





دانشکده فیزیک

گرایش حالت جامد

پایان نامه کارشناسی ارشد

عنوان:

مطالعه نظری خواص الکترونی و مغناطیسی کادمیم تلوراید

آلاییده با عناصر واسطه

سمیه نیک زاد

اساتید راهنما:

دکتر مرتضی ایزدی فرد

دکتر محمد ابراهیم قاضی

بهمن ماه ۱۳۹۲

ماحصل آموخته‌هایم را تقدیم می‌کنم به آنان که مهر آسمانی‌شان آرام‌بخش آلام زمینی‌ام است:

به همسر عزیزم

به استوارترین تکیه‌گاهم، دستان پر مهر پدرم

به سبزترین نگاه زندگیم، چشمان سبز مادرم

که هرچه آموختم در مکتب عشق‌ش آموختم و هرچه بگو شتم قطره‌ای از دریای بی‌کران مهربانیان را پاس
نتوانم بگویم.

امروز، هستی‌ام به امید شماست و فردا گلید باغ به‌شتم رضای شما

ره‌آوردی‌کران سنگ‌تراز این ارزان‌داشت‌م تا به خاک پیان نثار کنم، باشد که حاصل تلاشم نسیم‌گونه
غبار محسوسیتان را بروداید.

بوسه بر دستان پرمهرتان

تقدیر و شکر

منت خدای را عزوجل که طاعتش موجب قربت است و به شکر اندرش مزید نعمت... هر نفسی که فرو می رود مهد

حیات است و چون بر می آید مفرح ذات... پس در هر نفسی دو نعمت است و بر هر نعمتی شکری واجب...

از دست و زبان که بر آید کز عهده شکرش به در آید.

از بهر مهربان و دلسوزم که برای ادامه تحصیل نهایت لطف را نسبت به اینجانب ارزانی داشتند بسیار شگرمی
کنم.

از اساتید فریخته و کرامتدارم دکتر مرتضی ایزدی فرد و دکتر محمد ابراهیم قاضی که زحمت فراوانی در امر پیشبرد این پایان
نامه متقبل شدند کمال شکر و قدردانی را دارم.

و همچنین از آقای آریانی به خاطر راهنمایی‌های بسیار با ارزششان صمیمانه شکر و قدردانی می‌کنم.

تعهد نامه

اینجانب سمیه نیک زاد دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک دانشکده فیزیک

دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه متعهد می شوم.

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

تاریخ ۱۳۹۲/۱۱/۲۹

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

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

چکیده

نظریه تابعی چگالی یکی از روش های مهم برای مطالعه و بررسی سیستم های بس ذره ای است. در این سیستم ها وجود تعداد زیاد ذرات مانع رسیدن به جواب دقیق برای حل معادله شرودینگر به منظور بدست آوردن ویژه تابع و ویژه مقدار حالت پایه سیستم است و به ناچار از تقریب هایی نظیر شیب تعمیم یافته (GGA) و چگالی موضعی (LDA) استفاده می شود.

در این پایان نامه خواص الکترونی و مغناطیسی کادمیم تلوراید آلایش یافته با عناصر واسطه کروم، منگنز، آهن و کبالت با غلظت های ۶/۲۵، ۱۲/۵ و ۲۵ درصد با تقریب GGA در فاز پایدارشان بررسی شده است. در این کار با استفاده از بهینه سازی حجم، انرژی تعادلی و مدول حجمی محاسبه شده است. مقایسه انرژی تعادلی محاسبه شده برای ترکیبات نشان داد که فاز پایدار تمام ترکیبات به جز ترکیبات حاصل شده از آلایش کادمیم تلوراید با منگنز فرومغناطیس می باشد. این بررسی نشان داد که فاز پایدار نمونه آلاییده با منگنز آنتی فرومغناطیس است. بررسی نتایج محاسبات انجام شده نشان داد که کادمیم تلوراید آلاییده با کروم، آهن، کبالت و منگنز (در فاز فرومغناطیس) خواص نیم فلزی دارد و کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز در فاز آنتی فرومغناطیس خواص فلزی دارد. مقایسه مقادیر گاف های انرژی محاسبه شده نشان داد که ترکیب $\text{Cd}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{Te}$ در بین ترکیبات بررسی شده دارای بیشترین گاف انرژی است. محاسبه چگالی حالت ها وجود هیبریداسیون اوربیتال d عناصر واسطه با اوربیتال p اتم های آنیون (تلوراید) را نشان داد. همچنین محاسبه گشتاور مغناطیسی کل نمونه ها نشان داد که سهم عمده در ایجاد این گشتاور مربوط به عناصر واسطه است که به علت هیبریداسیون اوربیتال های Te-p و d عناصر واسطه ایجاد می شود.

کلمات کلیدی :

کادمیم تلوراید، نظریه تابعی چگالی، Wien2k، تقریب شیب تعمیم یافته، خواص مغناطیسی.

لیست مقالات مستخرج از پایان نامه:

۱- نیک زاد، سمیه؛ ایزدی فرد، مرتضی؛ قاضی، محمد ابراهیم؛ (۱۳۹۲) " مطالعه نظری ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نیمرسانای کادمیم تلوراید" مقاله نامه کنفرانس سالانه ایران، بیرجند.

۲- نیک زاد، سمیه؛ ایزدی فرد، مرتضی؛ قاضی، محمد ابراهیم؛ (۱۳۹۲) " مطالعه ابتدا به ساکن سیستم فرومغناطیس $Cd_{1-x}Cr_xTe$ " مقاله نامه کنفرانس فیزیک محاسباتی ایران، تهران.

فصل اول : مقدمه ای بر فیزیک مواد نیمرسانا و کاربردهای آنها

مقدمه.....	۲
۱-۱ مروری کلی بر نیمرساناهای گروه II-VI.....	۲
۲-۱ معرفی کادمیم تلوراید.....	۳
۱-۲-۱ ساختار بلوری کادمیم تلوراید.....	۳
۲-۲-۱ کاربردهای کادمیم تلوراید.....	۵
۳-۱ خواص مغناطیسی مواد.....	۶
۴-۱ نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده (DMSs).....	۶
۱-۴-۱ برهمکنش های مغناطیسی در نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده.....	۸
۲-۴-۱ ثابت های تبادلی.....	۹

فصل دوم : نظریه تابعی چگالی

۱-۲ سیستم های بس ذره ای.....	۱۲
۱-۱-۲ تقریب بورن - اپنهایمر.....	۱۳
۲-۱-۲ تقریب هارتری.....	۱۴
۳-۱-۲ تقریب هارتری- فوک.....	۱۵
۲-۲ نظریه تابعی چگالی.....	۱۶
۳-۲ معادلات کوهن-شم.....	۱۷
۴-۲ تابعی همبستگی - تبادلی.....	۱۹
۱-۴-۲ تقریب چگالی موضعی (LDA).....	۲۰
۲-۴-۲ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA).....	۲۱
۵-۲ روش های حل معادلات کوهن-شم.....	۲۱
۱-۵-۲ روش امواج تخت تقویت شده (APW).....	۲۲
۲-۵-۲ روش امواج تخت تقویت شده خطی (LAPW).....	۲۳
۳-۵-۲ روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل (FP- LAPW).....	۲۴
۴-۵-۲ روش امواج تخت تقویت شده خطی با اوربیتال موضعی (LO- LAPW).....	۲۴
۶-۲ معرفی نرم افزار مورد استفاده برای انجام محاسبات شبیه سازی شده در این پایان نامه.....	۲۵
۱-۶-۲ مرحله آماده سازی.....	۲۶
۱-۱-۶-۲ برنامه های مرحله آماده سازی.....	۲۶
۲-۶-۲ مرحله حل خودسازگار.....	۲۷
۱-۲-۶-۲ برنامه های مرحله حل خودسازگار.....	۲۷

فصل سوم : مروری بر برخی مطالعات انجام شده در زمینه کادمیم تلوراید خالص و آلاییده با عناصر واسطه

۱-۳	مروری بر برخی مطالعات انجام شده در زمینه خواص مغناطیسی و اپتیکی کادمیم تلوراید خالص.....	۳۰
۲-۳	مروری بر برخی مطالعات انجام شده در زمینه کادمیم تلوراید آلاییده با عناصر واسطه.....	۳۲

فصل چهارم : محاسبه خواص الکترونی و اپتیکی کادمیم تلوراید خالص

۴۲	مقدمه.....	۴۲
۴۲	۱-۴ پارامترهای ورودی نرم افزار.....	۴۲
۴۳	۱-۱-۴ طول و زاویه پیوند.....	۴۳
۴۴	۲-۴ بهینه سازی پارامترهای شبکه و خواص ساختاری CdTe.....	۴۴
۴۴	۱-۲-۴ بهینه سازی ساختار.....	۴۴
۴۷	۳-۴ بررسی ساختار الکترونی CdTe با تقریب GGA.....	۴۷
۴۷	۱-۳-۴ ساختار نواری.....	۴۷
۴۸	۲-۳-۴ چگالی حالت ها.....	۴۸
۵۰	۴-۴ بررسی خواص الکترونی CdTe با تقریب LDA.....	۵۰
۵۰	۱-۴-۴ ساختار نواری.....	۵۰
۵۱	۲-۴-۴ چگالی حالت ها.....	۵۱
۵۲	۵-۴ بررسی خواص اپتیکی CdTe.....	۵۲
۵۲	۱-۵-۴ تابع دی الکتریک.....	۵۲
۵۵	۲-۵-۴ رسانندگی اپتیکی.....	۵۵
۵۶	۳-۵-۴ ضریب شکست و ضریب خاموشی.....	۵۶
۵۸	۴-۵-۴ طیف اتلاف انرژی الکترون.....	۵۸
۵۹	۵-۵-۴ بازتابندگی.....	۵۹
۶۰	۶-۵-۴ ضریب جذب.....	۶۰
۶۱	نتیجه گیری.....	۶۱

فصل پنجم : بررسی ساختار الکترونی و خواص مغناطیسی کادمیم تلوراید آلاییده با عناصر واسطه

۶۴	مقدمه.....	۶۴
۶۴	۱-۵ روش انجام محاسبات.....	۶۴
۶۵	۲-۵ محاسبه فاز پایدار مغناطیسی.....	۶۵

۳-۵	بهینه سازی انرژی.....	۶۷
۱-۳-۵	محاسبه ثابت شبکه.....	۷۰
۲-۳-۵	مدول حجمی، مشتق مدول حجمی و تراکم پذیری.....	۷۲
۴-۵	محاسبه چگالی حالت های نمونه ها.....	۷۴
۱-۴-۵	چگالی حالت های کادمیم تلوراید آلاییده با کروم.....	۷۴
۲-۴-۵	چگالی حالت های کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز.....	۷۷
۱-۲-۴-۵	چگالی حالت های کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز در فاز فرومغناطیس.....	۷۷
۲-۲-۴-۵	چگالی حالت های کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز در فاز آنتی فرومغناطیس.....	۷۹
۳-۴-۵	چگالی حالت های کادمیم تلوراید آلاییده با آهن.....	۸۱
۴-۴-۵	چگالی حالت های کادمیم تلوراید آلاییده با کبالت.....	۸۳
۵-۵	ساختار نواری نمونه ها.....	۸۵
۱-۵-۵	ساختار نواری کادمیم تلوراید آلاییده با کروم.....	۸۵
۲-۵-۵	ساختار نواری کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز.....	۸۷
۱-۲-۵-۵	ساختار نواری کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز در فاز فرومغناطیس.....	۸۷
۲-۲-۵-۵	ساختار نواری کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز در فاز آنتی فرومغناطیس.....	۹۰
۳-۵-۵	ساختار نواری کادمیم تلوراید آلاییده با آهن.....	۹۱
۴-۵-۵	ساختار نواری کادمیم تلوراید آلاییده با کبالت.....	۹۳
۶-۵	بررسی خواص مغناطیسی نمونه ها.....	۹۶
۱-۶-۵	ثابت های تبادلی.....	۹۶
۲-۶-۵	گشتاور مغناطیسی.....	۹۷
	نتیجه گیری.....	۱۰۱
	مراجع.....	۱۰۳

فهرست شکل ها :

عنوان	صفحه
فصل اول	
شکل (۱-۱) : سلول واحد CdTe در فاز زینک بلند [۳].....	۴
شکل (۲-۱) : سلول واحد CdTe در فاز ورتسایت [۳].....	۴
شکل (۳-۱) : دیاگرام چگالی حالت های قطبیده اسپینی در برهمکنش تبادل p-d [۱۰].....	۹
فصل دوم	
شکل (۱-۲) : طرح شماتیک از یک دستگاه بس ذره ای شامل الکترون ها و هسته ها [۱۵].....	۱۲
شکل (۲-۲) : نمایش کره های مافین-تین و ناحیه بین جایگاهی [۲۲].....	۲۳
فصل سوم	
شکل (۱-۳) : ساختار نواری و چگالی حالت های محاسبه شده برای CdTe با دو تقریب GGA و GGA+U [۲۴].....	۳۰
شکل (۲-۳) : نمودار قسمت حقیقی تابع دی الکتریک کادمیم تلوراید [۲۴].....	۳۱
شکل (۳-۳) : نمودار قسمت موهومی تابع دی الکتریک کادمیم تلوراید [۲۴].....	۳۲
شکل (۴-۳) : منحنی چگالی حالت های جزئی اتم های Cd ، Te و Cr در ترکیب [۲۵].....	۳۳
شکل (۵-۳) : منحنی چگالی حالت های جزئی اتم های Cd ، Te و Cr در ترکیب $Cd_{0.75}Cr_{0.25}Te$ [۱۲].....	۳۵
شکل (۶-۳) : منحنی چگالی حالت های جزئی اتم های Co و Te و چگالی حالت های کل ترکیب $Cd_{0.75}Co_{0.25}Te$ [۲۸].....	۳۸
شکل (۷-۳) : ساختار نواری برای الکترون های اسپین بالا و پایین ترکیب $Cd_{0.75}Co_{0.25}Te$ [۲۸].....	۳۹
فصل چهارم	
شکل (۱-۴) : نمودار انرژی بر حسب حجم CdTe محاسبه شده با تقریب GGA.....	۴۶
شکل (۲-۴) : نمودار انرژی بر حسب حجم CdTe محاسبه شده با تقریب LDA.....	۴۶
شکل (۳-۴) : ساختار نواری محاسبه شده برای CdTe خالص با استفاده از تقریب GGA.....	۴۷
شکل (۴-۴) : چگالی حالت های کل محاسبه شده برای CdTe مربوط به اسپین بالا و پایین با تقریب GGA.....	۴۸
شکل (۵-۴) : چگالی حالت های کل محاسبه شده برای Cd و Te در ترکیب CdTe با تقریب GGA.....	۴۹

- شکل (۴-۶) : چگالی حالت‌های جزئی محاسبه شده برای اوربیتال های s ، p و d اتم Cd در ترکیب CdTe با تقریب GGA..... ۴۹
- شکل (۴-۷) : چگالی حالت‌های جزئی محاسبه شده برای اوربیتال های s ، p و d اتم Te در ترکیب CdTe با تقریب GGA..... ۵۰
- شکل (۴-۸) : ساختار نواری محاسبه شده برای CdTe با استفاده از تقریب LDA..... ۵۱
- شکل (۴-۹) : چگالی حالت‌های کل محاسبه شده برای CdTe مربوط به اسپین بالا و پایین با تقریب LDA..... ۵۲
- شکل (۴-۱۰) : گذار درون نواری و بین نواری یک الکترون از حالت اولیه $|i\rangle$ به حالت نهایی $|f\rangle$ [۴۲]..... ۵۳
- شکل (۴-۱۱) : منحنی قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی..... ۵۴
- شکل (۴-۱۲) : منحنی رسانندگی اپتیکی CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی..... ۵۶
- شکل (۴-۱۳) : منحنی ضریب شکست و ضریب خاموشی CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی..... ۵۷
- شکل (۴-۱۴) : منحنی طیف اتلاف انرژی CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی..... ۵۸
- شکل (۴-۱۵) : منحنی بازتابندگی CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی..... ۵۹
- شکل (۴-۱۶) : منحنی جذب CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی..... ۶۰

فصل پنجم

- شکل (۵-۱) : منحنی بهینه سازی حجم سلول $Cd_{1-x}Cr_xTe$ برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ کروم در فاز فرومغناطیس..... ۶۷
- شکل (۵-۲) : منحنی بهینه سازی حجم سلول $Cd_{1-x}Mn_xTe$ برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ منگنز در فاز آنتی فرومغناطیس..... ۶۸
- شکل (۵-۳) : منحنی بهینه سازی حجم سلول $Cd_{1-x}Fe_xTe$ برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ آهن در فاز فرومغناطیس..... ۶۸
- شکل (۵-۴) : منحنی بهینه سازی حجم سلول $Cd_{1-x}Co_xTe$ برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ کبالت در فاز فرومغناطیس..... ۶۹
- شکل (۵-۵) : منحنی تغییرات ثابت شبکه بر حسب غلظت عناصر واسطه ترکیبات $Cd_{1-x}TM_xTe$ (TM=Cr, Mn, Fe, Co)..... ۷۲
- شکل (۵-۶) : چگالی حالت‌های کل $Cd_{1-x}Cr_xTe$ برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ کروم در فاز فرومغناطیس..... ۷۴
- شکل (۵-۷) : چگالی حالت‌های جزئی ترکیب $Cd_{0.9375}Cr_{0.0625}Te$ در فاز فرومغناطیس..... ۷۵
- شکل (۵-۸) : چگالی حالت‌های کل $Cd_{1-x}Mn_xTe$ برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ منگنز در فاز فرومغناطیس..... ۷۶

شکل (۵-۹): چگالی حالت‌های جزئی ترکیب $\text{Cd}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{Te}$ در فاز فرومغناطیس ۷۸

شکل (۵-۱۰): چگالی حالت‌های کل $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ منگنز در فاز آنتی فرومغناطیس ۷۹

شکل (۵-۱۱): چگالی حالت‌های جزئی ترکیب $\text{Cd}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{Te}$ در فاز آنتی فرومغناطیس ۸۰

شکل (۵-۱۲): چگالی حالت‌های کل $\text{Cd}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Te}$ برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ آهن در فاز فرومغناطیس ۸۱

شکل (۵-۱۳): چگالی حالت‌های جزئی ترکیب $\text{Cd}_{0.9375}\text{Fe}_{0.0625}\text{Te}$ در فاز فرومغناطیس ۸۲

شکل (۵-۱۴): چگالی حالت‌های کل $\text{Cd}_{1-x}\text{Co}_x\text{Te}$ برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ کبالت در فاز فرومغناطیس ۸۳

شکل (۵-۱۵): چگالی حالت‌های جزئی ترکیب $\text{Cd}_{0.9375}\text{Co}_{0.0625}\text{Te}$ در فاز فرومغناطیس ۸۴

شکل (۵-۱۶): ساختارهای نواری $\text{Cd}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Te}$ با اسپین بالا و پایین برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ کروم در فاز فرومغناطیس ۸۵

شکل (۵-۱۷): ساختارهای نواری $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ با اسپین بالا و پایین برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ منگنز در فاز فرومغناطیس ۸۸

شکل (۵-۱۸): ساختارهای نواری $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ با اسپین بالا و پایین برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ منگنز در فاز آنتی فرومغناطیس ۹۰

شکل (۵-۱۹): ساختارهای نواری $\text{Cd}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Te}$ با اسپین بالا و پایین برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ آهن در فاز فرومغناطیس ۹۲

شکل (۵-۲۰): ساختارهای نواری $\text{Cd}_{1-x}\text{Co}_x\text{Te}$ با اسپین بالا و پایین برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ کبالت در فاز فرومغناطیس ۹۴

فهرست جدول ها :

عنوان	صفحه
فصل اول	
جدول (۱-۱) : برخی از ویژگی های کادمیم تلوراید [۶].....	۵
فصل سوم	
جدول (۱-۳) : مقادیر محاسبه شده برای گاف نواری (E_g) و گاف نیم فلزی (g_h) ترکیبات $Cd_{1-x}Cr_xTe$ با تقریب GGA [۲۵].....	۳۳
جدول (۲-۳) : مقادیر ثابت شبکه (a)، مدول حجمی (B) و گشتاورهای مغناطیسی موضعی ترکیبات $Cd_{1-x}Cr_xTe$ [۲۵].....	۳۴
جدول (۳-۳) : مقادیر ثابت شبکه (a)، گشتاور مغناطیسی کل (M)، گاف نیم فلزی (G_{HM}) و گاف اسپین پایین (G_{MIS}) ترکیبات $Cd_{1-x}Cr_xTe$ [۱۲].....	۳۴
جدول (۴-۳) : مقادیر ثابت شبکه (a) و گاف نواری اسپین پایین (E_g) ترکیبات $Cd_{1-x}Cr_xTe$ [۲۶].....	۳۵
جدول (۵-۳) : مقادیر گشتاورهای مغناطیسی کل و موضعی ترکیبات $Cd_{1-x}Cr_xTe$ [۲۶].....	۳۶
جدول (۶-۳) : مقادیر ثابت شبکه (a)، مدول حجمی (B) و مشتق مدول حجمی (B') ترکیبات $Cd_{1-x}Mn_xTe$ [۲۷].....	۳۶
جدول (۷-۳) : مقادیر محاسبه شده برای شکافتگی اسپینی لبه نواری و ثابت های تبدیلی نوارهای ظرفیت و رسانش ترکیبات $Cd_{1-x}Mn_xTe$ [۲۷].....	۳۷
جدول (۸-۳) : گشتاورهای مغناطیسی موضعی و کل ترکیبات $Cd_{1-x}Mn_xTe$ بر حسب مگنتون بوهر (μ_B) [۲۷].....	۳۷
جدول (۹-۳) : مقادیر ثابت شبکه (a)، مدول حجمی (B)، مشتق مدول حجمی (B') و گاف نواری (E_g) ترکیب $Cd_{0.75}Co_{0.25}Te$ [۲۸].....	۳۸
جدول (۱۰-۳) : مقادیر محاسبه شده برای شکافتگی اسپینی لبه نواری و ثابت های تبدیلی نوارهای ظرفیت و رسانش ترکیب $Cd_{0.75}Co_{0.25}Te$ [۲۸].....	۴۰
فصل چهارم	
جدول (۱-۴) : گروه بندی الکترون ها به مغزه، شبه مغزه و ظرفیتی در $CdTe$	۴۳
جدول (۲-۴) : طول و زاویه پیوند محاسبه شده برای $CdTe$ در فاز مکعبی.....	۴۳
جدول (۳-۴) : مقادیر بار کل اتم ها، بار داخل کره مافین - تین و بار بین جایگاهی هر اتم با تقریب GGA.....	۴۳

جدول (۴-۴) : مقادیر بار کل اتم ها، بار داخل کره مافین - تین و بار بین جایگاهی هر اتم با تقریب LDA..... ۴۴

جدول (۵-۴) : مقادیر ثابت شبکه محاسبه شده برای CdTe با دو تقریب GGA و LDA..... ۴۴

جدول (۶-۴) : مقادیر محاسبه شده برای مدول حجمی، مشتق مدول حجمی و تراکم پذیری CdTe با دو تقریب GGA و LDA..... ۴۵

جدول (۷-۴) : مقادیر گاف نواری محاسبه شده برای CdTe با استفاده از تقریب GGA..... ۴۸

جدول (۸-۴) : مقادیر گاف نواری محاسبه شده برای CdTe با استفاده از تقریب LDA..... ۵۱

جدول (۹-۴) : موقعیت قله های نمودار سهم موهومی تابع دی الکتریک CdTe..... ۵۵

جدول (۱۰-۴) : مقادیر ضریب شکست استاتیک تجربی و تئوری محاسبه شده برای CdTe..... ۵۷

فصل پنجم:

جدول (۱-۵) : مقایسه انرژی دو ترکیب $Cd_{0.75}Cr_{0.25}Te$ و $CdCr_{0.25}Te_{0.75}$ ۶۵

جدول (۲-۵) : مقادیر انرژی حالت پایه در سه فاز فرومغناطیس، آنتی فرومغناطیس و پارامغناطیس برای ترکیبات $Cd_{1-x}TM_xTe$ (Te=Cr, Mn, Fe, Co)..... ۶۶

جدول (۳-۵) : مقادیر ثابت شبکه آلیاژ سه تایی $Cd_{1-x}Cr_xTe$ ($x=0.125$ و 0.625)..... ۷۰

جدول (۴-۵) : مقادیر ثابت شبکه آلیاژ سه تایی $Cd_{1-x}Mn_xTe$ ($x=0.125$ و 0.625)..... ۷۱

جدول (۵-۵) : مقادیر ثابت شبکه آلیاژ سه تایی $Cd_{1-x}Fe_xTe$ ($x=0.125$ و 0.625)..... ۷۱

جدول (۶-۵) : مقادیر ثابت شبکه آلیاژ سه تایی $Cd_{1-x}Co_xTe$ ($x=0.125$ و 0.625)..... ۷۱

جدول (۷-۵) : مقادیر محاسبه شده مدول حجمی، مشتق مدول حجمی و تراکم پذیری ترکیبات $Cd_{1-x}TM_xTe$ (Te=Cr, Mn, Fe, Co)..... ۷۳

جدول (۸-۵) : مقادیر محاسبه شده گاف نیم فلزی و گاف نواری اسپین پایین ترکیبات $Cd_{1-x}Cr_xTe$ در فاز فرومغناطیس..... ۸۷

جدول (۹-۵) : مقادیر محاسبه شده گاف نیم فلزی و گاف نواری اسپینی ترکیبات $Cd_{1-x}Mn_xTe$ در فاز فرومغناطیس..... ۸۹

جدول (۱۰-۵) : مقادیر محاسبه شده گاف نیم فلزی و گاف نواری اسپینی ترکیبات $Cd_{1-x}Fe_xTe$ در فاز فرومغناطیس..... ۹۳

جدول (۱۱-۵) : مقادیر محاسبه شده گاف نیم فلزی و گاف نواری اسپین بالای ترکیبات $Cd_{1-x}Co_xTe$ در فاز فرومغناطیس..... ۹۵

جدول (۱۲-۵) : مقادیر محاسبه شده ثابت های تبادلی ترکیبات $Cd_{1-x}TM_xTe$ (TM=Cr, Mn, Fe, Co)..... ۹۶

جدول (۱۳-۵) : مقادیر محاسبه شده گشتاورهای مغناطیسی کل و موضعی هر اتم شرکت کننده در ترکیب $Cd_{1-x}Cr_xTe$ در فاز فرومغناطیس..... ۹۷

جدول (۱۴-۵) : مقادیر محاسبه شده گشتاورهای مغناطیسی کل و موضعی هر اتم شرکت کننده در ترکیب $Cd_{1-x}Mn_xTe$ در فاز فرومغناطیس..... ۹۸

جدول (۵-۱۵) : مقادیر محاسبه شده گشتاورهای مغناطیسی کل و موضعی دو اتم منگنز با اسپین های مخالف در ترکیب $Cd_{1-x}Mn_xTe$ در فاز آنتی فرومغناطیس..... ۹۹

جدول (۵-۱۶) : مقادیر محاسبه شده گشتاورهای مغناطیسی کل و موضعی هر اتم شرکت کننده در ترکیب $Cd_{1-x}Fe_xTe$ در فاز فرومغناطیس..... ۹۹

جدول (۵-۱۷) : مقادیر محاسبه شده گشتاورهای مغناطیسی کل و موضعی هر اتم شرکت کننده در ترکیب $Cd_{1-x}Co_xTe$ در فاز فرومغناطیس..... ۹۹

فصل اول:

مقدمه ای بر فنریک مواد نیم رسانا و کاربردهای آنها

مقدمه

پایه علم مواد بر درک ساختار الکترونی ماده استوار است. بررسی رفتار الکترون ها در یک ماده بر پایه پیشرفت یافته های تئوری و روش های محاسباتی است که می توانند یک سیستم برهمکنش کننده شامل تعداد بیشماری الکترون و هسته را به طور دقیق مورد بحث قرار دهند. پایه و اساس این روش های محاسباتی شبیه سازی است و شبیه سازی خواص فیزیکی یک سیستم تنها با حل معادله شرودینگر بس ذره ای به روش مکانیک کوانتومی حاصل می شود [۱].

در این فصل پس از معرفی مختصر نیمرساناهای ترکیبی گروه II-VI به بیان نظریه تابعی چگالی برای حل مسائل بس ذره ای کوانتومی سیستم های در حالت پایه می پردازیم.

۱-۱ مروری کلی بر نیمرساناهای گروه II-VI

ترکیبات نیمرسانای گروه II-VI از ترکیب اتم های گروه IIB با اتم های گروه VIA جدول تناوبی حاصل می شوند. این نیمرساناها نقطه ذوب بالایی دارند و به دلیل یونیزاسیون بالا زمانی که آن ها را تا نقطه ذوب شان حرارت دهیم پدیده فوق گرمایی^۱ رخ می دهد. متأسفانه به علت فشار بخار بالا در نقطه ذوب، رشد بلورهای حجمی از مذاب مشکل است. اما از سوی دیگر رشد بلورهای حجمی از فاز بخار لایه های نازک آن ها آسان است [۲].

ترکیبات نیمرسانای گروه II-VI معمولاً در دو فاز زینک بلند^۲ و ورتسایت^۳ متبلور می شوند و در دمای اتاق معمولاً یکی از این فازها پایدارتر است [۳]. این ترکیبات دارای گاف نواری مستقیم (به غیر از دو ترکیب HgTe و HgSe) و ضریب جذب و گسیل بالا هستند. در کاتیون ترکیبات این گروه جایگزیده بودن اوربیتال های d از اهمیت بالایی برخوردار است؛ چون این اوربیتال ها نقش مهمی در پیوند بین اتم ها ایفا می کنند [۲].

