمت یک زیر لایه^۱ معین هدایت می‌شوند. MBE روش بسیار دقیق در کنترل ترکیبات شیمیایی و عمل آرایش است. با MBE، می‌توان تک بلور در ساختارهای چند لایه ای در ابعاد نانومتری را به راحتی رشد داد. شکل (۴-۲) پیکربندی سیستم MBE را نشان می‌دهد.

جایگاه ورودی هر عنصر مجزا است، که از نیتراید بورون ساخته شده است. همه تنورها شامل عناصر رشد به راکتور متصل اند و دارای همان فشار راکتورند. دمای هر تنور مجزا بوده و به نوع ماده تبخیری درون آن بستگی دارد. نگه دارنده زیر لایه بطور مداوم با آهنگ ثابتی می‌چرخد تا روآراستی بطور یکنواخت صورت بگیرد.



شکل ۷-۲: شمائی از رشد بلور به روش MBE [۹].

دو روش برای تمیز کردن سطح لایه روآراستی در MBE وجود دارد. روش اول پخت در دمای بالا است، که باعث تجزیه اکسیدهای محلی و تبخیر آنها می‌شود و یا باعث پخش در زیر لایه می‌گردد. روش دوم بمباران کردن نمونه با پرتوی گازهای بی اثر است که باعث پراکنندگی

^۱ -Substrate

ناخالصی از سطح می‌شود. برای باز آرایش مجدد شبکه بلوری نمونه، آن را با دمای پائین زیر دمای ذوب باز پخت می‌کنند.

از خصوصیات این تکنیک استفاده از آلایشهای مختلف است، که با استفاده از تبخیر و کنترل شارش مناسب، می‌توان نمونه را با درصدهای مختلفی آرایش نمود. دمای زیر لایه با این تکنیک در بازه ۴۰۰ تا ۹۰۰ درجه سلسیوس است. نرخ رشد بلور در حدود $0.3 \frac{\mu m}{min}$ است. دما، نرخ رشد پائین، آرایش یکنواخت نمونه و استفاده از ترکیبات آلیاژی مختلف، این تکنیک را از روشهای دیگر روآراستی نظیر VPE و LPE متمایز می‌سازد.

ترکیبات فسفر دار را نمی‌توان با این روش رشد داد زیرا فسفر یک ماده انفجاری است و مقدار اندک آن در دمای ۱۵۰۰ درجه سلسیوس بسیار خطرناک است. برای رشد Si در این تکنولوژی، نیازمند به یک پرتو الکترونی (تفنگ الکترونی) هستیم تا Si را در اتمهای شبکه بنشانند و حتی تبخیر کند.

- [1] S. Nakashima , H. Matsunami , S. Yoshida , H. Harima , IOP publishing, Bristol, UK , 1 , 1995.
- [2] T. P. Chow , Mat. Sci. Forum ,1155, 338-342 , 2000.
- [3] H. J. Round , Electric World , 19 , 309 , 1907 .
- [4] Stephen E.Saddow, Anant Agarwal, Advances in silicon carbide processing and Application, , 1-2 , 2004 .
- [5] L.G. Matus, et.al., Inst, phys. Conf. Ser , No137, 185-188 , 1993 .
- [6]Homepage:http://www.ifm.liu.se/matephys/new_page/yesearch/SiC/chapter2.htm/ .
- [7] W. J. Choyke, G. pensel, physical properties of SiC MRS Balletin, March, 25-29 , 1997 .
- [8] Leys. M. R , H. Veenvliet , J. Cryst. Growth , 55 , 145 , 1981 .
- [9] S. M. Sze , Semiconductor Divices Physics and Tecnology, P333, 1985.

فصل سوم

نظریه تابعی چگالی راهی برای حل مسئله بس ذره کوانتومی

۱-۳ تقریب بورن - اوپنهایمر

۲-۳ نظریه تابعی چگالی

۳-۳ حل معادلات

۴-۳ روش شبه پتانسیل

فصل سوم

نظریه تابعی چگالی راهی برای حل مسئله بس ذره‌ای کوانتومی

یک بلور از مجموعه‌ای از ذرات باردار مثبت و سنگین (هسته‌ها) و ذرات باردار منفی و سبک‌تر (الکترون‌ها) تشکیل شده است. اگر N هسته داشته باشیم و بازای هر هسته Z الکترون. آنگاه با یک مسئله مشتمل بر $N+ZN$ ذره برهم کنش‌دار روبرو هستیم. در این مسئله بس ذره‌ای چون ذرات بر هم کنش کننده خیلی سبک هستند، لذا آثار کوانتومی غیرقابل اغماض است. هامیلتونی بس ذره‌ای دقیق این سیستم به صورت زیر است:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{R_i}^2}{M_i} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{r_i}^2}{m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i=j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (1-3)$$

هسته‌هایی که در مکان R_i قرار دارند دارای جرم M_i و الکترون‌های واقع در r_i دارای جرم m_e هستند. جملات اول و دوم در عبارت بالا به ترتیب عملگر انرژی جنبشی هسته‌ها و الکترون‌ها هستند. سه جمله آخر به ترتیب بر هم کنش کولنی الکترون - هسته، الکترون - الکترون و هسته - هسته را توصیف می‌کنند.

حل این مسئله بس ذره‌ای بطور دقیق امکان‌پذیر نیست و لذا اعمال تقریب‌ها و ساده‌سازیها برای حل آن اجتناب ناپذیر است. معمولاً ساده‌سازی‌های مورد نیاز در سه سطح اعمال می‌شود که ذیلاً به آنها می‌پردازیم:

۳-۱ تقریب بورن - اوپنهاইمر

هسته‌ها بسیار سنگین‌تر و لذا کندتر از الکترون‌ها هستند. بنابراین ما می‌توانیم هسته‌ها را در مکان‌های موضعی خود بطور لحظه‌ای ساکن در نظر گرفته و فرض کنیم که الکترون‌ها در تعادل آنی با آنها هستند. به این ترتیب تنها با یک مسئله بس الکترونی مواجه خواهیم بود و هسته‌ها تنها نقش یک چشمه خارجی از بار مثبت را برای ابر الکترونی بر عهده دارند. بعد از بکار بردن این تقریب ما با یک مجموعه شامل NZ ذره منفی بر هم کنش کننده و متحرک در پتانسیل ساکن هسته‌ها روبرو هستیم. نتیجه تقریب بورن - اوپنهاইمر بر روی هامیلتونی (۳-۱) این است که چون در این تقریب هسته‌ها حرکتی ندارند، لذا انرژی جنبشی آن‌ها صفر و جمله اول حذف می‌شود. از طرفی جمله آخر نیز به یک مقدار ثابت کاهش می‌یابد و تنها جملات مربوط به انرژی جنبشی گاز الکترونی، انرژی پتانسیل ناشی از بر هم کنش الکترون - الکترون و انرژی پتانسیل الکترون‌ها در پتانسیل (خارجی) هسته‌ها باقی می‌ماند:

$$H = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{r_i}^2}{me} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (۳-۲)$$

در اینجا ذکر این نکته جالب توجه است که در تقریب بورن - اوپنهاইمر چون سیستم بس الکترونی مستقل از سیستم بس یونی است لذا بر هم کنش الکترون - فونون وجود نخواهد داشت.

۳-۲ نظریه تابعی چگالی^۱

سیستم بس الکترونی کوانتومی بدست آمده بعد از اعمال تقریب اول (بورن - اوپنهاইمر)، گرچه بسیار ساده‌تر از سیستم بس ذره‌ای قبلی شده است ولی هنوز هم حل آن مشکل است و لازم است با تقریب‌هایی به شکل ساده‌تر تبدیل گردد. یکدسته از این تقریب‌ها نظیر هارتری و هارتری فوک^۲ بر پایه استفاده از تابع موج به عنوان متغیر اساسی استوار است که برای اتم‌ها و

1-Density Functional Theory

^۲-Hartree Fock Approximation

مولکول‌ها کارایی خوبی دارند، لذا در شیمی کوانتومی بکار می‌روند. لیکن برای بلورها چندان مناسب نیستند. نوع دیگر از تقریب‌ها بر پایه استفاده از چگالی ابر الکترونی به عنوان متغیر اساسی است که نظریه تابعی چگالی اینگونه است. اگرچه از نظر تاریخی ایده استفاده از چگالی بعنوان متغیر اساسی به اوایل دهه سوم از قرن بیستم بر می‌گردد اما دو قضیه محوری نظریه تابعی چگالی، یعنی قضایای هوهنبرگ و کوهن در سال ۱۹۶۴ به اثبات رسیدند [۱].

۳-۲-۱ قضایای هوهنبرگ و کوهن

رهیافت هوهنبرگ و کوهن که برای فرمولبندی دقیق نظریه تابعی چگالی استفاده می‌شود، برای هر سیستم متشکل از ذرات بر هم کنش کننده در یک پتانسیل خارجی $V_{ext}(r)$ بکار می‌رود. نظریه تابعی چگالی بر اساس دو قضیه هوهنبرگ و کوهن استوار است.

قضیه اول: برای هر سیستم متشکل از ذرات بر همکنش کننده در پتانسیل خارجی $V_{ext}(r)$ با استفاده از چگالی حالت پایه، $V_{ext}(r)$ بصورت یکتایی مشخص می‌شود. بنابراین برطبق این قضیه می‌توان هامیلتونی یک سیستم بس الکترونی را تعیین و به دنبال آن توابع موج برای تمامی حالات (پایه و برانگیخته) مشخص ساخت. لذا تمامی خواص سیستم از طریق چگالی حالت پایه قابل استخراج هستند [۲].

قضیه دوم: برای هر سیستم بس الکترونی یک تابعی انرژی جهان شمول $E[n]$ بر حسب چگالی الکترونی $n(r)$ می‌توان بیان کرد که انرژی حالت پایه سیستم، مینیمم این تابعی است و چگالی الکترونی که این تابعی را مینیمم می‌کند چگالی حالت پایه $n_0(r)$ سیستم است. لذا بر طبق این قضیه، تابعی $E(n)$ به تنهایی برای تعیین چگالی و انرژی حالت پایه کافی است. این تابعی جهانشمول به شکل زیر است:

$$E[n] = T[n] + \int V_{ext}(r)n(r)d^3r + E_{int}[n] \quad (3-3)$$

که در آن جمله اول انرژی جنبشی، جمله دوم برهمکنش الکترون و میدان خارجی و جمله آخر برهمکنش الکترون-الکترون است. نکته ای که می‌بایست در اینجا توجه کرد آن است که این

تابعی تنها خواص حالت پایه سیستم را مشخص می‌کند و برای تعیین خواص سیستم در حالت برانگیخته بکار نمی‌رود. [۲].

۲-۲-۳ معادلات کوهن-شم^۱

معادلات کوهن و شم که در سال ۱۹۶۵ منتشر شد، نظریه تابعی چگالی را به یک ابزار عملی تبدیل کرد [۳]. کوهن و شم در واقع یک شیوه عملی برای بکارگیری تابعی چگالی ارائه دادند. در روش کوهن-شم یک دستگاه فرضی در نظر گرفته می‌شود که در آن برهمکنش الکترون-الکترون صفر است (سیستم غیر برهمکنشی) و در یک پتانسیل خارجی به گونه‌ای قرار گرفته است که چگالی حالت پایه آن با چگالی حالت پایه دستگاه واقعی یکسان است.

چگالی دستگاه فرضی را بصورت زیر می‌نویسیم:

$$\rho(r) = \sum_i |\phi_i(r)|^2 \quad (۴-۳)$$

که $\phi_i(r)$ توابع موج تک ذره ای هستند که از معادله شرودینگر پیروی می‌کنند. هامیلتونی تک ذره ای در این سیستم غیر برهم کنشی بصورت زیر است:

$$\hat{H}_{ps} \phi_i = \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_{eff}(\vec{r}_i) \right) \phi_i = (T_s + V_{eff}) \phi_i = \epsilon_i \phi_i \quad (۵-۳)$$

در رابطه فوق T_s انرژی جنبشی دستگاه غیر برهمکنشی است. همچنین پتانسیل مؤثر V_{eff} شامل دو بخش: ۱- پتانسیل ناشی از اثرات هسته ها، ۲- پتانسیل میانگین ناشی از اثرات تمام الکترون های دیگر است. اگر تابعی انرژی کل حالت پایه سیستم برهمکنشی $H[\rho] = E[\rho]$ به شکل زیر باشد:

$$E[\rho] = T[\rho] + V_{ee}[\rho] + V_{ext}[\rho] \quad (۶-۳)$$

$V_{ee}[\rho]$ را می‌توان به دو بخش برهم کنش کلاسیک هارتری $V_H[\rho]$ و بخش کوانتومی $V_{ee}[\rho] - V_H[\rho]$ تقسیم کرد، لذا داریم:

^۱ -Kohn-Shame

$$\begin{aligned}
E[\rho] &= T[\rho] + (V_{ee}[\rho] - V_H[\rho]) + V_H[\rho] + \int \rho(\vec{r}) V_{ext} d\vec{r} \\
&= T[\rho] + T_s[\rho] - T_s[\rho] + (V_{ee}[\rho] - V_H[\rho]) + V_H[\rho] + \int \rho(\vec{r}) V_{ext} d\vec{r}
\end{aligned} \quad (۷-۳)$$

حال انرژی تبادلی - همبستگی^۱ E_{xc} را بصورت زیر تعریف می کنیم:

$$T[\rho] - T_s[\rho] + (V_{ee}[\rho] - V_H[\rho]) = E_{xc}[\rho] \quad (۸-۳)$$

به این ترتیب معادله (۷-۳) را بصورت زیر می توان نوشت:

$$E[\rho] = T_s[\rho] + V_H[\rho] + \int \rho(\vec{r}) V_{ext} d\vec{r} + E_{xc}[\rho] \quad (۹-۳)$$

که در آن $V_H[\rho]$ بر همکنش هارتری و بصورت زیر است:

$$V_H[\rho] = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' \quad (۱۰-۳)$$

با جایگذاری $T_s[\rho]$ از رابطه (۵-۳)، تابعی انرژی در رابطه (۹-۳) به شکل زیر حاصل

می شود:

$$E[\rho] = \sum \varepsilon_i \int V_{eff}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} + V_H[\rho] + \int V_{ext}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} + E_{xc}[\rho] \quad (۱۱-۳)$$

حال این تابعی را تحت قید ثابت بودن تعداد ذرات نسبت به چگالی وردش می دهیم تا

حداقل آن بدست آید:

$$\delta \frac{[E - \mu(\int \rho(\vec{r}) d\vec{r} - N)]}{\delta \rho} = 0 \quad (۱۲-۳)$$

بنابراین داریم:

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + \int \frac{\rho(\vec{r}') d\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + V_{xc}(\vec{r}) + \mu \quad (۱۳-۳)$$

که μ پتانسیل شیمیایی است که می‌توان آن را صفر در نظر گرفت. در اینجا پتانسیل تبادلی - همبستگی را بصورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$V_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta(E_{xc}[\rho])}{\delta\rho(\vec{r})} \quad (۱۴-۳)$$

سپس با داشتن تابعی E_{xc} می‌توانیم V_{xc} را بدست آوریم. حال قضیه کوهن و شم را در ادامه فرمول بندی می‌کنیم:

چگالی دقیق حالت پایه $\rho(\vec{r})$ یک سیستم N الکترونی بصورت زیر است:

$$\rho(\vec{r}) = \sum \phi_i(\vec{r})^* \phi_i(\vec{r}) \quad (۱۵-۳)$$

که در آن توابع موج تک-ذره $\phi_i(\vec{r})$ پاسخ‌های مربوط به حداقل انرژی در هامیلتونی کوهن - شم هستند:

$$\hat{H}_{KS} \phi_i = \varepsilon_i \phi_i \quad (۱۶-۳)$$

باید توجه داشت که توابع موج تک ذره ای ϕ_i توابع موج الکترونی واقعی نیستند و تنها شبه ذرات فرضی را توصیف می‌کنند. البته چگالی این شبه-ذرات برابر با چگالی الکترونی واقعی است.