^۱ Overheating

^۲ Zinc blende

^۳ Wurtzite

این ترکیبات از جمله مهمترین مواد برای ساخت قطعات اپتوالکترونیکی با عملکرد بالا مانند دیودهای گسیلنده نور (LED) و دیودهای لیزری (LD) عمل کننده در گستره طیفی آبی و فرابنفش هستند. در بین ترکیبات این گروه کادمیم تلوراید (CdTe)، کادمیم سولفاید (CdS) و کادمیم سلناید (CdSe) از اهمیت ویژه ای برای ساخت قطعات اپتوالکترونیکی برخوردار می باشند [۲]. در ادامه به معرفی یکی از ترکیبات این گروه یعنی CdTe پرداخته شده است.

۱-۲ معرفی کادمیم تلوراید

از شناسایی ترکیب کادمیم تلوراید حدود صد سال می گذرد. تا سال ۱۹۴۰ میلادی از CdTe به عنوان یک رنگدانه استفاده می شده است. در سال ۱۹۴۸ میلادی اولین سلول های نوری بر پایه CdTe ساخته شد [۴]. آنچه مشخص است CdTe یک نیمرسانا با گاف نواری مستقیم (حدود ۱/۵ eV) در دمای اتاق) است که خصوصیات قابل توجهی از جمله تحرک الکترونی نسبتا بالا، ضریب جذب بالا، لبه جذب تیز و پیوند شیمیایی یونی - کووالانسی با ضریب یونیزاسیون ۰/۵۵ دارد [۵]. به طور کلی خواص اپتیکی لایه های نازک نیمرسانا همانند ضریب جذب و گاف نواری می تواند به شرایط رشد و همچنین روش رشد وابسته باشد [۴]. معمولا کادمیم تلوراید چه به صورت حجمی و چه لایه نازک از خود خواص یک نیمرسانای نوع p را نشان می دهد. با این وجود در ضخامت های متفاوت، یا بر اثر ترکیب با اکسیژن و کنترل دمای زیرلایه خواص یک نیمرسانای نوع n را نیز از خود بروز می دهد. این مسئله برای استفاده از این ترکیب در ساخت دیودها و ترانزیستورها بسیار حائز اهمیت است [۵].

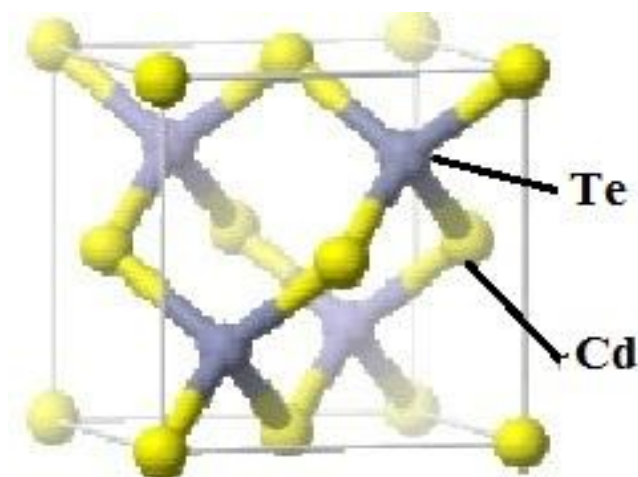
۱-۲-۱ ساختار بلوری کادمیم تلوراید

تحت شرایط فشار و دمای معمول، CdTe در ساختار زینک بلند (با گروه فضایی F43m) متبلور می شود؛ که شامل دو زیر شبکه با ساختار مکعبی مرکز وجهی^۱ (FCC) است که یکی نسبت به دیگری به میزان ۰/۲۵ در جهت صفحه (۱ ۱ ۱) جابجا شده است [۳]. یکی از زیر شبکه ها به وسیله کاتیون ها و دیگری به وسیله آنیون ها اشغال می شود. هر مکان اتمی به وسیله چهار اتم نزدیک همسایه در یک

^۱Face Center Cubic

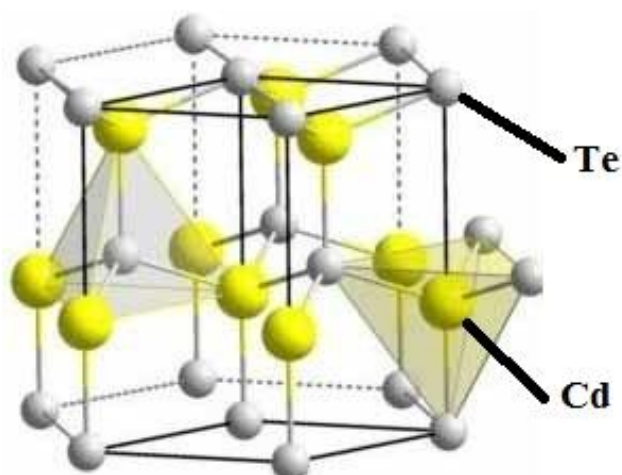
ساختار چهارگوشی^۱ احاطه شده است. در دمای اتاق ثابت شبکه این ماده $6/48 \text{ \AA}$ گزارش شده است.

در شکل (۱-۱) سلول واحد ساختار CdTe در فاز زینک بلند نشان داده شده است [۳].



شکل (۱-۱): سلول واحد CdTe در فاز زینک بلند [۳].

CdTe، تحت بعضی شرایط رشد، در ساختار بلوری ورتسایت که از دو زیر شبکه تنگ پکیده شش گوشه تشکیل شده است؛ متبلور می شود. ثابت های شبکه این ساختار مقادیر $a=4/58 \text{ \AA}$ و $c=7/5$ را دارا می باشند [۳ و ۶]. در شکل (۲-۱) سلول واحد ساختار CdTe در فاز ورتسایت نشان داده شده است.



شکل (۲-۱): سلول واحد CdTe در فاز ورتسایت [۳].

در جدول (۱-۱) نیز بعضی از ویژگی های CdTe به طور خلاصه گزارش شده است.

^۱Tetrahedral

جدول (۱-۱) : برخی از ویژگی های کادمیم تلوراید [۶].

$0.21 \text{ J/g}^\circ\text{C}$	گرمای ویژه	$6.48 \text{ \AA}$	ثابت شبکه زینک بلند در دمای اتاق
۲/۷۲	ضریب بازتاب	5.86 g/Cm^3	چگالی ساختار زینک بلند در دمای اتاق
1.474 eV مستقیم	گاف انرژی ساختار زینک بلند در دمای اتاق	$4.58 \text{ \AA}$ و $7.5 \text{ \AA}$	ثابت های شبکه در ساختار ورتسایت در دمای اتاق
$1050 \text{ Cm}^2/\text{VS}$	تحرك الكترون هال در دمای اتاق	زینک بلند	فاز پایدار در دمای اتاق
۴۴/۵	مدول حجمی	1041°C	نقطه جوش ساختار زینک بلند
		$0.062 \text{ W/Cm}^\circ\text{C}$	رسانندگی گرمایی در 20°C

۲-۲-۱ کاربردهای کادمیم تلوراید

در ادامه به بعضی از کاربردهای CdTe اشاره شده است.

CdTe یک ماده بسیار خوب برای استفاده در قطعات اپتوالکترونیکی مختلف از جمله دیودهای

نورگسیل، ترانزیستورها و آشکارسازهای پرتو x و γ است [۷].

این ماده کاربرد مهمی به عنوان زیر لایه برای رشد رو آراستی $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ برای استفاده در

آشکارسازهای مادون قرمز دارد و مهمترین نیمرسانا برای آشکارسازی مادون قرمز در محدوده

$8 - 12 \mu\text{m}$ است [۷ و ۸].

در سال های اخیر به دلیل معلوم شدن امکان رشد CdTe روی زیرلایه های سیلیکونی به ابعاد بزرگ

(علی رغم عدم توافق در ثابت های شبکه) توجه به این ترکیب روزافزون شده است [۸].

لایه های نازک CdTe یک ترکیب مناسب برای ساخت سلول های خورشیدی پر بازده و ارزان قیمت

به دلیل محدوده گاف نواری آن و همچنین ضریب جذب بالا و رشد نسبتاً آسان آن است [۸].

لایه های نازک CdTe نوع p به همراه لایه های نازک نیمرسانای CdS نوع n را می توان برای ساخت

یک پیوندگاه pn در سلول های خورشیدی بکار برد. با وجود این که سلول های خورشیدی ساخته

شده از پیوندگاه CdTe/CdS مزایای بسیاری دارند، اما به جهت عدم انطباق ثابت های شبکه بلوری

بین لایه ها بازده سلول خورشیدی حاصل کاهش می یابد؛ در حالی که اتصال سلول های خورشیدی با ساختار همگون p-CdTe/n-CdTe مشکل یاد شده را نخواهد داشت [۷].

۱-۳ خواص مغناطیسی مواد

مواد از نظر دارا بودن خواص مغناطیسی در پنج گروه فرومغناطیس، آنتی فرومغناطیس، دیا مغناطیس، پارامغناطیس و فری مغناطیس دسته بندی می شوند. در مواد فرومغناطیس هر حوزه مغناطیسی گشتاور مغناطیسی متفاوت با حوزه های مجاور دارد. در این مواد گشتاورهای اتمی مجاور قویا با هم برهمکنش داشته و اثر این برهمکنش ها می تواند منجر به تولید یک گشتاور مغناطیسی خالص در درون ماده شود. مواد آنتی فرومغناطیس دارای ضریب تراوایی مثبت و کوچک در تمام دماها می باشند. این مواد از دو زیر شبکه با گشتاورهای مغناطیسی مخالف تشکیل شده اند. اغلب این مواد شامل ترکیبات یونی مانند اکسیدها، سولفایدها و کلرایدها می شوند [۹]. در مواد دیامغناطیس گشتاورهای مغناطیسی الکترون های آن ها همدیگر را خنثی کرده در نتیجه اتم ها هیچ گشتاور مغناطیسی خالصی ندارند. گازهای تک اتمی و جامدات یونی چون دارای لایه های الکترونی بسته می باشند؛ رفتار دیامغناطیس از خود نشان می دهند. مواد پارامغناطیس از یون ها و اتم هایی تشکیل شده اند که به علت عدم خنثایی کامل مولفه های اسپینی و مداری، گشتاور مغناطیسی خالصی از خود نشان می دهند. این مواد ضریب تراوایی مثبت و کوچکی دارند. فری مغناطیس ها نیز دسته ای از مواد مغناطیسی هستند که رفتاری بین مواد فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس از خود نشان می دهند و ساختار آن ها به دو گروه مکعبی و شش گوشه دسته بندی می شود [۹].

۱-۴ نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده (DMSs)^۱

در سال های اخیر توجه به نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده (DMSs) برای ساخت قطعات اسپینترونیکی به طور چشمگیری افزایش یافته است. در این مواد یکی از دو کانال اسپینی فلزی است؛

^۱Diluted Magnetic Semiconductor

در حالی که کانال اسپینی دیگر یک نیمرسانا و یا یک عایق با گاف انرژی قطبیده اسپینی در حوالی تراز فرمی می باشد. این مواد اولین بار توسط گروت^۱ کشف شدند. نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده با آرایش درصد کمی از یک یون مغناطیسی (عناصر واسطه) در یک ترکیب نیمرسانا نظیر CdTe تولید می شوند. این عناصر گشتاورهای مغناطیسی جایگزیده در درون ماده نیمرسانا تولید می کنند. معمولاً گشتاورهای مغناطیسی از اوربیتال های ۳d یا ۴f عناصر واسطه نشات می گیرند. ترابرد و مغناطش در این مواد به میزان رقیق سازی و وجود نقص های ذاتی بسیار حساس می باشند [۱۲]. در این مواد برهمکنش درجات آزادی الکترونی و اسپینی بین یون های مغناطیسی آرایش کننده و مغزی شبکه، خواص اپتیکی و مغناطیسی ترکیب را بالا می برد. این برهمکنش ها همچنین رفتار فرومغناطیس، پارامغناطیس و آنتی فرومغناطیس را بسته به اندازه انتگرال های تبدالی بین آرایش دهنده و شبکه میزبان القا می کنند [۱۲].

نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده ویژگی های نیمرسانایی و مغناطیسی بسیار جالبی از خود نشان می دهند. گاف انرژی را در این مواد می توان به صورت ساختاری کنترل کرد. یک جفت شدگی اسپینی قوی در نوار ظرفیت بین حالت های جایگزیده سبب ویژگی های برجسته این مواد می شود. این جفت شدگی باعث افزایش پراکندگی بی نظم اسپینی، شکافتگی اسپینی قوی حالت های الکترونی و برهمکنش های تبدالی غیر مستقیم قوی بین گشتاورهای مغناطیسی می گردد [۱۳].

سه جنبه مهم نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده که آن ها را برای کاربردهای اسپینترونیک مفید قرار داده است عبارتند از : پارامترهای تعیین کننده ساختار نواری مانند گاف نواری و ثابت شبکه که با تغییر غلظت عناصر مغناطیسی تغییر می کنند؛ و دوم اینکه خواص مغناطیسی این مواد طیف بسیار پهنی از رفتار از قبیل پارامغناطیس، آنتی فرومغناطیس و غیره را شامل می شود؛ و سوم اینکه برهمکنش تبدالی بین گشتاورهای مغناطیسی جایگزیده عناصر مغناطیسی با الکترون های نوار ظرفیت و یا رسانش موجب بوجود آمدن یک سری از خواص منحصر به فرد برای این ترکیبات می

^۱Groot

شود [۱۴]. به منظور کاربردی شدن این مواد در صنایع اسپینترونیک تلاش می شود که با انتخاب یک ماده میزبان مناسب و آلایش آن با عناصر واسطه، دمای کوری^۱ این ترکیبات به دمای اتاق یا بالاتر از آن افزایش یابد.

۱-۴-۱ برهمکنش های مغناطیسی در نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده

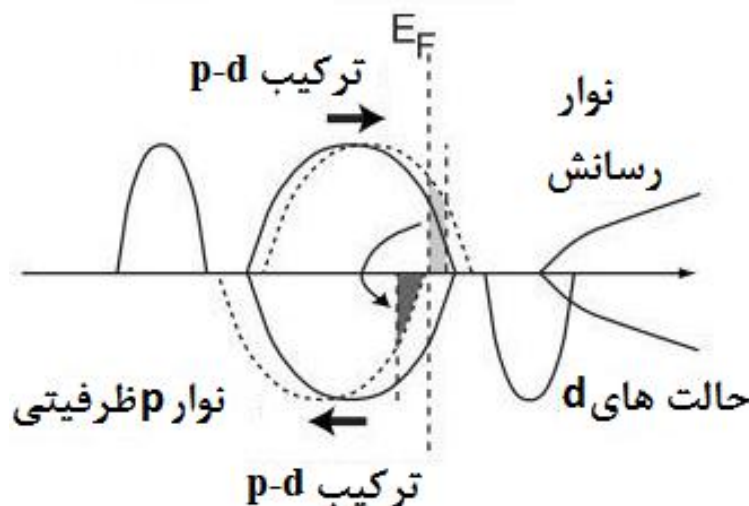
عناصر واسطه مانند آهن، منگنز و کبالت دارای اوربیتال های d غیر پر می باشند که مسئول برهمکنش های مغناطیسی هستند. به طور مثال منگنز دارای پنج الکترون ظرفیت در لایه d خود است. طبق قانون هوند پنج الکترون باید به طور موازی در اوربیتال ها قرار گیرند تا دافعه کولنی را کاهش دهند. این الکترون ها می توانند خاصیت مغناطیسی در ماده القا کنند. سه مکانیزم تبدادی متفاوت وجود دارد که بر خواص مغناطیسی نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده حکمفرماست: مکانیزم تبدادی دوگانه زرن^۲، مکانیزم تبدادی p-d زرن و مکانیزم ابرتبدالی^۳. مکانیزم های حاکم بر مواد فرومغناطیس، مکانیزم های تبدادی دوگانه و p-d زرن هستند [۱۰].

در شکل (۱-۳) برهمکنش تبدادی p-d زرن به طور شماتیک نشان داده شده است. در نیمرساناهای با گاف نواری باریک، مانند GaSb آلاینده با منگنز، تراز اسپین اکثریت (بالا) Mn-d به زیر یا لبه زیری نوار Sb-p کشیده می شود. این در حالی است که تراز اسپین اقلیت (پایین) آن به بالای تراز فرمی کشیده می شود. در حالت طبیعی به دلیل خنثایی بار همانگونه که با موقعیت تراز فرمی در شکل (۱-۳) نشان داده شده است، یک الکترون به ازاء هر اتم منگنز در نوار ظرفیت کم می شود.

^۱Curie temperature

^۲Zener exchange double mechanism

^۳Super exchange mechanism



شکل (۳-۱) : دیاگرام چگالی حالت های قطبیده اسپینی در برهمکنش تبدیلی p-d زمر [۱۰].

شکل (۳-۱) منحنی کامل این موقعیت را نشان می دهد. چون توابع موج اوربیتال d ناخالصی با توابع موج اوربیتال p عناصر همسایه هیبرید می شوند، نوار p اسپین بالا به سمت انرژی های بالاتر جابجا می شود. در حالی که نوار p اسپین پایین به سمت انرژی های پایین تر جابجا می شود. اگر هیبریداسیون به اندازه کافی قوی باشد نوار p اسپین پایین کاملاً اشغال می شود، در حالی که یک الکترون در نوار p اسپین بالا کم است، که این می تواند منجر به بروز چگالی حالت های نیم فلزی شود. به این دلیل اتم های Sb گشتاور مغناطیسی کوچکی حمل می کنند که پادموازی با گشتاور مغناطیسی اتم های منگنز است؛ بنابراین گشتاور موثر کل به ازاء هر اتم منگنز $4 \mu_B$ است و هیبریداسیون اوربیتال p با حالت های اسپین بالای اشغال شده و اسپین پایین اشغال نشده منگنز مانند یک میدان مغناطیسی روی حالت های نوار ظرفیت عمل می کند و یک قطبش اسپینی در میزبان القا می کند. نکته مهم این است که به دلیل گسترش وسیع توابع موج اوربیتال p، که نشان دهنده حالت حفره است؛ جفت شدگی تبدیلی p-d نسبتاً ضعیف اما بسیار بلندبرد است [۱۰].

۱-۴-۲ ثابت های تبدیلی^۱

محاسبات ساختار نواری DMS ها برای تخمین ثابت های تبدیلی s-d ($N_0\alpha$) نوار رسانش و p-d ($N_0\beta$) نوار ظرفیت مورد استفاده قرار می گیرد. این پارامترها نشان می دهند که چگونه نوارهای

^۱Exchange constants

رسانش و ظرفیت به دلیل فرآیندهای تبادلی و شکافتگی تحت تاثیر قرار می گیرند. ایده اصلی از نظریه میدان میانگین^۱ گرفته شده است که بر پایه هامیلتونی زیر استوار است [۱۱]:

$$H = -N_0 \beta s S \quad (۱-۱)$$

در این رابطه β انتگرال تبادلی s و $p-d$ و S اسپین حفره و اسپین یون مغناطیسی و N_0 غلظت کاتیون است. ثابت های تبادلی مستقیماً از شکافتگی اسپینی لبه نواری بیشینه نوار ظرفیت و کمینه نوار رسانش در نقطه Γ ($\Delta E^C = E_{\downarrow}^C - E_{\uparrow}^C$ و $\Delta E^V = E_{\downarrow}^V - E_{\uparrow}^V$) با استفاده از روابط زیر محاسبه می شوند [۱۱]:

$$N_0 \alpha = \frac{\Delta E^C}{X \langle M \rangle} \quad (۲-۱)$$

$$N_0 \beta = \frac{\Delta E^V}{X \langle M \rangle} \quad (۳-۱)$$

در این روابط N_0 غلظت کاتیون، X غلظت یون مغناطیسی و $\langle M \rangle$ مغناطش میانگین به ازاء هر یون مغناطیسی است. $N_0 \alpha$ برهمکنش های تبادلی بین الکترون های اوربیتال s نوار رسانش و حالت های d عنصر واسطه را توصیف می کند؛ در حالی که $N_0 \beta$ برهمکنش های تبادلی بین حفره های اوربیتال p نوار ظرفیت و حالت های d عنصر واسطه را توصیف می کند.

^۱ Mean field theory

فصل دوم:

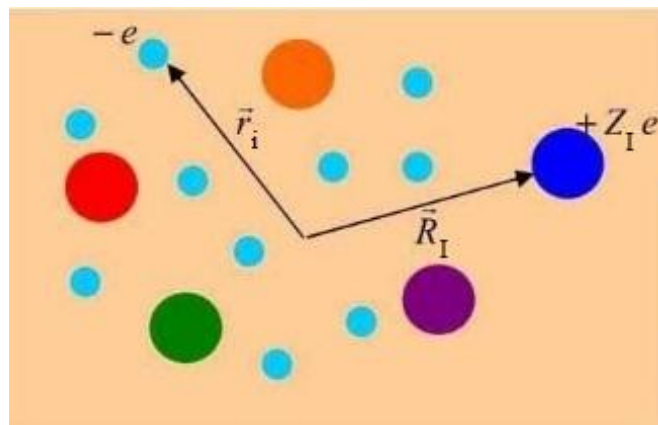
نظریہ تابعی چکالی

۲-۱ سیستم های بس ذره ای

یک جسم جامد مجموعه ای از ذرات مثبت سنگین (هسته ها) و ذرات باردار منفی سبک تر (الکترون ها) است. تعیین ساختار الکترونی جامدات یک مساله بس ذره ای است که نیازمند حل دقیق معادله شرودینگر برای تعداد زیادی از هسته ها و الکترون هاست. حل دقیق این مساله غیر ممکن است؛ اما می توان با استفاده از کوانتوم مکانیک و استفاده از تقریب ها مساله را کمی ساده تر کرد. هامیلتونی بس ذره ای دقیق برای این سیستم به صورت زیر نوشته می شود:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2} \sum_I \frac{\nabla_I^2}{M_I} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_i^2}{m_i} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,I} \frac{e^2 Z_I}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{I \neq J} \frac{e^2 Z_I Z_J}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \quad (۱-۲)$$

که در این رابطه $\vec{R}_I$ مکان هسته به جرم M_I و $\vec{r}_i$ مکان الکترون به جرم m_i است. اولین و دومین جمله در این رابطه به ترتیب عملگر انرژی جنبشی برای هسته ها و برای الکترون ها می باشد. سه جمله آخر در این رابطه برهمکنش کولنی بین الکترون ها و هسته ها، بین الکترون ها و الکترون های دیگر و بین هسته ها و هسته های دیگر است. جمله برهمکنش جاذبه ای بین الکترون ها و هسته ها در حقیقت پتانسیل خارجی وارد شده بر الکترون هاست و به صورت V_{ext} تعریف می شود [۱۵].



شکل (۱-۲): طرح شماتیک از یک دستگاه بس ذره ای شامل الکترون ها و هسته ها [۱۵].

در این هامیلتونی از آثار نسبیتی صرف نظر شده است و دستگاه در میدان خارجی قرار ندارد. هدف ما حل معادله شرودینگر برای چنین دستگاهی به منظور بدست آوردن ویژه بردار و ویژه مقدار حالت پایه

است. متأسفانه به دلیل پیچیدگی این هامیلتونی حل دقیق این معادله عملاً امکان پذیر نمی باشد و به ناچار نیازمند استفاده از تقریب هایی می باشیم.

۲-۱-۱ تقریب بورن - اپنهايمر^۱

هسته ها به دلیل سنگین تر بودن از الکترون ها، بسیار آهسته تر از آن ها حرکت می کنند و می توان فرض کرد هسته ها در مکان های ثابتی قرار دارند و دینامیک آن ها تاثیری در دینامیک الکترون ها ندارد. در این تقریب الکترون ها در حالت پایه خود فرض می شوند و در بررسی حرکت الکترون ها یون ها را منجمد شده در مکان تعادلی شان فرض می کنیم [۱۵]. حال سوالی که مطرح می شود این

است که پیامد اعمال تقریب بورن - اپنهايمر بر هامیلتونی داده شده با رابطه (۲-۱) چیست؟

از آنجایی که هسته ها را ثابت فرض کردیم پس انرژی جنبشی آن ها صفر است و جمله اول حذف می شود. جمله آخر هم نسبت به متغیرهای الکترونی ثابت است و جملات مربوط به انرژی جنبشی گاز الکترون، انرژی پتانسیل مربوط به برهمکنش های الکترون - الکترون و انرژی پتانسیل الکترون ها در پتانسیل (خارجی) هسته ها باقی می ماند و بنابراین می توان هامیلتونی حاکم بر بخش الکترونی یک سیستم بس ذره ای را به صورت زیر نوشت [۱۵]:

$$H = T_e + V_{e-e} + V_{ext}$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_i^2}{m_i} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{I,i} \frac{e^2 Z_I}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|} \quad (2-2)$$

با جایگذاری این هامیلتونی در معادله شرودینگر مربوط به کل سیستم معادلات حاکم بر دینامیک یون ها نیز استخراج خواهد شد. اکنون هدف ما حل معادله شرودینگر (۲-۳) در حالت پایه با استفاده از هامیلتونی رابطه بالا است.

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (3-2)$$

^۱Born-Openheimer approximation

هرچند این تقریب هامیلتونی بس ذره ای را به هامیلتونی بس الکترونی کاهش می دهد، اما حل بخش الکترونی سیستم های بس ذره ای نیز مشکل است. با کمی دقت می توان دید که منشا پیچیدگی این هامیلتونی جمله دوم آن است که به برهمکنش دو به دوی الکترون ها با هم مربوط می شود و در صورت حذف این جمله می توان H را به صورت جمع هامیلتونی های تک الکترونی نوشت و حل سیستم N الکترونی به حل N سیستم تک الکترونی کاهش می یابد. اما حضور برهمکنش الکترون - الکترون مانع از جداسازی سیستم به بخش های تک الکترونی می شود. این جمله منشا پدیده مهمی به نام همبستگی^۱ بین الکترون هاست [۱۶].

۲-۱-۲ تقریب هارتری^۲

در روش هارتری الکترون های متحرک در میدان میانگین ناشی از الکترون های دیگر در نظر گرفته می شوند. در این تقریب تابع موج سیستم به صورت حاصل ضرب توابع موج تک ذره بهنجار شده مطابق رابطه (۲-۴) در نظر گرفته می شود:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \phi(\vec{r}_1)\phi(\vec{r}_2) \dots \phi(\vec{r}_N) \quad (2-4)$$

سپس مقدار چشمداشتی هامیلتونی محاسبه می شود و با قید ثابت بودن تعداد ذرات آن را نسبت به مزدوج توابع موج تک ذره وردش می دهند تا به دسته معادلات تک ذره هارتری (معادله (۲-۵)) دست یابند [۱۷].

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq i} \int \frac{e^2 |\phi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' \right] \phi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \phi_i(\vec{r}) \quad (2-5)$$

قابل ذکر است که هامیلتونی مربوط به هسته ها به صورت کلاسیکی حل می گردد و نتیجه بدست آمده را با نتیجه حاصل از بخش الکترونی جمع می کنند. از نقائص این روش می توان به عدم تعامد

^۱Correlation

^۲Hartree approximation

توابع موج تک الکترونی و پاد متقارن نبودن توابع موج و در نتیجه نقض اصل طرد پائولی اشاره کرد [۱۷].

۲-۱-۳ تقریب هارتری - فوک (H-F)^۱

یک تقریب بسیار مهم دیگر تقریب هارتری - فوک است که در شیمی کوانتومی کاربرد بسیاری دارد. این روش در حقیقت با اضافه کردن آمار فرمی به رهیافت هارتری بوجود آمد. هارتری و فوک تابع موج سیستم را به صورت دترمینان اسلیتر (۲-۶) در نظر گرفتند [۱۷]:

$$\psi_0 \cong \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{x}_1) & \phi_1(\vec{x}_2) & \dots & \phi_1(\vec{x}_N) \\ \phi_2(\vec{x}_1) & \phi_2(\vec{x}_2) & \dots & \phi_2(\vec{x}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(\vec{x}_1) & \phi_N(\vec{x}_2) & \dots & \phi_N(\vec{x}_N) \end{vmatrix} \quad (2-6)$$

که در این رابطه $\phi_i(\vec{x}_j) = \phi_i(\vec{r}_j)\phi_i(\vec{s}_j)$ ؛ $\phi_i(\vec{r}_j)$ بخش فضایی، $\phi_i(\vec{s}_j)$ بخش اسپینی تابع موج و ψ_0 تابع موج حالت پایه است. در این روش توابع موج تک الکترونی متعامد و بهنجار هستند و به این ترتیب مشکل پادتقارنی توابع موج و اصل طرد پائولی حل می شود. بنابراین کافیت همانند روش هارتری ابتدا مقدار چشمداشتی هامیلتونی را محاسبه کرد و سپس با استفاده از اصل وردش به دسته معادلات هارتری - فوک رسید. با کمی محاسبات هامیلتونی را به صورت زیر می توان نوشت [۱۷]:

$$\langle H \rangle = \sum_i H_i + \frac{1}{2} [\sum_{i < j} J_{ij} - \sum_{i < j} K_{ij}] \quad (2-7)$$

که در این رابطه H_i مقدار چشمداشتی انرژی الکترون ها، J_{ij} انتگرال کولنی و K_{ij} انتگرال تبادلی است که با روابط زیر داده می شوند:

$$H_i = \int \psi_i^*(r_i) \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{ext}(r) \right] \psi_i(r_i) dr \quad (2-8)$$

$$J_{ij} = \iint \psi_i(r_i) \psi_j(r_j) \frac{1}{r_{ij}} \psi_i^*(r_i) \psi_j^*(r_j) dr_i dr_j \quad (2-9)$$

^۱Hartree-Fuk approximation

$$K_{ij} = \iint \psi_i(r_j) \psi_j(r_i) \frac{1}{r_{ij}} \psi_i^*(r_i) \psi_j^*(r_j) dr_i dr_j \quad (۱۰-۲)$$

تقریب هارتری - فوک توصیفی ناکامل از ساختار الکترونی می دهد، زیرا از همبستگی بین الکترون ها چشم پوشی می شود؛ اما در عوض الکترون ها به صورت مستقل از هم و برهمکنش کننده با یک میدان متوسط موثر در نظر گرفته می شوند [۱۸].

۲-۲ نظریه تابعی چگالی (DFT)^۱

اگرچه تاریخچه نظریه تابعی چگالی به اوایل دهه سوم قرن بیستم باز می گردد؛ اما این نظریه رسماً در سال ۱۹۶۴ میلادی با بیان دو قضیه مهم هوهنبرگ و کوهن^۲ معرفی شد [۱۹]. این قضایا به عنوان نقطه شروع نظریه تابعی چگالی مدرن پذیرفته شدند. فرمول بندی مرسوم دو قضیه هوهنبرگ و کوهن به صورت زیر است:

قضیه اول: یک رابطه یک به یک بین چگالی حالت پایه یک سیستم بس الکترونی، $\rho(\vec{r})$ ، و پتانسیل خارجی، V_{ext} ، وجود دارد.

$$\rho(\vec{r}) \Leftrightarrow V_{ext}(\vec{r}) \quad (۱۱-۲)$$

نتیجه مهم این قضیه این است که مقدار چشمداشتی حالت پایه هر مشاهده پذیر تابعی یکتا از چگالی الکترونی حالت پایه است [۲۰].

قضیه دوم: تابعی انرژی کل یک دستگاه بس الکترونی به ازاء یک چگالی خالص $\rho(\vec{r}) = n(\vec{r})$ کمینه می شود؛ اگر و تنها اگر $\rho(\vec{r})$ چگالی بار حالت پایه باشد و این انرژی کمینه همان انرژی واقعی حالت پایه دستگاه بس الکترونی است [۲۰].

^۱Density Functional Theory

^۲Hohenberg and Kohn

۲-۳ معادلات کوهن-شم^۱

معادلات کوهن-شم که نظریه تابعی چگالی را به یک ابزار کاربردی تبدیل نمود، یک فرآیند عملی برای بدست آوردن چگالی حالت پایه دستگاه بس الکترونی است. به کمک این معادلات چگالی الکترونی $\rho(\vec{r})$ حالت پایه دستگاه قابل محاسبه است. در سال ۱۹۶۵ میلادی کوهن و شم مساله بس ذره ای با ذرات برهمکنش کننده را با مساله ای کمکی از ذرات مستقل غیر برهمکنشی که تحت تاثیر پتانسیل موثری، که با رابطه (۲-۱۲) داده می شود قرار دارند، جایگزین کردند [۱۵].

$$V_{eff}(r) = V_{ext}(r) + V_H(r) + V_{XC}(r) \quad (2-12)$$

در این رابطه V_{eff} پتانسیل موثر^۲، V_H پتانسیل هارتری و V_{XC} پتانسیل همبستگی-تبادلی^۳ است. تابعی انرژی کل $E_e[\rho]$ و $E_{HF}[\rho]$ که به ترتیب مربوط به هامیلتونی سیستم واقعی^۴ و هارتری-فوک هستند؛ عبارتند از [۱۵]:

$$E_e = T + V \quad (2-13)$$

$$E_{HF} = T_0 + \underbrace{(V_H + V_X)}_V \quad (2-14)$$

که در این رابطه T و V تابعی های انرژی جنبشی و پتانسیل الکترون-الکترون سیستم واقعی هستند و T_0 تابعی انرژی جنبشی گاز الکترون سیستم غیر برهمکنش کننده و V_X سهم جمله تبادلی در پتانسیل است. با کم کردن رابطه (۲-۱۴) از رابطه (۲-۱۳) تابعی انرژی همبستگی به صورت زیر ظاهر می شود:

$$V_C = T - T_0 \quad (2-15)$$

^۱Kohn-Sham equations

^۲Effective potential

^۳Exchange-correlation potential

^۴Real system

سهم تبدالی قسمتی از انرژی کل است که در حل هارتری- فوک وجود دارد؛ اما در حل هارتری موجود نیست. واضح است که اگر تابعی هارتری را با رابطه (۲-۱۶) در نظر بگیریم این سهم با رابطه (۲-۱۷) بیان می شود:

$$E_H = T_0 + V_H \quad (۲-۱۶)$$

$$V_X = V - V_H \quad (۲-۱۷)$$

بنابراین می توان تابعی هوهنبرگ-کوهن را به صورت زیر نوشت:

$$\begin{aligned} F_{HK} &= T + V + T_0 - T_0 \\ &= T_0 + V + \underbrace{(T - T_0)}_{V_C} \\ &= T_0 + V + V_C + V_H - V_H \\ &= T_0 + V_H + V_C + \underbrace{(V - V_H)}_{V_X} \\ &= T_0 + V_H + \underbrace{(V_X + V_C)}_{V_{XC}} \end{aligned} \quad (۲-۱۸)$$

در این رابطه V_{XC} تابعی انرژی همبستگی- تبدالی است و با فرض دانستن آن می توانیم تابعی انرژی را به شکل زیر بنویسیم [۱۵]:

$$E[\rho] = T_0[\rho] + V_H[\rho] + V_{XC}[\rho] + V_{ext}[\rho] \quad (۲-۱۹)$$

می توان رابطه بالا را به صورت تابعی انرژی یک گاز الکترون کلاسیک غیر برهمکنشی که تحت تاثیر دو پتانسیل خارجی (یکی به دلیل هسته ها و دیگری به دلیل اثرات همبستگی - تبدالی) قرار گرفته اند؛ تفسیر کرد. هامیلتونی مربوطه که هامیلتونی کوهن- شم نامیده می شود به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} H_{KS} &= T_0 + V_H + V_{XC} + V_{ext} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \bar{\nabla}_i^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{XC} + V_{ext} \end{aligned} \quad (۲-۲۰)$$

همچنین پتانسیل کوهن- شم و همبستگی - تبدالی با روابط زیر بیان می شوند [۱]:

$$V_{KS}(r) = V_{ext}(r) + V_H(r) + V_{xc}(r) \quad (۲-۲۱)$$

$$V_{XC} = \frac{\partial E_{XC}[\rho]}{\partial \rho} \quad (۲-۲۲)$$

اکنون قضیه کوهن و شم به صورت زیر فرمول بندی می شود [۱۵]:

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

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \phi_i^*(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\vec{r})|^2 \quad (2-23)$$

که $\phi_i(\vec{r})$ تابع های موج یک تک ذره و جواب پایین ترین انرژی معادله کوهن - شم زیر هستند:

$$H_{KS} \phi_i = \epsilon_i \phi_i \quad (2-24)$$

برای یافتن چگالی حالت پایه نیازی به استفاده از قضیه دوم هوهنبرگ - کوهن نیست و می توان روی حل خانواده معادلات تک ذره غیر برهمکنشی شبه شرودینگر تکیه کرد. عملگر هارتری و عملگر همبستگی - تبدالی به چگالی وابسته اند و چگالی نیز به نوبه خود به ϕ_i وابسته است که باید محاسبه شود و به این معنی است که ما با یک مساله خودسازگار^۱ روبرو هستیم. در این مساله جواب ها (ϕ_i) معادله اصلی را تعیین می کنند و معادله را قبل از دانستن جواب نمی توان نوشت و حل کرد. یک فرآیند دوره ای برای فرار از این پارادوکس لازم است. می توان به این شکل آغاز کرد که با حدس چگالی ρ_0 و نوشتن هامیلتونی H_{KS_1} مساله ویژه مقداری حل شود و از آن چگالی ρ_1 مشتق گردد. احتمالاً اختلاف ρ_0 با ρ_1 زیاد است. بنابراین ρ_1 برای ساختن هامیلتونی H_{KS_2} بکار می رود و تولید ρ_2 می کند و این فرآیند به صورت یک سری همگرا به سمت ρ_f پیش می رود و تولید هامیلتونی H_{KS_f} می کند. چگالی نهایی با هامیلتونی سازگار است [۱۵].

۲-۴ تابعی همبستگی-تبدالی^۲

معادلات کوهن - شم شرح داده شده در قسمت قبل دقیق هستند، چون به جز تقریب بی دررو^۳ اولیه هیچ تقریب دیگری بکار گرفته نشد. اما تا کنون از این حقیقت که تابعی همبستگی - تبدالی را نمی دانیم چشم پوشی کردیم؛ لیکن برای حل معادلات کوهن - شم ابتدا باید تابعی همبستگی - تبدالی را

^۱ Self-consistent

^۲ Exchange -Correlation functional

^۳ Adiabatic

تعیین کنیم. برای تعیین کردن تابعی همبستگی - تبدالی بایستی تقریب هایی وارد این نظریه شود که در ادامه به آن ها اشاره می کنیم [۱۵].

۲-۴-۱ تقریب چگالی موضعی (LDA)^۱

یک تقریب بسیار پرکاربرد که تابعی همبستگی - تبدالی را لازم می داند، تقریب چگالی موضعی نامیده می شود که با رابطه زیر داده می شود [۱۵]:

$$E_{xc}^{LDA} = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}^{LDA}(\rho(r)) d^3r \quad (2-25)$$

این رابطه یک عبارت منطقی است، یعنی انرژی همبستگی - تبدالی وابسته به چگالی مشخص $\rho(r)$ با تقسیم کردن ماده به حجم های بینهایت کوچک نامتناهی با یک چگالی ثابت مشخص می شود. هر حجم در انرژی همبستگی - تبدالی کل توسط یک حجم معادل انرژی همبستگی - تبدالی یک حجم مشابه پر شده با یک گاز الکترون همگن، مشارکت دارد. انرژی همبستگی - تبدالی هر الکترون برای یک گاز الکترون همگن تابعی از چگالی است و می توان آن را به صورت مجموع دو جمله زیر نوشت [۱]:

$$\varepsilon_{xc}(\rho) = \varepsilon_x(\rho) + \varepsilon_c(\rho) \quad (2-26)$$

که در این رابطه $\varepsilon_c(\rho)$ و $\varepsilon_x(\rho)$ به ترتیب بیانگر سهم انرژی همبستگی و انرژی تبدالی است. هیچ قانونی از طبیعت ضمانت نمی کند که انتخاب ε_{xc} واقعی به این شکل یک حدس منطقی است، اما انتظار داریم این تقریب برای سیستم هایی که چگالی آن ها آهسته تغییر می کند، مناسب باشد. سهم تبدالی گاز الکترون همگن با روش هارتری-فوک محاسبه و با رابطه زیر بیان می شود [۱]:

$$\varepsilon_x(\rho) = -\frac{1}{2^{2/3}} \frac{3}{8} e^2 \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \rho^{1/3} \quad (2-27)$$

محاسبه جمله همبستگی ($\varepsilon_c(\rho)$) مشکل تر است که با استفاده از روش مونت کارلو می توان آن را دقیقاً محاسبه کرد.

^۱Local Density Approximation

۲-۴-۲ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)^۱

یک گام منطقی برای بهبود بخشیدن به تقریب LDA استفاده از سهم همبستگی - تبدالی هر حجم بینهایت کوچک، که نه تنها به چگالی موضعی در آن حجم بلکه به چگالی در حجم های همسایه نیز وابسته باشد، است. به بیان دیگر در اینجا شیب چگالی نقش ایفا می کند. این تقریب، تقریب شیب تعمیم یافته نامیده می شود که با رابطه زیر بیان می شود [۲۱]:

$$E_{xc}^{GGA} = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}^{GGA}(\rho(r), |\nabla \rho(r)|) d^3 \vec{r} \quad (2-28)$$

اگر چه این تقریب در حالت کلی کمی بهتر از تقریب LDA عمل می کند اما دارای چندین اشکال است:

اشکال اول: از آنجایی که یک تعریف واحد برای ε_{xc} وجود دارد، تنها یک تابعی همبستگی - تبدالی LDA وجود خواهد داشت، اما برای بهم پیوستن شیب چگالی آزادی عمل وجود دارد و بنابراین چندین نسخه برای GGA وجود خواهد داشت [۱۵].

اشکال دوم: علاوه بر این در عمل اغلب یک تابعی کاندید GGA با پارامترهای آزاد، به یک مجموعه بزرگ داده های تجربی اتم ها و مولکول ها برازش^۲ می شود؛ بهترین مقادیر برای این پارامترها ثابت نگه داشته می شوند و تابعی برای استفاده در جامدات آماده است. بنابراین به یک محاسبه GGA، با قاطعیت محاسبه ابتدا به ساکن گفته نمی شود؛ زیرا تعدادی داده تجربی در آن بکار رفته است [۱۵].

۲-۵ روش های حل معادلات کوهن - شم

برای حل معادلات کوهن - شم روش های تقریبی زیادی وجود دارند که از معروف ترین آن ها می توان به موارد زیر اشاره کرد [۲۲]:

۱- روش ترکیب خطی اوربیتال های اتمی (LCAO)^۳

^۱Generalized Gradient Approximation

^۲Fit

^۳Linear Combination of Atomic Orbital

۲- روش اوربیتال های مافین-تین خطی (LMTO)^۱

۳- روش شبه پتانسیل^۲

۴- روش امواج تخت تقویت شده (APW)^۳

۵- روش امواج تخت تقویت شده خطی (LAPW)^۴

۶- روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل

۷- روش امواج تخت تقویت شده خطی با اوربیتال موضعی (LAPW+LO)^۵

در ادامه بعضی از این روش ها به اختصار توضیح داده شده اند.

۲-۵-۱ روش امواج تخت تقویت شده (APW)

در سال ۱۹۳۷ میلادی اسلیتر روشی را پیشنهاد کرد که رفتار الکترون های ظرفیت به طور کامل در آن لحاظ شده باشد. این روش به نام روش امواج تخت تقویت شده معروف است. در این روش فضای بلور به دو ناحیه تقسیم می شود؛ به این صورت که در حوالی هسته ها کره هایی با شعاع های اختیاری اما با شرط عدم همپوشانی در نظر گرفته می شود. پتانسیل درون کره ها کاملاً کروی بوده و در خارج آن ها ثابت در نظر گرفته می شود. این کره ها به کره های مافین-تین^۶ معروف هستند [۲۲].

^۱Linear Muffin Tin Orbital

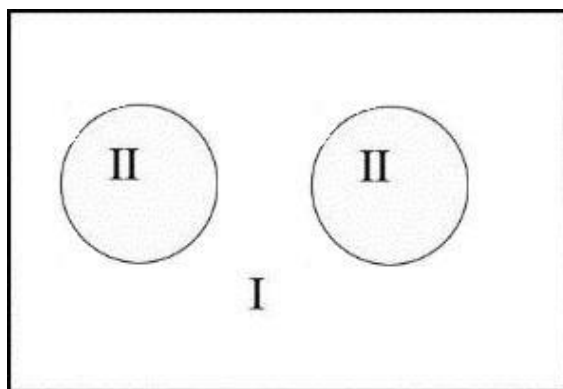
^۲Pseudopotentials method

^۳Augmented Plane Wave

^۴Linear Augmented Plane Wave

^۵Linear Augmented Plane Wave plus Local Orbital

^۶Muffin- tin



شکل (۲-۲): نمایش کره های مافین-تین و ناحیه بین جایگاهی [۲۲].

در شکل (۲-۲)، ناحیه بین جایگاهی با پتانسیل ثابت و ناحیه II، ناحیه درون کره ها می باشد. برای این دو ناحیه دو نوع پتانسیل و دو نوع توابع پایه در نظر گرفته می شود [۱۹]:

$$\phi(k_n, r) = \begin{cases} I \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_n \cdot r} \\ II \Rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l A_{lm}(k_n) u_l(r, E) Y_{lm}(r) \end{cases} \quad (2-29)$$

که در آن V حجم یاخته، k_n برداری در فضای وارون و $Y_{lm}(r)$ هارمونیک های کروی است. در استفاده از این روش دو مشکل وجود دارد:

الف- تابع پایه به انرژی وابسته است؛ در نتیجه به ازاء هر ویژه مقدار انرژی بایستی تابع خاصی در نظر گرفته شود که این باعث افزایش حجم محاسبات می شود.

ب- ناپیوستگی شیب تابع موج روی سطح کره مافین-تین مهم ترین مانع استفاده از این روش است [۲۲].

۲-۵-۲ روش امواج تخت تقویت شده خطی (LAPW)

اندرسون در سال ۱۹۵۷ میلادی اولین روش خطی سازی امواج تخت تقویت شده را معرفی نمود. در این روش تابع $u_l(r, E)$ معرفی شده در معادله (۲-۲۹) با استفاده از بسط تیلور بسط داده می شود و از جملات مرتبه های دوم و بالاتر به دلیل کوچکی آن ها صرف نظر می گردد [۱۵]:

$$u_l(r, E) = u_l(r, E_0) + (E_0 - E) \left. \frac{\partial u_l(r, E)}{\partial E} \right|_{E=E_0} + O(E_0 - E)^2 \quad (2-30)$$

هیچ تردیدی وجود ندارد که روش LAPW روش وابسته به انرژی APW را از نظر محاسباتی به طور قابل توجهی بهبود بخشیده است. در این روش توابع پایه به صورت زیر انتخاب می شوند [۱۵]:

$$\phi(k_n, r) = \begin{cases} I \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_n \cdot r} \\ II \Rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l [A_{lm}(k_n) u_l(r', E) + B_{lm}(k_n) \bar{u}_l(r', E)] Y_{lm}(r') \end{cases} \quad (31-2)$$

۲-۵-۳ روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW)

در این روش پتانسیل وارد بر الکترون را در کلی ترین حالت در نظر می گیریم و آن را در درون و بیرون کره مافین-تین به صورت زیر بسط می دهیم [۲۲]:

$$V(r) = \begin{cases} I \Rightarrow \sum_{K_n=0}^{K_n=\max} V(K_n) e^{iK_n \cdot r} \\ II \Rightarrow \sum_{lm} V_{lm}(r) Y_{lm}(r) \end{cases} \quad (32-2)$$

محاسبات در این روش تا مرحله ساختن توابع پایه و حتی ترکیب آن ها برای ساخت توابع موج کوهن-شم دقیقاً مشابه روش LAPW است. در این روش دیگر لزومی ندارد که E_I ویژه مقادیر انرژی کوهن-شم باشد؛ بلکه مقدار ثابتی است که اگر درست انتخاب شود به نتایج دقیقی منجر شده و حجم محاسبات کاهش خواهد یافت. در محاسبات انجام شده در این پایان نامه از این روش استفاده شده است.

۲-۵-۴ روش امواج تخت تقویت شده خطی با اوربیتال موضعی (LAPW+LO)

در روش های APW و LAPW علاوه بر تقسیم کل فضا به دو ناحیه بین جایگاهی و درون کره های مافین-تین، الکترون های درون بلور نیز به دو دسته الکترون های ظرفیت^۱ و الکترون های مغزه^۲ تقسیم می شوند. تفکیک این الکترون ها معمولاً با مقایسه انرژی آن ها صورت می گیرد. علاوه بر این تابع موج الکترون های ظرفیت در سرتاسر بلور گسترده است، اما تابع موج الکترون های مغزه، که تنها

^۱Valence electrons

^۲Core electrons

در ناحیه محدود درون کره ها گسترش دارد، جایگزیده است [۲۲]. در بعضی ترکیبات با الکترون هایی روبرو می شویم که رفتاری بین الکترون های ظرفیت و مغزه دارند. این الکترون ها الکترون های شبه مغزی^۱ نامیده می شوند. در این روش با اضافه کردن نوعی دیگر از توابع پایه که اوربیتال موضعی نامیده می شود، می توانیم رفتار این الکترون ها را نیز توصیف کنیم. اوربیتال موضعی به صورت زیر بیان می شود [۱۵]:

$$\Phi_{lm}^{\alpha, LO}(\vec{r}) = \begin{cases} I \Rightarrow 0 \\ II \Rightarrow (A_{lm}^{\alpha, LO} u_l^{\alpha}(r', E_{1,l}^{\alpha}) + B_{lm}^{\alpha, LO} \dot{u}_l^{\alpha}(r', E_{1,l}^{\alpha}) + C_{lm}^{\alpha, LO} u_l^{\alpha}(r', E_{2,l}^{\alpha})) Y_m^l(r') \end{cases} \quad (۳۳-۲)$$

یک اوربیتال موضعی برای یک اتم مشخص α و یک l و m معین تعریف می شود و در ناحیه بین جایگاهی و درون کره های مافین- تین اتم های دیگر صفر است. ضرایب $A_{lm}^{\alpha, LO}$ و $B_{lm}^{\alpha, LO}$ و $C_{lm}^{\alpha, LO}$ با شرط بهنجارش و شرط شیب صفر اوربیتال موضعی در مرز کره مافین- تین بدست می آیند [۱۵].

۲-۶ معرفی نرم افزار مورد استفاده برای انجام محاسبات شبیه سازی شده در این پایان نامه

در این پایان نامه از برنامه کامپیوتری Wien2k استفاده شده است. این برنامه برای محاسبه ساختار الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی جامدات بلورین مورد استفاده قرار می گیرد. اولین نسخه این برنامه در سال ۱۹۹۰ میلادی توسط بلاها و شوارز^۲ در دانشگاه وین منتشر شد [۲۳]. این برنامه تحت سیستم عامل لینوکس^۳ کار می کند و به زبان فرترن^۴ نوشته شده است. نرم افزار Wien2k از طریق دو مرحله مجزای آماده سازی و حل خودسازگار به حل دسته معادلات کوهن- شم به کمک روش FP-LAPW می پردازد. در ادامه به توضیح این دو مرحله و معرفی زیر برنامه های آن ها پرداخته شده است.

^۱Semicore electrons

^۲Balaha and Schwarz

^۳Linux

^۴Fortran

۲-۶-۱ مرحله آماده سازی

در مرحله آماده سازی ابتدا باید مجموعه ای از اطلاعات اولیه نظیر ثابت شبکه تجربی، نوع شبکه، عدد اتمی و موقعیت اتم ها و شعاع کره های مافین-تین هر اتم وارد شود. سپس باید مرز انرژی الکترون های ظرفیت و مغزه را مشخص کنیم. با این انتخاب الکترون های با انرژی کمتر از این انرژی به عنوان الکترون های اتمی و الکترون های با انرژی بیشتر به عنوان الکترون های بلوری شناخته می شوند. سپس در قسمت اولیه برنامه یک چگالی اولیه برای شروع محاسبات تولید می شود که با استفاده از آن بتوان دسته معادلات کوهن-شم را حل کرد [۲۲].

۲-۶-۱-۱ برنامه های مرحله آماده سازی

NN: در این برنامه مکان اتم ها و فاصله نزدیک ترین همسایه ها در سلول واحد تعیین می شود و اگر کره ها همپوشانی داشته باشند پیغام خطا روی صفحه نمایش ظاهر می گردد؛ و باید با کاهش شعاع کره های مافین-تین این خطا را برطرف کرد [۲۳].

SGROUP: این برنامه از اطلاعات ساختار اصلی نظیر نوع شبکه، ثابت شبکه و موقعیت های اتمی استفاده می کند و گروه فضایی شبکه را تعیین می کند [۲۳].

SYMMETRY: این برنامه عملگرهای تقارنی گروه فضایی و مقادیر نمایش بیشینه عدد کوانتومی مداری (l_{max}) هماهنگ های شبکه را بر اساس نوع شبکه و موقعیت های اتمی داده شده، تعیین می کند.

LSTART: در این برنامه ابتدا معادله نسبیتی دیراک-فوک با استفاده از تقریب چگالی اسپینی موضعی (LSDA)^۱ برای اتم های منزوی حل و انرژی و چگالی بار الکترونی اتم منزوی محاسبه می گردد. سپس مقدار انرژی جداسازی حالت های ظرفیت از مغزی (که معمولاً ۶ Ry- است) وارد برنامه می شود. ورودی دیگر این برنامه، تقریب منظور شده برای پتانسیل همبستگی - تبادلی است؛ که به عنوان مثال می تواند یکی از تقریب های LDA و GGA باشد [۲۲].

^۱Local Spin Density Approximation

KGEN: این برنامه منطقه اول بریلون را بر اساس تقارن شبکه مشخص می کند و به هر نقطه از شبکه فضای وارون، یک بردار شبکه وارون (K) نسبت می دهد [۲۲].

DSTART: در این برنامه با ترکیب چگالی الکترونی اتم های منزوی، چگالی بار اولیه بلوری برای حل خودسازگار معادلات کوهن-شم تولید می شود [۲۳].

۲-۶-۲ مرحله حل خودسازگار (SCF)^۱

این نرم افزار برای حل معادلات خودسازگار کوهن-شم از چگالی تولید شده در مرحله قبل به عنوان چگالی اولیه استفاده می کند. در این چرخه دو دسته معادله یکی برای الکترون های مغزی (کاملاً نسبیتی) و دیگری برای الکترون های ظرفیت (نیمه نسبیتی) در نظر گرفته می شود.

۲-۶-۲-۱ برنامه های مرحله حل خودسازگار

LAPW0: این برنامه پتانسیل کولنی ($V_c = V_{Ne} + V_{ee}$)، پتانسیل همبستگی - تبادلی (V_{xc}) و پتانسیل کل ($V_{tot} = V_c + V_{xc}$) به کار رفته در معادلات کوهن-شم را محاسبه می کند.

LAPW1: این برنامه با استفاده از پتانسیل کل محاسبه شده، معادلات کوهن-شم را برای الکترون های ظرفیت به صورت نیمه نسبیتی حل نموده، هامیلتونی دستگاه را تشکیل می دهد. سپس با قطری نمودن هامیلتونی، ویژه مقادیر و ویژه بردارهای کوهن-شم را محاسبه می نماید [۲۲].

LAPW2: این برنامه از ویژه مقادیر محاسبه شده استفاده کرده و انرژی فرمی و چگالی الکترون های ظرفیت را محاسبه می کند [۲۳].

LCORE: این برنامه با استفاده از تقریب چگالی اسپینی موضعی ویژه حالت های الکترون های مغزی را به روش هارتری-فوک حل و از آنجا چگالی الکترون های مغزی را محاسبه می کند.

MIXER: این برنامه چگالی تولید شده الکترون های مغزی، شبه مغزی و ظرفیت را با هم جمع می کند و چگالی لازم برای تکرار بعدی را با توجه به این چگالی و چگالی تکرار قبلی تعیین می کند [۲۲].

¹ Self Consistent Field

فصل سوم:

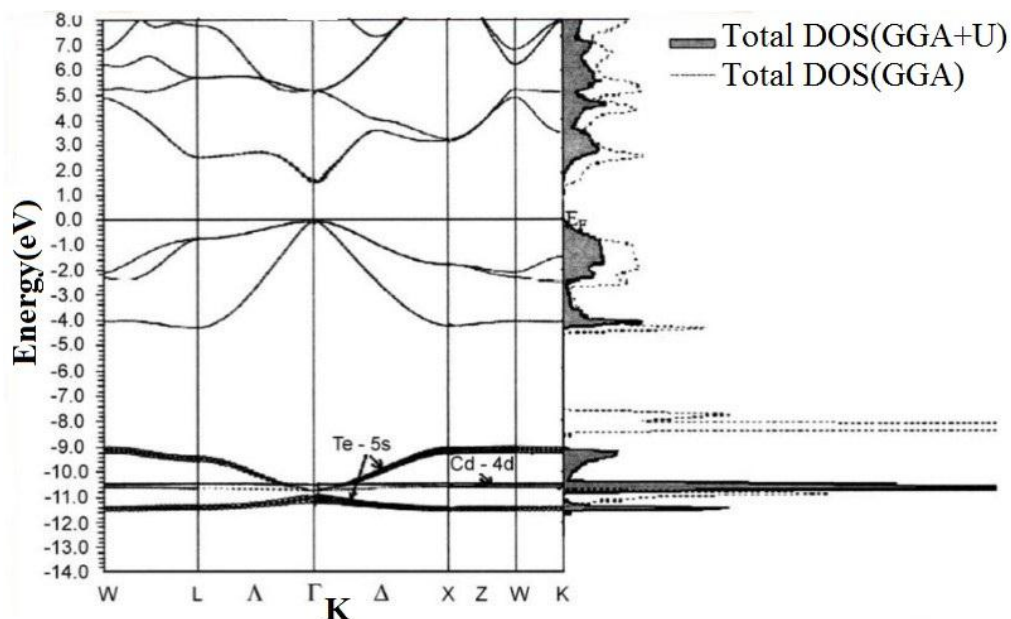
مروری بر برخی مطالعات انجام شده در زمینه

کادمیم تلوراید خالص و آلاییده با عناصر واسطه

۳-۱ مروری بر برخی مطالعات انجام شده در زمینه خواص مغناطیسی و اپتیکی

کادمیم تلوراید خالص

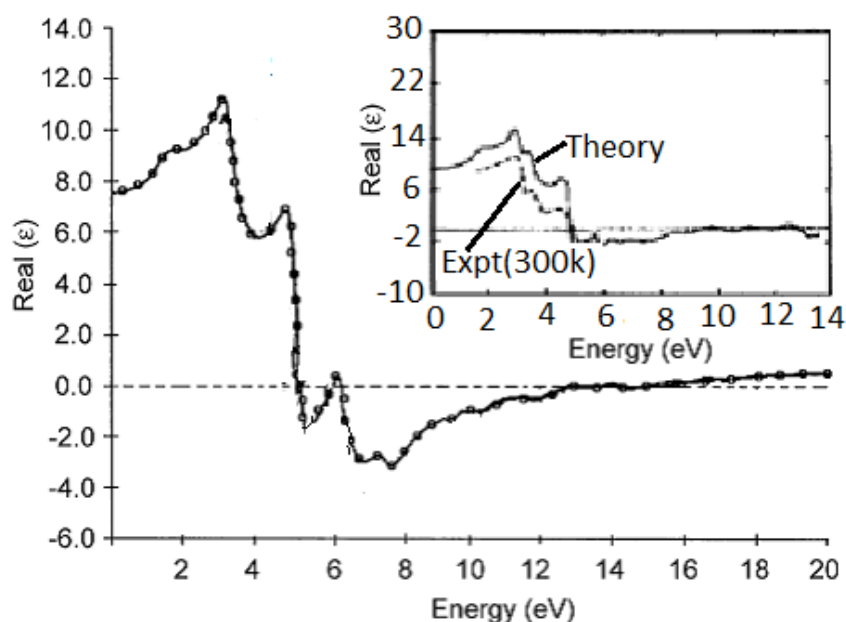
در مقاله ای که توسط دکتر حسینی ارائه شده است [۲۴]، خواص الکترونی و اپتیکی CdTe از قبیل ساختار نواری، تابع دی الکتریک، ضریب شکست، ضریب خاموشی، بازتابندگی و انرژی پلاسما با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) و روش موج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل و تقریب های GGA و GGA+U در دو فاز مکعبی و ورتسایت مورد بررسی قرار گرفته است. در این کار مقدار پارامتر همگرایی $RK_{max}=7$ و $G_{max}=14$ و شعاع مافین-تین اتم های کادمیم و تلوراید به ترتیب ۲/۴ a.u. و ۱/۷ a.u. انتخاب شده است. انرژی قطع نیز که جدایی حالت های ظرفیت و مغزه را توصیف می کند ۶ Ry- بدست آمده است. همچنین مقدار تجربی ثابت شبکه در ساختار مکعبی ۶/۴۷۷ Å در نظر گرفته شده و با مینیمم سازی انرژی کل نسبت به حجم بلور (بهینه سازی) ثابت شبکه برای ساختار مکعبی ۶/۵۴ Å بدست آمده است. در شکل (۳-۱) نمودار چگالی حالت های کل و ساختار نواری محاسبه شده برای CdTe با استفاده از دو تقریب اشاره شده، نشان داده شده است.