عملگرهای هارتری V_H و تبادلی - همبستگی V_{xc} هر دو به چگالی $\rho(\vec{r})$ که خود به ϕ_i وابسته است بستگی دارند. این بدان معناست که ما با یک مسئله خودسازگار روبرو هستیم: هامیلتونی به ϕ_i بستگی دارد حال آنکه برای بدست آوردن ϕ_i ها بایستی هامیلتونی را در اختیار داشت. در اینجا برای خود سازگار بودن به یک شیوه تکرار شونده نیاز است. ابتدا چگالی اولیه ρ_0 حدس زده می‌شود و هامیلتونی H_{KS1} توسط آن ساخته می‌شود. سپس ویژه مقادیر آن بدست می‌آید و از نتایج بصورت مجموعه‌ای از ϕ_1 ها برای بدست آوردن چگالی جدید ρ_1 استفاده می‌شود. اغلب اوقات ρ_0 متفاوت از ρ_1 است. حال از ρ_1 برای ساخت H_{KS2} استفاده می‌شود که از آن نیز ϕ_2 ها نتیجه می‌شوند و به همین ترتیب روند ادامه می‌یابد تا سیستم همگرا شود. در نهایت

که همگرایی حاصل شد ϕ_f یک H_{ksf} را تولید می‌کند که این هامیلتونی مجدداً همان ϕ_f را نتیجه می‌دهد و لذا این چگالی نهایی سازگار با هامیلتونی است.

۳-۲-۳ تابعی تبادلی - همبستگی^۱

در هامیلتونی کوهن - شم توصیف شده در قسمت قبل بجز تقریب بورن - اوپنهاইمر هیچ تقریب دیگری بکار برده نشده است. ولی تابعی تبادلی - همبستگی هنوز برای ما ناشناخته است. در این مرحله نیز تقریبهایی برای تعیین مقدار انرژی تبادلی - همبستگی وارد نظریه می‌شوند. یکی از تقریبها که بسیار بکار می‌رود تقریب چگالی موضعی (LDA)^۲ است که در آن تابعی تبادلی - همبستگی به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$E_{xc}^{LDA} = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}^{\text{hom o}}(\rho(\vec{r})) d\vec{r} \quad (۱۷-۳)$$

تابع (نه تابعی) $\varepsilon_{xc}^{\text{hom o}}$ انرژی تبادلی - همبستگی واحد حجم برای گاز الکترونی همگن است که با روشهای عددی مشخص می‌شود. این بدین معنی است که انرژی تبادلی - همبستگی ناشی از چگالی $\rho(\vec{r})$ می‌تواند با تقسیم ماده به حجم های کوچک با یک چگالی ثابت مشخص شود. لذا انتظار می‌رود که این تقریب برای سیستم های با چگالی تقریباً یکنواخت به خوبی کار کند. این تقریب برای خیلی از سیستم های دیگر نیز بکار رفته است و جوابهای قابل قبولی حاصل شده است.

مرحله بعدی که برای بهبود تقریب چگالی موضعی بکار می‌رود آن است که سهم تبادلی همبستگی هر یک از حجم های کوچک نه فقط به چگالی موضعی وابسته بلکه علاوه بر آن به گرادیان چگالی نیز بستگی داشته باشد. این تقریب را تقریب گرادیان تعمیم یافته GGA^3 می‌نامند. در اکثر موارد تقریب GGA نسبت به LDA به جوابهای دقیقتری منجر می‌شود البته ملاحظات نیز در مورد آن وجود دارد که در ادامه توضیح داده می‌شود:

^۱-Exchange- Correlation Functional

1-Local Density Approximation

^۳-Generalized Gradient Approximation

اول اینکه در تقریب LDA بیان یکتایی برای ε_{xc} وجود دارد و به همین دلیل تنها یک تنوع تقریب LDA موجود است در حالی که برای وارد کردن گرادیان چگالی در محاسبات آزادی عمل بیشتری وجود دارد. لذا چندین نسخه متفاوت از تابعی GGA وجود دارد. نکته دیگر آن است که برای استخراج برخی از تابعی های GGA ابتدا یک تابعی با پارامترهای آزاد انتخاب می شود و این پارامتر از طریق برازش با مجموعه ای از داده های تجربی تعیین می شود. بنابراین برخی از انواع GGA ها حاصل یک محاسبه ابتدا به ساکن نیستند چون در محاسبه تابعی آنها از برخی اطلاعات تجربی استفاده شده است.

۳-۳ حل معادلات

با بکاربردن تابعی چگالی با مجموعه نامحدودی از معادلات تک-ذره بصورت زیر روبرو می شویم:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_m^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' + V_x + V_{ext}\right)\phi_m(\vec{r}) = \varepsilon_m \phi_m(\vec{r}) \quad (3-18)$$

که در آن ϕ_m ها اربیتال های تک ذره هستند.

در اغلب روشها، برای حل این معادلات می بایست ضرایب c_p^m موردنیاز برای بسط ϕ_m بر حسب مجموعه پایه های ϕ_p^b را بیابیم.

$$\phi_m = \sum c_p^m \phi_p^b \quad (32-19)$$

بسط کامل توابع موج ϕ_m به یک مجموعه توابع پایه نامحدود نیاز دارد لذا p در رابطه اخیر بی نهایت است. اما در عمل ما با یک مجموعه محدودی از توابع پایه کار می کنیم. یک چنین پایه محدودی هرگز نمی تواند ϕ_m را بطور دقیق توصیف کند، اما می توان تلاش کرد تا پایه ها به گونه ای انتخاب شوند که تابعی نزدیک به ϕ_m را تولید کنند. بنابراین در این مرحله تلاش می شود که تعداد توابع پایه به اندازه ای بزرگ انتخاب شود تا تقریب ناشی از محدود بودن تعداد آنها اثری بر فیزیک مسئله نداشته باشد.

۳-۳-۱ انتخاب امواج تخت به عنوان توابع پایه

امواج تخت از جمله توابع ساده ای هستند که هر ویژه تابع ϕ_k^n از یک هامیلتونی تناوبی را می توان برحسب یک مجموعه نامتناهی از این امواج تخت دقیقاً بسط داد.

$$\psi_k^n(\vec{r}) = \sum C_{n,k} e^{i(\vec{K}+\vec{k}) \cdot \vec{r}} \quad (۲۰-۳)$$

که در رابطه فوق $\vec{K}$ بردار شبکه وارون است. این معادله با فرمولبندی کلی (۲-۱۸) قابل مقایسه است. در اینجا $(n, \vec{k})$ به جای m و $\vec{k} + \vec{K}$ بکار برده شده است. همچنین تابع پایه بصورت زیر است:

$$\phi_{\vec{K}}^k(\vec{r}) = |\vec{K}\rangle = e^{i(\vec{K}+\vec{k}) \cdot \vec{r}} \quad (۲۱-۳)$$

این مجموعه پایه به k وابسته است.

همه ویژه حالات ψ_k^n که دارای k یکسان، ولی n متفاوت هستند، توسط یک مجموعه پایه با مقدار معینی از k بسط داده می شوند. برای ویژه حالات با k متفاوت یک مجموعه پایه جدید نیاز است. در عمل ما می توانیم با یک مجموعه پایه نامتناهی کار کنیم، لذا می بایست آن را به گونه ای محدود کنیم.

برای امواج تخت این کار به آسانی توسط محدود کردن مجموعه پایه به $\vec{K}$ هایی با $K \leq K_{\max}$ صورت می گیرد که این متناظر است با انتخاب یک کره به شعاع $K_{\max}$ که مرکز آن در مبدا فضای وارون قرار دارد. تمامی بردارهای شبکه وارون که در داخل این کره قرار دارند در مجموعه پایه بکار می روند. اغلب به جای ذکر $K_{\max}$ انرژی جنبشی الکترون آزادی را که بردار موج آن $K_{\max}$ است و انرژی قطع نامیده می شود بیان می کنند:

$$E_{cut} = \frac{\hbar^2 K_{\max}^2}{2m_e} \quad (۲۲-۳)$$

این نکته قابل ذکر است که امواج تختی که برای بسط توابع موج بکار می روند متعامد

هستند:

$$(\vec{K}_r | \vec{K}_l) = \int e^{i(\vec{K}_r - \vec{K}_l) \cdot \vec{r}} d^3 r = \delta(\vec{K}_r - \vec{K}_l) \quad (23-3)$$

۳-۴- روش شبه پتانسیل

برای تولید شبه پتانسیل ابتدا الکترونهاى بلور را به دو دسته الکترونهاى مغزی و والانس و فضای اطراف هسته را نیز به دو ناحیه مغزی و بین جایگاهی تقسیم می‌کنند. منظور از ناحیه مغزی مناطقی اطراف هسته است که با کره های فرضی محدود می‌شود و ناحیه بین جایگاهی مناطق خارج از این کره ها است. توابع موج الکترونهاى مغزی به ناحیه مغزی محدود هستند در حالی که توابع موج الکترونهاى والانس هم در ناحیه مغزی و هم در ناحیه بین جایگاهی گسترش دارند. ضمناً توابع موج قرار گرفته در ناحیه مغزی تغییرات قابل ملاحظه ای دارند. این بدین دلیل است که انرژی پتانسیل الکترونها در نواحی مغزی بسیار کم (مقادیر منفی بزرگ) و در نتیجه انرژی جنبشی آنها زیاد است. چون انرژی جنبشی متناسب با مشتق دوم تابع موج است لذا تغییرات تابع موج نیز زیاد است و بنابراین برای بسط تابع موج بر حسب امواج تخت به تعداد زیادی موج تخت نیاز است که حجم محاسبات را زیاد میکند. از طرفی ما می دانیم که خواص فیزیکی یک بلور به الکترونهاى والانس اتم در نواحی دور از هسته بسیار بیشتر از الکترونهاى مغزی وابسته است. بنابراین شبه پتانسیلها به گونه‌ای هستند که: (۱) از وجود الکترونهاى مغزی (الکترونهاى که تابع موج آنها محدود به ناحیه مغزی است) صرفنظر می‌شود. (۲) از نوسانات سریع تابع موج الکترون های والانس در نزدیکی هسته که به مجموعه پایه بسیار بزرگ و پیچیده ای نیاز دارد^۱ جلوگیری می‌کنند.

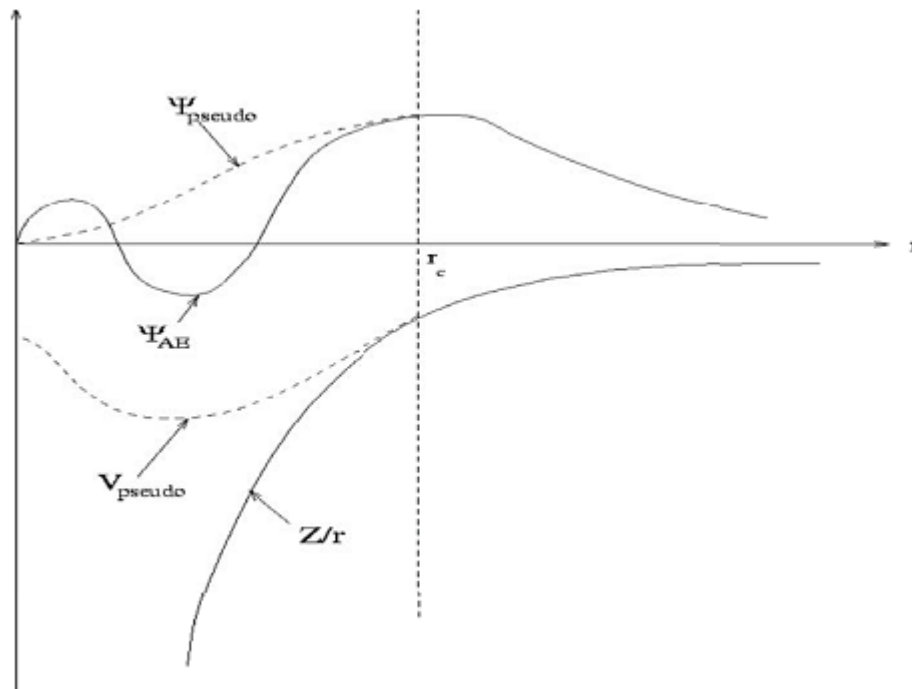
رهیافت شبه پتانسیل به سال ۱۹۴۰ یعنی زمانی که هرینگ^۱ روش موج تخت متعامد را ارائه کرد^۲ بر می‌گردد. [۴]. بعدها فیلیپ^۲ و آنتونیک^۳ شرط تعامد (که لزوم رعایت این شرط باعث تغییرات زیاد تابع موج در ناحیه نزدیک هسته می‌شود) را توسط یک پتانسیل مؤثر جایگزین کردند که در آن اصل طرد توسط الکترونهاى مغزی رعایت می‌شد و از این طریق جاذبه

^۱ - Herring

^۲ - Phillips

^۳ - Antoncik

الکتروستاتیکی هسته ها جبران می‌شد [۶،۵]. نمونه ای از پتانسیل یونی شبه پتانسیل، تابع موج والانس و شبه تابع موج متناظر با آن در شکل زیر آمده است:



شکل ۳-۱- نمایشی از شبه پتانسیل و شبه تابع موج در مقایسه با پتانسیل و تابع موج اصلی الکترونها [5].

شبه پتانسیل هایی که تولید می‌شوند ضمن اینکه می‌بایست حجم محاسبات را کاهش دهند، یک مجموعه از شرایط را نیز می‌بایست برآورده کنند که این شرایط بعد ذکر شده‌اند.

۳-۴-۱ شرایط لازم برای یک شبه پتانسیل خوب

برای آنکه یک شبه پتانسیل از کیفیت قابل قبولی برخوردار باشد لازم است مجموعه ویژگی‌های زیر را دارا باشد [۲/۷-۸]:

۱- ویژه مقادیر انرژی ناشی از بکارگیری شبه پتانسیل با ویژه مقادیر انرژی واقعی الکترونها یکسان باشد.

۲- شبه تابع موج و شبه پتانسیل در خارج ناحیه مغزی بر تابع موج و پتانسیل واقعی الکترون منطبق شوند.

۳- مقدار بار الکتریکی ناشی از شبه پتانسیل با مقدار بار ناشی از پتانسیل واقعی در ناحیه درون مغزی برابر باشند (شرط پایستگی بار) یعنی:

$$4\pi \int |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 4\pi \int |\psi_l^{ps}(\vec{r})|^2 d\vec{r} \quad (24-3)$$

که در آن $\psi_l(\vec{r})$ و $\psi_l^{ps}(\vec{r})$ تابع موج واقعی و شبه تابع موج با اندازه حرکت زاویه 1 هستند.

۴- پراش امواج که ناشی از قسمت مغزی است برای پتانسیل و شبه پتانسیل یکسان باشد. به عبارتی شبه پتانسیل خواص مربوط به پراکندگی را نیز درست پیش‌بینی کند. برای این منظور می‌بایست تغییر فاز امواج ناشی از پتانسیل و شبه پتانسیل یکسان باشند. از طرفی تغییر فاز در اثر وجود سد پتانسیل به مشتق لگاریتمی تابع موج بستگی دارد لذا لازم است که شرط زیر برقرار باشد:

$$\left. \frac{d \ln \psi_l(r, E)}{dr} \right|_{R_c} = \left. \frac{d \ln \psi_l^{ps}(r, E)}{dr} \right|_{R_c} \quad (25-3)$$

تغییر فاز ایجاد شده توسط قسمت مغزه برای تابع موج والانس با اندازه حرکت‌های زاویه‌ای مختلف، متفاوت است و بنابراین پراکندگی حاصل از شبه پتانسیل می‌بایست وابسته به اندازه حرکت زاویه ای باشد.

۵- مشتق اول مشتق لگاریتمی شبه تابع موج و تابع موج نسبت به انرژی در شعاع R_c برابر باشند:

$$\frac{d}{dE} \left(\frac{d \ln \psi_l(r, E)}{dr} \right) \Big|_{R_c} = \frac{d}{dE} \left(\frac{d \ln \psi_l^{ps}(r, E)}{dr} \right) \Big|_{R_c} \quad (26-3)$$

۳-۴-۲ روش تولید شبه پتانسیل

به منظور ساخت یک شبه پتانسیل^۱ اولیه ابتدا از محاسبه تابعی چگالی تمام الکترونی برای اتم منزوی شروع و پتانسیل اتمی و توابع موج $\phi_{l,m}(\vec{r})$ را بدست می‌آورند که بعلت تقارن کروی، قسمت شعاعی توابع موج برای اعداد کوانتومی مغناطیسی مختلف (m ها) یکسان است.

در مرحله بعد به ازای هر تابع موج والانس شبه تابع موج نظیر آن $|\phi_{l,m}\rangle$ ساخته میشود که این کار با روشهای مختلف امکان پذیر است [۹-۱۲]. قبل از انجام این مرحله بایستی توابع موج والانس را مشخص و برای این منظور تقسیم بندی مغزی- والانس لازم است. تفاوت کیفی الکترونهاى مغزی و والانس در آن است که الکترونهاى والانس در تشکیل پیوند سهم اصلی را بر عهده دارند حال آنکه نقش الکترونهاى مغزی در تشکیل پیوند قابل اغماض است. البته گاهی اوقات به ویژه در مورد فلزات واسطه، فلزات قلیایی سنگین و برخی نیم رساناهای III-V و II-VI اینگونه تقسیم بندی به راحتی امکان پذیر نیست.