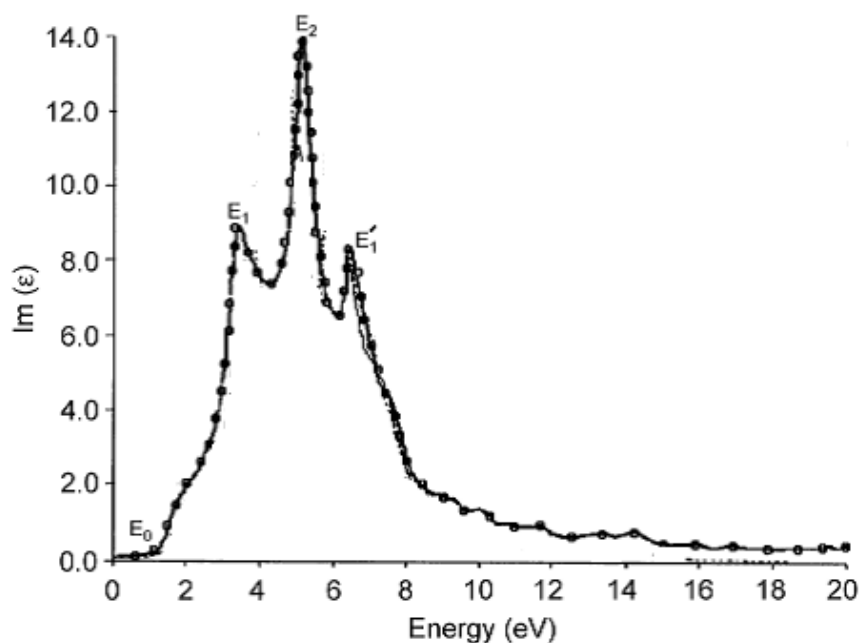
شکل (۳-۱): ساختار نواری و چگالی حالت های محاسبه شده برای CdTe با دو تقریب GGA و GGA+U [۲۴].

در ساختار نواری محاسبه شده برای این ترکیب پایین ترین تراز نوار ظرفیت از هیبریداسیون حالت های Cd-4d و Te-5s ناشی می شود. تراز بالایی نیز شامل اوربیتال های Te-5p و Cd-5s می شود. نوار رسانش عمدتاً از هیبریداسیون حالت های Te-5p، Te-4d و حالت های Cd-4p نشأت می گیرد. در این کار استفاده از پارامتر هابارد باعث شکافتگی تراز Te-5s و جابجایی انرژی های پیوندی ترازهای Cd-4d به سمت مقدار تجربی (10 eV) شد.

در نتایج بدست آمده از محاسبات اِپتیک برای قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، که در شکل های (۲-۳) و (۳-۳) نشان داده شده است، قله های مهمی در موقعیت انرژی $4/14 \text{ eV}$ در بخش حقیقی تابع دی الکتریک و در موقعیت انرژی $5/12 \text{ eV}$ در بخش موهومی تابع دی الکتریک دیده می شود.



شکل (۲-۳): نمودار قسمت حقیقی تابع دی الکتریک کادمیم تلوراید [۲۴].



شکل (۳-۳) : نمودار قسمت موهومی تابع دی الکتریک کادمیم تلوراید [۲۴].

۳-۲ مروری بر برخی مطالعات انجام شده در زمینه کادمیم تلوراید آلاییده با

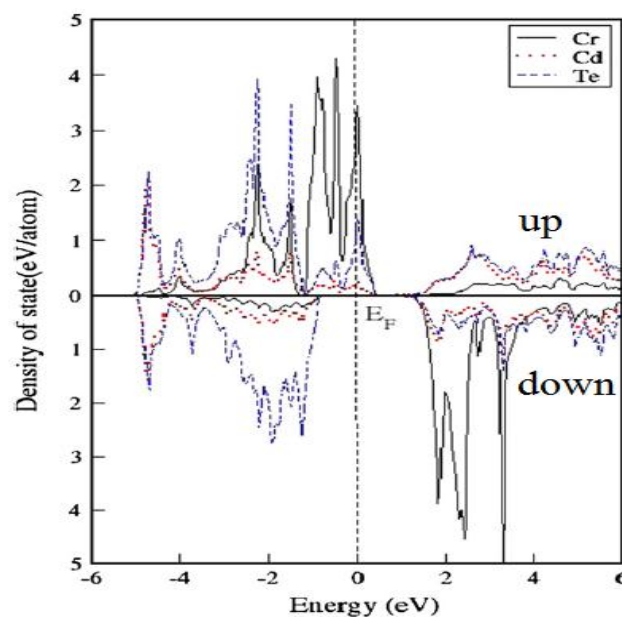
عناصر واسطه

گروه نور با بکارگیری کد محاسباتی Wien2k و استفاده از روش پتانسیل کامل موج تخت تقویت شده خطی بعلاوه اوربیتال موضعی به بررسی خواص مغناطیسی CdTe آلاییده با غلظت های ۰.۲۵٪، ۰.۵۰٪ و ۰.۷۵٪ کروم پرداختند [۲۵]. در این مقاله از تقریب GGA استفاده شده است. مقایسه انرژی های فازهای فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس نشان داد که فاز پایدار این سیستم ها فرومغناطیس است. نتایج کار این گروه نشان داد که افزایش غلظت کروم منجر به کاهش ثابت شبکه ساختار مکعبی CdTe می شود. بررسی منحنی های چگالی حالت های این ترکیبات نشان داد که این مواد ویژگی های فرومغناطیس نیم فلزی با گاف نیم فلزی بیشتر از ۰.۵۲ eV دارند. مقادیر گاف نیم فلزی (g_h) (که کمینه بین دو مقدار ΔE^c و ΔE^v است) و گاف نواری (E_g) این ترکیبات که با استفاده از تقریب فوق محاسبه شده در جدول (۳-۱) گزارش شده است.

جدول (۳-۱) : مقادیر محاسبه شده برای گاف نواری (E_g) و گاف نیم فلزی (g_h) ترکیبات $Cd_{1-x}Cr_xTe$ با تقریب GGA [۲۵].

ترکیب	$E_g(eV)$	$g_h(eV)$
$Cd_{0.75}Cr_{0.25}Te$	۱/۵۶	۰/۶۴
$Cd_{0.50}Cr_{0.50}Te$	۱/۹۶	۰/۸۰
$Cd_{0.25}Cr_{0.75}Te$	۲/۲۶	۰/۵۸
$CrTe$	۲/۶۲	۰/۵۲

نتایج این مطالعه نشان داد که چگالی حالت های محاسبه شده در بازه انرژی eV ۴/۸۸- تا eV ۱/۲۹ (برای نمونه شامل ۲۵٪ کروم) ناشی از حالت های $Te-5p$ ، $Cr-3d$ ، $Cd-5s$ و $Cd-4p$ می باشد. همچنین گاف انرژی در کانال اسپین پایین با افزایش غظت کروم زیاد می شود. در این کار شکافتگی تبدیلی بین حالت های $Cr-3d$ اسپین بالا و پایین این نمونه مقدار eV ۲/۳۴ محاسبه شده است. بررسی چگالی حالت های کل نشان داد که یک هیبریداسیون قوی بین حالت های $Cr-3d$ و $Te-5p$ وجود دارد که این هیبریداسیون مقدار گشتاور مغناطیسی کروم را از مقدار بار آزادش کاهش می دهد. در شکل (۳-۴) نمودار چگالی حالت های جزئی اتم های کروم، کادمیم و تلوراید در ترکیب $Cd_{0.75}Cr_{0.25}Te$ که توسط این گروه محاسبه شده است، را مشاهده می کنیم.



شکل (۳-۴) : منحنی چگالی حالت های جزئی اتم های Cr ، Te ، Cd در ترکیب $Cd_{0.75}Cr_{0.25}Te$ [۲۵].

جدول (۳-۲): مقادیر ثابت شبکه (a)، مدول حجمی (B) و گشتاورهای مغناطیسی موضعی ترکیبات $Cd_{1-x}Cr_xTe$ [۲۵].

ترکیب	a (Å)	B(GP)	$M_{tot}(\mu_B)$	$M_{Cr}(\mu_B)$	$M_{Cd}(\mu_B)$	$M_{Te}(\mu_B)$
$Cr_{0.25}Cd_{0.75}Te$	۶/۴۳	۴۳/۷۸	۴	۳/۷۴۵	۰/۰۱۳	-۰/۰۵۴
$Cr_{0.50}Cd_{0.50}Te$	۴/۴۵	۴۶/۶۵	۴	۳/۷۵	۰/۰۲۵	-۰/۰۹۶
$Cr_{0.75}Cd_{0.25}Te$	۶/۲۴	۴۸/۸۱	۴	۳/۷۰۸	۰/۰۴۲	-۰/۰۱۱
CrTe	۶/۱۶	۵۳/۵۸	۴	۳/۷۱۲	---	-۰/۱۲۴

نتایج بدست آمده از محاسبه ثابت های تبدالی نشان می دهند که این ثابت ها با افزایش غلظت کروم کاهش پیدا می کنند تا با خواص مغناطیسی این آلیاژ هماهنگ شوند.

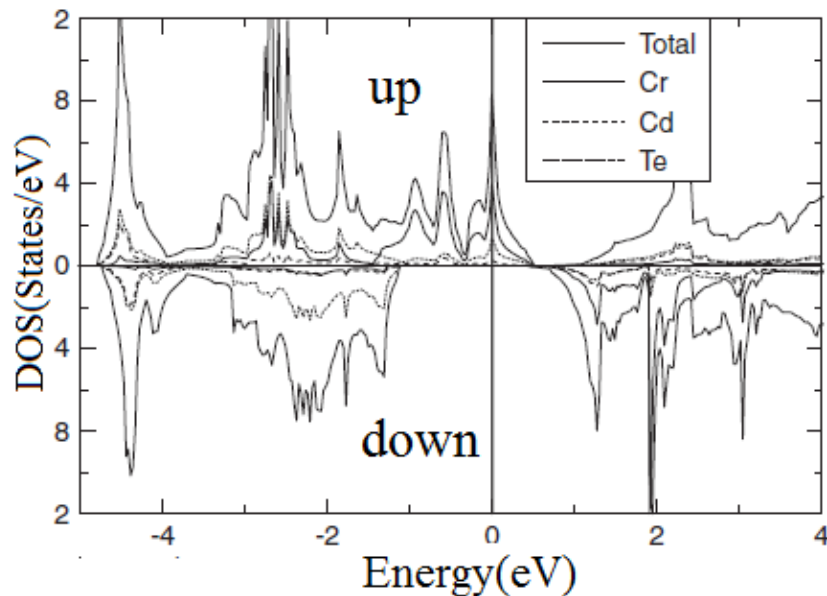
گروه ليو با استفاده از روش موج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل بعلاوه اوربیتال موضعی و تقریب GGA ساختار نواری کادمیم تلوراید آلائیده با غلظت های ۲۵٪، ۵۰٪ و ۷۵٪ کروم را مورد بررسی قرار دادند [۱۲]. این گروه با در نظر گرفتن پارامتر همگرایی RK_{max} برابر با ۸، انرژی کل بر حسب حجم سلول برای نمونه ها را محاسبه و سپس ثابت شبکه تعادلی را بدست آورده اند. در جدول (۳-۳) مقادیر ثابت شبکه (a)، گشتاور مغناطیسی کل (M)، گاف نیم فلزی (G_{HM}) و گاف اسپین پایین (G_{MIS}) محاسبه شده برای این ترکیبات گزارش شده است.

جدول (۳-۳): مقادیر ثابت شبکه (a)، گشتاور مغناطیسی کل (M)، گاف نیم فلزی (G_{HM}) و گاف اسپین پایین (G_{MIS}) ترکیبات $Cd_{1-x}Cr_xTe$ [۱۲].

ترکیب	M(μ_B)	a (Å)	$G_{MIS}(eV)$	$G_{HM}(eV)$
$Cd_{0.75}Cr_{0.25}Te$	۴	۶/۵۴۸	۲/۳۶	۰/۳۰
$Cd_{0.5}Cr_{0.5}Te$	۴	۶/۴۴۹	۲/۲۴	۱/۰۲
$Cd_{0.25}Cr_{0.75}Te$	۴	۶/۳۶۳	۲/۲۸	۰/۷۲

محاسبه چگالی حالت ها نشان داد که چگالی حالت های وابسته به اسپین اکثریت (بالا) در نزدیکی تراز فرمی عمدتاً ناشی از سهم حالت های Cr-3d می باشد. همچنین نتایج این بررسی نشان داد که نوارهای اسپین اکثریت بین ۴eV- و ۱/۵eV- عمدتاً از حالت های Te-5p نشأت می گیرند. فرومغناطیس نیم فلزی به دلیل توزیع مطلوب چگالی حالت های اسپین بالا در تراز فرمی تشکیل می

شود. شکل (۳-۵) چگالی حالت های کادمیم تلوراید آلائیده با کروم ۲۵٪ را نشان می دهد. دماهای کوری کاملاً بالا در بعضی از این ترکیبات نیم فلزی به دلیل گاف نیم فلزی عریض آن ها وجود دارد. این مواد می توانند در اسپینترونیک مفید باشند.



شکل (۳-۵): منحنی چگالی حالت های جزئی اتم های Cd, Cr و Te در ترکیب $\text{Cd}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{Te}$ [۱۲]. در مقاله دیگری که کار گروه ساینی است [۵۷]، به مطالعه تغییرات خواص نیم فلزی و مغناطیسی این ترکیبات با تغییر در غلظت کروم برای غلظت های ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ پرداخته شده است. این گروه از روش پتانسیل کامل موج تخت تقویت شده خطی و تقریب GGA برای انجام محاسبات استفاده کردند. محاسبات انجام شده نشان داد که آرایش کروم به این ترکیبات خواص فرومغناطیسی القا می کند. علاوه بر این، این ترکیبات در دو غلظت بیان شده خاصیت نیم فلزی با قطبش اسپینی ۱۰۰٪ در تراز فرمی دارند. مقادیر ثابت شبکه (a) و گاف نواری اسپین پایین (E_g) این نمونه ها را در جدول (۳-۴) مشاهده می کنیم.

جدول (۳-۴): مقادیر ثابت شبکه (a) و گاف نواری اسپین پایین (E_g) ترکیبات $\text{Cd}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Te}$ [۲۶].

ترکیب	a (Å)	E_g (eV)
$\text{Cd}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{Te}$	۶/۵۴	۱/۵۸
$\text{Cd}_{0.875}\text{Cr}_{0.125}\text{Te}$	۶/۵۸	۱/۱۰

داده های جدول (۳-۴) نشان می دهند که مقدار گاف نواری اسپین پایین با کاهش غلظت کروم کاهش می یابد. این رفتار به تمایل بیشتر حالت های Cr-3d برای جایگزیدگی بیشتر در غلظت های کمتر کروم نسبت داده می شود. حالت های Cr-3d جایگزیده در غلظت های کمتر ضعیف تر با حالت های Te-p هیبرید می شود. هیبریداسیون p-d در این ترکیبات منجر به برهمکنش تبدالی دوگانه و بروز خواص مغناطیسی در این نمونه ها می گردد. مقادیر گشتاورهای مغناطیسی کل و موضعی هر نمونه را در جدول (۳-۵) مشاهده می کنیم.

جدول (۳-۵): مقادیر گشتاورهای مغناطیسی کل و موضعی ترکیبات $Cd_{1-x}Cr_xTe$ [۲۶].

ترکیب	$M_{Cd}(\mu_B)$	$M_{Cr}(\mu_B)$	$M_{Te}(\mu_B)$	$M_{tot}(\mu_B)$
$Cd_{0.75}Cr_{0.25}Te$	۰/۰۱۴	۳/۷۷۷	-۰/۰۵۹	۳/۹۹۹
$Cd_{0.875}Cr_{0.125}Te$	۰/۰۲۱	۳/۷۸۲	-۰/۰۵۶	۳/۹۹۴

نتایج گزارش شده در این جدول نشان می دهند با کاهش غلظت کروم مقادیر گشتاورهای مغناطیسی کادمیم و کروم به مقدار اندکی افزایش می یابد.

گروه شارما و همکارانش با استفاده از تقریب GGA خواص الکترونی، مغناطیسی و ایتیکی کادمیم تلوراید آلائیده با غلظت های ۱۲/۵٪، ۲۵٪ و ۵۰٪ منگنز را مورد بررسی قرار دادند [۲۷]. مقادیر ثابت شبکه (a)، مدول حجمی (B) و مشتق مدول حجمی (B') بدست آمده توسط این گروه در جدول (۳-۶) گزارش شده است.

جدول (۳-۶): مقادیر ثابت شبکه (a)، مدول حجمی (B) و مشتق مدول حجمی (B') ترکیبات $Cd_{1-x}Mn_xTe$ [۲۷].

ترکیب	a (Å)	B(GP)	B'
$Cd_{0.875}Mn_{0.125}Te$	۶/۵۷۷	۳۴/۹۲	۴/۵۴
$Cd_{0.75}Mn_{0.25}Te$	۶/۵۴۴	۳۵/۶۱	۴/۶۴
$Cd_{0.50}Mn_{0.50}Te$	۶/۴۸۵	۳۷/۷۸	۴/۹۹

نتایج بررسی این گروه نشان می دهد که تراز فرمی برای کانال اسپین پایین با تغییر غلظت منگنز به سمت انرژی های بیشتر جابجا می شود. مقادیر بدست آمده از محاسبات ثابت های تبدالی نواری

رسانش ($N_0\alpha$) و نوار ظرفیت ($N_0\beta$) و شکافتگی اسپینی لبه نواری نوارهای ظرفیت (ΔE^v) و رسانش (ΔE^c) نمونه ها در جدول (۷-۳) گزارش شده است.

جدول (۷-۳): مقادیر محاسبه شده برای شکافتگی اسپینی لبه نواری و ثابت های تبدیلی نوارهای ظرفیت و رسانش ترکیبات $Cd_{1-x}Mn_xTe$ [۲۷].

ترکیب	ΔE^c (eV)	ΔE^v (eV)	$N_0\alpha$	$N_0\beta$
$Cd_{0.875}Mn_{0.125}Te$	۰/۰۸	-۰/۳۶	۰/۳۲	-۱/۴۲
$Cd_{0.75}Mn_{0.25}Te$	۰/۱۴	-۰/۵۸	۰/۲۸	-۱/۱۳
$Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te$	۰/۱۱	-۱/۱۰	۰/۱۱	-۱/۰۸

بررسی چگالی حالت های جزئی محاسبه شده برای این ترکیبات نشان می دهد که در نزدیکی تراز فرمی، حالت های نوار ظرفیت از هیبریداسیون اوربیتال های $Mn-3d$ و $Te-5p$ تشکیل شده است. بررسی ساختار نواری اسپین پایین نشان می دهند که با افزایش غلظت منگنز تراز فرمی به سمت انرژی های بیشتر جابجا می شود. مقادیر گشتاور مغناطیسی بدست آمده نشان می دهد که گشتاور مغناطیسی به ازاء هر اتم منگنز به دلیل هیبریداسیون $p-d$ کاهش می یابد و گشتاورهای مغناطیسی موضعی کوچکی در جایگاه های کادمیم و تلوراید غیرمغناطیسی ایجاد می شود. مقادیر گشتاورهای مغناطیسی موضعی و کل هر نمونه در جدول (۸-۳) گزارش شده است.

جدول (۸-۳): گشتاورهای مغناطیسی موضعی و کل ترکیبات $Cd_{1-x}Mn_xTe$ بر حسب مگنتون بوهر (μ_B) [۲۷].

غلظت منگنز در نمونه	۰/۱۲۵	۰/۲۵	۰/۵۰
Mn	۴/۰۷۴	۴/۰۷۸	۴/۰۸۹
Cd	۰/۰۰۵	۰/۰۰۹	۰/۰۱۶
Te	۰/۰۱۸	۰/۰۳۵	۰/۰۴۳
گشتاور مغناطیسی کل به ازاء هر اتم منگنز	۴/۹۹۹	۵/۰۰۱	۵/۰۰۱

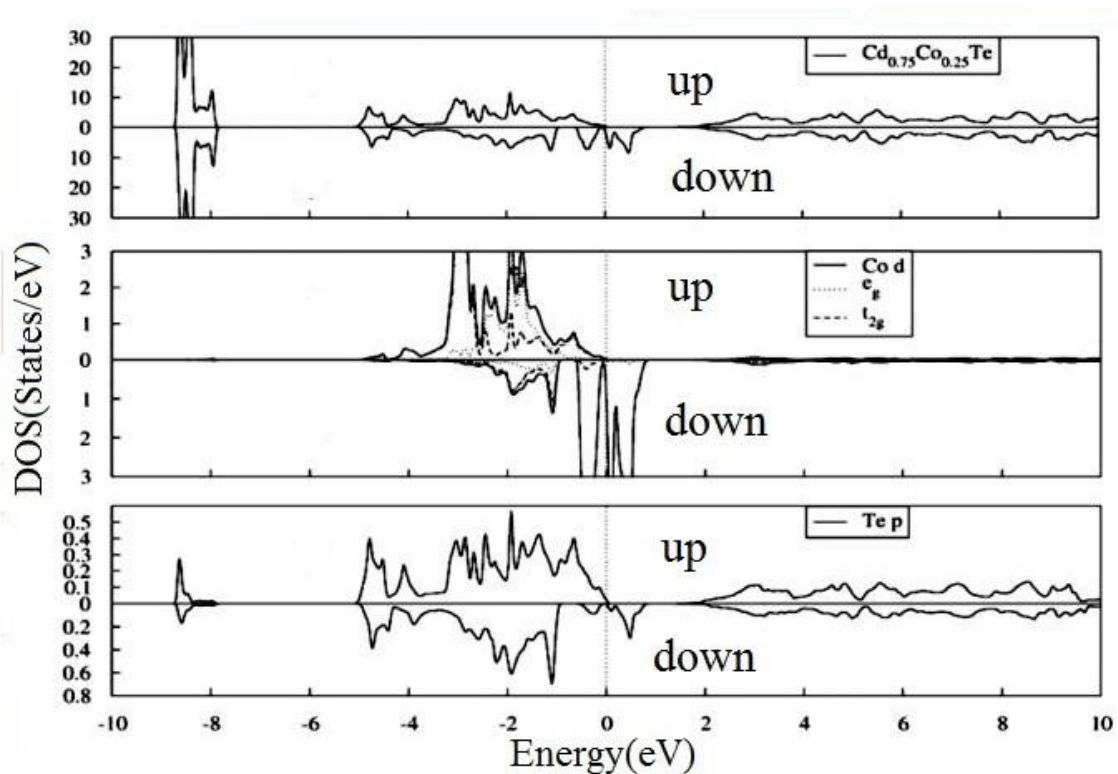
گروه سعید و همکاران با استفاده از نرم افزار Wien2k و روش موج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل و اوربیتال موضعی و تقریب GGA به بررسی خواص مغناطیسی و الکترونی کادمیم تلوراید آلاییده با غلظت ۲۵٪ کبالت پرداختند [۲۸]. فاز پایدار سیستم در این بررسی فرومغناطیس

بدست آمد. مقادیر محاسبه شده برای ثابت شبکه (a)، مدول حجمی (B)، مشتق مدول حجمی (B') و گاف نواری (E_g) این ترکیب در جدول (۹-۳) گزارش شده است.

جدول (۹-۳): مقادیر ثابت شبکه (a)، مدول حجمی (B)، مشتق مدول حجمی (B') و گاف نواری (E_g) ترکیب $Cd_{0.75}Co_{0.25}Te$ [۲۸].

ترکیب	a (Å)	B(GP)	B'	$E_g(eV)$
$Cd_{0.75}Co_{0.25}Te$	۶/۲۹	۵۰/۴۱	۴/۹۸۵	۰/۸

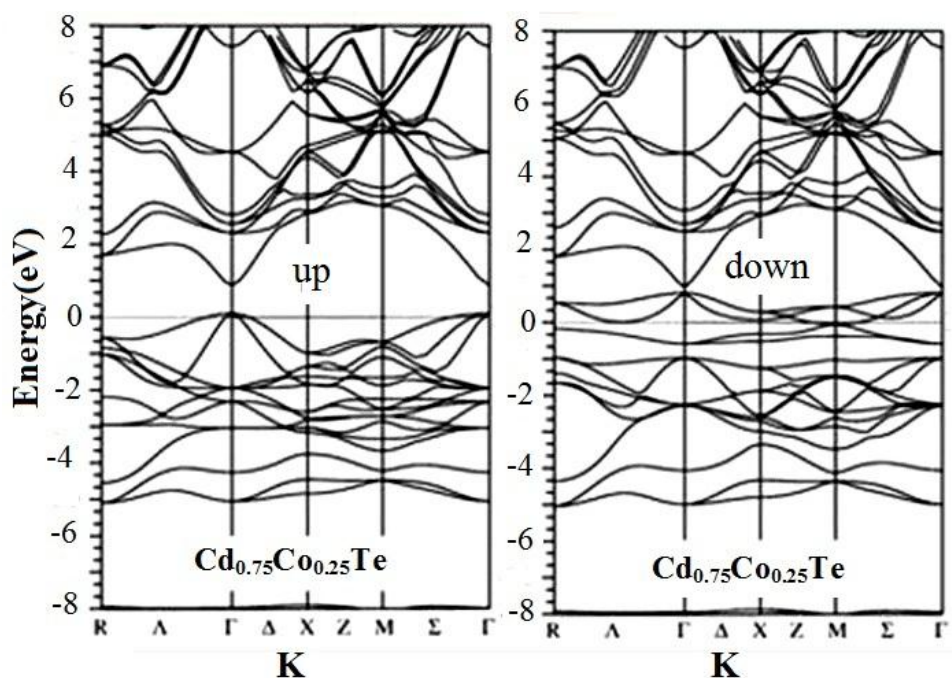
چگالی حالت های کل و جزئی محاسبه شده برای نمونه $Cd_{0.75}Co_{0.25}Te$ در شکل (۶-۳) نشان داده شده است.



شکل (۶-۳): منحنی چگالی حالت های جزئی اتم های Co و Te و چگالی حالت های کل ترکیب $Cd_{0.75}Co_{0.25}Te$ [۲۸].

بررسی چگالی حالت های محاسبه شده نشان می دهد که این ترکیب رفتار نیم فلزی با اسپین بالای نیمرسانا و اسپین پایین فلزی دارند. مقایسه چگالی حالت های جزئی و ساختار نواری نشان داد که نوارهای ظرفیت حالت های اسپین بالا شامل اوربیتال های Co-3d و سهم کوچکی از اوربیتال های

Te-5p می شود؛ در حالی که نوارهای بین $-5/5$ eV تا $-3/7$ eV عمدتاً از حالت های Te-5p نشأت می گیرند. نوار رسانش اسپین اقلیت تراز فرمی را قطع می کند و منجر به خاصیت فرومغناطیس نیم فلزی می شود. میدان بلوری چهاروجهی تشکیل شده توسط یون های تلوراید حالت های 3d اتم کبالت را به حالت های تبهگن دوگانه e_g و سه گانه t_{2g} می شکافد که حالت های e_g از حالت های t_{2g} در انرژی پایین تری قرار دارند. در شکل (۷-۳) نمودارهای ساختار نواری نمونه مطالعه شده برای حالت های اسپین بالا و پایین داده شده است.



شکل (۷-۳): ساختار نواری برای الکترون های اسپین بالا و پایین ترکیب $\text{Cd}_{0.75}\text{Co}_{0.25}\text{Te}$ [۲۸].