برای ساخت شبه پتانسیل های اولیه دو روش متعارف هستند:

۱- شبه پتانسیل هایی که در محاسبه آنها با به کاربردن پتانسیل و تابع موج واقعی اتم منزوی ابتدا شبه پتانسیل و سپس شبه تابع موج تولید می شود، مثل روش BHS [۱۳].

۲- شبه پتانسیلهایی که با به کاربردن پتانسیل و تابع موج اتم منزوی ابتدا شبه تابع موج و سپس با وارون کردن معادله شرودینگر شبه پتانسیل تولید می شود، مثل روش کرکر^۱ [۱۰].

در اینجا ما به توضیح روش دوم می پردازیم:

(۲۷-۳)

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + u_l(\vec{r}) - \varepsilon_{l,m} \right] \phi_{l,m}(\vec{r}) = 0 \Rightarrow u_l(\vec{r}) = \varepsilon_{l,m} + \frac{1}{\phi_{l,m}} \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \phi_{l,m}(\vec{r})$$

این پتانسیل که تقارن کروی نیز دارد برای اندازه حرکت های زاویه ای مختلف، متفاوت است. ضمناً این پتانسیل با پتانسیل اتم واقع در بلور نیز متفاوت است و نمی توان آن را به همین صورت برای محاسبات بلوری مورد استفاده قرار داد و می بایست جمله ای را که باعث این اختلاف می شود حذف شود. از آنجا که اختلاف میان پتانسیل یک اتم منزوی و پتانسیل اتم واقع در بلور ناشی از تفاوت در توزیع ابرالکترونی آنها است. بنابراین پتانسیل های تبدالی- همبستگی و هارتری به واسطه وابستگی آنها به چگالی ابر الکترونی مقادیر متفاوتی در دو محیط خواهند داشت. اما در

^۱-Kerker

مرحله بعد می‌بایست این دو جمله را از پتانسیل بدست آمده برای اتم منزوی کم و در زمان بکارگیری در درون بلور این عبارت (منتهی به ازای چگالی ابر الکترونی در بلور) به آن افزوده شود.

اگر شبه‌ها میل‌تونی را بصورت زیر تعریف کنیم:

$$H_l = \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + v_l^{ps}(\vec{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r \frac{\tilde{n}(\vec{r}) + \tilde{z}(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \mu_{xc}([n(\vec{r})], \vec{r}) \quad (28-3)$$

(29-3)

$$v_l^{ps}(\vec{r}) = u_l(\vec{r}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \frac{\tilde{n}(\vec{r}') + \tilde{z}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \mu_{xc}([n(\vec{r})], \vec{r})$$

این عمل را واپوشانی شبه پتانسیل می‌گویند. $\tilde{z}(\vec{r})$ چگالی بار هسته‌ها و الکترونهای مغزی است که همان طور که در شرایط لازم برای تولید شبه پتانسیل ذکر شد می‌بایست با پتانسیل تغییر نکند. شبه چگالی $\tilde{n}(\vec{r}) = \sum_n f_n \tilde{\psi}_n^*(\vec{r}) \tilde{\psi}_n(\vec{r})$ توسط شبه توابع موج بدست می‌آید.

نکته ای که در اینجا می‌بایست مدنظر قرارداد این است که تابعی‌هایی که برای جمله تبدالی-همبستگی در تولید شبه پتانسیل مورد استفاده قرار می‌گیرند، می‌بایست از همان نوعی باشند که بعداً قرار است در محاسبات بلوری مورد استفاده قرار گیرند. برای مثال، استفاده از تابعی GGA در محاسبات بلوری با یک شبه پتانسیل LDA مناسب نیست. برای همین است که اکثر فایل‌های مربوط به شبه پتانسیل‌ها اطلاعاتی درمورد نظریه تابعی چگالی مورد استفاده در تولید شبه پتانسیل دارند. شکل کلی اغلب شبه پتانسیل‌ها بصورت زیر است:

$$V = V_{loc} + V_{NL} = V_{loc} + \sum_l |lm\rangle V_l \langle lm| \quad (30-3)$$

که در اینجا V_{loc} پتانسیل موضعی است. همچنین $|lm\rangle$ ، هارمونیکهای کروی V_l شبه پتانسیل مربوط به اندازه حرکت زاویه ای l است. وقتی این عملگر روی تابع موج الکترونی عمل می‌کند. آن را به هارمونیکهای کروی تفکیک می‌کند که هر یک از آنها در شبه پتانسیل مربوط به V_l ضرب می‌شوند. شبه پتانسیلی که برای تابع موج با اندازه حرکت‌های زاویه ای مختلف از یک پتانسیل یکسان استفاده می‌کند شبه پتانسیل موضعی نامیده می‌شود.

البته در مجموع پراکندگی از ناحیه مغزی، توسط یک پتانسیل غیرموضعی که در آن از پتانسیلهای مختلفی برای هر یک از مولفه های اندازه حرکت زاویه ای تابع موج استفاده می کنند، بهتر توصیف می شود. تاکنون گروه های زیادی شبه پتانسیل های غیرموضعی از این نوع را که بسیار خوب نیز کار می کنند. تولید کرده اند. [۱۰'۹۱۶-۱۳].

۳-۴-۳ شبه پتانسیل های پایسته-بهنجار^۱ و فوق نرم^۲

راههای مختلفی برای تولید شبه پتانسیل وجود دارد. عمده شبه پتانسیلها در دو دسته شبه پتانسیلهای پایسته بهنجار و فوق العاده نرم قرار می گیرند. برای محاسبه انرژی تبادل-همبستگی با دقت بالا لازم است که تابع موج واقعی و شبه تابع موج در بیرون خانه مغزه یکسان باشند و لذا هر دو تابع موج، چگالی بار یکسانی ایجاد می کنند. تولید یک شبه پتانسیل که در آن شرط

$$\int_0^{r_c} \psi_{AE}^*(\vec{r}) \psi_{AE}(\vec{r}) d\vec{r} = \int_0^{r_c} \psi_{ps}^*(\vec{r}) \psi_{ps}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3-31)$$

رعایت شده باشد (ψ_{AE} تابع موج تمام الکترونی و ψ_{ps} شبه تاج موج است)، تضمین می کند که تابع موج واقعی و شبه تابع موج در خارج ناحیه هسته معادل هستند. در عمل این شرط با استفاده از یک شبه پتانسیل غیرموضعی که در قسمت قبل توضیح داده بدست می آید. این کار بهترین روش برای توصیف خواص پراکندگی از هسته یونی است.

شبه پتانسیل هایی از این نوع، شبه پتانسیلهای پایسته بهنجار نامیده می شوند و بعلاوه توانایی بالایی که در توصیف خواص پراکندگی از یک یون در محیطهای یونی مختلف دارند، انتقال پذیری بالایی دارند.

گروه جدیدی از شبه پتانسیل ها هستند که شبه پتانسیلهای فوق نرم نامیده می شوند و توسط وندربیت^۳ در سال ۱۹۹۰ ابداع شده اند [۱۷]. همانگونه که از نام این دسته از شبه پتانسیلها مشخص است، شبه پتانسیل های فوق نرم از شبه پتانسیل هموارتری استفاده می کنند و لذا امواج

^۱-Norm-Conserving

^۲-Ultra Soft

^۳-Vanderbit

تخت بسیار کمتری برای بسط لازم است ضمن اینکه دقت نیز حفظ می‌شود. برای رسیدن به این هدف، قید پایسته-بهنجار در ساخت شبه پتانسیل تعدیل شده و لذا ما انعطاف پذیری بیشتری در ساخت شبه توابع موج داریم. در این مدل چگالی کل والانس $n(r)$ به دو قسمت سخت و نرم تقسیم می‌شود:

$$n(r) = \sum [|\phi_n(\vec{r})|^2 + \sum Q_{ij}(\vec{r}) \langle \phi_n | \beta_j \rangle \langle \beta_j | \phi_n \rangle] \quad (32-3)$$

β تابع تصویرگر^۱ است که به موقعیت اتمها بستگی دارد و توابع افزایشی $Q_{ij}(\vec{r})$ نیز بصورت زیر مشخص می‌شوند:

$$Q_{ij}(\vec{r}) = \psi_i^*(\vec{r})\psi_j(\vec{r}) - \phi_i^*\phi_j(\vec{r}) \quad (33-3)$$

$\psi(r)$ تابع موج تمام الکترونی و $\phi_i(r)$ تابع موج فوق نرم است که بدون ارضای شرط نرم پایستگی (یعنی $Q_{ij}(r) = 0$) ساخته شده است. همچنین شرط راست هنجاری به شکل تعمیم یافته زیر صورت گرفته است:

$$\langle \phi_i | S(R_I) | \phi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (34-3)$$

که $S(R_I)$ به موقعیت یون ها بستگی دارد:

$$S = 1 + \sum q_{ij} | \beta_j \rangle \langle \beta_i | \quad (35-3)$$

امتیاز بسیار مهمی که در شبه پتانسیلهای فوق نرم وجود دارد این است که انرژی قطع مورد نیاز برای بسط توابع موج تقریباً نصف انرژی قطعی است که در شبه پتانسیل های پایسته بهنجار استفاده می‌شود و لذا تعداد امواج تخت مورد نیاز برای بسط تقریباً $\frac{1}{3}$ کمتر است.

شبه پتانسیلهایی که در انجام این پایان نامه مورد استفاده قرار گرفته‌اند از نوع شبه پتانسیلهای فوق نرم هستند که با فرمت مناسب برای استفاده در کد *Esspresso* بر روی شبکه قرار گرفته‌اند.

^۱-Projector Function

قسمت اول هر یک از این شبه پتانسیل ها حاوی اطلاعاتی در مورد نحوه ساخته شدن و نوع آنها است که برای مثال در پیوست الف اطلاعات مربوط به یکی از شبه پتانسیل های اتم C , Si , Mn که بکار گرفته شده 'آمده است.

توضیح هر یک از بخشهای شماره گذاری شده در پیوست الف که حاوی اطلاعاتی در مورد شبه پتانسیل تولید شده هستند در زیر آمده است:

۱- در این قسمت تصحیحات نسبیتی اعمال شده در معادله کوهن-شم اتم موردنظر مشخص شده است که می تواند هر یک از ۳ حالت زیر باشد:

الف- غیرنسبیتی: در این حالت هامیلتونی کوهن-شم بصورت غیرنسبیتی حل می شود:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} + V(r) - \varepsilon\right)\psi(r) = 0 \quad (3-36)$$

ب- نسبیتی اسکالر: در این حالت هامیلتونی کوهن-شم علاوه بر جملات بالا شامل دو جمله دیگر نیز می شود:

$$-\frac{p^2}{4m^2c^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r} \quad (3-37)$$

ج- نسبیتی کامل: در این حالت علاوه بر تصحیح نسبیتی، معادله کوهن-شم تصحیح اسپین-مدار را نیز شامل می شود:

$$+ \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} (\vec{L} \cdot \vec{S}) \quad (3-38)$$

در صورتی که هر یک از تصحیحات بالا در تولید شبه پتانسیل اعمال شده باشد، آنگاه برای حل معادله شرودینگر سیستم بس ذره ای می بایست همان نوع تصحیح نسبیتی مورد استفاده قرار گیرد.

۲- در این خط شعاع قطع پتانسیل موضعی آمده است. همانطور که در قسمتهای قبلی ذکر شد، پتانسیل موضعی برای تمامی مولفه های اندازه حرکت زاویه ای یکسان است. بنابراین تنها یک شعاع قطع که در آن ناحیه مغزی را از ناحیه والانس جدا می کند، مشخص شده است.

۳- در این بخش پیکربندی شبه حالتی که شبه پتانسیل برایشان تولید می شود آمده است:

ستون اول (nl): شناسه شبه حالت l ام .

ستون دوم (pn): عدد کوانتومی اصلی شبه حالت مربوطه .

ستون سوم (l): عدد کوانتومی اندازه حرکت زاویه ای شبه حالت مربوطه .

ستون چهارم (OCC): پیکربندی و عدد اشغال هر یک از شبه حالتها را نشان می دهد که شخص می تواند هر پیکربندی را انتخاب کند به شرطی که از پیکربندی بلور یا مولکول دور نباشد. نکته: در انتخاب پیکربندی، یک پیکربندی کاملاً خالی ($s^0 p^0 d^0$) و حتی یک پیکربندی با عدد اشغال کسری نیز قابل قبول است. حتی اگر عدد اشغال کسری متناظر با یک حالت فیزیکی نباشد، با یک موجود ریاضی معین متناظر است.

ستون پنجم (R_{cut}): شعاع قطع نرم - پایسته (برحسب Bohr). در شبه پتانسیل های نرم - پایسته برای $x > R$ شرط $\langle \psi_i^{ps} | \psi_i^{ps} \rangle = \langle \psi_i | \psi_i \rangle$ می بایست برقرار باشد.

ستون ششم (R_{cut}^{US}): شعاع قطع برای پتانسیل فوق نرم (برحسب Bohr) در شبه پتانسیل های فوق - نرم شرط پایسته بهنجار حذف شده است ولی برای هر یک از شبه حالات یک شعاع قطع مشخص می شود که در آن توابع موج واقعی و شبه توابع موج بر یکدیگر منطبق میشوند و حداقل مشتق اول آنها در این نقطه پیوسته است.

نکته: شعاع r_{cl} می بایست به گونه ای انتخاب می شود که بیرون از آخرین قله موجود در تابع موج واقعی قرار بگیرد. هرچه r_c بزرگتر باشد پتانسیل نرم تر است و امواج تخت کمتری برای بسط مورد نیاز است، در عوض انتقال پذیری کاهش می یابد .

همچنین بهتر است که r_{cl} مربوط به شبه حالات مختلف خیلی با یکدیگر تفاوت نداشته باشند .

ستون هفتم (E_{pseu}): انرژی شبه حالت ها (Ry)

۴- شماره نسخه شبه پتانسیل حاضر .

۵- نام عنصری که شبه پتانسیل برای آن تولید شده است.

۶- نوع شبه پتانسیل، که می‌تواند هر یک از موارد الف (NC: نرم پایسته و یا ب (US: فوق نرم باشد.

۷- این خط مشخص می‌کند که در تولید شبه پتانسیل مذکور تصحیح غیرخطی مغزی (NLCC)^۱ بکار برده شده (T) و یا نشده (F) است [۱۸/۱۹].

تصحیح غیرخطی هسته بعثت غیرخطی بودن پتانسیل تبادلی - همبستگی اعمال می‌شود. در تولید شبه پتانسیل ابتدا یک شبه پتانسیل با شبه توابع موج وشبه انرژی های دلخواه تولید می‌شود. این شبه پتانسیل شامل شبه پتانسیل عریان^۲ و شبه پتانسیل استتار^۳ می‌شود، اما از آنجا که شبه پتانسیل استتار عمدتاً ناشی از الکترونهای ظرفیت است و از طرفی تغییر در چگالی بار الکترونی اتم منزوی نسبت به اتم واقع در بلور عمدتاً ناشی از الکترونهای ظرفیت است، لذا می‌بایست این سهم از شبه پتانسیل تولید شده حذف شود. مشکلی که در حذف این جمله وجود دارد این است که پتانسیل تبادلی - همبستگی با چگالی بار، رابطه خطی ندارد و این باعث ایجاد خطا در محاسبات می‌شود.

با اعمال تصحیح غیرخطی هسته، چگالی بار مغزی هموار می‌شود و سپس هم در مرحله واپوشانی و هم در مرحله استفاده از شبه پتانسیل تولید شده، با چگالی بار والانس جمع زده می‌شود [۲۰].

کار هموار کردن چگالی بار مغزی از طریق جایگزینی بار واقعی با بار ساختگی و هموارتر (برای $r < r_{cc}$ که در آن $\rho_v(r_{cc}) = a\rho_c(r_{cc})$ و $r_{cc} \sim 0.5a$) صورت می‌گیرد. (چگالی بار مغزی و ρ_v چگالی بار والانس است) در حقیقت اثر غیرخطی بودن تنها برای ناحیه هایی که $\rho_v(r) \approx \rho_c(r)$ است مهم است. [۲۱].

^۱-Nonlinear Core Correction

^۲-Bare Potential

^۳-Screening Potential

نکته: هر چه a کوچکتر باشد r_{cc} کوچکتر و در نتیجه دقت تصحیح غیرخطی هسته بیشتر است، در عوض بار مغزی سخت تر بوده و تغییرات بیشتری دارد.

۸- نوع تابعی تبادلی - همبستگی بکار برده شده در تولید شبه پتانسیل .