محاسبه گشتاور مغناطیسی این ترکیب نشان می دهد که اتم های کبالت در گشتاور مغناطیسی کل سهم بیشتری از اتم های آنیون، که گشتاور مغناطیسی آنها پادموازی گشتاور مغناطیسی کبالت است، دارند. همچنین گشتاورهای مغناطیسی کوچکی از جایگزیدگی اسپینی کبالت در مکان اتم های کادمیم القا می شود. بررسی چگالی حالت های جزئی محاسبه شده نشان می دهد بین حالت های p آنیون و حالت های d اتم های کبالت هیبریداسیون وجود دارد. این هیبریداسیون گشتاورهای مغناطیسی اتم کبالت را از مقدار بار آزادش کاهش داده و تولید گشتاور مغناطیسی موضعی کوچکی در جایگاه اتم های غیرمغناطیسی کادمیم و تلوراید می نماید. در این مطالعه به منظور بررسی خواص

ترمودینامیکی ترکیب مورد نظر ثابت های تبدالی $N_0\alpha$ و $N_0\beta$ نیز محاسبه شدند. این پارامترها با تخمین شکافتگی اسپینی نوارهای رسانش و ظرفیت محاسبه می شوند. نتایج این بررسی در جدول (۳-۱۰) گزارش شده است.

جدول (۳-۱۰): مقادیر محاسبه شده برای شکافتگی اسپینی لبه نواری و ثابت های تبدالی نوارهای ظرفیت و رسانش ترکیب $\text{Cd}_{0.75}\text{Co}_{0.25}\text{Te}$ [۲۸].

ترکیب	ΔE^v (eV)	ΔE^c (eV)	$N_0\alpha$	$N_0\beta$
$\text{Cd}_{0.75}\text{Co}_{0.25}\text{Te}$	-۰/۴۴۳۲	-۲/۹۷	-۳/۹۶۴	-۰/۵۹۰۹

نتایج بدست آمده نشان می دهند که مقدار $N_0\alpha$ کوچکتر از مقدار $N_0\beta$ است؛ که به معنی آن است که برهمکنش بین حالت s کاتیون و حالت های d کبالت در نقطه Γ (مینیمم نوار رسانش) ضعیف تر از برهمکنش p-d در بیشینه نوار ظرفیت است.

فصل چهارم:

محاسبه خواص الکترونی و اپتیکی کادمیم تلوراید خالص

مقدمه

در این فصل از پایان نامه با استفاده از کد محاسباتی Wien2k ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نیمرسانای CdTe خالص در فاز پایدار مکعبی (زینک بلند) مورد بررسی و تحلیل قرار گرفته است. در کد محاسباتی Wien2k برای محاسبه ساختار نواری و چگالی حالت های بلور، از روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) برای حل معادلات کوهن-شم استفاده می شود. متغیر اصلی در این روش چگالی ابر الکترونی است و یاخته واحد بلور به کره های مافین-تین اطراف هر اتم و ناحیه بین جایگاهی تقسیم می شود. درون کره های مافین-تین توابع موج، که از برهم نهی جواب های شعاعی معادله شرودینگر تک ذره در انرژی ثابت و توابع هارمونیک کروی بدست می آیند، بسط داده می شوند؛ در حالی که در ناحیه بین جایگاهی مجموعه پایه موج تخت مورد استفاده قرار می گیرد. رفتار الکترون های مغزی نسبیتی و الکترون های ظرفیتی نیمه نسبیتی در نظر گرفته می شود [۲۸].

۴-۱ پارامترهای ورودی نرم افزار

محاسبات مربوط به خواص الکترونی ساختار خالص با استفاده از دو تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) و چگالی موضعی (LDA) و مقادیر بهینه $R_{MT}K_{max}=9$ که همگرایی سری پایه را در محاسبات کنترل می کند، انجام شدند؛ که در این رابطه R شعاع کوچکترین کره مافین-تین و K بیشینه بردار موج در شبکه وارون است. همچنین بیشینه عدد کوانتومی مداری (l_{max}) برای بسط چگالی بار برابر با ۱۰ انتخاب و بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه بین جایگاهی تا $G_{max}=13 \text{ a.u.}^{-1}$ انجام شدند. برای انجام محاسبات شعاع کره های مافین-تین اتم های Cd و Te به ترتیب برابر ۲/۴۰ a.u. و ۲/۵۰ a.u. انتخاب شدند؛ به گونه ای که این کره ها همپوشانی نداشته باشند و هیچ نشت باری از هسته وجود نداشته باشد؛ و بنابراین همگرایی انرژی کل تضمین شده باشد. انرژی جداسازی بین

حالت های مغزه و ظرفیت برابر با $8Ry$ - بدست آمد و با توجه به آن الکترون ها به سه گروه الکترون های مغزه، شبه مغزه و ظرفیتی تقسیم شدند. این گروه بندی در جدول (۴-۱) گزارش شده است.

جدول (۴-۱): گروه بندی الکترون ها به مغزه، شبه مغزه و ظرفیتی در CdTe.

ظرفیت	شبه مغزه	مغزه	عدد اتمی	اتم
$4d^{10} 5s^2$	$4s^2 4p^6$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$	۴۸	Cd
$5s^2 5p^4$	$4d^{10}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$	۵۲	Te

۴-۱-۱ طول و زاویه پیوند

از دیگر نتایج بدست آمده، مقدار طول و زاویه پیوند بین اتم های Cd و Te است که با استفاده از مکان اتم های فوق در ساختار CdTe محاسبه شدند؛ که نتایج آن در جدول (۴-۲) گزارش شده است.

جدول (۴-۲): طول و زاویه پیوند محاسبه شده برای CdTe در فاز مکعبی.

طول پیوند Cd-Te	زاویه پیوند Cd-Te-Cd
$2.718 \text{ \AA}$	(درجه) 109.47

همچنین با استفاده از دو تقریب LDA و GGA و با وارد کردن پارامترهای ضروری، مقدار بار کل اتم ها، بار داخل کره مافین- تین هر اتم و بار بین جایگاهی محاسبه شدند. نتایج این محاسبات در جدول های (۴-۳) و (۴-۴) گزارش شده است.

جدول (۴-۳): مقادیر بار کل اتم ها، بار داخل کره مافین- تین و بار بین جایگاهی هر اتم با تقریب GGA.

بار بین جایگاهی (الکترون)	بار داخل کره مافین- تین (الکترون)	بار کل (الکترون)	اتم
1.796	46.204	۴۸	Cd
2.513	49.487	۵۲	Te

جدول (۴-۴) : مقادیر بار کل اتم ها، بار داخل کره مافین- تین و بار بین جایگاهی هر اتم با تقریب LDA.

بار بین جایگاهی (الکترون)	بار داخل کره مافین - تین (الکترون)	بار کل (الکترون)	اتم
۱/۶۸۸	۴۶/۳۱۲	۴۸	Cd
۲/۴۳۲	۴۹/۵۶۸	۵۲	Te

همانطور که داده های جدول (۴-۳) و (۴-۴) نشان می دهند مقدار بار داخل کره های مافین- تین اتم های Cd و Te در تقریب LDA از تقریب GGA بیشتر و در نتیجه بار بین جایگاهی آن ها کمتر است.

۴-۲ بهینه سازی پارامترهای شبکه و خواص ساختاری CdTe

۴-۲-۱ بهینه سازی ساختار

محاسبات اولیه با ثابت شبکه تجربی $6/48 \text{ \AA}$ آغاز شدند و سپس با بهینه سازی انرژی نسبت به حجم بلور، ثابت شبکه نظری بلور، با دو تقریب LDA و GGA محاسبه شدند. در جدول (۴-۵) این نتایج به همراه نتایج پژوهش های تئوری دیگران گزارش شده است.

جدول (۴-۵) : مقادیر ثابت شبکه محاسبه شده برای CdTe با دو تقریب GGA و LDA.

واحد ثابت شبکه	مقدار تجربی	LDA	GGA	کار دیگران LDA	کار دیگران GGA
$\text{\AA}$	$[29]6/48$	$6/279$	$6/671$	$[30]6/50$	$[30]6/706$

همانطور که این نتایج نشان می دهند مقادیر ثابت شبکه های بدست آمده در توافق خوبی با مقدار تجربی و نتایج گزارش شده توسط گروه های تحقیقاتی دیگر است [۳۰]. مقایسه نتایج نشان می دهد مقدار ثابت شبکه حاصل از تقریب GGA بزرگتر از مقدار تجربی و ثابت شبکه حاصل از تقریب LDA کوچکتر از مقدار تجربی است.

بهینه سازی حجم سلول با وردش حجم آن حول حجم اولیه ای که از ثابت شبکه تجربی بدست آمده و محاسبه انرژی حالت پایه مربوط به هر حجم و ترسیم منحنی انرژی بر حسب حجم، حاصل می

شود. نقطه کمینه این نمودار معرف بهینه انرژی و حجم تعادلی است که با استفاده از آن ثابت شبکه بهینه بدست می آید. با انجام بهینه سازی، مدول حجمی، که انرژی لازم برای ایجاد یک تغییر شکل معین در بلور است، و مشتق مدول حجمی نسبت به فشار و تراکم پذیری محاسبه می شود. پارامترهای مدول حجمی (B)، تراکم پذیری (k) و فشار (P) با استفاده از روابط زیر بدست می آیند [۳۱]:

$$B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_{T=0} = V \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \right) \quad (1-4)$$

$$K = \frac{1}{B} \quad (2-4)$$

$$P = - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_{T=0} \quad (3-4)$$

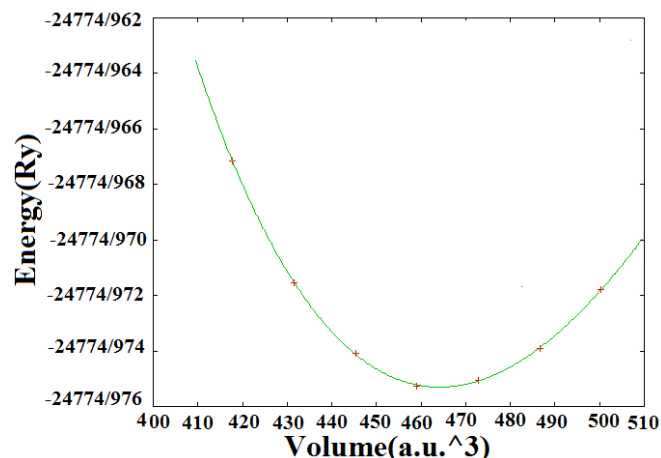
بنابراین با داشتن انرژی حالت پایه E می توان فشار اعمال شده به گاز الکترونی را با استفاده از رابطه (۳-۴) بدست آورد. نتایج محاسبه مدول حجمی، مشتق مدول حجمی و تراکم پذیری CdTe در جدول (۶-۴) گزارش و با نتایج نظری و تجربی گروه های دیگر مقایسه شده است.

جدول (۶-۴): مقادیر محاسبه شده برای مدول حجمی، مشتق مدول حجمی و تراکم پذیری CdTe با دو تقریب GGA و

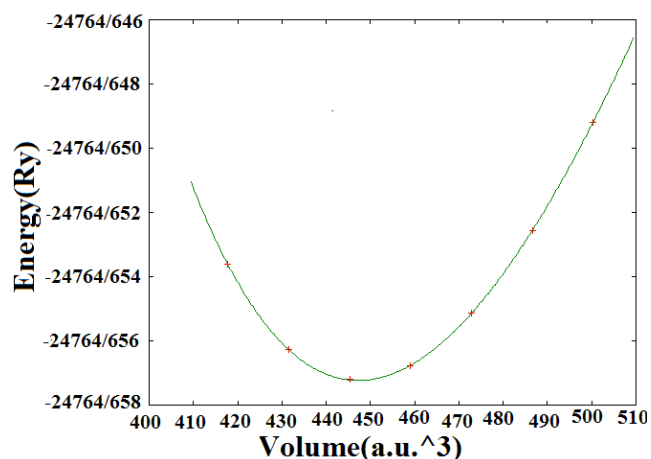
LDA و

کمیت	مقدار تجربی	LDA	GGA	کار دیگران LDA	کار دیگران GGA
مدول حجمی (GP)	[۳۴]۴۴/۵	۴۷/۱۰۷	۴۲/۰۶۳	[۳۲]۴۸/۹۴	[۳۰]۴۳/۹۱
مشتق مدول حجمی	[۳۳]۶/۴۰	۵/۲۲۴	۴/۷۱۶	[۳۲]۴/۴۷	[۳۳]۳/۸۵
تراکم پذیری	[۳۴]۰/۰۲۲	۰/۰۲۱	۰/۰۲۳	[۳۲]۰/۰۲۰	[۳۰]۰/۰۲۸

نتایج این بهینه سازی با استفاده از دو تقریب GGA و LDA در شکل های (۱-۴) و (۲-۴) نشان داده شده است.



شکل (۴-۱): نمودار انرژی بر حسب حجم CdTe محاسبه شده با تقریب GGA.



شکل (۴-۲): نمودار انرژی بر حسب حجم CdTe محاسبه شده با تقریب LDA.

در این نرم افزار نمودار انرژی بر حسب حجم با استفاده از معادله حالت مورناگون^۱ (رابطه (۴-۴)) رسم می شود [۳۲]:

$$E(v) = \frac{Bv}{B'} \left[\frac{\left(\frac{v}{v_0}\right)B'}{\frac{B'}{B'-1} + 1} + 1 \right] + c \quad (4-4)$$

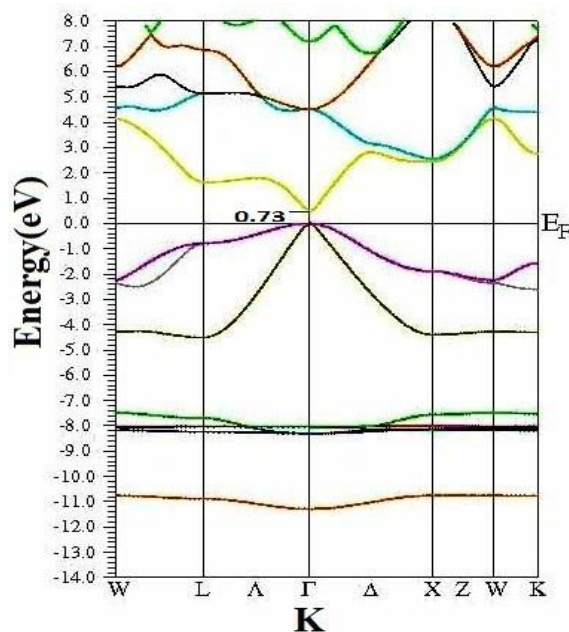
که در این رابطه B' مشتق مدول حجمی نسبت به فشار، v_0 حجم تعادلی سیستم و c یک مقدار ثابت است. با توجه به شکل های (۴-۱) و (۴-۲) مشاهده می شود که انرژی تعادلی محاسبه شده برای CdTe با استفاده از تقریب GGA کمتر از انرژی تعادلی محاسبه شده با استفاده از تقریب LDA است.

^۱Murnaghan

۳-۴ بررسی ساختار الکترونی CdTe با تقریب GGA

۱-۳-۴ ساختار نواری^۱

ساختار نواری جامدات، که رابطه بین انرژی و ممنتوم (E-K) آن هاست، معمولاً با حل تقریبی معادله شرودینگر یک مساله تک الکترونی بدست می آید. محاسبه ساختار نواری برای CdTe خالص در محدوده انرژی ۱۴eV- تا ۸eV با استفاده از تقریب GGA انجام شد که نتیجه این بررسی در شکل (۳-۴) نشان داده شده است.



شکل (۳-۴): ساختار نواری محاسبه شده برای CdTe خالص با استفاده از تقریب GGA.

همان گونه که در شکل (۳-۴) دیده می شود در ناحیه انرژی بین صفر تا ۰/۷۳eV ساختار نواری بوسیله یک گاف انرژی، که ویژگی مواد نیمرساناست، به دو ناحیه تقسیم شده است. نوارهای ایجاد شده در ناحیه انرژی بین صفر تا ۵ eV- از هیبریداسیون اوربیتال های Cd-5s و Te-5p ناشی می شود. در محدوده انرژی ۷ eV- تا ۹ eV- اوربیتال های Te-s و Te-p جایگزیده اند. در نوار رسانش نیز اوربیتال های 4d و 5p اتم های Te و p اتم های Cd همپوشانی دارند. گاف انرژی بدست آمده از این

^۱Band structure

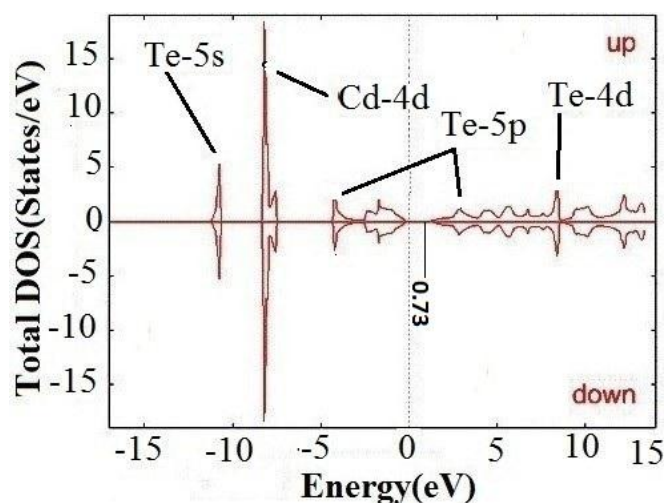
محاسبات (فاصله انرژی بین کمینه نوار رسانش و بیشینه نوار ظرفیت) مستقیم و در حدود 0.73 eV می باشد. در جدول (۷-۴) مقدار گاف نواری محاسبه شده تئوری و تجربی برای CdTe را گزارش کرده ایم.

جدول (۷-۴) : مقادیر گاف نواری محاسبه شده برای CdTe با استفاده از تقریب GGA.

مقدار تجربی (eV)	این کار (eV)	کار دیگران (eV)
$[26] 1.60$	0.73	$[26] 0.86$

۴-۳-۲ چگالی حالت ها (DOSs)^۱

چگالی حالت های الکترونی بیانگر تعداد حالت های مجاز در واحد گستره انرژی است. منحنی چگالی حالت های الکترونی طیفی است که نحوه توزیع الکترون ها را درون هریک از اوربیتال های اتمی نشان می دهد و به کمک آن می توان سهم مربوط به اوربیتال هریک از اتم های شرکت کننده در ترکیب را به درستی بیان نمود [۳۷]. نتایج بررسی چگالی حالت های مربوط به اسپین های بالا و پایین CdTe در محدوده انرژی 15 eV تا 15 eV با استفاده از تقریب GGA در شکل (۴-۴) نشان داده شده است.



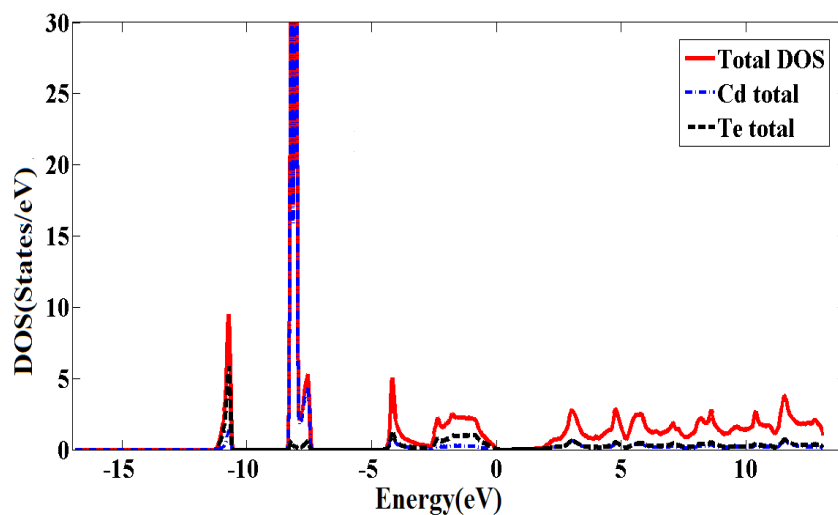
شکل (۴-۴) : چگالی حالت های کل محاسبه شده برای CdTe مربوط به اسپین بالا و پایین با تقریب GGA.

در نمودار شکل (۴-۴) تراز فرمی به نقطه صفر منتقل شده و با خط نقطه چین نشان داده شده است. ترازهای بالای تراز فرمی مربوط به نوار رسانش و ترازهای زیر آن مربوط به نوار ظرفیت CdTe می

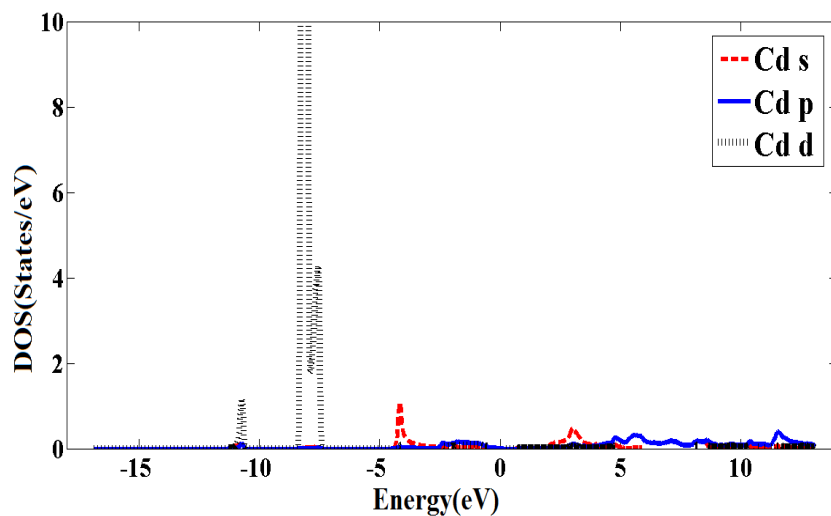
^۱Density Of States

باشند. همان طور که در این شکل مشاهده می کنیم چگالی حالت های کل بدست آمده مربوط به اسپین های پایین در تقارن کامل با چگالی حالت های مربوط به اسپین های بالا می باشند؛ که نشانگر عدم وجود خواص مغناطیسی در CdTe خالص است. در این شکل نیز دیده می شود که نوارهای ظرفیت و رسانش با یک گاف انرژی در حدود 0.73eV از یکدیگر جدا شده اند.

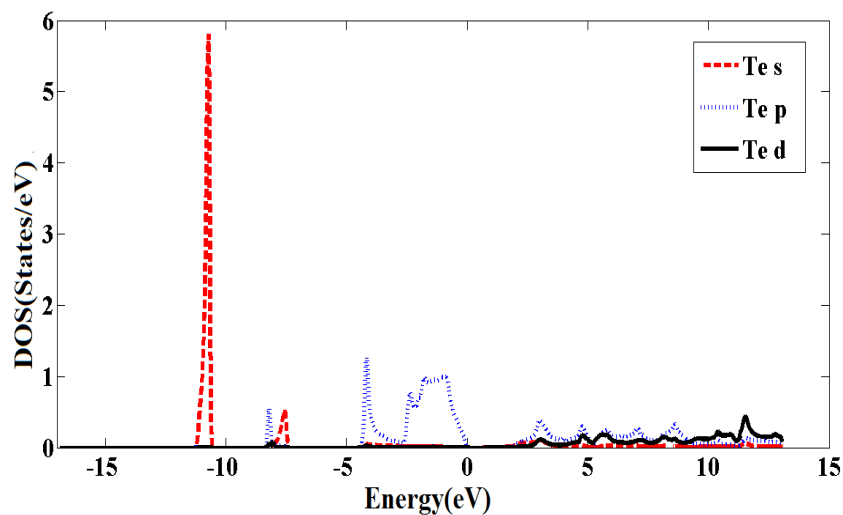
با ترسیم منحنی چگالی حالت های هر عنصر می توان میزان مشارکت آن ها را در چگالی حالت های کل تعیین نمود. در شکل های (۴-۵)، (۴-۶) و (۴-۷) این نمودارها را مشاهده می کنیم.



شکل (۴-۵): چگالی حالت های کل محاسبه شده برای Cd و Te در ترکیب CdTe با تقریب GGA.



شکل (۴-۶): چگالی حالت های جزئی محاسبه شده برای اوربیتال های s، p و d اتم Cd در ترکیب CdTe با تقریب GGA.



شکل (۴-۷): چگالی حالت های جزئی محاسبه شده برای اوربیتال های s ، p و d اتم Te در ترکیب CdTe با

تقریب GGA.

بررسی چگالی حالت های جزئی CdTe نشان دهنده هیبریدشدگی اوربیتال های 5s اتم های Cd و

5p اتم های Te در نوار ظرفیت و اوربیتال های 4d و 5p اتم های Te در نوار رسانش است.

۴-۴ بررسی خواص الکترونی CdTe با تقریب LDA

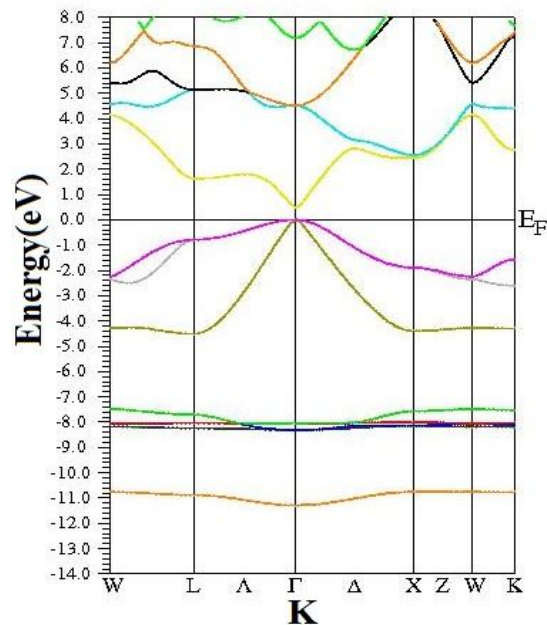
۴-۴-۱ ساختار نواری

ساختار نواری محاسبه شده برای CdTe با استفاده از تقریب LDA نیز محاسبه شد. نتیجه این

محاسبات را در شکل (۴-۸) مشاهده می کنیم. همان طور که مشاهده می شود این ساختار با ساختار

بدست آمده با تقریب GGA هیچ تفاوت ظاهری ندارد و تنها مقدار ناچیزی در گاف نواری با هم

اختلاف دارند.



شکل (۴-۸): ساختار نواری محاسبه شده برای CdTe با تقریب LDA.

مقادیر محاسبه شده برای گاف نواری CdTe با استفاده از تقریب LDA را در جدول (۴-۸) مشاهده می کنیم.

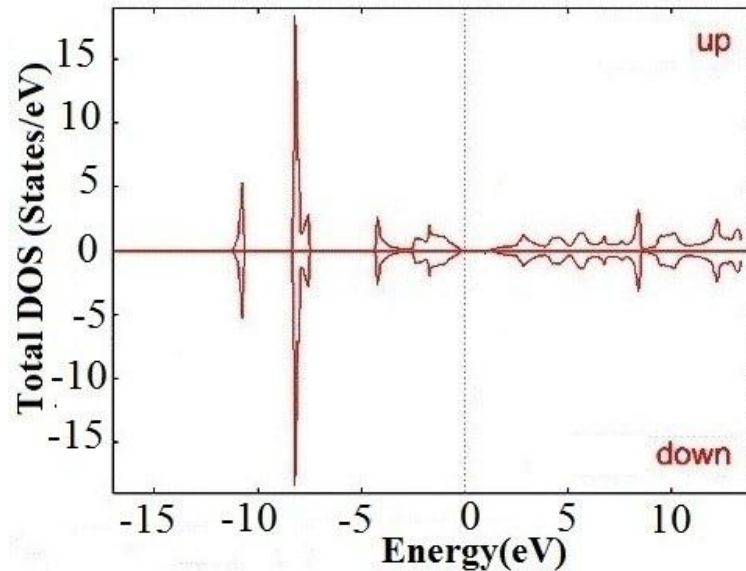
جدول (۴-۸): مقادیر گاف نواری محاسبه شده برای CdTe با استفاده از تقریب LDA.

مقدار تجربی (eV)	این کار (eV)	کار دیگران (eV)
[۲۶] ۱/۶۰	۰/۷۵	[۳۲] ۰/۶۳

داده های جدول (۴-۸) نشان می دهند که مقدار گاف نواری بدست آمده با استفاده از این تقریب از مقدار گاف نواری بدست آمده از تقریب GGA بزرگتر و در نتیجه به مقدار تجربی نزدیکتر است.

۴-۴-۲ چگالی حالت ها

چگالی حالت های کل CdTe نیز با استفاده از تقریب LDA محاسبه شد. نمودار آن را در شکل (۴-۹) مشاهده می کنیم. چگالی حالت های بدست آمده با این تقریب نیز عینا همانند چگالی حالت های بدست آمده با تقریب GGA است و تنها تفاوت ناچیزی در مقدار گاف نواری مشاهده می شود.



شکل (۴-۹): چگالی حالت های کل محاسبه شده برای CdTe مربوط به اسپین بالا و پایین با تقریب LDA.

۴-۵ بررسی خواص اپتیکی CdTe

ویژگی های اپتیکی مواد با محاسبه تابع دی الکتریک بررسی می شود. ثابت دی الکتریک یکی از مهمترین کمیت های اپتیکی است که با تعیین آن می توان سایر کمیت های اپتیکی را به درستی محاسبه نمود. بنابراین در ابتدا به بررسی تابع دی الکتریک می پردازیم.

۴-۵-۱ تابع دی الکتریک^۱

تابع دی الکتریک $\epsilon(\omega)$ در مبحث الکترواستاتیک بر حسب میدان الکتریکی E و قطبیدگی p به صورت زیر تعریف می شود:

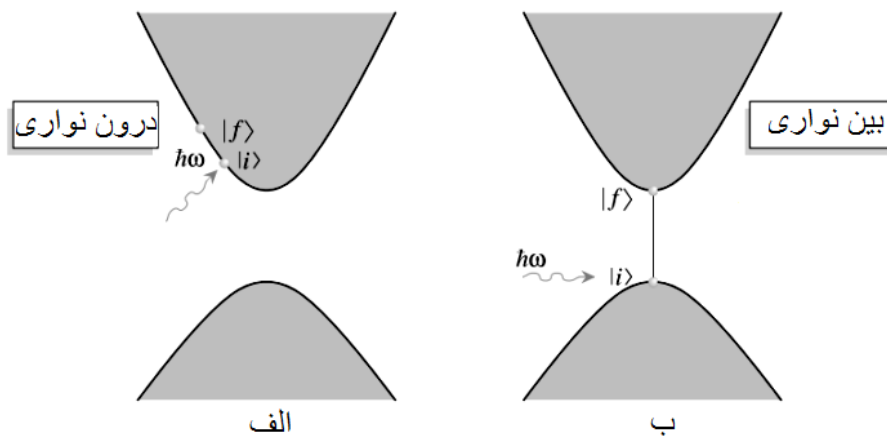
$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{p(\omega)}{\epsilon_0 E(\omega)} \quad (۴-۵)$$

تابع دی الکتریک یک ماده، تانسوری مختلط است که بیان کننده پاسخ ماده به میدان الکترومغناطیسی اعمال شده است. تانسور دی الکتریک برای یک شبکه مکعبی به صورت زیر است [۳۹]:

^۱Dielectric function

$$\varepsilon(\omega) = \begin{bmatrix} \text{Im} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \text{Im} \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \text{Im} \varepsilon_{xx} \end{bmatrix} \quad (۴-۶)$$

تابع دی الکتریک دارای دو سهم درون نواری و بین نواری است که سهم درون نواری برای فلزات بکار می رود. گذارهای بین نواری به دو نوع مستقیم و غیر مستقیم تقسیم می شوند که گذار غیر مستقیم شامل پراکندگی فونون هاست و سهم اندکی در تابع دی الکتریک دارد و در اکثر مواقع می توان از آن چشم پوشی کرد. پس برای محاسبه خواص اپتیکی نیمرساناها باید تابع دی الکتریک ناشی از گذارهای مستقیم بین نواری را محاسبه کرد [۴۰]. در واقع این نوع گذار ناشی از تحریک پلاسمون های حجمی در لبه های جذب است [۴۱]. در شکل (۴-۱۰) گذارهای درون نواری و بین نواری یک الکترون را مشاهده می کنیم.



شکل (۴-۱۰): گذار درون نواری و بین نواری یک الکترون از حالت اولیه $|i\rangle$ به حالت نهایی $|f\rangle$ [۴۲].

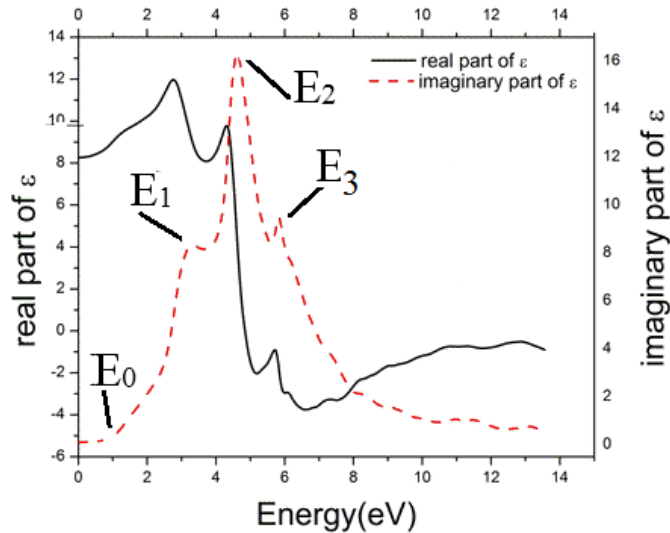
قسمت حقیقی تابع دی الکتریک (ε_1) به صورت زیر محاسبه می شود [۴۳]:

$$\text{Re}(\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega)) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} P \int \frac{\omega' \text{Im}(\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega'))}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega \quad (۴-۷)$$

که در این رابطه P بخش اصلی انتگرال کوشی است. قسمت موهومی تابع دی الکتریک (ε_2) نیز با استفاده از رابطه زیر محاسبه می شود [۴۳]:

$$\text{Im}(\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega)) = \frac{4\pi e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{C,V} \int \langle C_k | p^\alpha | V_k \rangle \langle V_k | p^\beta | C_k \rangle \delta(\varepsilon_{Ck} - \varepsilon_{Vk} - \omega) dk \quad (۴-۸)$$

در این رابطه p عناصر ماتریس تکانه بین حالت های α و β و $|V_k\rangle$ و $|C_k\rangle$ حالت های الکترون در نوار ظرفیت و رسانش با بردار موج k هستند. در شکل (۴-۱۱) منحنی سهم حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک CdTe را مشاهده می کنیم.



شکل (۴-۱۱): منحنی قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی.

در نمودار مربوط به سهم حقیقی تابع دی الکتریک، مقدار این تابع در انرژی 0 eV ، معرف ثابت دی الکتریک استاتیک است. مقدار این کمیت با استفاده از شکل (۴-۱۱)، $8/15$ بدست آمد. در محدوده قله این تابع (انرژی $2/7 \text{ eV}$)، ترازها مانع عبور امواج الکترومغناطیسی می شوند و در عوض آن را جذب و به فوتون تبدیل می کنند. یعنی اگر انرژی فوتون تابشی از گاف انرژی ماده کمتر باشد، ماده شفاف عمل می کند؛ اما اگر فوتون هایی که دارای انرژی برابر گاف ماده باشند به ماده بتابند، ماده به صورت کدر عمل می کند و آن ها را جذب می کند. در انرژی هایی که ϵ_1 منفی است محدوده غیر مجاز را داریم و منفی شدن این نمودار نشان دهنده انعکاس قوی می باشد [۴۴]. در قسمت موهومی تابع دی الکتریک چندین قله وجود دارد. این قله ها بیانگر گذارهای اپتیکی مجاز بین نوارهای اشغال شده ظرفیت و حالت های خالی نوار رسانش اند. بیشینه های موجود بر روی این نمودار منطبق بر نقاط بحرانی منحنی چگالی حالت های کل است و این بیشینه ها با ساختار نواری در توافقند [۴۵]. اولین تغییرات سریع منحنی ϵ_2 (در ابتدای نمودار) نزدیک به مقدار گاف انرژی است و آستانه

جذب نامیده می شود. مقدار محاسبه شده برای این کمیت، E_0 ، در جدول (۹-۴) آورده شده است. در منحنی ϵ_2 سه قله را مشاهده می کنیم. موقعیت این قله ها و مقدار تجربی و تئوری آن ها را در جدول (۹-۴) مشاهده می کنیم.

جدول (۹-۴): موقعیت قله های نمودار سهم موهومی تابع دی الکتریک CdTe.

پژوهش های تئوری دیگران (eV)	این کار (eV)	مقدار تجربی (eV)	قله
[۴۸]۰/۹۵	۰/۹۰	[۴۴]۱/۵۰	E_0
[۴۶]۳/۴۰	۳/۳۳	[۴۵]۳/۳۰	E_1
[۴۷]۵/۲۰	۴/۶	[۴۴]۵/۰۰	E_2
[۴۶]۶/۴۶	۵/۸۵	---	E_3

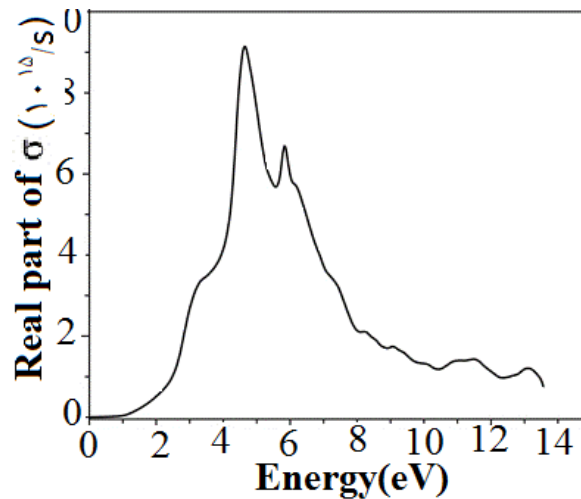
۴-۵-۲ رسانندگی اپتیکی^۱

الکترون های حالت های اشغال شده در اثر جذب فوتون به حالت های اشغال نشده در بالای تراز فرمی برانگیخته می شوند. به این گذار بین نواری رسانندگی اپتیکی و به جذب فوتون توسط الکترون ها جذب بین نواری گفته می شود. رابطه رسانندگی اپتیکی درون نواری وابسته به فرکانس با تابع دی الکتریک به صورت زیر است [۳۱]:

$$\sigma(\omega) = \frac{i\omega}{4\pi}(1 - \epsilon(\omega)) \quad (۱۰-۴)$$

در شکل (۴-۱۲) منحنی رسانندگی اپتیکی CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی را مشاهده می کنیم.

^۱Optical conductivity



شکل (۴-۱۲): منحنی رسانندگی اپتیکی CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی.

رسانندگی اپتیکی از انرژی حدود گاف نواری شروع می شود و با افزایش انرژی فوتون افزایش می یابد و در گستره انرژی بین ۴ eV تا ۵ eV به بیشترین مقدار خود می رسد که مربوط به گذار اوربیتال های Cd-5s به Te-5p است و قله بعدی در گستره انرژی های ۵ eV تا ۶ eV مربوط به گذار اوربیتال های Cd-4d به Te-5p است. دلیل شروع رسانندگی از انرژی حدود گاف نواری این است که در انرژی های پایین تر انرژی فوتون فرودی کمتر از انرژی گاف است؛ بنابراین الکترون های برانگیخته شده انرژی کافی برای عبور از گاف را دارا نمی باشند و گذاری انجام نمی گیرد و در نتیجه رسانندگی اپتیکی صفر می شود.

۴-۵-۳ ضریب شکست^۱ و ضریب خاموشی^۲

رابطه های ضریب شکست و ضریب خاموشی با تابع دی الکتریک به صورت زیر هستند [۳۵]:

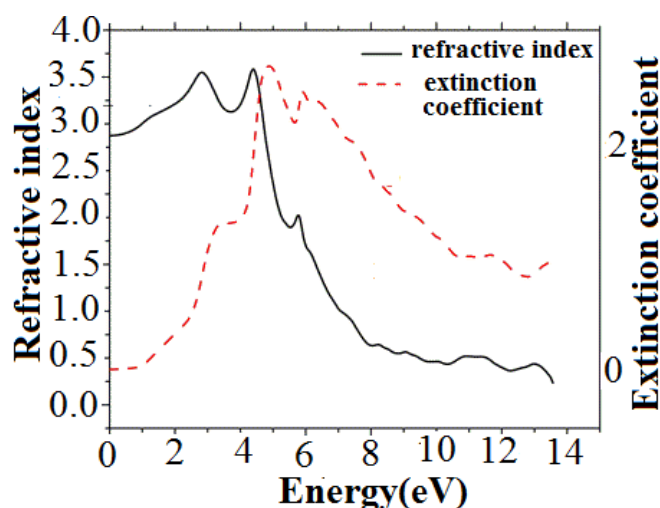
$$n_{\alpha\beta}(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega)| + \text{Re } \varepsilon_{\alpha\beta}(\omega)}{2}} \quad (۴-۱۱)$$

$$k_{\alpha\beta}(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega)| - \text{Re } \varepsilon_{\alpha\beta}(\omega)}{2}} \quad (۴-۱۲)$$

در شکل (۴-۱۳) منحنی ضریب شکست و ضریب خاموشی CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی رسم شده است.

^۱Refractive index

^۲Extinction coefficient



شکل (۴-۱۳): منحنی ضریب شکست و ضریب خاموشی CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی.

نمودار ضریب شکست بر حسب انرژی فوتون فرودی همان نمودار پاشندگی است. در مواردی که نمودار صعودی است و ضریب شکست با افزایش انرژی و فرکانس زیاد می شود، ماده شفاف است و پاشندگی بهنجار داریم. در مواردی که نمودار نزولی است و ضریب شکست با افزایش انرژی کم می شود، جذب اتفاق می افتد و پاشندگی بی هنجار داریم [۴۹]. مقدار این کمیت در انرژی ۰ eV ضریب شکست استاتیک نامیده می شود. مقدار محاسبه شده برای این کمیت در جدول (۴-۱۰) گزارش شده است.

جدول (۴-۱۰): مقادیر ضریب شکست استاتیک تجربی و تئوری محاسبه شده برای CdTe.

مقدار تجربی	این کار	پژوهش تئوری دیگران
[۵۰] ۲/۶۹	۲/۸۰	[۲۴] ۲/۷۴

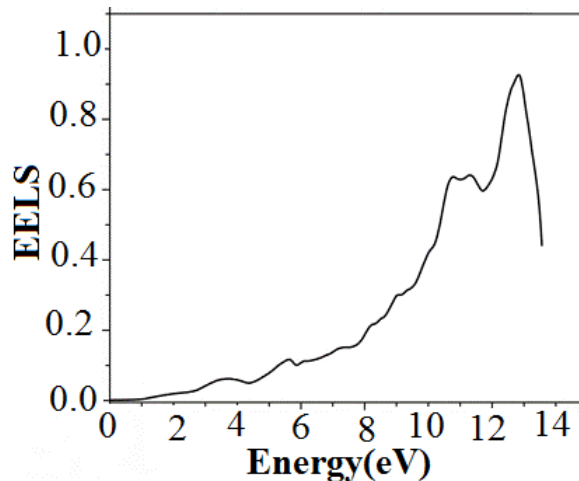
ضریب خاموشی برای یک ماده، سنجشی از میزان جذب پرتوی الکترومغناطیسی توسط آن ماده است. اگر موج الکترومغناطیسی از داخل ماده به آسانی عبور کند ماده ضریب خاموشی پایینی دارد و اگر به سختی به ماده نفوذ کند ماده دارای ضریب خاموشی بالاست. از آنجا که ضریب خاموشی به واپاشی یا میرایی دامنه نوسان میدان الکتریکی فوتون فرودی وابسته است با افزایش طول موج فوتون فرودی کاهش پیدا می کند [۵۱].

۴-۵-۴ طیف اتلاف انرژی الکترون (EELS)^۱

چندین راه برای تحریک الکترون ها در یک جسم جامد وجود دارد. یک راه که وابسته به طیف اپتیکی است تحریک الکترون ها به وسیله الکترون های دیگر است؛ که با تاباندن یک پرتو از الکترون های تک انرژی به نمونه و تجزیه انرژی پرتو منعکس شده انجام می شود [۵۱]. طی این فرآیند الکترون های بازتابی به میزان چشمگیری انرژی از دست می دهند. طیف اتلاف می تواند ناشی از تحریک الکترون های تک انرژی در جامد و یا تحریک دسته جمعی الکترون های ظرفیت که پلاسمون نامیده می شود، باشد. پلاسمون ها را می توان به صورت قله های متوالی در طیف اتلاف انرژی الکترون مشاهده کرد [۵۴]. فرکانس پلازما (ω_p) عبارتست از بسامد آستانه بین انتشار درون ماده و انعکاس قوی از سطح نمونه. مواد در فرکانس های پایین تر از فرکانس پلازما مانند نیمرسانا و در فرکانس های بالاتر از آن مانند فلز رفتار می کنند [۴۴]. رابطه بین اتلاف انرژی الکترون و تابع دی الکترون به صورت زیر است [۴۳]:

$$EELS(\omega) = \text{Im} \left[-\frac{1}{\epsilon_{\alpha\beta}(\omega)} \right] = \frac{\epsilon_2^2}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \quad (۴-۱۳)$$

در شکل (۴-۱۴) منحنی طیف اتلاف انرژی CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی را مشاهده می کنیم.



شکل (۴-۱۴): منحنی طیف اتلاف انرژی CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی.

^۱Electron Energy Loss Spectra

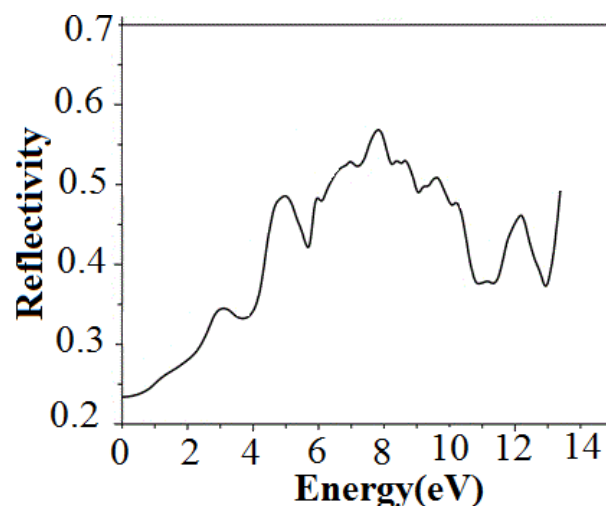
طیف اتلاف از انرژی حدود گاف نواری شروع می شود و در انرژی حدود $12/8 \text{ eV}$ بیشترین مقدار خود را دارد که همان انرژی مربوط به پلاسماون های حجمی است.

۴-۵-۵ بازتابندگی^۱

وقتی نوری با انرژی کافی به یک ماده بتابد، قسمتی از فوتون های نوری جذب ماده می شوند و گذارهای الکترونی از حالت های اشغال شده زیر تراز فرمی به حالت های اشغال نشده بالای تراز فرمی القا می کنند و بقیه بازتاب می شوند. مقدار بازتابندگی به ضریب شکست و ضریب خاموشی ماده بستگی دارد و آن را می توان با استفاده از رابطه زیر محاسبه نمود [۴۳]:

$$R_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (4-14)$$

که در این رابطه n مشخصه قسمت حقیقی و k مشخصه قسمت موهومی ضریب شکست (ضریب خاموشی) است. در شکل (۴-۱۵) منحنی بازتابندگی CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی را مشاهده می کنیم.



شکل (۴-۱۵): منحنی بازتابندگی CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی.

در نمودار بازتابندگی در نقاط مینیمم فرآیند جذب و در نقاط ماکزیمم بیشترین بازتابندگی را داریم. اولین مینیمم نمودار مربوط به گذارهای درون نواری می شود. این لبه جذب به طور معمول بین تراز

^۱ Reflectivity

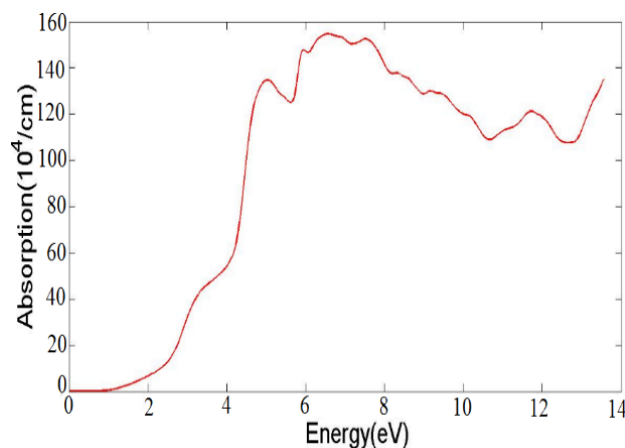
بالای نوار ظرفیت (Te-5p) و تراز ته نوار رسانش (Cd-5s) هر دو در نقطه Γ رخ می دهد. در انرژی های بالا جذب بیشینه و بازتاب کمینه است.

۴-۵-۶ ضریب جذب^۱

ضریب جذب یک ماده تعداد فوتون های جذب شده بر واحد طول ماده است. در اثر جذب فوتون، الکترون ها از نوار ظرفیت به نوار رسانش برانگیخته می شوند. به جذب فوتون توسط الکترون ها جذب بین نواری می گویند [۵۳]. ضریب جذب با رابطه زیر به قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مربوط می شود [۵۴]:

$$I_{\alpha\beta}(\omega) = \sqrt{2} \frac{\omega}{c} \left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2} \quad (۱۵-۴)$$

در شکل (۴-۱۶) منحنی ضریب جذب CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی را مشاهده می کنیم.



شکل (۴-۱۶): منحنی جذب CdTe بر حسب انرژی فوتون فرودی.

همانطور که در شکل (۴-۱۶) مشاهده می کنیم در طیف جذب CdTe، جذب اپتیکی از محدوده گاف نواری شروع می شود و تا انرژی حدود ۶/۵ eV روند صعودی دارد و در این انرژی بیشینه میزان جذب فوتون ($10^4 \times 156/6$ فوتون بر سانتی متر) را داریم. در انرژی های بالاتر از ۶/۵ eV روند طیف نزولی است و از میزان جذب کاسته می شود.

^۱Absorption index

نتیجه گیری

در این فصل خواص الکترونی و اپتیکی CdTe خالص مورد مطالعه قرار گرفت. در ابتدا با استفاده از ثابت شبکه تجربی CdTe، بهینه سازی حجم سلول واحد آن با دو تقریب GGA و LDA انجام شد و مقدار ثابت شبکه آن با دو تقریب محاسبه و با هم مقایسه شدند. سپس نمودار چگالی حالت های کل CdTe و همچنین ساختار نواری آن رسم و مقدار گاف نواری با استفاده از دو تقریب محاسبه شد. در محاسبات اپتیکی ابتدا محاسبات مربوط به تابع دی الکتریک CdTe (سهم حقیقی و موهومی) انجام و نمودار آن رسم شد و مورد تحلیل قرار گرفت و بعد از آن محاسبات مربوط به رسانندگی اپتیکی، ضریب شکست و ضریب خاموشی، طیف اتلاف انرژی الکترون، بازتابندگی و ضریب جذب انجام و نمودارهای مربوطه رسم شدند و مورد بررسی قرار گرفتند.

فصل پنجم:

بررسی ساختار الکترونی و خواص مغناطیسی

کادمیم تلوراید آلاییده با عناصر واسطه

مقدمه

در این فصل به ارائه نتایج حاصل از بررسی ساختار الکترونی و خواص مغناطیسی نیمرساناهای مغناطیسی رقیق شده حجمی حاصل از آلایش کادمیم تلوراید با عناصر واسطه (کروم، منگنز، آهن و کبالت) با غلظت های مختلف ۶/۲۵٪، ۱۲/۵٪ و ۲۵٪ پرداخته شده است. برای محاسبه ساختار الکترونی و خواص مغناطیسی این ترکیبات ابتدا بهینه سازی حجم ابرشبکه ها انجام شدند که در ادامه به آن می پردازیم.

۵-۱ روش انجام محاسبات

در این کار برای انجام محاسبات از روش موج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل و تقریب GGA برای پتانسیل همبستگی - تبدالی استفاده شده است. در این روش حالت های مغزی کاملاً نسبیتی و حالت های ظرفیتی نیمه نسبیتی در نظر گرفته می شوند. در این محاسبات مقدار پارامتر همگرایی برابر $RK_{max}=8$ در نظر گرفته شد. برای بسط فوری پتانسیل در ناحیه بین جایگاهی مقدار G_{max} برابر $13 a.u.^{-1}$ انتخاب شد. شعاع مافین - تین اتم های کادمیم، تلوراید و عنصر واسطه به ترتیب ۲/۴ a.u.، ۲/۵ a.u. و ۲/۰ a.u. انتخاب شدند. همگرایی انرژی تا مقدار $10^{-6} Ry$ انجام و انرژی قطع برای تفکیک بین حالت های ظرفیت و مغزه $8 Ry$ - محاسبه شد. آلایش ۶/۲۵٪ با جایگزینی دو اتم فلز واسطه در ابرشبکه $2 \times 2 \times 2$ ، آلایش ۱۲/۵٪ با جایگزینی دو اتم فلز واسطه در ابرشبکه $1 \times 2 \times 2$ و ۲ و آلایش ۲۵٪ با جایگزینی دو اتم فلز واسطه در ابرشبکه $1 \times 1 \times 2$ به جای اتم کادمیم بدست آمد. با توجه به پایداری ساختارها در تمام آلایش ها عنصر واسطه جایگزین اتم های کاتیون (کادمیم) شدند. به منظور اثبات پایداری ساختارهایی که عنصر واسطه جانشین کاتیون می شود، محاسبات انرژی برای یک نمونه با آلایش ۲۵٪ کروم انجام شد؛ در حالی که در آن اتم های کروم جایگزین اتم های آنیون (تلوراید) گردید. نتیجه بدست آمده از این محاسبات در جدول (۵-۱) گزارش شده است.

جدول (۵-۱) : مقایسه انرژی دو ترکیب $\text{Cd}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{Te}$ و $\text{CdCr}_{0.25}\text{Te}_{0.75}$.

انرژی ترکیب $\text{Cd}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{Te}$ (Ry)	انرژی ترکیب $\text{CdCr}_{0.25}\text{Te}_{0.75}$ (Ry)
-۱۸۰۰۲۵/۰۶۰۷	-۱۷۵۲۲۲/۲۴۷۶

همان طور که این نتایج نشان می دهند انرژی ساختاری که اتم های کروم جایگزین اتم های کادمیم شده کمتر از انرژی ساختاری است که اتم های کروم جایگزین اتم های تلوراید شده است؛ و بنابراین ساختار پایدارتری خواهد داشت. در ادامه محاسبات یون های مغناطیسی جایگزین اتم های کادمیم، که یک کاتیون دو ظرفیتی است، شدند.

۲-۵ محاسبه فاز پایدار مغناطیسی

در بررسی فاز پایدار ترکیبات نیمرسانای مغناطیسی حاصل از آرایش کادمیم تلوراید با فلزات واسطه کروم، منگنز، آهن و کبالت مشخص گردید که فاز پایدار مغناطیسی تمام ترکیبات حاصل شده به جز منگنز فرومغناطیس است. فاز پایدار حالت فرومغناطیس این ترکیبات با تفاوت انرژی کل ابرشبکه آن ها در حالت های آنتی فرومغناطیس (و یا پارامغناطیس) و فرومغناطیس مشخص می شود. اگر این تفاوت مثبت باشد، حالت فرومغناطیس بعد از بهینه سازی ساختاری پایین ترین انرژی را خواهد داشت. انرژی های محاسبه شده برای فاز فرومغناطیس، آنتی فرومغناطیس و پارامغناطیس در جدول (۲-۵) گزارش شده است.

جدول (۵-۲) : مقادیر انرژی حالت پایه در سه فاز فرومگناطیس، آنتی فرومگناطیس و پارامگناطیس برای ترکیبات

$Cd_{1-x}TM_xTe$ (TM=Cr, Mn, Fe, Co).

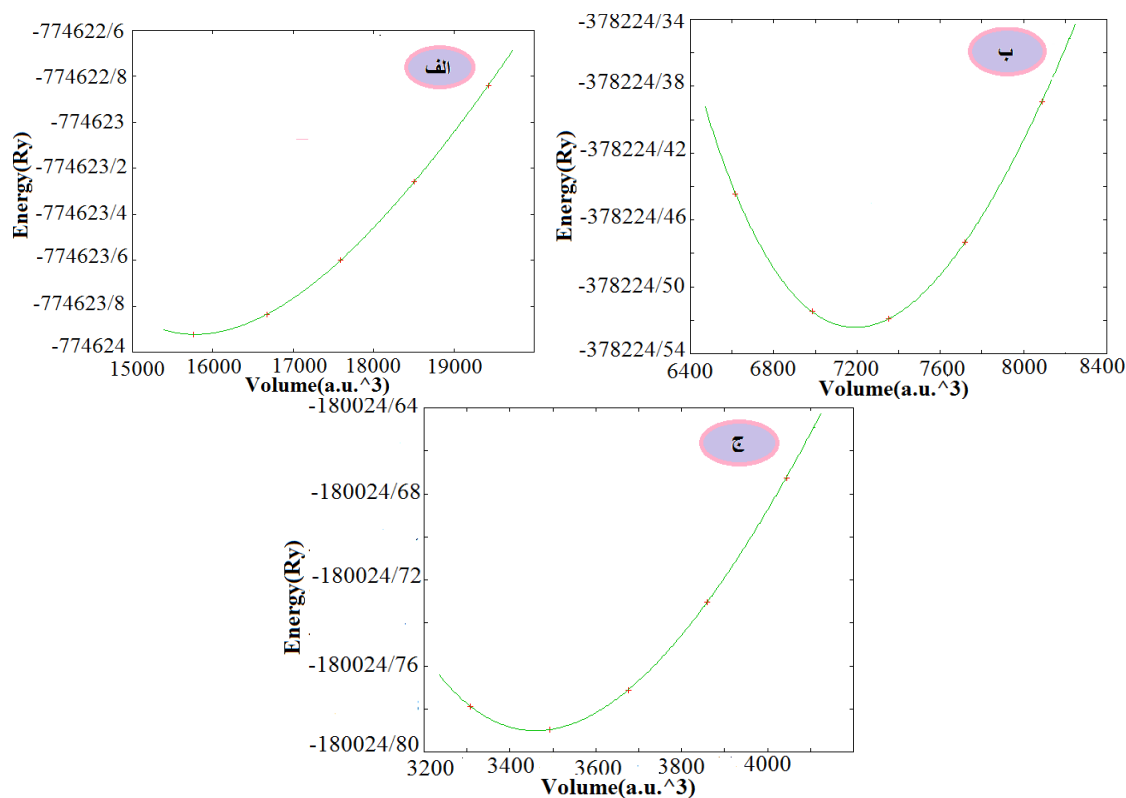
ترکیب	فاز فرومگناطیس (Ry)	فاز آنتی فرومگناطیس (Ry)	فاز پارامگناطیس (Ry)	فاز پایدار
$Cd_{0.9375}Cr_{0.0625}Te$	-۷۷۴۶۲۴/۲۶۸	-۷۷۴۶۲۳/۹۲۶	-۷۷۴۶۲۳/۹۲۶	FM
$Cd_{0.875}Cr_{0.125}Te$	-۳۷۸۲۲۴/۷۳۰	-۳۷۸۲۲۴/۴۴۶	-۳۷۸۲۲۴/۴۴۸	FM
$Cd_{0.75}Cr_{0.25}Te$	-۱۸۰۰۲۵/۰۶۱	-۱۸۰۰۲۴/۷۷۸	-۱۸۰۰۲۴/۷۷۶	FM
$Cd_{0.9375}Mn_{0.0625}Te$	-۷۷۵۰۵۵/۲۴۰	-۷۷۵۰۵۵/۷۴۰	-۷۷۵۰۵۴/۷۲۶	AFM
$Cd_{0.875}Mn_{0.125}Te$	-۳۷۸۶۵۵/۸۰۴	-۳۷۸۶۵۶/۳۴۲	-۳۷۸۶۵۵/۳۴۸	AFM
$Cd_{0.75}Mn_{0.25}Te$	-۱۸۰۴۵۶/۰۳۴	-۱۸۰۴۵۶/۶۱۳	-۱۸۰۴۵۵/۶۱۱	AFM
$Cd_{0.9375}Fe_{0.0625}Te$	-۷۷۵۵۱۱/۵۴۴	-۷۷۵۵۱۱/۲۳۸	۷۷۵۵۱۱/۲۵۰	FM
$Cd_{0.875}Fe_{0.125}Te$	-۳۷۹۱۱۲/۰۱۰	-۳۷۹۱۱۱/۷۲۴	-۳۷۹۱۱۱/۷۳۰	FM
$Cd_{0.75}Fe_{0.25}Te$	-۱۸۰۹۷۱/۹۲۷	-۱۸۰۹۱۱/۹۹۸	-۱۸۰۹۱۱/۹۹۷	FM
$Cd_{0.9375}Co_{0.0625}Te$	-۷۷۵۹۹۳/۷۷۴	-۷۷۵۹۹۰/۳۱۶	-۷۷۵۹۹۰/۸۵۶	FM
$Cd_{0.875}Co_{0.125}Te$	-۳۷۹۵۹۴/۳۵۲	-۳۷۹۴۹۱/۶۹۰	-۳۷۹۴۵۱/۴۸۴	FM
$Cd_{0.75}Co_{0.25}Te$	-۱۸۱۳۹۴/۶۶۲	-۱۸۱۳۹۴/۶۶۰	-۱۸۱۳۹۴/۶۵۱	FM

در تمام محاسبات انجام شده از تقریب GGA استفاده شده است. لیکن برای مقایسه نتایج، محاسبات با هر دو تقریب GGA و LDA برای نمونه کادمیم تلوراید آلائیده با غلظت ۲۵٪ کروم انجام شدند. با انجام بهینه سازی مقدار ثابت شبکه برای این ترکیب در تقریب LDA، $6.03 \text{ \AA}$ بدست آمد. با توجه به ثابت شبکه تجربی این ترکیب ($6.22 \text{ \AA}$) مشاهده گردید که ثابت شبکه بدست آمده با تقریب LDA نسبت به تقریب GGA ($6.35 \text{ \AA}$) خطای بیشتری دارد. همچنین مقدار انرژی تعادلی (انرژی حالت پایه) با این تقریب برابر $172230/85 \text{ Ry}$ بدست آمد که از مقدار مشابه محاسبه شده با تقریب GGA ($180024/79 \text{ Ry}$) بزرگتر است. محاسبه ساختار نواری، چگالی حالت ها و گاف

نواری با استفاده از تقریب LDA نیز نشان داد که نتایج بدست آمده تفاوت قابل توجهی با نتایج بدست آمده از تقریب GGA ندارند.