۹- تعداد الکترونهاى والانس (باتوجه به پیکربندی انتخاب شده برای تولید شبه پتانسیل) .

۱۰- انرژی کل سیستم .

۱۱- به ترتیب انرژی جنبشی قطع (Ry) برای توابع موج و انرژی جنبشی قطع (Ry) برای چگالی بار و پتانسیل را نشان می‌دهد. اگر هیچ انرژی قطعی پیشنهاد نشده باشد عد صفر درج می‌شود.

۱۲- عدد کوانتومی بزرگترین مولفه اندازه حرکت زاویه ای که در پیکربندی انتخاب شده است.

۱۳- تعداد نقاط در ناحیه کاهش یافته از منطقه اول بریلوئن.

۱۴- به ترتیب تعداد توابع موج که شبه پتانسیل برای آنها تولید شده و تعداد تصویرگرها در رابطه (۲-۳۱) را بیان می‌کند.

۱۵- در این بخش نیز مجدداً پیکربندی توابع موجی که شبه پتانسیل برایشان تولید می‌شود شامل شناسه شبه حالت، عدد کوانتومی اصلی و عدد اشغال آمده است.

۳-۴-۴ انتخاب شبه پتانسیل

همانطور که اشاره شد، در انتخاب شبه پتانسیل می‌بایست به این نکته توجه داشت که شبه پتانسیلهای بکار رفته برای اتمهای یک ترکیب دارای تقریب یکسانی در جمله تبادلی همبستگی (LDA) یا (GGA) باشند. از طرفی در صورت وجود انواع یکسانی از شبه پتانسیل ها (فوق نرم، نرم پایسته، ...) برای اتمهای موجود در ترکیب، حتی الامکان از شبه پتانسیل های مشابه استفاده شود. یک معیار برای انتخاب شبه پتانسیل مناسب این است که خواص فیزیکی محاسبه شده بر خواص تجربی منطبق باشد. ماخذ شبه پتانسیل های بکار رفته در این پروژه، پایگاه اینترنتی،

PWscf^۱ است در صورتی که شبه پتانسیل ها از سایر پایگاه های موجود انتخاب شوند می بایست به فرمت مناسب (UPF) برای کد Espresso تبدیل شوند. ما برای انجام محاسباتمان از شبه پتانسیل های فوق نرم که با تقریب گرادیان تعمیم یافته تولید شده اند استفاده کرده ایم.

منابع

- [1] H. Hirohata , H. Kurebsyashi , S. Oksmurs , Appl. Phys. 97, 103714 ,2005,
- [2] R. M. Matrin ,”Electronic structure:basic theory and practical methods”
,Cambridge University press , Cambridge (UK) , 2004 .
- [3] W. Kohn , L. Sham, J. Phys. Rev , 140 (4A) , 1133, 1965.
- [4] C. Herring , Phys. Rev , 57, 1169 , 1940.
- [5] J. C. Philips , L. Kleinman , Phys. Rev , 116 , .287 , 1959.
- [6] E. Antonic , J. Phys. Chem. Solids , 10 , 314 , 1959.

^۱ -www.pwscf.org

- [7] M. C. Payne , M. P. Teter , D. C. Allan , T. A. Arias , J. D. Joannopoulos , J. Mod. Phys , 64 , 1045, 1992.
- [8] D. J. Singh , "PlaneWaves Pseudopotentials and the LAPW Method" , Naval Research laboratory,, Aarhus University, Washington.
- [9] G. B. Bachelet , D. R. Hamann , M. Schluter , Phys. Rev . B , 47 , 4174 , 1993.
G. P. Kerker , J. Phys. C , 13 , L189, 1980. [10]
- [11] J. S. Lin , A. Qteish , M. C. Payne , V. heine , Phys. Rev. B , 47 , 4174 , 1993.
- [12] N. Troullier, J. L. Martins , Phys. Rev. B, 43 , 1993 , 1991.
- [13] C. Chiang , D. R. Hamman , M. Schluter , Phys. Rev. Lett , 43 , 1494 , 1979 .
- [14] A. Redondo , W. A. Goddard , T. C. McGill , Phys. Rev. B, 15 , 5038 , 1977.
- [15] A. Zunger , M. L. Cohen , Pheys. Rev. B, 20, 482 , 1979.
- [16] E. L. Shirley , D. C. Alaan , R. M. Martin , Phys. Rev. B, 40 , 3652 , 1989.
- [17] D. Vanderbilt , Phys. Rev. B, 41 , 7892 , 1990 .
- [18] J. Louie , S. Froyen , M. L. Cohen , Phys. Rev. B, 26 , 1739 , 1982.
- [19] J. Hebenstreit , M. Heineman , M. Scheffler , Phys. Rev. Lett , 67, 1031 , 1991.
- [20] P. Giannozzi , "Notes on pseudopotential generation" URL
<http://www.sns.it/giannozz>.
- [21] K. A. Kilian , Victora. R. H , J. Appl. Phys , 87 , 7064 , 2000.

فصل چهارم

بررسی ساختاری نیمرسانای خالص β -SiC

۱-۴ معرفی نرم افزار محاسباتی PWscf

۲-۴ بهینه سازی پارامترهای محاسباتی

۳-۴ بررسی برخی ویژگیهای β -SiC

۴-۴ خلاصه نتایج

فصل چهارم

بررسی ساختاری نیمرسانای خالص β -SiC

مقدمه

در مقایسه با مطالعات گسترده روی نیمرساناهای مغناطیسی رقیق، مطالعات بسیار کمتری روی رفتار DMS های بر پایه SiC شده است. همانطور که در فصل دوم ذکر شد در تمام ساختارهای SiC پیوند بین Si و C بصورت چهاروجهی است که از بین آنها SiC مکعبی با ساختار zinc-blend که بصورت β -SiC نشان داده می شود را برای بررسی انتخاب کرده ایم. اخیراً β -SiC به دلیل گاف نواری عریض و غیر مستقیم ($2/39\text{eV}$) ، خواص گذار عالی و قابلیت آلیس خوب ، در قلمرو میکروالکترونیک و اپتوالکترونیک در ایزومرهای توان بالا، فرکانس بالا و دما بالا بسیار مورد استفاده قرار گرفته است [۱].

در این فصل به بررسی خواص الکترونی و ساختار نواری نیمرسانای β -SiC می پردازیم و نتایج حاصل را با داده های تجربی و نتایج نظری دیگران مقایسه خواهیم کرد. خواهیم دید که این ماده بطور قابل قبولی قابلیت آلیس با عناصر مغناطیسی را داشته و در نتیجه قابلیت استفاده به عنوان یک نیمرسانای مغناطیسی رقیق را دارد و بنابراین می تواند در صنعت اسپینترونیک نیز مورد استفاده قرار گیرد . با توجه به اینکه محاسبات انجام شده را با نرم افزار شبیه ساز PWscf^۱ که تحت سیستم عامل لینوکس^۲ اجرا می شود ، انجام داده ایم ، لازم است ابتدا توضیحاتی راجع به این نرم افزار و پارامترهای مرتبط به آن و روش بهینه سازی آنها بدهیم.

۴-۱ معرفی نرم افزار محاسباتی PWscf

نرم افزار PWscf برنامه ای در چارچوب نظریه تا بعی چگالی و بر مبنای روش محاسباتی شبه پتانسیل است ، که برای محاسبه ساختار الکترونی و خواص مختلف مواد بکار می رود. این نرم افزار محاسباتی شامل یک سری زیر برنامه های اجرایی نظیر (dos.x , PP.X , PW.X , projwFc.X , bands.X , plotband.X) است . که هر یک از این برنامه ها توانایی خاصی دارند و برای استخراج هر یک از خواص بلورها مجموعه ای از این برنامه ها را باید با ترتیب مناسب اجرا نمود [۲]. هر برنامه برای اجرا نیاز به یکسری پارامترهای ورودی دارد که از یک فایل ورودی خوانده می شوند. بنابراین یکی از مهمترین کارها در این نرم افزار تهیه فایل ورودی

^۱ -Plane Wave Self Consistent field

^۲ -Linux

مناسب است. از جمله این پارامترها می توان به نوع شبکه براوه سیستم، تعداد اتم های موجود در سلول واحد، تعداد عناصر مختلف موجود در سیستم، پارامتر شبکه، انرژی قطع بسط تابع موج الکترونی بر حسب امواج تخت، شبه پتانسیل های مناسب برای هر اتم و تعیین جایگاههای اتمی اشاره کرد.

۲-۴ بهینه سازی پارامترهای محاسباتی

گام اول در انجام محاسبات بهینه سازی پارامترهای محاسباتی است. برای آنکه محاسبات از دقت مطلوب و در عین حال سرعت قابل قبولی برخوردار باشد، معمولاً در هر کار محاسباتی لازم است تعدادی از کمیت های ورودی بهینه سازی شوند. این کار معمولاً در مورد کمیت هایی انجام میشود که از یک طرف با سرعت انجام محاسبات و از طرفی با دقت نتایج در ارتباطند. در ادامه به توضیح کمیت های ورودی مهم ونحوه بهینه سازی آنها پرداخته ایم.

۱-۲-۴ تعداد نقاط k

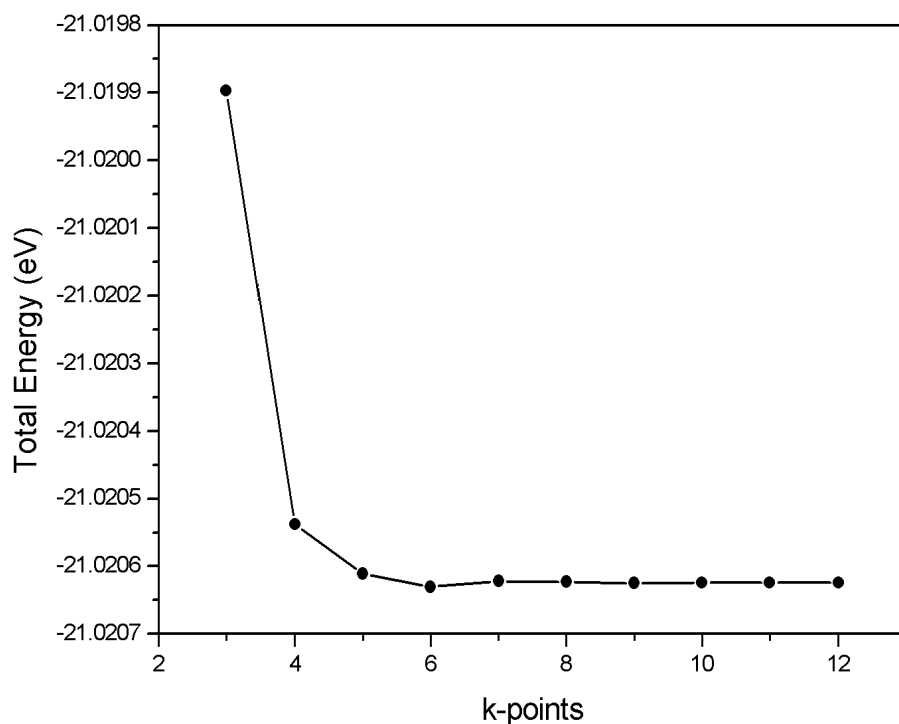
می دانیم که با تکرار یاخته ویگنر سایتز در سه بعد ساختار بلوری شکل می گیرد. چون ساختار بلور تناوبی است لذا قضیه بلوخ در مورد آن صادق است:

$$\psi_i(\vec{r}) \rightarrow \psi_{n,k}(\vec{r}) = \sum_G C_{n,\vec{k}+\vec{G}} \exp i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r} \quad (1-4)$$

در اینجا، i شماره الکترون های بلور، n شماره نوار، $\vec{k}$ بردار موج الکترون (محدود به ناحیه اول بریلوئن) و $\vec{G}$ بردار شبکه وارون است.

مقادیر مجاز $\vec{k}$ از روی شرایط مرزی دوره ای تعیین می شوند و تعداد آنها مساوی تعداد نقاط شبکه بلور یعنی N است که این تعداد حتی در یک بلور ساده نیز بسیار بزرگ است. لذا ما با حجم زیادی از محاسبات روبرو هستیم، اما چون در بلور تقارن انتقالی وجود دارد لذا بجای محاسبه به ازاء همه مقادیر مجاز k می توان این تابع را تنها به ازای مقادیر محدودی از آنها محاسبه کرده و ψ را در حوالی هر k یکسان در نظر بگیریم. به این منظور می بایست در اولین گام تعداد نقاط k مناسب را از طریق بررسی میزان همگرایی انرژی بر حسب تعداد نقاط k پیدا کنیم. برای این کار ابتدا باید چند بار محاسبه خود سازگار به ازای k های مختلف انجام شده و سپس با مقایسه انرژی های مربوط به هر یاخته مقدار k مناسب را تعیین کرد.

شکل ۴-۱ انرژی هر یاخته بر حسب تعداد نقاط k موجود در ناحیه اول بریلوئن را نمایش می دهد. این نتایج نشان می دهد که عدد ۷ مقدار مناسبی برای تعداد نقاط k بهینه شده در هر راستا در نیمرسانای β -SiC می باشد. زیرا از این مقدار به بعد انرژی یاخته تقریباً ثابت شده است. توجه به این نکته ضروری است که تغییر انرژی بر حسب تعداد نقاط k در β -SiC از مرتبه $1/000001$ ریذبرگ است که مقدار بسیار کوچکی است. قابل ذکر است که در محاسبات ما منطقه اول بریلوئن توسط سلول بندی منخوست-پک^۱ تقسیم بندی شده است [۳].



شکل ۴-۱: انرژی هر یاخته بلور β -SiC بر حسب تعداد نقاط k در هر راستا.

۴-۲-۲ انرژی قطع

یکی دیگر از پارامترهایی که در شروع محاسبات می بایست بهینه شود انرژی قطع است. طبق نظریه بلوخ تابع موج الکترون به صورت رابطه (۴-۱) بر حسب امواج تخت بسط داده می شود که در این رابطه جمع روی همه بردارهای شبکه وارون $\vec{G}$ است. اگر بخواهیم این بسط را به طور کامل در نظر بگیریم بی نهایت موج تخت نیاز خواهیم داشت که انجام محاسبات را غیر ممکن می

1- Monkhorst-Pack

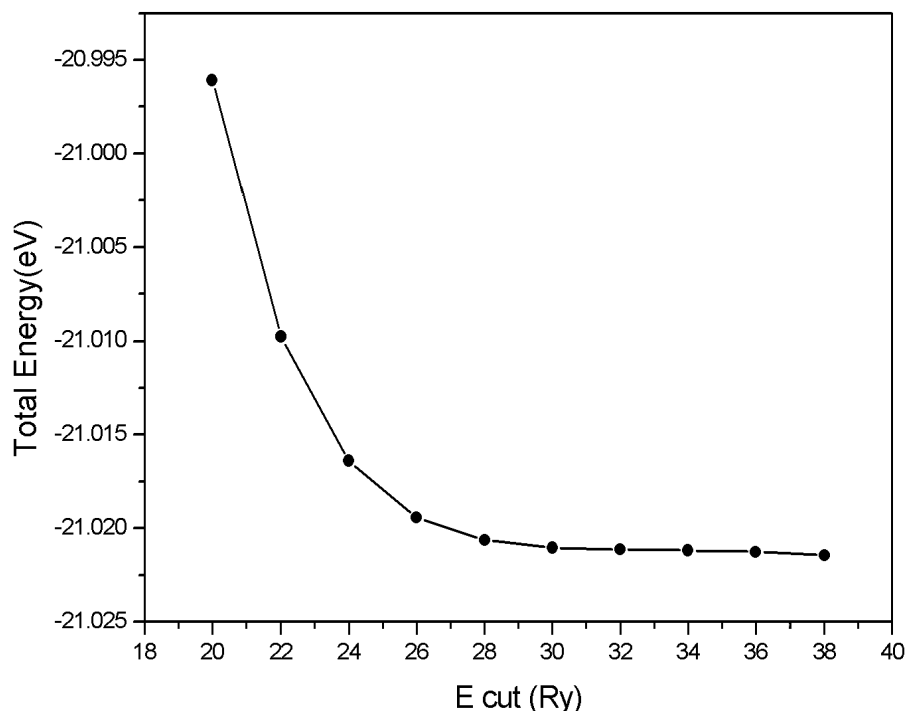
سازد. برای رفع این مشکل از این نکته استفاده می کنیم که چون ضرایب بسط $C_{n,k}+G$ برای امواج تخت با انرژی جنبشی بالا به تدریج کاهش می یابند لذا می توان این ضرایب را برای صفحات با انرژی بیش از یک مقدار که اصطلاحاً انرژی قطع^۱ می نامند، صفر در نظر گرفت. بنابراین می توان در عبارت $\sum G...$ تنها جملاتی را نگه داشت که انرژی جنبشی آنها از حد معینی کمتر باشد و بدین ترتیب تعداد توابع پایه را محدود و حجم محاسبات را کاهش می دهیم.

به منظور یافتن انرژی قطع بهینه می بایست میزان همگرایی انرژی هر یاخته را بر حسب انرژی قطع مورد بررسی قرار دهیم (شکل ۴-۲). از آنجایی که انرژی قطع و تعداد نقاط k باید همزمان بهینه شوند، بنابراین زمانی که تعداد نقاط k را بهینه می کنیم اگر انرژی قطع، بسیار نامناسب و کوچک انتخاب شود مطمئناً نمی توانیم بهینه تعداد نقاط k را بدست آوریم لذا توصیه می شود که در مرحله بهینه سازی تعداد نقاط k ، انرژی قطع ترجیحاً مقدار بزرگی انتخاب شود سپس با انتخاب تعداد نقاط k بهینه شده، انرژی قطع را بهینه کنیم.

برای انجام محاسبات بهینه سازی پس از تنظیم فایل ورودی، برنامه pw.x را اجرا می کنیم. این برنامه معادلات تک ذره کوهن شم را در سیستم (بلور) به روش خود سازگار حل کرده و ویژه توابع و ویژه مقادیر همگرا شده را محاسبه می کند[۲].

همان طور که در شکل (۴-۲) مشاهده می کنیم به نظر می رسد که انرژی ۲۸ ریدبرگ مقدار مناسبی برای انرژی قطع بهینه شده می باشد. زیرا از این مقدار به بعد تغییرات انرژی به مرتبه 10^{-6} Ry می رسد که مقدار بسیار کوچکی است و میتوان گفت برای توابع موجی با انرژی جنبشی بیش از ۲۸ ریدبرگ، انرژی کل یاخته تقریباً ثابت است. ما در این محاسبات همین مقدار را به عنوان انرژی قطع در نظر گرفتیم.

^۱-E_{cutoff}



شکل ۴-۲: انرژی هر یاخته بلور β -SiC بر حسب انرژی قطع.

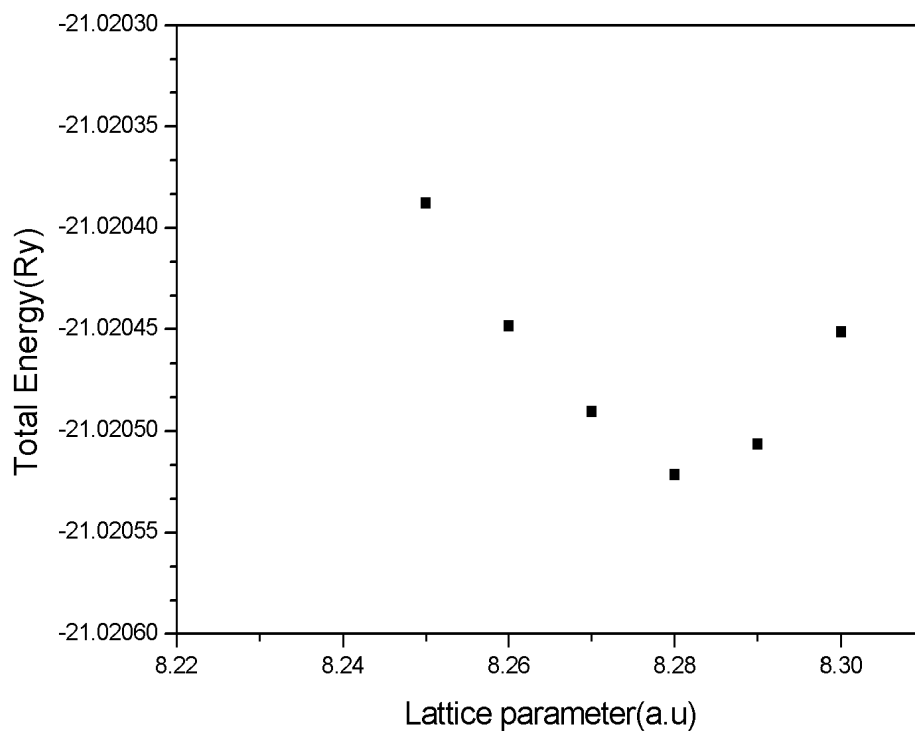
۳-۲-۴ محاسبه پارامتر شبکه تعادلی

مرحله بعدی محاسبه پارامتر شبکه تعادلی نیمرسانای β -SiC و نیمرسانای مغناطیسی رقیق SiC:Mn است. پارامتر شبکه از جمله خواص ساختاری هر بلور می باشد و اگر محاسبات صحیح و با دقت کافی صورت گرفته باشد مقادیر پارامتر محاسبه شده و تجربی می بایست به یکدیگر نزدیک باشند. از طرفی چون پارامتر شبکه تعادلی اولین خاصیت فیزیکی محاسبه شده از طریق شبیه سازی است بنابراین می تواند معیار مناسبی برای تائید شبه پتانسیل های بکار رفته برای بلور نیز باشد.

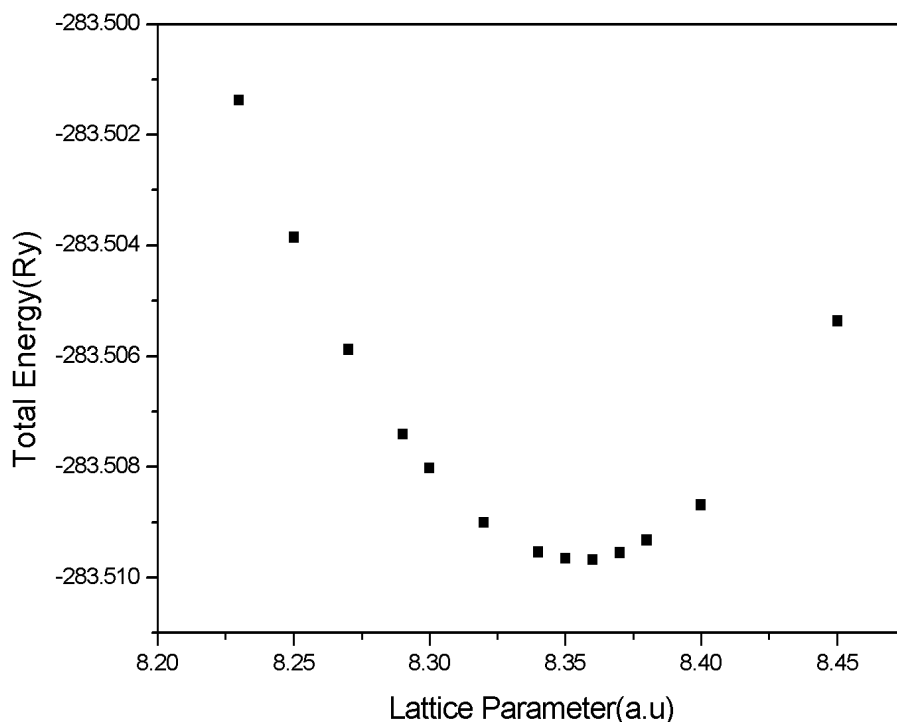
برای تعیین مقدار پارامتر شبکه تعادلی، در هر مرحله پارامتر شبکه آزمون را حول و حوش پارامتر شبکه تجربی ($1/232a.u.$) تغییر می دهیم و با اجرای برنامه pw.x انرژی کل یاخته را به ازای پارامترهای انتخابی به دست می آوریم. ورودی این برنامه به گونه ای تنظیم شده است که انرژی

^۱ - atomic unit

سیستم را تا 10^{-6} Ry همگرا می کند. سپس نمودار انرژی بر حسب ثابت شبکه را برای نیمرسانای β -SiC و ترکیب SiC:Mn رسم می کنیم. شکل (۳-۴) و (۴-۴) مقادیر بهینه شده ثابت شبکه را نشان می دهد که برای β -SiC خالص مقدار بهینه شده ثابت شبکه 8.278 a.u. و برای نمونه آلاینش یافته با منگنز 8.268 a.u. بدست آمده است. بنابراین در نمونه آلاینش یافته پارامتر شبکه افزایش یافته است.



شکل ۳-۴: انرژی کل هر یاخته به ازای ثابت شبکه مختلف در β -SiC خالص.

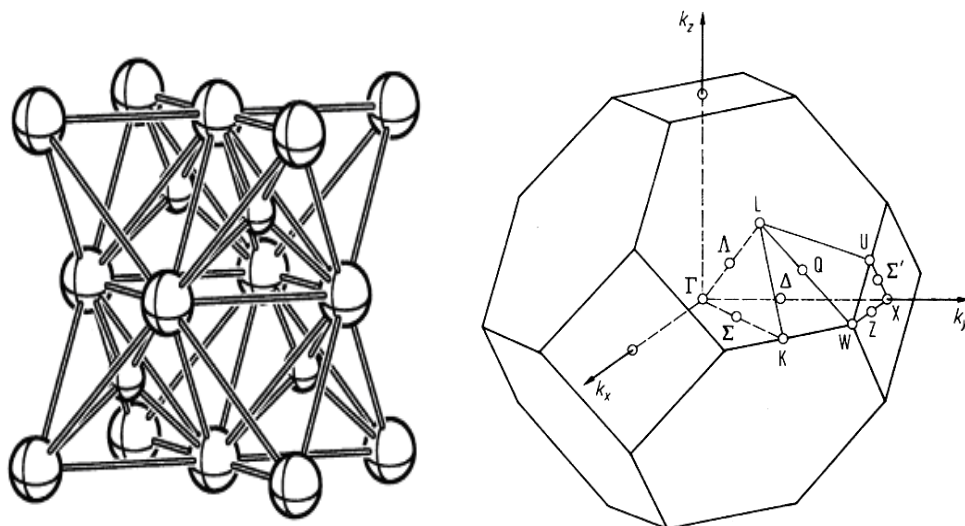


شکل ۴-۴: انرژی کل هر یاخته به ازای ثابت شبکه مختلف در Mn: SiC با آرایش منگنز.

۳-۴ بررسی برخی ویژگیهای β -SiC

مطالعات تجربی و تئوری بسیاری راجع به ساختارهای مختلف SiC وجود دارد که برای مطالعه ساختار الکترونیکی آن در اکثر محاسبات از روش تمام پتانسیلی [۵،۴] و روش امواج تخت شبه پتانسیلی استفاده شده است [۸-۶] و برخی نیز با روش هارتری-فاک [۹] بررسی شده است. برای ساختار مکعبی SiC یک سلول واحد اولیه^۱ fcc را در همه محاسبات استفاده خواهیم کرد، که از پایه دو اتمی تشکیل شده است، که در آن یک اتم سیلیکون Si در مبدأ قرار دارد و یک اتم C روی قطر اصلی سلول واحد مکعبی در فاصله مساوی از چهار گوشه واقع شده است. ساختار بلوری و منطقه اول بریلوئن مربوطه در شکل (۴-۵) نشان داده شده است و برخی از نقاط پر تقارن K در منطقه بریلوئن مشخص شده اند [۱].

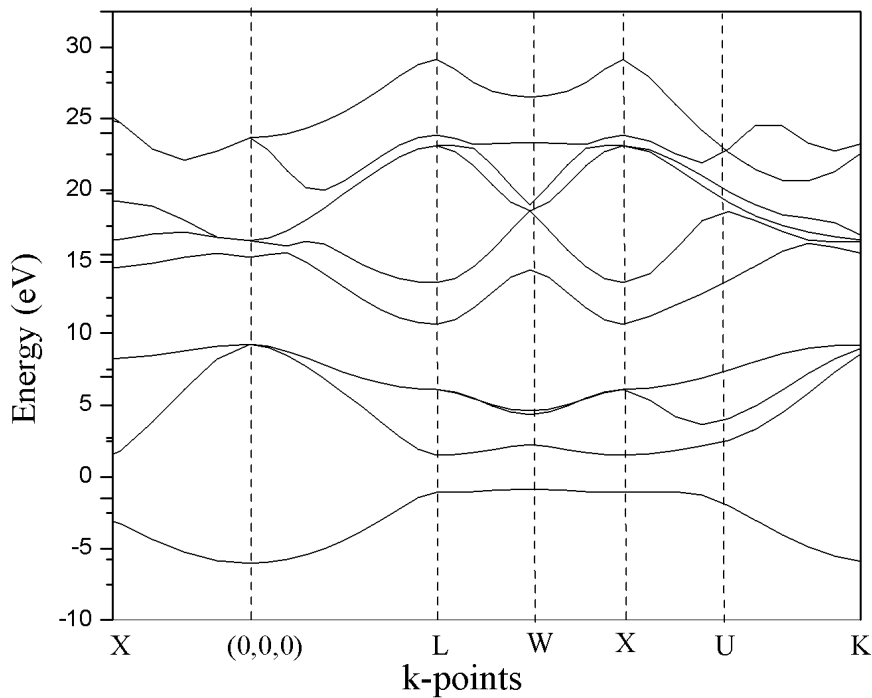
2 - Face center cubic



شکل ۴-۵: ساختار بلوری و منطقه اول بریلوئن SiC مکعبی [۱].

۴-۳-۱ مطالعه ساختار نواری

پس از انجام محاسبات خود سازگار و غیرخودسازگار می توان محاسبه ساختار نواری را انجام داد. شکل (۴-۶) ساختار نواری β -SiC را در امتداد جهتهای پرتقارن در منطقه اول بریلوئن نشان میدهد که سازگاری بسیار خوبی با یافته های تجربی و نظری پیشین [۱ / ۱۰ / ۱۱] دارد.

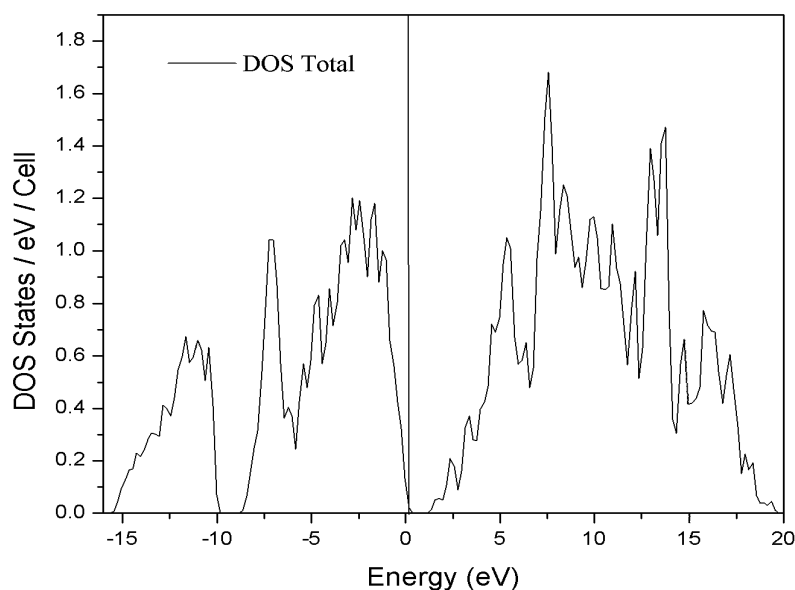


شکل ۴-۶ : ساختار نواری 3C-SiC با استفاده از محاسبات شبه سازی شده.

گاف نواری مستقیم E_d بصورت کمترین اختلاف انرژی بین پایین ترین تراز اشغال نشده و بالاترین تراز اشغال شده، در یک نقطه k مشخص تعریف می شود که در نیمرسانای SiC در مرکز نوارها یعنی نقطه Γ اتفاق می افتد. اما این نیمرسانا دارای گاف نواری غیرمستقیم است زیرا اختلاف بین کمترین انرژی نوار رسانش و بیشترین انرژی نوار ظرفیت در نقاط k متفاوتی رخ می دهد و همانطور که در شکل مشاهده می شود E_i یا همان گاف نواری غیرمستقیم یک جابجایی $\Gamma - X$ بدست می آید که مقدار آن $1/37 \text{ eV}$ بدست آمده است که با مقادیر گزارش شده [۱ و ۱۱] $E_i = 1.602 \text{ eV}$ و $E_i = 1.317 \text{ eV}$ تقریباً سازگار است. یعنی ماکزیمم نوار ظرفیت در نقطه $\Gamma(k=(0,0,0))$ و مینیمم نوار رسانش در نقطه $X(k=(\frac{2\pi}{a}, 0, 0))$ واقع است که این منجر به گاف نواری غیرمستقیم می شود. مقدار این گاف وابسته به شبه پتانسیلهای اتمها می باشد و به کارگیری شبه پتانسیل مناسب در دستیابی به مقدار صحیح گاف نواری تاثیر مهمی دارد. انرژی بالاترین تراز اشغال شده را انرژی فرمی می گویند که در محاسبات مربوط به β -SiC مقدار $9/27 \text{ eV}$ بدست آمده است.