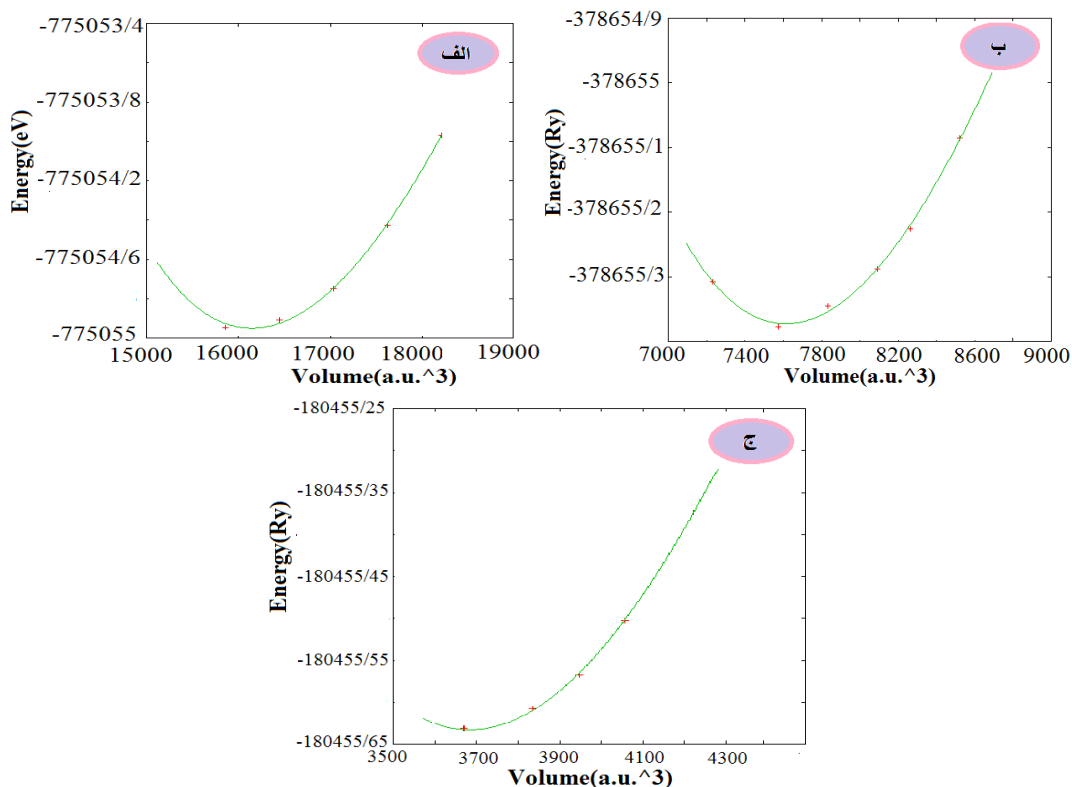
۳-۵ بهینه سازی انرژی

برای انجام محاسبات مربوط به ساختار الکترونی و خواص مغناطیسی نمونه ها ابتدا انرژی کل نسبت به حجم سلول بهینه می شود. در شکل (۱-۵) نتایج حاصل از بهینه سازی کادمیم تلوراید آلاییده با درصد های مختلف کروم در فاز پایدار فرومغناطیس نشان داده شده است.



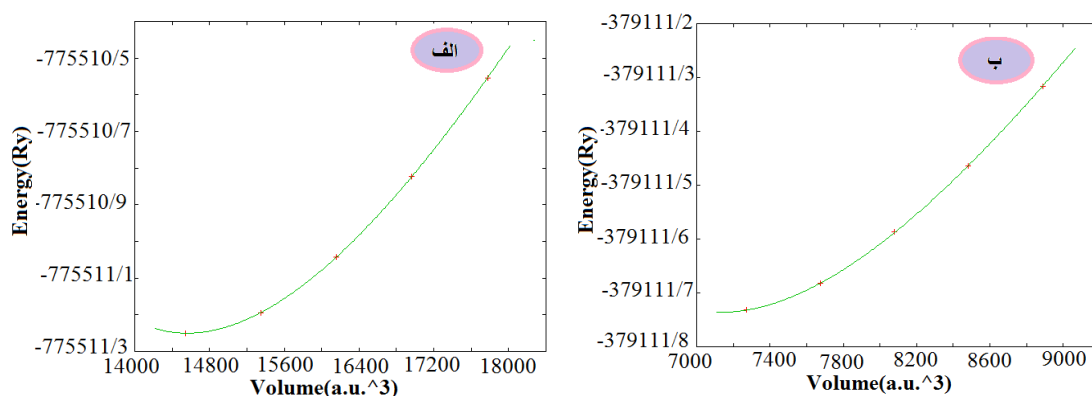
شکل (۱-۵): منحنی بهینه سازی حجم سلول Cd_{1-x}Cr_xTe برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ کروم در فاز فرومغناطیس.

نتایج بدست آمده نشان می دهند که با افزایش غلظت کروم ثابت شبکه نمونه کاهش می یابد. همانند آلایش های کروم برای منگنز نیز بهینه سازی انرژی بر حسب حجم در فاز پایدار انجام شده است. نتایج این بررسی در شکل (۲-۵) نشان داده شده است.

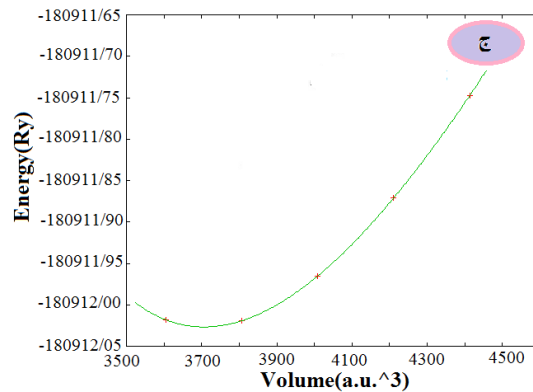


شکل (۵-۲): منحنی بهینه سازی حجم سلول $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب (۰/۱۲۵ و ج (۰/۲۵ منگنز در فاز آنتی فرومغناطیس.

در شکل (۵-۳) نتایج حاصل از بهینه سازی انرژی بر حسب حجم سلول برای نمونه های کادمیم تلوراید آلاییده با آهن در فاز پایدار فرومغناطیس نشان داده شده است.

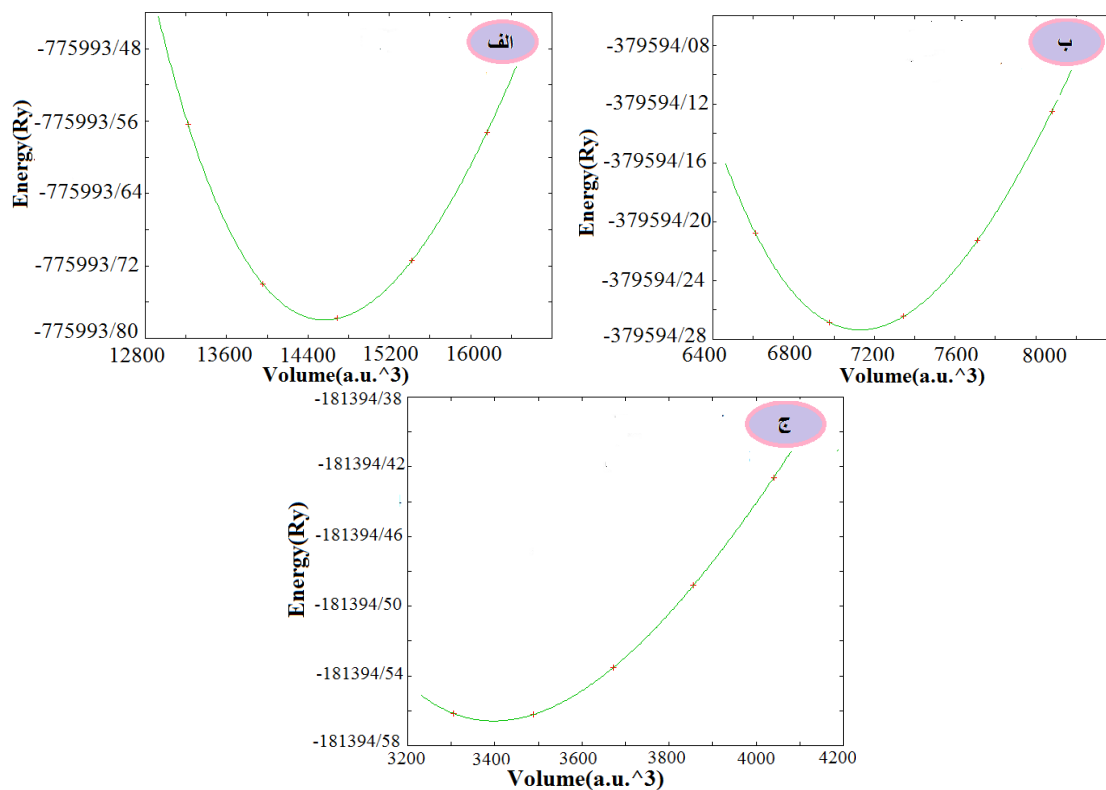


شکل (۵-۳): منحنی بهینه سازی حجم سلول $\text{Cd}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Te}$ برای غلظت های الف (۰/۰۶۲۵، ب (۰/۱۲۵ و ج (۰/۲۵ آهن در فاز فرومغناطیس.



ادامه شکل (۳-۵): منحنی بهینه سازی حجم سلول $\text{Cd}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Te}$ برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ آهن در فاز فرومغناطیس.

در شکل (۴-۵) نیز نتایج حاصل از بهینه سازی انرژی برای نمونه های کادمیم تلوراید آلائیده با کبالت در فاز پایدار فرومغناطیس نشان داده شده است.



شکل (۴-۵): منحنی بهینه سازی حجم سلول $\text{Cd}_{1-x}\text{Co}_x\text{Te}$ برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ کبالت در فاز فرومغناطیس.

نتایج بدست آمده نشان می دهند که ثابت شبکه نمونه ها با افزایش غلظت کبالت کاهش می یابند

که در ادامه به توضیح تغییرات می پردازیم.

۵-۳-۱ محاسبه ثابت شبکه

معمولا در بررسی رفتار آلیاژی فرض می شود که اتم ها در مکان های شبکه ایده آل قرار دارند و ثابت شبکه به طور خطی با افزایش غلظت (x) مطابق قانون وگارد تغییر می کند [۲۷]:

$$a(A_{1-x}B_xC) = xa_{BC} + (1-x)a_{AC} \quad (۱-۵)$$

در این رابطه a_{AC} و a_{BC} ثابت های شبکه ترکیبات دوتایی AC و BC و $a(A_{1-x}B_xC)$ ثابت شبکه آلیاژ سه عنصری $A_{1-x}B_xC$ است. نتایج تجربی و تئوری نشان داده است که این قانون در مورد آلیاژهای نیمرسانا نیز صدق می کند. بنابراین ثابت شبکه آلیاژ را می توان به صورت زیر نوشت [۲۷]:

$$a(A_{1-x}B_xC) = xa_{BC} + (1-x)a_{AC} - x(1-x)b \quad (۲-۵)$$

که در این رابطه b پارامتر خمشی^۱ نامیده می شود. با استفاده از داده های بدست آمده برای حجم تعادلی از منحنی بهینه سازی، می توان ثابت شبکه برای هر ساختار را محاسبه نمود. در جدول (۵-۳) نتایج محاسبه شده برای ترکیبات $Cd_{1-x}Cr_xTe$ گزارش شده است.

جدول (۳-۵): مقادیر ثابت شبکه آلیاژ سه تایی $Cd_{1-x}Cr_xTe$ ($x = ۰/۰۶۲۵$ و $۰/۱۲۵$ و $۰/۲۵$).

غلظت کروم	ثابت شبکه محاسبه شده در این کار (Å)	ثابت شبکه محاسبه شده توسط دیگران (Å)	
		تجربی	تئوری
۰/۰۶۲۵	۶/۶۲	[۲۵]۶/۴۶	---
۰/۱۲۵	۶/۴۳	[۲۵]۶/۴۴	[۲۶]۶/۵۸
۰/۲۵	۶/۳۵	[۲۵]۶/۲۲	[۲۶] ۶/۵۴

مقادیر گزارش شده در این جدول نشان دهنده کاهش ثابت شبکه این ترکیبات با افزایش غلظت کروم است. این نتایج با کار تحقیقاتی گروه ساینی^۲ و همکاران برای نمونه های کادمیم تلوراید آلائیده با غلظت های ۲۵٪ و ۱۲/۵٪ کروم در توافق است. در جدول (۴-۵) نتایج بدست آمده برای ثابت های شبکه ترکیبات $Cd_{1-x}Mn_xTe$ در دو فاز فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس گزارش شده است.

^۱Bowing parameter

^۲Saini

جدول (۴-۵) : مقادیر ثابت شبکه آلیاژ سه تایی $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ ($x=0.0625, 0.125, 0.25$)

غلظت منگنز	ثابت شبکه محاسبه شده در این کار ($\text{\AA}$)		ثابت شبکه محاسبه شده توسط دیگران ($\text{\AA}$)	
	فاز فرومغناطیس	فاز آنتی فرومغناطیس	تجربی (فاز آنتی فرومغناطیس)	تئوری (فاز فرومغناطیس)
۰/۰۶۲۵	۶/۴۸	۶/۴۹	[۲۷]۶/۵۹۲	---
۰/۱۲۵	۶/۳۹	۶/۴۲	[۲۷]۶/۵۸۰	[۲۷]۶/۵۷۷
۰/۲۵	۶/۳۳	۶/۳۸	[۲۷]۶/۵۵۰	[۲۷]۶/۵۴۴

داده های جدول (۴-۵) نشان می دهند که با افزایش غلظت منگنز برای هر دو فاز فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس ثابت شبکه کاهش می یابد. نتایج بدست آمده در هر دو فاز در توافق خوبی با مقادیر تجربی و تئوری گزارش شده است. در جدول های (۵-۵) و (۶-۵) نیز نتایج بدست آمده برای ثابت شبکه ترکیبات $\text{Cd}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Te}$ و $\text{Cd}_{1-x}\text{Co}_x\text{Te}$ گزارش شده است. این نتایج نشان می دهند که با افزایش آلیاژ آهن و کبالت ثابت شبکه نمونه ها کاهش می یابد.

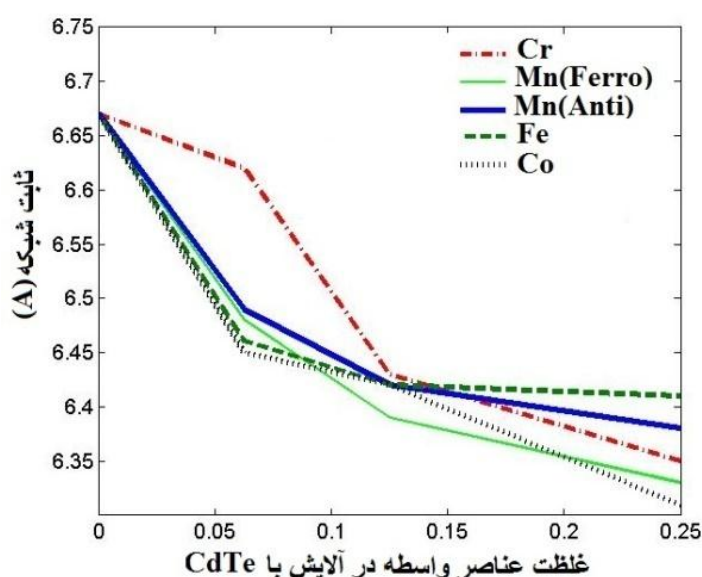
جدول (۵-۵) : مقادیر ثابت شبکه آلیاژ سه تایی $\text{Cd}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Te}$ ($x=0.0625, 0.125, 0.25$)

غلظت آهن	ثابت شبکه محاسبه شده در این کار ($\text{\AA}$)
۰/۰۶۲۵	۶/۴۶
۰/۱۲۵	۶/۴۲
۰/۲۵	۶/۴۱

جدول (۶-۵) : مقادیر ثابت شبکه آلیاژ سه تایی $\text{Cd}_{1-x}\text{Co}_x\text{Te}$ ($x=0.0625, 0.125, 0.25$)

غلظت کبالت	ثابت شبکه ترکیبات ($\text{\AA}$)	
	این کار	کارهای تئوری دیگران
۰/۰۶۲۵	۶/۴۵	---
۰/۱۲۵	۶/۴۲	---
۰/۲۵	۶/۳۱	[۲۸]۶/۲۹۰

نتایج بدست آمده در توافق با نتایج گزارش شده توسط گروه سعید^۱ و همکاران می باشد [۲۸]. نتیجه گزارش شده توسط این گروه در جدول (۵-۶) گزارش شده است. در شکل (۵-۵) منحنی تغییرات ثابت شبکه کادمیم تلوراید آلاینده با عناصر واسطه (کروم، منگنز، آهن و کبالت) حاصل از این کار بر حسب غلظت آلاینش نشان داده شده است. این بررسی نشان می دهد ثابت شبکه با افزایش درصد یون مغناطیسی کاهش می یابد. به دلیل اختلاف کم در شعاع یونی عناصر واسطه، ثابت شبکه نمونه های آلاینده تفاوت زیادی با یکدیگر ندارند.



شکل (۵-۵): منحنی تغییرات ثابت شبکه بر حسب غلظت عناصر واسطه ترکیبات $Cd_{1-x}TM_xTe$ (TM=Cr, Mn, Fe, Co).

۵-۳-۲ مدول حجمی، مشتق مدول حجمی و تراکم پذیری

از کمیت های دیگری که بعد از مرحله بهینه سازی حجم سلول بدست می آید، مقادیر مدول حجمی و مشتق مدول حجمی است. مقادیر محاسبه شده این کمیت ها برای درصدهای مختلف آلاینش در جدول (۵-۷) گزارش شده است. مقدار تراکم پذیری این ترکیبات نیز، (عکس مدول حجمی)، محاسبه و در این جدول گزارش شده است.

^۱Y. Saeed

جدول (۷-۵): مقادیر محاسبه شده مدول حجمی، مشتق مدول حجمی و تراکم پذیری ترکیبات $Cd_{1-x}TM_xTe$ (TM=Cr, Mn, Fe, Co).

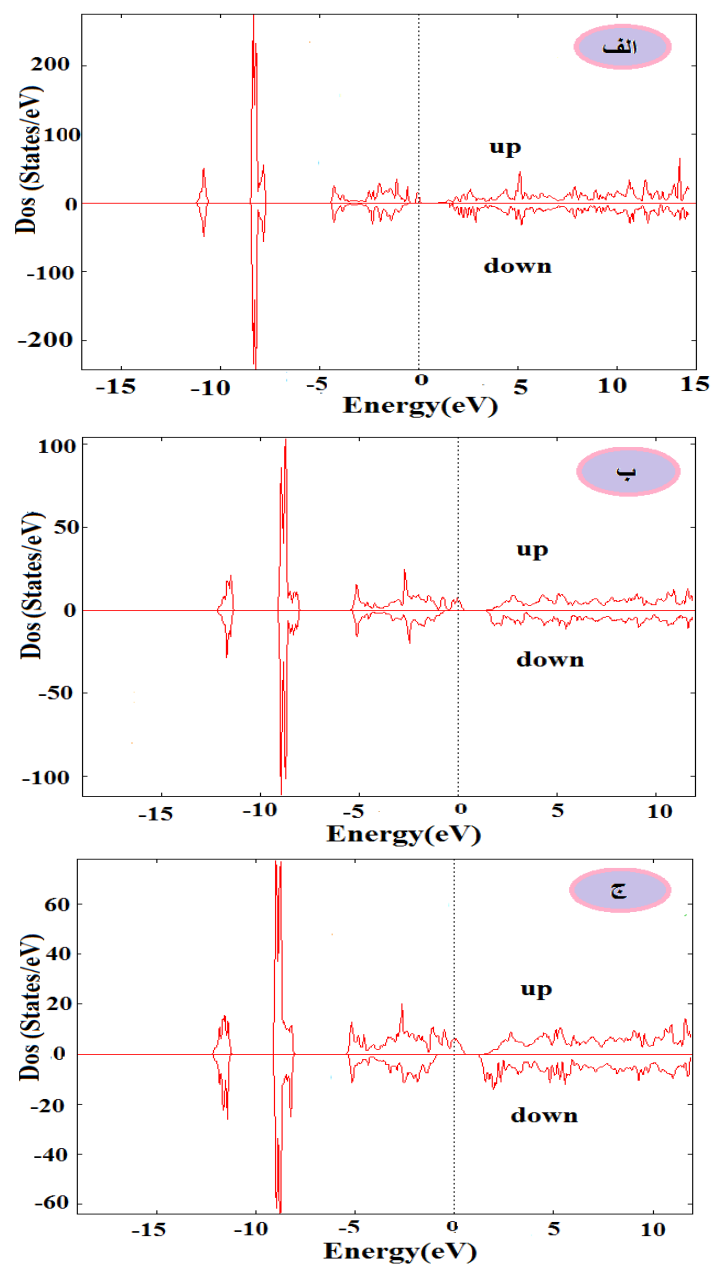
عنصر واسطه	مدول حجمی (GPa)		مشتق مدول حجمی	تراکم پذیری
	این پژوهش	پژوهش دیگران		
$Cr_{0.0625}$	۴۶/۳۴	---	۴/۲۳۴	۰/۰۲۱۵
$Cr_{0.125}$	۴۳/۹۱	[۵۹]۴۲/۸	۴/۵۶	۰/۰۲۳
$Cr_{0.25}$	۴۶/۱۰	[۵۲]۴۳/۷۸	۴/۴۱۵	۰/۰۲۲
$Mn_{0.0625}$ فرومغناطیس	۴۹/۰۹	---	۶/۸۲	۰/۰۲
$Mn_{0.125}$ فرومغناطیس	۳۸/۴۵	[۵۳] ۳۴/۹۲	۵/۰۱	۰/۰۲۶
$Mn_{0.25}$ فرومغناطیس	۵۰/۱۰	[۵۵]۴۷/۱	۵/۹۷۷	۰/۰۲
$Mn_{0.0625}$ آنتی فرومغناطیس	۴۶/۶۰	---	۶/۵۱	۰/۰۲۱
$Mn_{0.125}$ آنتی فرومغناطیس	۴۱/۷۲	---	۵/۱۵	۰/۰۲۴
$Mn_{0.25}$ آنتی فرومغناطیس	۵۰/۲۵	---	۵/۴۷	۰/۰۲
$Fe_{0.0625}$	۴۳/۴۹	---	۵/۵۱	۰/۰۲۳
$Fe_{0.125}$	۴۴/۸۴	---	۵/۵۶	۰/۰۲۲
$Fe_{0.25}$	۴۶/۲۱	---	۵/۳۱	۰/۰۲۲
$Co_{0.0625}$	۴۲/۳۴	---	۴/۷۹	۰/۰۲۴
$Co_{0.125}$	۴۳/۲۷	---	۴/۹۲	۰/۰۲۳
$Co_{0.25}$	۴۷/۶۹	[۵۲]۵۰/۴۱	۵/۲۴	۰/۰۲۱

کوچکتر بودن مدول حجمی نمونه نشان دهنده نرم تر بودن آن است و در نتیجه این ترکیب به راحتی تغییر شکل می دهد. با مقایسه داده های گزارش شده در جدول (۷-۵) نتیجه می گیریم که ترکیب $Cd_{0.875}Mn_{0.125}Te$ در فاز فرومغناطیس کمترین مدول حجمی و در نتیجه بیشترین تراکم پذیری را در بین این ترکیبات داشته و نرم تر از بقیه نمونه ها است.

۴-۵ محاسبه چگالی حالت های نمونه ها

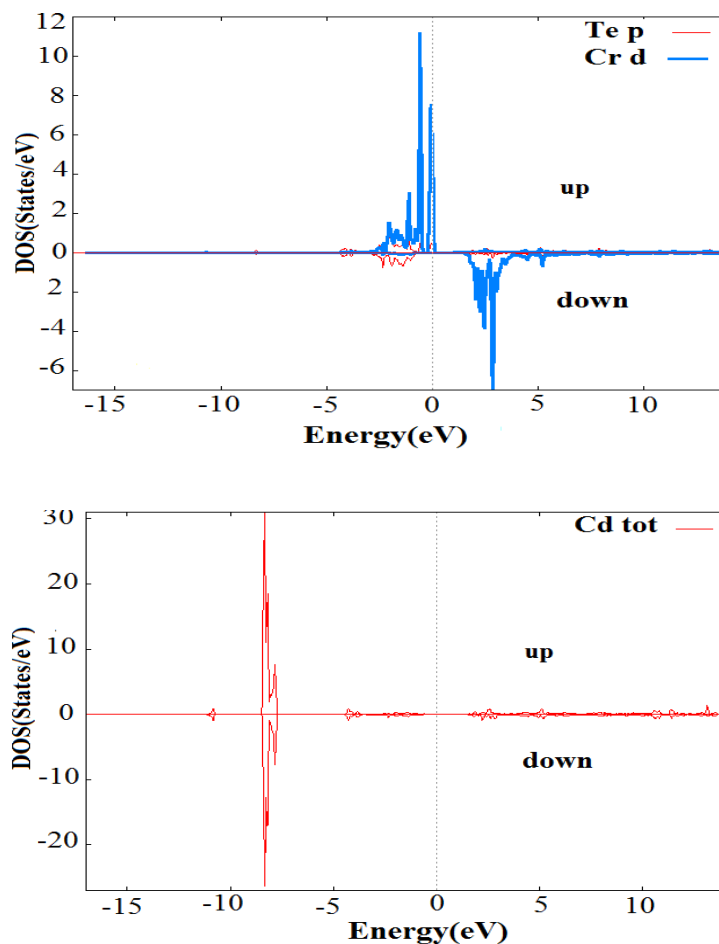
۴-۵-۱ چگالی حالت های کادمیم تلوراید آلاینده با کروم

منحنی های چگالی حالت های کل محاسبه شده برای کادمیم تلوراید آلاینده با کروم در شکل (۴-۵) نشان داده شده است. این نمودارها نشان دهنده قطبش اسپینی ۱۰۰٪ برای حالت های اسپین بالا و گاف نواری برای حالت های اسپین پایین است که با افزایش غلظت عنصر واسطه افزایش می یابد.



شکل (۴-۵) : چگالی حالت های کل Cd_{1-x}Cr_xTe برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ کروم در فاز فرومغناطیس.

شکل (۷-۵) چگالی حالت های جزئی Te-5p و Cr-3d کادمیم تلوراید آلائیده با غلظت ۰/۰۶۲۵ کروم را نشان می دهد. این اوربیتال ها نقش اساسی در خواص ترکیب نهایی خواهند داشت. بررسی چگالی حالت های جزئی اتم ها نشان می دهد که در نوار رسانش، اوربیتال های Te-5p و Cr-3d و Cd-5s سهم عمده ای دارند؛ اما در نوار ظرفیت علاوه بر این اوربیتال ها، اوربیتال های Cd-4d و Te-5s نیز مشارکت دارند. حالت های s و p اتم های میزبان سهم کمی در نوار رسانش دارند.