۴-۳-۲ محاسبه چگالی حالتها^۱

چگالی حالات (DOS) یک سیستم تعداد حالتهایی که در هر تراز انرژی می‌توانند اشغال شوند را توصیف می‌کند. یک DOS بالا در یک تراز انرژی خاص به این معنی است که تعداد حالات زیادی برای اشغال شدن وجود دارد و یک DOS صفر بدین معنی است که هیچ حالتی در این تراز انرژی نمی‌تواند اشغال شود [۱۲].



شکل ۴-۷: چگالی حالات کلی^۲ (TDOS) را برای نمونه β -SiC نشان می‌دهد که با نتایج تئوری پیشین سازگار است [۱۳]. نقطه صفر انرژی در نمودارها طوری انتخاب شده است که ماکزیمم نوار ظرفیت را نشان بدهد.

چگالی حالات کلی از مجموع چگالی حالات جزئی^۳ (PDOS) مربوط به اتمهای Si و C بدست می‌آید و همانطور که در شکل (۴-۸) و (۴-۹) دیده می‌شود اگرچه C و Si هر دو از گروه IV هستند اما حالات جزئی آنها یکسان نمی‌باشد، با کمی دقت در شکلها مشاهده می‌شود در ناحیه

^۱- Density of states

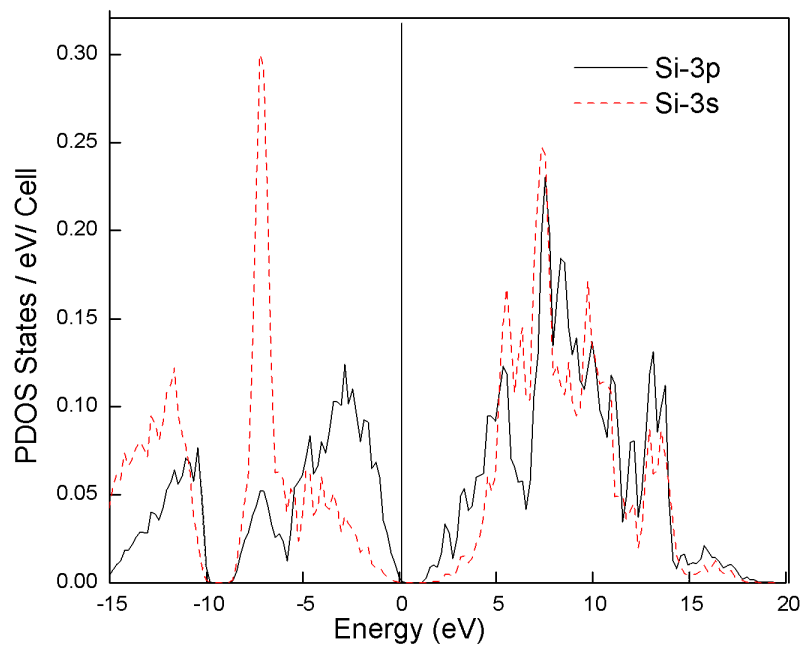
^۲-Total Density of state

^۳- Partial Density of state

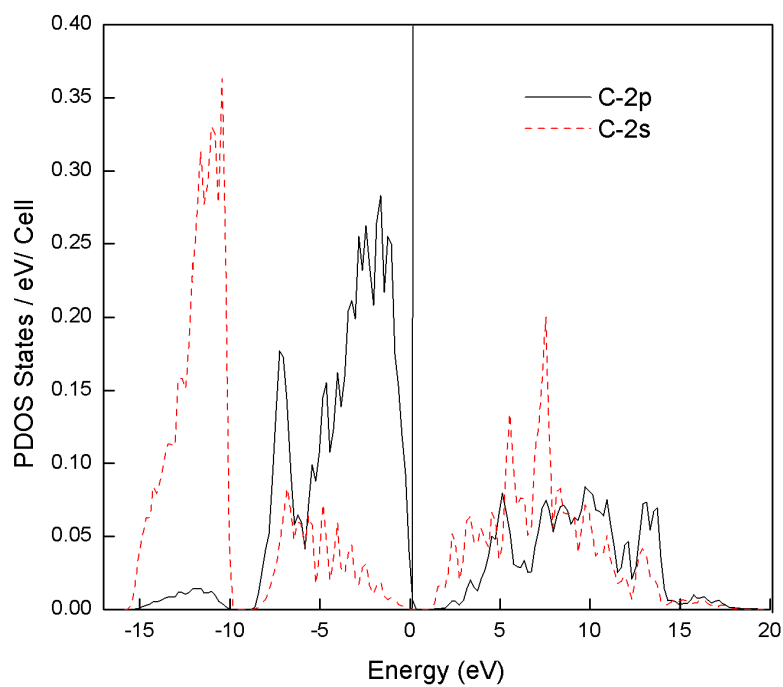
ظرفیت چگالی حالات بلور بوسیله یک گاف ناچیز به دو بخش تقسیم می‌شود. بخش پایین تر از پیوند بین اوربیتالهای $C: 2s$ و $Si: 3s$ حاصل می‌گردد و بخش بالاتر از پیوند بین اوربیتالهای $Si: 3p$ و $C: 2p$ ایجاد شده است.

چون حالات $Si: 3p$ و $C: 2p$ بیشتر در لبه های نوار ظرفیت توزیع شده‌اند بنابراین اوربیتالهای p بیشتر حالت‌های نزدیک انرژی فرمی را اشغال می‌کنند. حالت‌هایی که در لبه تراز رسانش قرار دارند نیز مخلوطی از همه ترازهای $Si: 3s, 3p$ و $C: 2s, 2p$ می‌باشند. همانطور که ملاحظه می‌شود چگالی حالات در نوار رسانش سیلیکون بیشتر است و می‌توان به این نتیجه رسید که سیلیکون جایگاه بهتری برای جانشین شدن یک اتم آلایش شده باشد.

همانطور که در محاسبات ساختار نواری گفته شد SiC مکعبی دارای گاف نواری غیرمستقیم است که در شکل مربوط به چگالی حالتها نیز می‌توان این گاف را مشاهده کرد که مقدار آن از روی نمودار تقریباً 1.36 eV است که با محاسبات مرحله قبل و مقادیر گزارش شده در مطالعات تئوری توافق نسبتاً خوبی دارد [۱/۱۱].



شکل ۴-۸: چگالی حالات جزئی برای تراز $Si: 3s$ و $Si: 3p$



شکل ۴-۹: چگالی حالات جزئی برای ترازهای $C: 2s$ و $C: 2p$

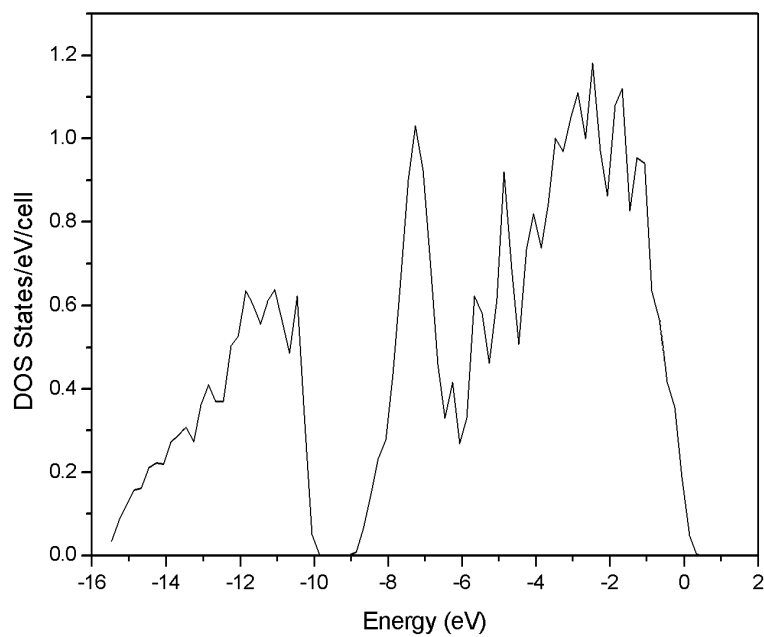
مقادیر گاف انرژی و پهنای ناحیه ظرفیت و رسانش و مقایسه آنها با مقادیر گزارش شده توسط دیگران در جدول (۴-۱) آورده شده است [۱ / ۱۱].

جدول ۴-۱ : مقایسه برخی پارامترهای 3C-SiC

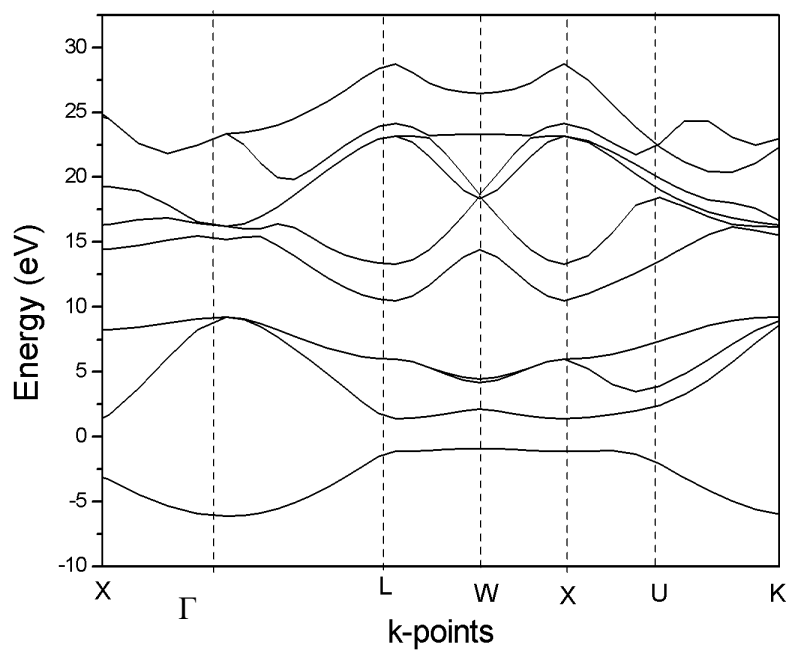
3C-SiC	مقادیر محاسبه شده	مقادیر برگرفته از مقالات
گاف نواری مستقیم	۵/۵۶	[۱] ۴/۸۶
گاف نواری غیر مستقیم	۱/۳۷	[۱] ۱/۶۰۲ و [۱۱] ۱/۳۱۷
پهنای تراز بالایی ظرفیت	۸/۹۳	[۱] ۸/۵۹
پهنای تراز پایینی ظرفیت	۵/۶۵	[۱] ۵/۳۸
پهنای تراز رسانش	۱۸/۲۵	-

۴-۴ بررسی اثر شبه پتانسیل

محاسبات فوق را بار دیگر بر مبنای شبه پتانسیلهای پایسته بهنجار که در پیوست توضیح آنها آمده است انجام داده ایم. مهمترین اثر شبه پتانسیل روی گاف نواری می باشد که در این مرحله مقدار گاف $1/48 \text{ eV}$ بدست می آید و ملاحظه می کنیم که نسبت به حالت قبل افزایش یافته است . ساختار نواری تغییری نکرده است ولی چگالی حالت های الکترونی فقط در محدوده نوار ظرفیت به دست می آید که احتمالاً به نوع تعریف شبه پتانسیلها مربوط می شود شکل (۴-۱۰) چگالی حالت های کل و شکل (۴-۱۱) ساختار نواری را نشان می دهد .



شکل ۴-۱۰: چگالی حالت‌های کلی الکترون‌ها با شبه پتانسیل های پایسته بهنجار.



شکل ۴-۱۱: ساختار نواری 3C-SiC با شبه پتانسیل های پایسته بهنجار.

۵-۴ خلاصه نتایج

پس از انجام بهینه سازی پارامترهای محاسباتی از جمله تعداد نقاط k در هر یاخته و انرژی قطع ، یکی از مهمترین پارامترهای ورودی یعنی ثابت شبکه تعادلی را بهینه کردیم که مقدار بهینه شده آن برای β -SiC خالص $8/28 \text{ a.u}$ و برای نمونه آرایش یافته با منگنز برابر $8/36 \text{ a.u}$ بدست آمده است. ملاحظه می شود با اضافه کردن منگنز به بلور پارامتر شبکه افزایش می یابد که با یافته های تجربی سازگار است. با محاسبه چگالی حالتها چگونگی توزیع الکترونها در نوارهای ظرفیت و رسانش مشخص می شود و مقدار گاف نواری نیز $1/37 \text{ eV}$ به دست آمده است. همچنین محاسبه ساختار نواری نشان می دهد β -SiC دارای گاف نواری غیرمستقیم است . هیچگونه حالت مغناطیسی در این نمونه مشاهده نشده است زیرا مقدار مغناطش در محاسبات صفر بدست آمده است.

- [1] W. Y. Ching , Y. Nian Xu , et .al, Materials Science and Engineering A, 422 , 147-156 , 2006.
- [۲] سید جواد هاشمی فر، راهنمای استفاده از نرم افزار محاسباتی PWscf، دانشگاه صنعتی اصفهان، ۱۳۸۳.
- [3] N. Monkhorst , H. J. Pack , Phys. Rev. B vol 13 , 5188, 1976.
- [4] W. R. Lambrecht , B. Segall , Phys. Rev. B. 52, R2249- R2252 , 1995.
- [5] M. Willatzen , M. Carabona , N. E. Christensen , phys. Rev. B , 51, 13150-13161, 1995.
- [6] N. Churcher, K. Kunc, V. Heine, J. Phys. C: Solid State Phys. 19 , 4413-4426, 1986.
- [7] C. H. Park , B-H. Chrong , K-H. Lee , K. J. Chang , Phys. Rev. B 49 , 4489-4493, 1994.
- [8] P.Kackell , B. Wenzien , F. Bechstedt , Phys. Rev. B 50, b761-10768 , 1990.
- [9] R.Orlando , R. Dovesi, C. Rotti, V. R. Saunders , J. Phys: Condens.Matter 2, 7769-7789, 1990.
- [10] M. Matos , Physica B 324, 15-33,2002.
- [11] Z. Jiang , X. Xu , H.Wu , Solid State Communication ,123,263-266 ,2002.
- [12] [http:// en.wikipedia.org/Density Of States](http://en.wikipedia.org/Density%20Of%20States).
- [13] V. A. Gabanov ,C. Buekema , C. Y. Fong , Applied Physics Letters, 78, 2, 2001.

فصل پنجم

بررسی نیمرسانای مغناطیسی آرایش شده β -SiC:Mn

۱-۵ برتری جایگاه Si یا C

۲-۵ نحوه انجام محاسبات

۳-۵ محاسبه چگالی حالتها

۴-۵ خلاصه نتایج

فصل پنجم

بررسی نیمرسانای مغناطیسی آرایش شده β -SiC:Mn

در این فصل اثر آرایش عنصر واسطه Mn را در نیمرسانای β -SiC بررسی خواهیم کرد. قبل از انجام محاسبات باید مشخص شود که منگنز در کدام یک از جایگاههای اتمی Si و C قرار می گیرد. پس از انتخاب جایگاه مناسب ' با بررسی چگالی حالتها کلی و مغناطش در نمونه های

β - SiC:Mn با درصد های مختلف Mn می توان برخی از خواص مغناطیسی ماده را استخراج کرد.

۱-۵ برتری جایگاه Si یا C

برای مطالعه اینکه کدام جایگاه برای جانشین شدن فلز واسطه مناسبتر است، یک سری تحقیقات برای جانشینی فلزات واسطه Cr, Fe, Mn, Co روی SiC مکعبی انجام شده است. این تحقیقات نشان داد آرایش Fe و Co در بلور میزبان β - SiC باعث خاصیت مغناطیسی نمی شود در حالی که یونهای سبکتر Mn و Cr در این بلور خاصیت مغناطیسی نشان می دهند [۱ / ۲].

با مقایسه چگالی حالتها و گشتاور مغناطیسی این دو عنصر وقتی در جایگاه C یا Si قرار می گیرند، این نتیجه مسلم شد که برای دستیابی به خواص مغناطیسی 'بهتر است Cr در جایگاه Mn و C در جایگاه Si جانشین شود، زیرا وقتی Mn جایگاه C را اشغال می کند نسبت به حالتی که جایگاه Si را اشغال کند، سیستم انرژی کمتری بدست می آورد [۱]. همچنین گروهی دیگر از طریق محاسبه چگالی حالتها برای غلظتهای مختلف Mn و در جایگاههای C و Si به این نتیجه رسیدند که جانشینی Mn در جایگاه Si در بلور β - SiC حالت فرومغناطیسی پایدارتری نسبت به جایگاه C نشان می دهد [۳].

بر اساس این نتایج ما در این پروژه و انجام محاسبات 'Mn را در جایگاه Si قرار داده و اثر آرایش آن را روی چگالی حالات β - SiC بررسی می کنیم.

۲-۵ نحوه انجام محاسبات

برای انجام محاسبات 'ابتدا سه نوع اتم Si و C و Mn را با مشخصات جدول (۱-۵) در نظر گرفتیم که فرم شبه پتانسیل های بکار رفته برای این عناصر در پیوست الف آمده است.

جدول ۱-۵ : مشخصات اتمهای Mn, Si, C.

نام اتم	عدد اتمی	جرم اتمی	آرایش الکترونی
Si	۱۴	۲۸/۰۸۵۵	$[Ne]3s^2 3p^2$
C	۶	۱۲/۰۱۰۷	$[He]2s^2 2p^2$

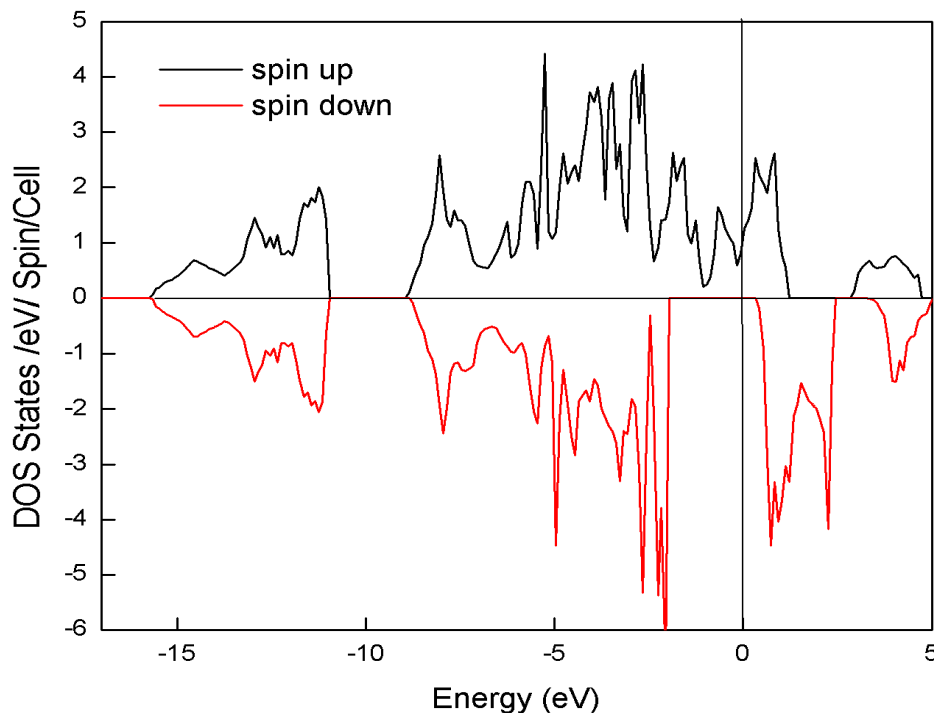
Mn	۲۵	۵۴/۹۳۸۰	$[Ar]3d^5 4s^2$
----	----	---------	-----------------

پس از اینکه منگنز را وارد شبکه بلوری β -SiC می‌کنیم، یک سلول واحد قراردادی ۸ اتمی با شبکه براوه معکبی که دارای چهار اتم کربن و سه اتم سیلیکون و یک اتم منگنز است، در نظر می‌گیریم. به علت عدم تغییر نوع شبکه نسبت به حالت بدون آرایش مقادیر بهینه شده انرژی قطع و نقاط k تغییری نمی‌کنند اما با وارد کردن یک اتم Mn به جای Si برهمکنش بین اتمها در شبکه تغییر می‌کند و بنابراین روی پارامتر شبکه تاثیر می‌گذارد. در نتیجه باید مجدداً مقدار آن را بهینه کرد. با انجام محاسبات مقدار بهینه شده پارامتر شبکه $8/36 \text{ a.u.}$ به دست آمده است. با این جایگزینی غلظت Mn در بلور میزبان حدود ۲۵٪ می‌باشد و به همین ترتیب اگر در ابر یاخته ۶۴ اتمی که از $2 \times 2 \times 2$ سلول واحد قراردادی تشکیل شده است یک اتم Mn جایگزین Si شود غلظت Mn در نمونه ۳/۱۳٪ و اگر دو اتم Mn جایگزین Si شود غلظت منگنز ۶/۲۵٪ خواهد بود. نکته مهمی که در اینجا باید توجه شود این است که از آنجا که برای جایگزینی بیش از یک اتم Mn در ابر یاخته ۶۴ اتمی شکل‌گیری های اتمی مختلفی (وابسته به محل جایگزینی Mn) وجود دارد باید دقت کرد که تنها زمانی که اتم های Mn در بیشترین فاصله ممکن از هم قرار گیرند این شکل‌گیریها درست خواهند بود [۳]. چون اولین اتم منگنز در سلول مکعبی $2 \times 2 \times 2$ در مبدا یعنی (۰، ۰، ۰) قرار دارد، دومین اتم منگنز باید در وسط قطر این مکعب قرار گیرد.

از طرفی چون وارد کردن اتم Mn در ابر یاخته باعث برهمکنش هایی بین اتمها و در نتیجه جابجایی اتمها از مکان اصلی خود می‌شود، بنابراین در ابتدا لازم است با استفاده از محاسبه واهلش، برهمکنش ها و نیروهای بین اتمی را به حداقل برسانیم یعنی انجام محاسبات خودسازگار تا جایی ادامه می‌یابد که نیروهای بین اتمی به مرتبه 0.001 Ry/a.u. برسد [۳ / ۴] و پس از آن جایگاههای اتمی اندکی با حالت اصلی تفاوت پیدا کرده است، بنابراین محاسبات غیرخودسازگار را با موقعیتهای اتمی جدیدی که پس از انجام محاسبات واهلش به آنها دست یافته ایم، انجام می‌دهیم.

۳-۵ بررسی چگالی حالات β -SiC:Mn

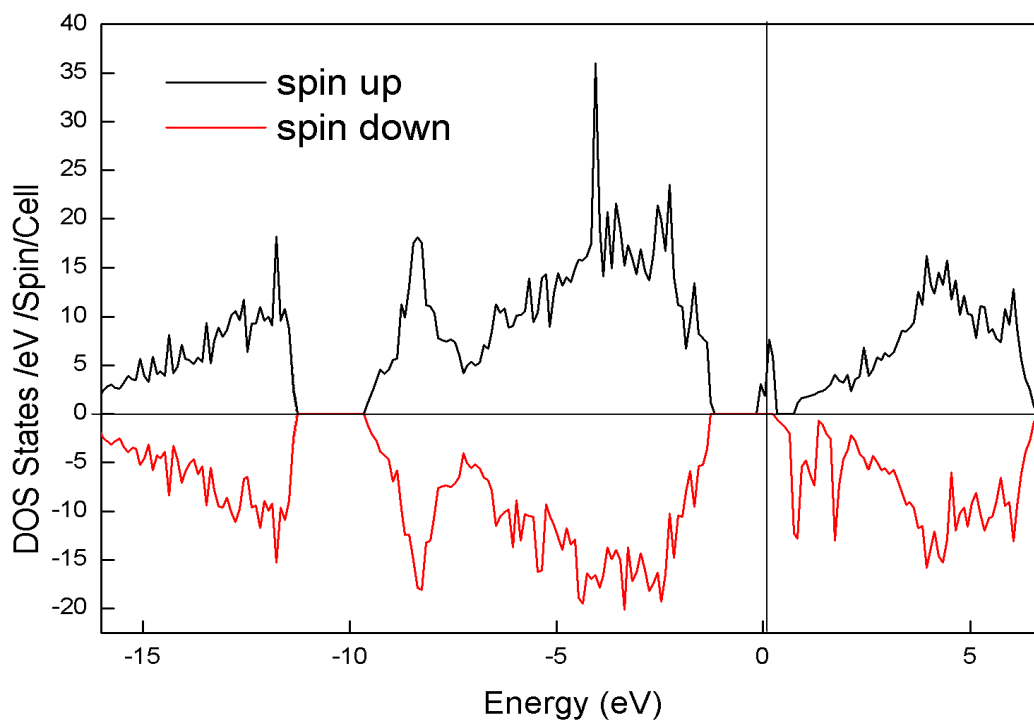
در این بخش به مطالعه چگالی حالات کلی و جزئی برای غلظتهای مختلف Mn در β -SiC می‌پردازیم. در ابتدا برای بررسی اثر آرایش ۲۵٪ منگنز در β -SiC چگالی حالات کلی را محاسبه کرده ایم که نتایج حاصل در شکل (۵-۱) نشان داده شده است.



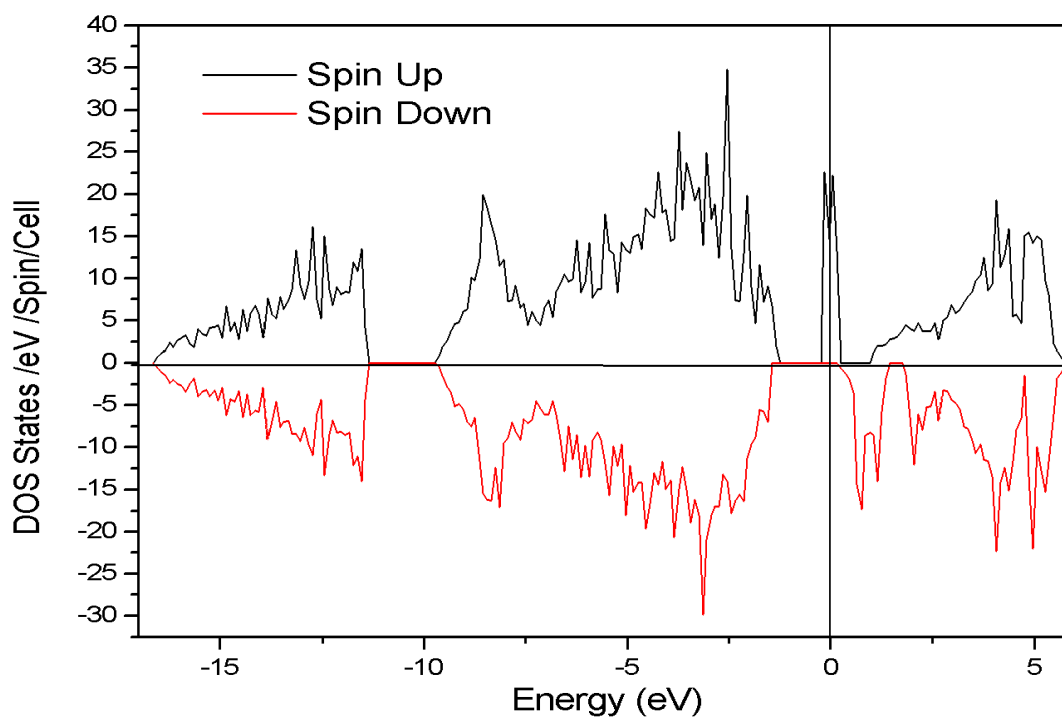
شکل ۵-۱: نمودار چگالی حالات Mn: SiC با آرایش ۲۵٪ منگنز.

شکل (۵-۱) حالاتی را نشان می‌دهد که تمامی الکترونهاى لایه خارجی اتمهای بلور در هر تراز انرژی اشغال می‌کنند. بعضی از این الکترونها می‌توانند در حالت اسپین بالا و برخی در حالت اسپین پایین قرار گیرند.

شکل (۵-۲) و (۵-۳) چگالی حالات کل را برای Mn: SiC با آرایش ۳/۱۳٪ و ۶/۲۵٪ منگنز نشان می‌دهد در کلیه نمودارهای مربوط به چگالی حالات، انرژی فرمی منطبق بر مبدا نمودار است یعنی آن را نقطه صفر انرژی در نظر گرفته ایم. به عنوان مثال در محاسبات Mn:SiC با غلظت ۲۵٪ مقدار انرژی فرمی $E_F = 10/76$ eV بدست آمده است که آن را نقطه صفر انرژی انتخاب نموده ایم. مقادیر انرژی فرمی در غلظتهای مختلف در جدول (۵-۲) آمده است.

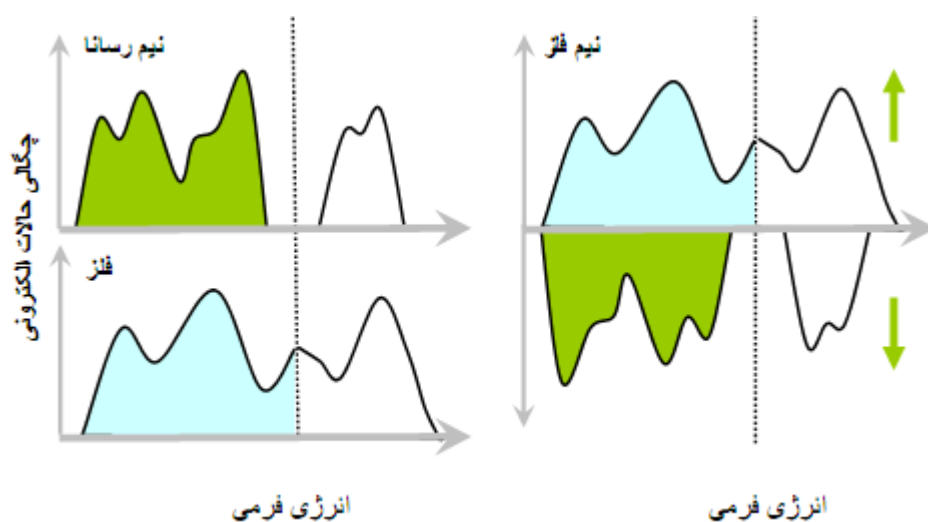


شکل ۵-۲: چگالی حالات کل SiC: Mn با آرایش ۳/۱۳٪ منگنز.



شکل ۵-۳: چگالی حالات کل SiC: Mn با آرایش ۶/۲۵٪ منگنز.

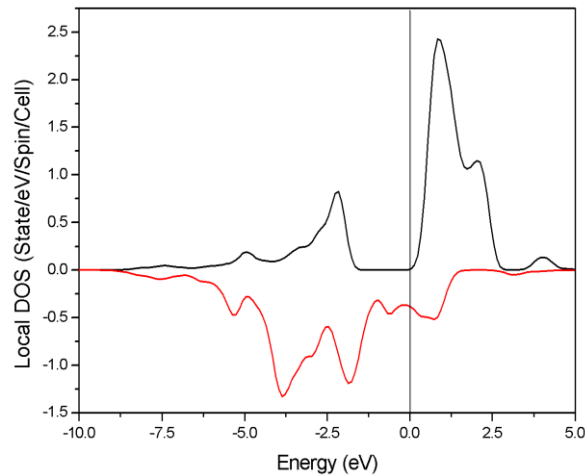
با دقت در نمودارهای چگالی حالتها در می یابیم که چگالی حالات کلی در نزدیک انرژی فرمی فقط حالتی با اسپین بالا دارد یعنی اسپین الکترونها در انرژی فرمی کاملاً قطبیده است. این موضوع اشاره می کند که رفتار حالتی با اسپین بالا فلزی و رفتار حالتی با اسپین پایین نیم رسانایی است و این دسته از مواد با چنین خاصیتی نیم فلز نامیده می شوند و به عنوان واسطی بین فلزات و نیم رساناها تلقی می گردند [۶ و ۵]. شکل (۴-۵) چگالی حالتی نیم فلزات را با نیم رساناها و فلزات مقایسه می کند.



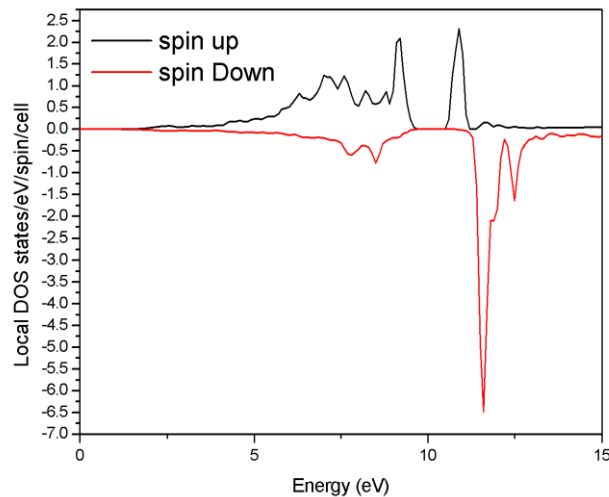
شکل ۴-۵: مقایسه چگالی حالتی اسپین بالا و پایین نیم فلزات با فلزات و نیم رساناها.

همانطور که از اشکال (۲-۵) و (۳-۵) مشاهده می شود همانند چگالی حالتها در β -SiC خالص، حالات الکترونی مربوط به اوربیتال P در نزدیکی تراز فرمی توزیع شده اند و همانطور که تمام نمودارهای (DOS) نشان می دهد یک گاف انرژی بین حالات الکترونی s و حالات p-d وجود دارد و چون این گاف ها در فاصله دوری از زیر سطح فرمی که توسط خط عمودی در شکلها نشان داده شده قرار گرفته اند، لذا نقش ناچیزی در خواص مغناطیسی سیستم دارند. همچنین چگالی حالات با اسپین بالا در انرژی فرمی در آلیش ۶/۲۵٪ بیشتر از حالت ۳/۱۳٪ می باشد.

در شکل (۵-۵) چگالی حالات موضعی^۱ برای الکترونهاي تراز 3d نشان داده شده است که با توجه به آن از آنجا که الکترونهاي d بیشتر، ترازهای نزدیک انرژی فرمی را اشغال می کنند، ساختار الکترونی SiC- Mn وابسته به حالات اوربیتالهای نیمه پر است. این حالات d با هیبریداسیون sp^3 اتمهای میزبان Si و C جفت شده اند.

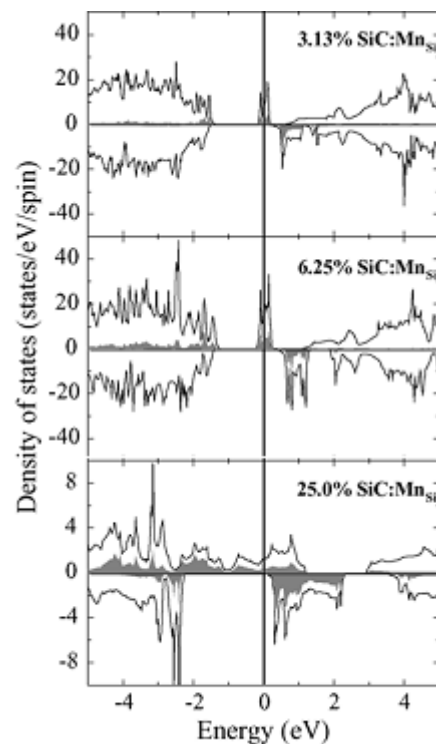


شکل ۵-۵: چگالی حالات موضعی تراز 3d برای غلظت ۲۵٪ منگنز .



شکل ۵-۶: چگالی حالات موضعی تراز 3d برای غلظت ۱۳٪ منگنز .

^۱ - Local Density of states



شکل ۷-۵: چگالی حالت‌های حاصل از محاسبات یون کیم و همکارانش [۳].

در شکل (۷-۵) نتایج حاصل از محاسبات یون کیم که از روش شبه پتانسیل فوق نرم امواج تخت استفاده کرده است را نشان داده ایم [۳]. مقایسه نمودارهای حاصل از محاسبه این پروژه و شکل (۷-۵) نشان می‌دهد که توافق خوبی بین محاسبات وجود دارد و به نتایج نسبتاً مشابهی دست یافته ایم.

با استفاده از چگالی حالت‌ها می‌توان مقادیر $E_F - E_{VBM_{Max}}$ و $E_{CBM_{Min}} - E_F$ را به طور مستقیم اندازه‌گیری کرد. به طوری که مقدار مینیمم انرژی نواری رسانش E_{CBM} و ماکزیمم انرژی نواری ظرفیت E_{VBM} را بدست آورد. در واقع با محاسبه مجموع مقادیر $E_F - E_{VBM}$ و $E_{CBM} - E_F$ می‌توان مقدار گاف نواری اسپینی را محاسبه کرد. نتایج حاصل در جدول (۷-۲) برای غلظت‌های مختلف SiC: Mn ارائه شده است.

جدول ۵-۲: مقایسه انرژی و مغناطش در غلظت های مختلف.

Mn doping concentration	Fermi Energy	Total magnetization (μ_B /cell)	$E_F - E_{VBM}$ (ev)	$E_{CBM} - E_F$ (ev)	Spin Down Band Gap
3.13%	10.84	3.05	1.2	0.34	1.54
6.25%	10.94	3.00	1.12	0.26	1.38
25%	10.76	3.00	1.96	0.27	2.23

در واقع گاف نواری اسپین پایین معیاری از پایداری نیم فلز است . علاوه بر آن فاصله بین بالاترین نقطه تراز ظرفیت تا تراز فرمی مقدار گاف چرخش اسپینی را می دهد ' که در واقع مشخص کننده میزان تمایل الکترونها برای چرخش اسپینی است. لذا هر چه مقدار این گاف کوچکتر باشد احتمال بروز چرخش اسپینی بیشتر است و انتقال الکترونها از اسپین پایین به بالا با سهولت بیشتری صورت می گیرد [۷].

ولتاژ قابل کاربرد در قطعات DMS، که نقش جدا سازی اسپین را دارند' به صورت مستقیم وابسته به رفتار نوار اسپینی مشخص شده در ماده DMS است. برای کاربرد قطعاتی با ولتاژ بالا، ماده DMS آن قطعه ، باید یک گاف نواری اسپینی، به اندازه کافی عریض داشته باشد . مقدار $E_F - E_{VBM}$ و $E_{CBM} - E_F$ ، محدوده ولتاژ بایاس برای تزریق یا استخراج الکترونها با اسپین قطبیده را مشخص می کند. همچنین در غلظتهای کم مشاهده می شود E_F به طور قابل ملاحظه ای به سمت مینیمم نوار رسانش انتقال پیدا کرده است.

۵-۴ خلاصه نتایج

پس از انتخاب شبکه براوه مناسب که دارای چهار اتم کربن و چهار اتم سیلیکون و یک اتم منگنز است' غلظت منگنز در ماده ۲۵٪ به دست می آید. اگر یک یا دو اتم منگنز در ابر یاخته ۶۴ اتمی

جایگزین شود غلظت‌های ۳/۱۳٪ و ۶/۲۵٪ به دست خواهد آمد. با محاسبه چگالی حالت‌ها برای ترکیباتی که با درصدهای مختلف منگنز آرایش یافته‌اند، مشاهده می‌شود اسپین الکترون‌ها در انرژی فرمی فقط حالت رو به بالا را انتخاب کرده است و در واقع قطبش اسپینی مشاهده می‌شود. در واقع یک خاصیت فلزی برای جهت اسپینی رو به بالا و یک گاف نواری در اطراف انرژی فرمی برای اسپین‌های رو به پایین مشاهده می‌شود که این موضوع منجر به یک رفتار نیمه فلزی در β -SiC:Mn می‌شود. طبق جدول (۵-۲) ملاحظه می‌شود که گشتاور مغناطیسی برای غلظت‌های مختلف تقریباً یکسان است و مقدار نسبتاً بزرگی دارد که با مقادیر گزارش شده یون کیم و همکارانش در توافق است [۳] و نشان دهنده فاز فرومغناطیسی نسبتاً پایایی در نمونه‌های SiC:Mn می‌باشد. با مشاهده رفتار نیمه فلزی گشتاور مغناطیسی بزرگ و پایا می‌توان گفت که ممکن است این ماده در قطعات اسپینترونیکی به عنوان یک وسیله القای اسپین و یا نظیر آن استفاده شود.

همچنین در غلظت‌های کم مشاهده می‌شود E_F به طور قابل ملاحظه‌ای به سمت مینیمم نوار رسانش انتقال پیدا کرده، که این مساله برای وسایل استخراج کننده اسپین مطلوب است.

با محاسبه گاف نواری اسپینی معیاری از پایداری نیم فلز به دست می‌آید که البته اگر چه در غلظت ۲۵٪ مقدار گاف نواری بیشتر است اما به دلیل درصد زیاد منگنز نمی‌توان آنرا به عنوان نیمرسانای مغناطیسی رقیق تلقی کرد و در این دسته نمی‌گنجد.

منابع

- 1- V. A.. Gubanov, C. Boekema, C.Y. Fong , Appl. phys. Lett , 78, 2, 2001.
- 2- M .S .Miao ,Walter R.L. Lambert, phys. Rev. B 68 , 125204, 2003.
- 3- Y. S. kim, Y.C.Chung , S.C. Yi, material science and engineering B 126, 194-196, 2006.
- 4- R. P. Feynman , phys. Tec. 56 , p.340 ,1939.
- 5- Y. S. Kim , et.al., Engineerig material , 264-268 , 13237-1240 , 2004.
- 6- K . Sato, H. Katayama, Semicond. Sci. Technol, 17, 367, 2000 .
- 7- M. Zhang , Z. Liu, J. Chen , et.al , J. Magn. Magn. Mter , 277 , 130 , 2004 .

پیوست

الف - شبه پتانسیل های فوق نرم

ب - شبه پتانسیل های پایسته بهنجار

الف.۱

<PP_INFO>
Generated using Vanderbilt code, version 7 3 4

Author: unknown Generation date: 4 3 5

Automatically converted from original format

1- 0 The Pseudo was generated with a Non-Relativistic
Calculation

2- 1.000000000000E+00 Local Potential cutoff radius

3-nl	pn	1	occ	Rcut	Rcut US	E	pseu
2S	2	0	2.00	10.000000000000	1.100000000000	-	
1.00978244769							
2P	2	1	2.00	10.000000000000	1.100000000000	-	
0.38870429969							

</PP_INFO>

<PP_HEADER>

4- 0 Version Number

5- C Element

6- US Ultrasoft pseudopotential

7- F Nonlinear Core Correction

8- SLA PW PBE PBE PBE Exchange-Correlation functional

9- 4.000000000000 Z valence

10- -10.72515811861 Total energy

11- 0.00000000 0.00000000 Suggested cutoff for wfc and rho

12- 1 Max angular momentum component

13- 721 Number of points in mesh

14- 2 4 Number of Wavefunctions, Number of Projectors

15- Wavefunctions	nl	1	occ
	2S	0	2.00
	2P	1	2.00

</PP_HEADER>

الف.٢

<PP_INFO>

Generated using Vanderbilt code, version 7 3 5

Author: unknown Generation date: 10 6 2004

Automatically converted from original format

1- 1 The Pseudo was generated with a Scalar-Relativistic
Calculation

2- 1.700000000000E+00 Local Potential cutoff radius

3-nl	pn	l	occ	Rcut	Rcut US	E pseu
3S	3	0	2.00	10.000000000000	1.700000000000	-0.79473140944
3P	3	1	2.00	10.000000000000	1.700000000000	-0.29996198285

</PP_INFO>

<PP_HEADER>

4- 0 Version Number

5- Si Element

6- US Ultrasoft pseudopotential

7- T Nonlinear Core Correction

8- SLA PW PBE PBE PBE Exchange-Correlation functional

9- 4.000000000000 Z valence

10- -9.19870184797 Total energy

11- 0.00000000 0.00000000 Suggested cutoff for wfc and rho

12- 2 Max angular momentum component

13- 899 Number of points in mesh

14- 2 6 Number of Wavefunctions, Number of

15- Projectors

Wavefunctions	nl	l	occ
3S	0	2.00	
3P	1	2.00	

</PP_HEADER>

الف.٣

<PP_INFO>

Generated using Vanderbilt code, version 7 3 2
Author: P. Giannozzi Generation date: 11 4 2002
Mn PBE with s and p semicore states in valence - rinner = 1.0

1- 1 The Pseudo was generated with a Scalar-Relativistic Calculation

2- 1.600000000000E+00 Local Potential cutoff radius

3- nl	pn	l	occ	Rcut	Rcut US	
E pseu						
3S	3	0	2.00	10.000000000000	1.600000000000	-
6.31184660600						
3P	3	1	6.00	10.000000000000	1.600000000000	-
4.01255152900						
4S	4	0	2.00	10.000000000000	1.600000000000	-
0.37536488300						
4P	4	1	0.00	10.000000000000	1.600000000000	-
0.10071976200						
3D	3	2	5.00	10.000000000000	1.600000000000	-
0.49768182300						

</PP_INFO>

<PP_HEADER>

4-	0	Version Number
5-	Mn	Element
6-	US	Ultrasoft pseudopotential
7-	F	Nonlinear Core Correction
8-	SLA PW PBE PBE	PBE Exchange-Correlation functional
9-	15.000000000000	Z valence
10-	-208.58508348300	Total energy
11-	0.00000000 0.00000000	Suggested cutoff for wfc and rho
12-	2	Max angular momentum component
13-	879	Number of points in mesh
14-	5 6	Number of Wavefunctions, Number of
15-	Projectors	
	Wavefunctions	
	nl	l occ
	3S	0 2.00
	3P	1 6.00
	4S	0 2.00
	4P	1 0.00
	3D	2 5.00

<PP_INFO>

Generated using ld1 code

Author: P. Giannozzi Generation date: 1990

Info: C LDA 2s2 2p2 VonBarth-Car, l=1 local

١.ب

```

1-   The Pseudo was generated with a Non-Relativistic Calculation

2-   0.000000000000E+00   Local Potential cutoff radius

3-   nl pn  1   occ           Rcut           Rcut US           E pseu
    2S  0  0  2.00   0.000000000000   0.000000000000   0.000000000000
    2P  0  1  2.00   0.000000000000   0.000000000000   0.000000000000
</PP_INFO>

<PP_HEADER>

4-   0                       Version Number

5-   C                       Element

6-   NC                      Norm - Conserving pseudopotential

7-   F                       Nonlinear Core Correction

8-   SLA  PZ   NOGX NOGC   PZ   Exchange-Correlation functional

9-   4.000000000000         Z valence

10-  0.000000000000         Total energy

11-  0.00000000  0.00000000 Suggested cutoff for wfc and rho

12-   0                       Max angular momentum component

13-  269                     Number of points in mesh

14-   2       1               Number of Wavefunctions, Number of Projectors

15- Wavefunctions           nl  1   occ
                             2S  0  2.00
                             2P  1  2.00
</PP_HEADER>

<PP_MESH>

```

ب. ٢٠

```
<PP_INFO>
```

```
Generated using unknown code
```

Author: Von Barth-Car (<1984)

Info: automatically converted from PWSCF format

1- The Pseudo was generated with a Non-Relativistic Calculation

2- 0.000000000000E+00 Local Potential cutoff radius

3- nl	pn	l	occ	Rcut	Rcut US	E pseu
3S	0	0	2.00	0.000000000000	0.000000000000	0.000000000000
3P	0	1	2.00	0.000000000000	0.000000000000	0.000000000000

</PP_INFO>

<PP_HEADER>

4- 0 Version Number

5- Si Element

6- NC Norm - Conserving pseudopotential

7- F Nonlinear Core Correction

8- SLA PZ NOGX NOGC PZ Exchange-Correlation functional

9- 4.000000000000 Z valence

10- 0.000000000000 Total energy

11-0.00000000 0.00000000 Suggested cutoff for wfc and rho

12- 1 Max angular momentum component

13- 431 Number of points in mesh

14- 2 2 Number of Wavefunctions, Number of Projectors

15-Wavefunctions	nl	1	occ
	3S	0	2.00
	3P	1	2.00

</PP_HEADER>

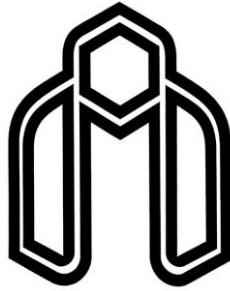
<PP_MESH>

Abstract:

Recently, Diluted Magnetic Semiconductors (DMS's) due to high ability to produce spin polarized current, has attracted a great attention. The

result of research was shown that doping of transition metal oxide elements in wide gap semiconductor lead to higher Curie temperature. SiC is one of the wide gap semiconductors, which is a good candidate for spintronics. In this work we investigate properties of this semiconductor and the effect of Mn doping on it.

Using ultrasoft Pseudopotential plan wave method by PWscf code , the effect of doping concentration of Mn on the magnetic properties of β -SiC (SiC:Mn) was quantitatively investigated. It is found that the SiC:Mn with low doping shows stable ferromagnetism. Using the density of states calculation, it is shown that SiC:Mn has half-metallic properties for doping concentration of 3.13%, 6.25%, 25% due to spin polarization at Fermi level, that is desirable characteristics for realizing spintronic devices.



Physics Department
Shahrood University Of Technology
Master of Science thesis
In Solid State Physics

Magnetic properties of SiC:Mn

By:
Samira Hosseini

Supervisors:
Dr. M. E. Ghazi – Dr. M. Izadifard

July 2008