شکل (۷-۵) : چگالی حالت های جزئی ترکیب Cd_{0.9375}Cr_{0.0625}Te در فاز فرومغناطیس.

همانطور که در شکل (۷-۵) مشاهده می کنیم چگالی حالت های کل در حوالی تراز فرمی، عمدتاً از هیبریداسیون حالت های Cr-3d و Te-5p ناشی می شوند. همچنین با مشاهده چگالی حالت های غلظت های دیگر کروم متوجه می شویم که با افزایش غلظت کروم از جایگزیدگی اوربیتال های Te-5p و Cr-3d کاسته می شود. این بررسی ها نشان می دهد که تراز فرمی با حالت های اسپین بالای کروم و سهم کمی از حالت های Te-5p اشغال شده که با افزایش غلظت کروم چگالی حالت ها در آن

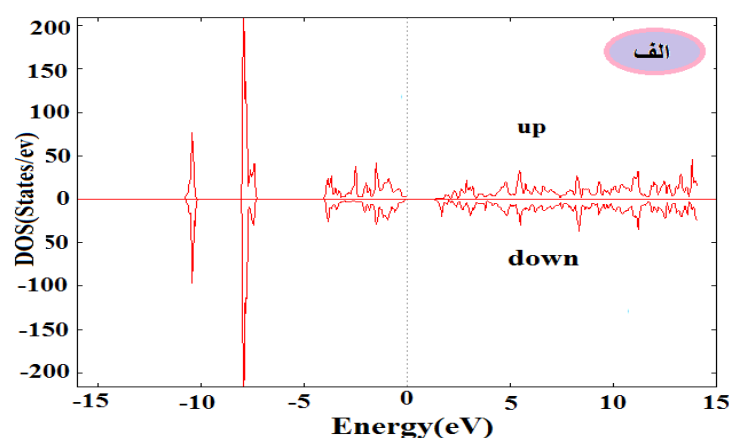
افزایش می یابد. منحنی چگالی حالت های کل اتم کادمیم نیز نشان دهنده یک جهش در انرژی حدود $8/2 \text{ eV}$ است که مربوط به اوربیتال d آن می شود. این اوربیتال ها نقش مهم و تعیین کننده در القاء فاز فرومغناطیس در ترکیب نهایی دارند. اوربیتال های دیگر کادمیم نقش مهمی در منحنی چگالی حالت های کل ندارند.

۵-۴-۲ چگالی حالت های کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز

۵-۴-۱ چگالی حالت های کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز در فاز

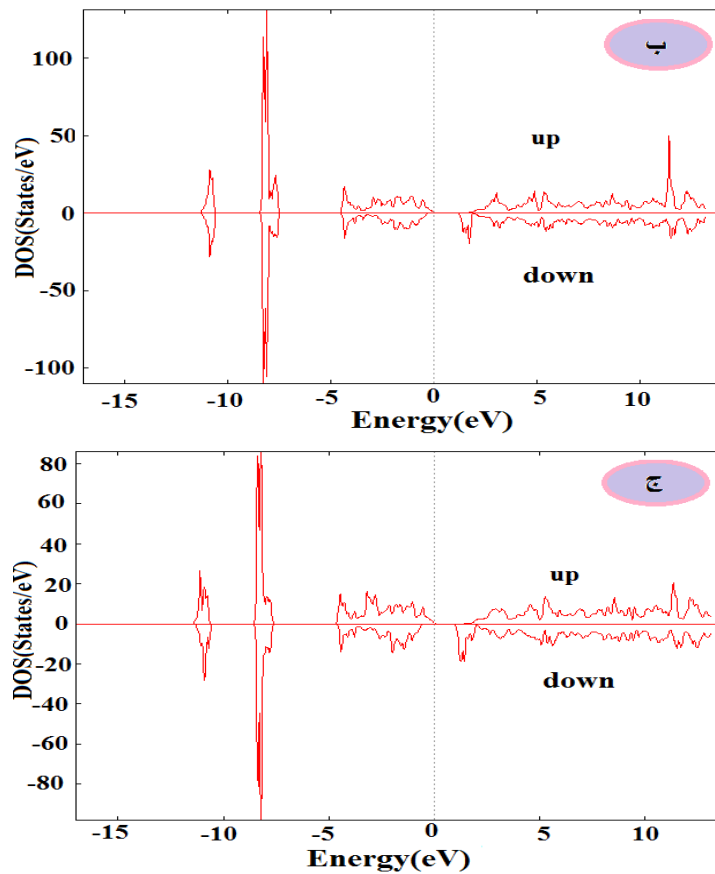
فرومغناطیس

همانگونه که قبلا اشاره شد کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز در فاز آنتی فرومغناطیس پایدار است. اخیرا با استفاده از روش های رو آراستی باریکه مولکولی^۱ (MBE) و اتم های نیتروژن به عنوان عنصر مشارکت کننده در آرایش، فاز فرومغناطیس القا شده حاملی برای کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز گزارش شده است [۵۳]. لذا در این کار برای مقایسه با این نتایج کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز را در فاز فرومغناطیس نیز مورد بررسی قرار دادیم. در شکل (۵-۸) نمودارهای چگالی حالت های کل محاسبه شده برای کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز در فاز فرومغناطیس نشان داده شده است.



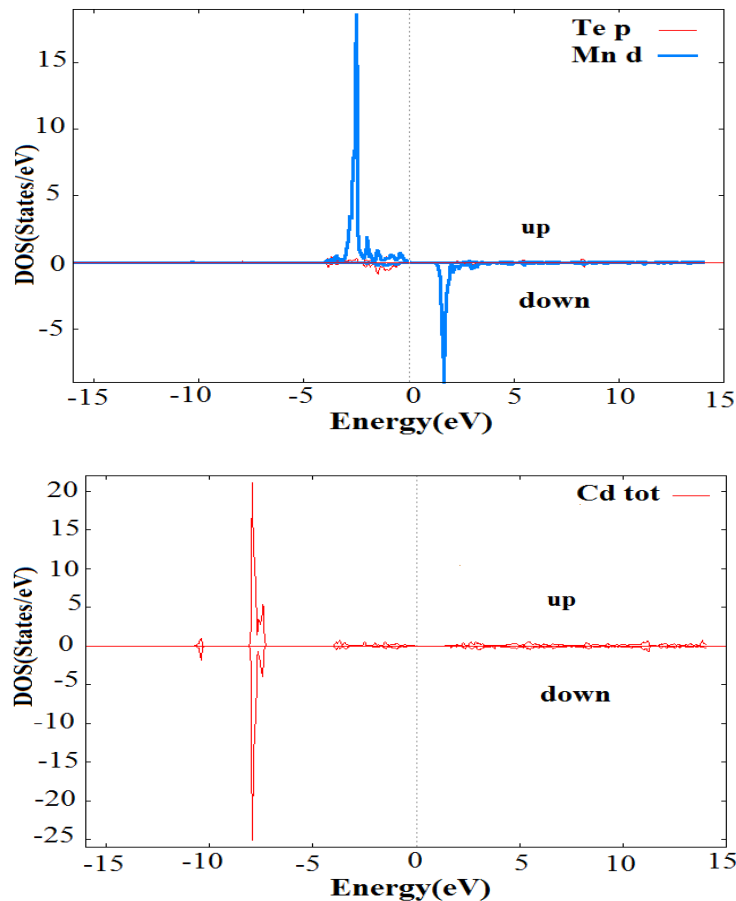
شکل (۵-۸): چگالی حالت های کل $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ منگنز در فاز فرومغناطیس.

^۱ Molecular Beam Epitaxial



ادامه شکل (۵-۸) : چگالی حالت های کل $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ منگنز در فاز فرومغناطیس.

منحنی چگالی حالت های کل آرایش با منگنز در فاز فرومغناطیس نشان دهنده اشغال تراز فرمی توسط الکترون های اسپین بالای اوربیتال Te-5p در این نمونه ها است؛ این ترکیبات در هر دو جهت اسپین بالا و پایین دارای گاف نواری هستند؛ اما گاف اسپین بالا مقدار کوچکی دارد و در کل می توان گفت این نمونه ها دارای خواص نیم فلزی می باشند. در شکل (۵-۹) نیز چگالی حالت های جزئی محاسبه شده برای نمونه کادمیم تلوراید آلاینده با غلظت ۰/۰۶۲۵ منگنز در فاز فرومغناطیس نشان داده شده است.



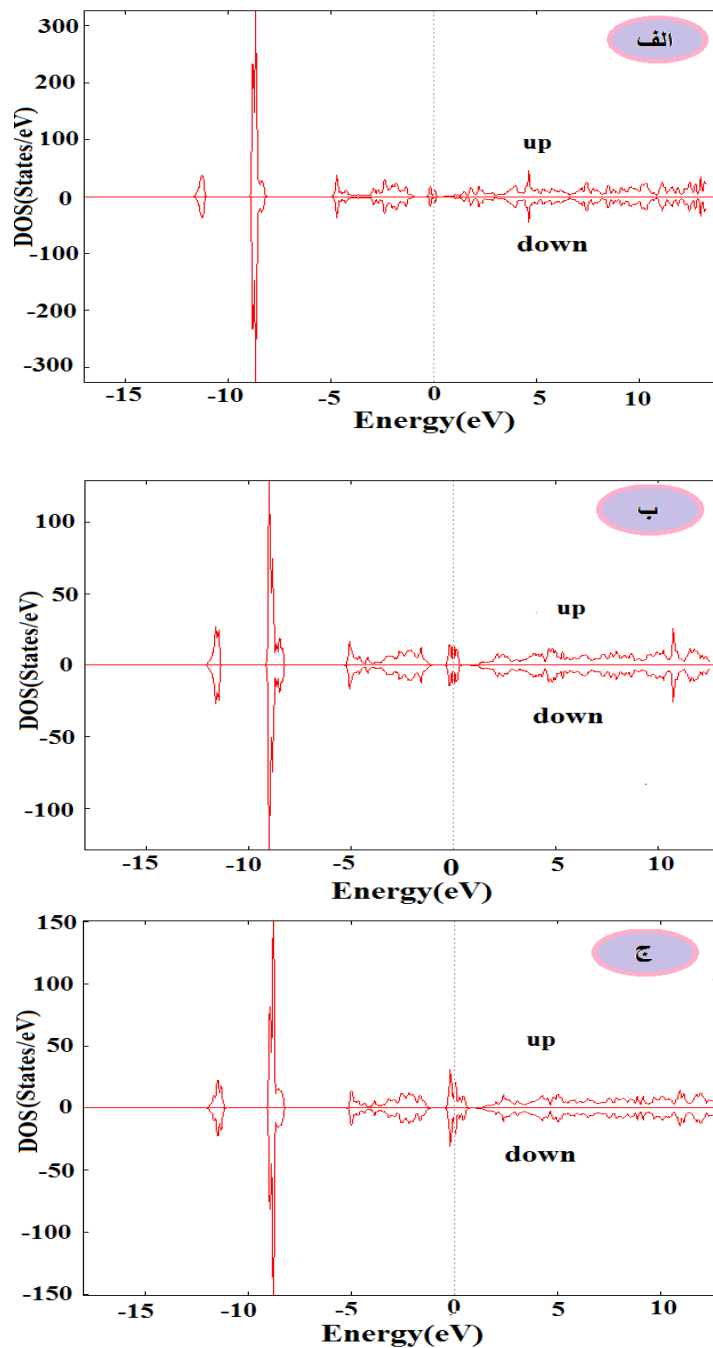
شکل (۵-۹): چگالی حالت های جزئی ترکیب $\text{Cd}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{Te}$ در فاز فرومغناطیس.

نمودارهای چگالی حالت های شکل (۵-۹) نشان می دهند که نوار اسپین بالای مربوط به اوربیتال های Mn-3d اشغال شده و بیشینه آن در موقعیت انرژی $3/3\text{eV}$ است، در حالی که همین نوار در اسپین پایین خالی است و بیشینه آن در موقعیت انرژی $2/1\text{eV}$ قرار دارد. این بررسی نشان می دهد که بخش پایین تر نوار ظرفیت با حالت های Cd-4d اشغال شده است؛ جایی که سهم کوچکی مربوط به حالت های Te-5p و Te-5s برای هر دو اسپین بالا و پایین قابل مشاهده است. نزدیک تراز فرمی، بخش بالایی نوار ظرفیت در اسپین بالا عمدتاً با حالت های Mn-3d و Te-5p اشغال شده است.

۵-۴-۲ چگالی حالت های آلایش کادمیم تلوراید با منگنز در فاز آنتی

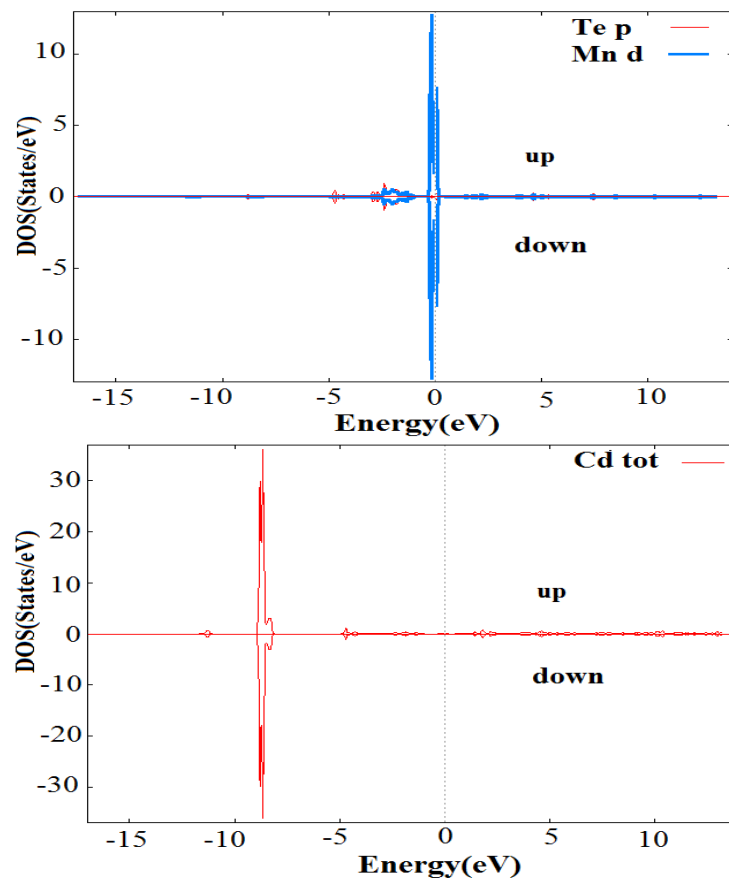
فرومغناطیس

نمودارهای چگالی حالت های کل محاسبه شده برای کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز در فاز آنتی فرومغناطیس در شکل (۵-۱۰) نشان داده شده است.



شکل (۵-۱۰): چگالی حالت های کل $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ منگنز در فاز آنتی فرومغناطیس.

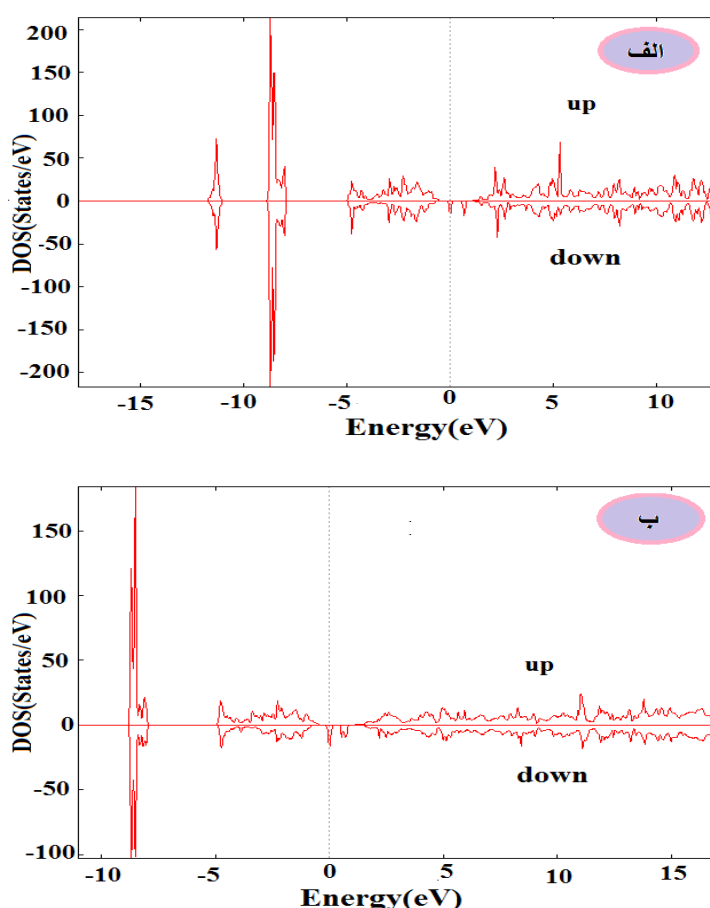
این بررسی نشان می دهد که در فاز آنتی فرومغناطیس گاف انرژی در چگالی حالت ها مشاهده نمی شود. بنابراین ترکیبات حاصل از کادمیم تلوراید آلائیده با منگنز با درصدهای ذکر شده، در فاز پایدار خواص فلزی از خود نشان می دهند. نمودار چگالی حالت های جزئی CdTe آلائیده با غلظت ۰/۰۶۲۵ منگنز در فاز آنتی فرومغناطیس برای اسپین های بالا و پایین در شکل های (۵-۱۱) نشان داده شده است.



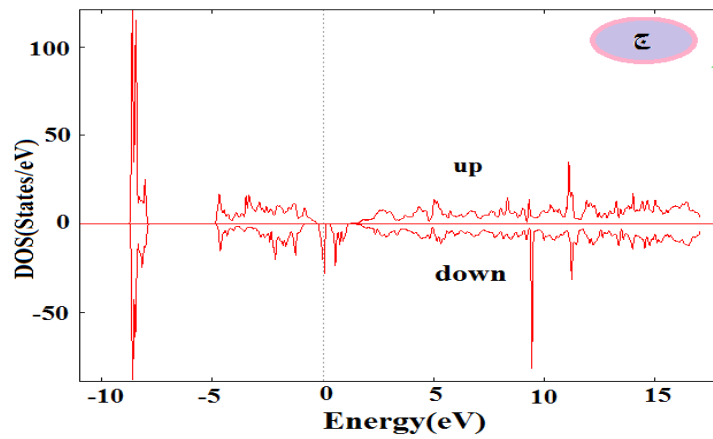
شکل (۵-۱۱): چگالی حالت های جزئی ترکیب $\text{Cd}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{Te}$ در فاز آنتی فرومغناطیس. با بررسی این نمودارها مشاهده می شود که چگالی حالت های اسپین بالا در تقارن کامل با چگالی حالت های اسپین پایین هستند؛ که این ویژگی فاز آنتی فرومغناطیس است؛ چون در این فاز تعداد الکترون های اسپین بالا و پایین مساویند. در این نمودارها نیز هیبریدشدگی p-d بین اوربیتال p تلوراید و اوربیتال d عنصر مغناطیسی منگنز مشاهده می شود. همچنین دیده می شود که هیچ گاف نواری در چگالی حالت ها قابل مشاهده نبوده و با افزایش غلظت عنصر واسطه، چگالی حالت ها در تراز فرمی افزایش می یابد.

۵-۴-۳ چگالی حالت های کادمیم تلوراید آلاینده با آهن

منحنی چگالی حالت های کل کادمیم تلوراید آلاینده با آهن در شکل (۵-۱۲) نشان داده شده است. با دقت در منحنی چگالی حالت های کل این ترکیبات دیده می شود که برای الکترون های اسپین پایین قطبش ۱۰۰٪ وجود دارد؛ در حالی که یک گاف انرژی عریض در چگالی حالت الکترون های اسپین بالا مشاهده می گردد که با افزایش غلظت آهن افزایش می یابد. بنابراین این ترکیبات دارای خاصیت نیم فلزی هستند.

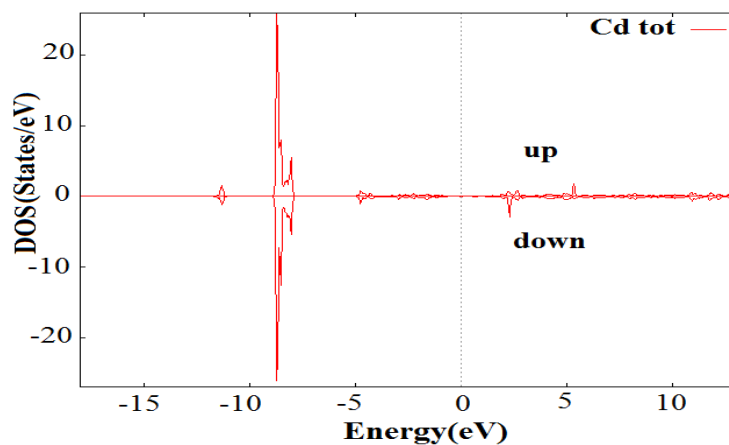
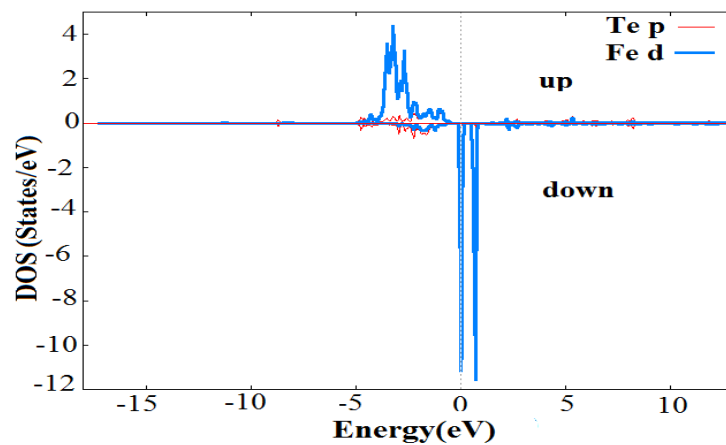


شکل (۵-۱۲): چگالی حالت های کل $\text{Cd}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Te}$ برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ آهن در فاز فرومغناطیس.



ادامه شکل (۵-۱۲): چگالی حالت های کل $\text{Cd}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Te}$ برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ آهن در فاز فرومغناطیس.

چگالی حالت های جزئی کادمیم تلوراید آلائیده با غلظت ۰/۰۶۲۵ آهن در شکل (۵-۱۳) نشان داده شده است.

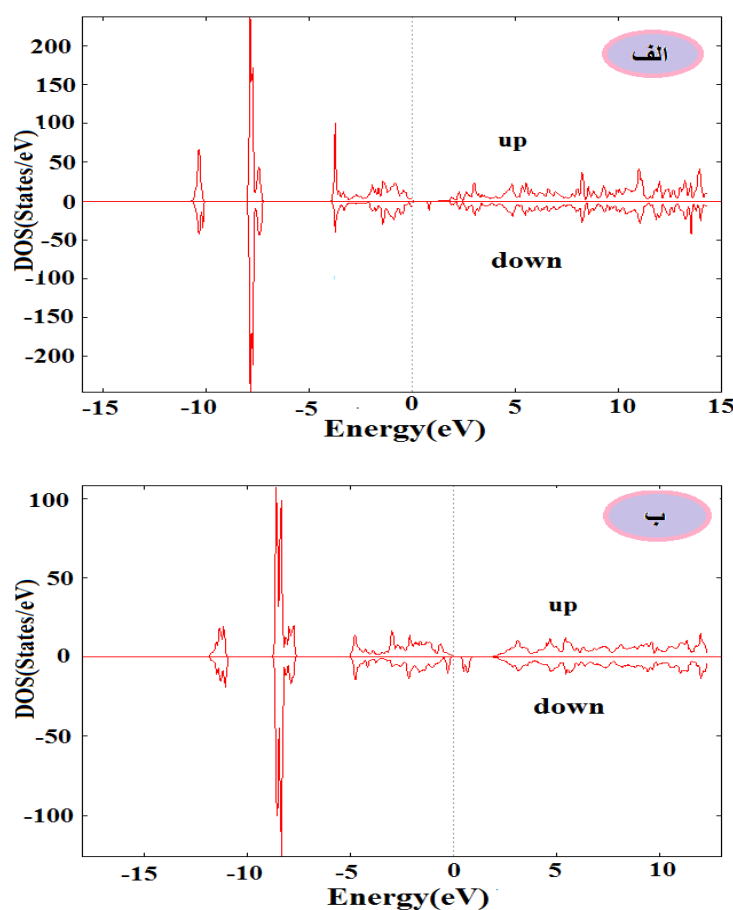


شکل (۵-۱۳): چگالی حالت های جزئی ترکیب $\text{Cd}_{0.9375}\text{Fe}_{0.0625}\text{Te}$ در فاز فرومغناطیس.

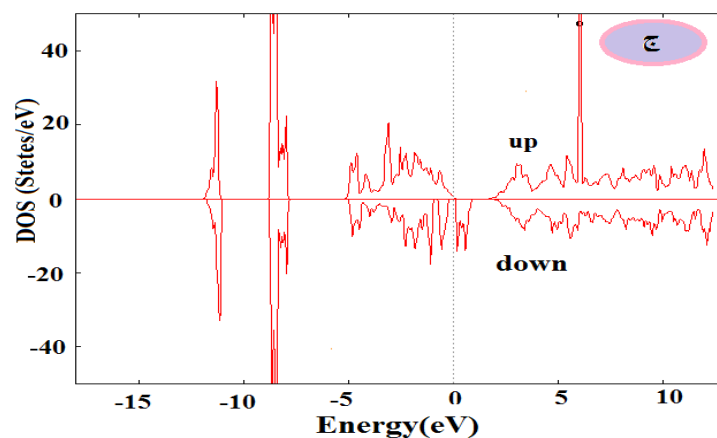
در بررسی چگالی حالت های جزئی این ترکیبات مشاهده می شود که در نوار ظرفیت در محدوده انرژی ۰ eV تا ۵ eV اوربیتال های Te-5p و Fe-3d و در محدوده انرژی ۸ eV- اوربیتال Cd-4d جایگزیده اند. در نوار رسانش هم اوربیتال Fe-3d سهم مهمی در چگالی حالت ها دارد.

۵-۴-۴ چگالی حالت های کادمیم تلوراید آلاینده با کبالت

منحنی چگالی حالت های کل کادمیم تلوراید آلاینده با کبالت در شکل (۵-۱۴) نشان داده شده است. در بررسی چگالی حالت های این نمونه ها مشخص شد که مانند نمونه های آلاینده با آهن، الکترون های اسپین پایین تراز فرمی را اشغال کرده اند و یک گاف انرژی عریض در چگالی حالت های الکترون های اسپین بالا قابل مشاهده است.

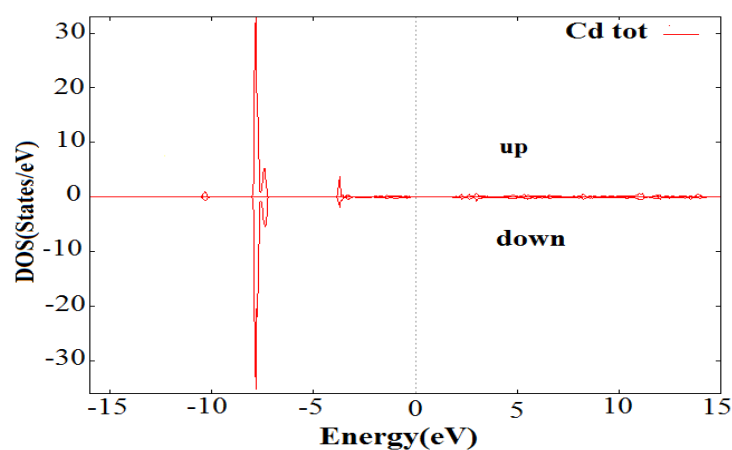
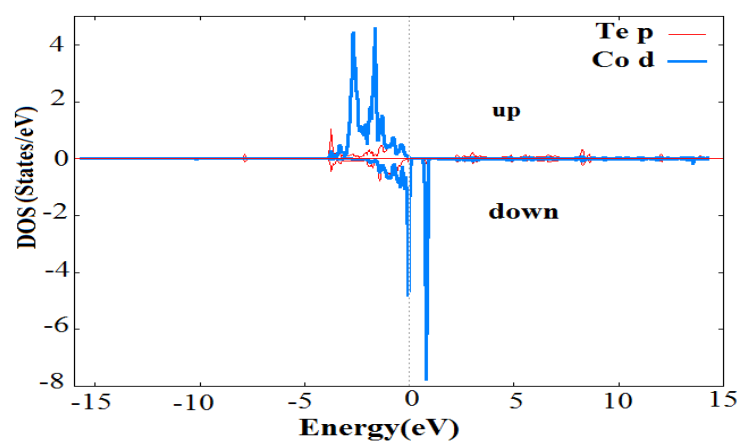


شکل (۵-۱۴): چگالی حالت های کل $Cd_{1-x}Co_xTe$ برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ کبالت در فاز فرومغناطیس.



ادامه شکل (۵-۱۴): چگالی حالت های کل برای $\text{Cd}_{1-x}\text{Co}_x\text{Te}$ برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ کبالت در فاز فرومغناطیس.

در شکل (۵-۱۵) نیز منحنی چگالی حالت های جزئی کادمیم تلوراید آلائیده با غلظت ۰/۰۶۲۵ کبالت را مشاهده می کنیم.



شکل (۵-۱۵): چگالی حالت های جزئی ترکیب $\text{Cd}_{0.9375}\text{Co}_{0.0625}\text{Te}$ در فاز فرومغناطیس.

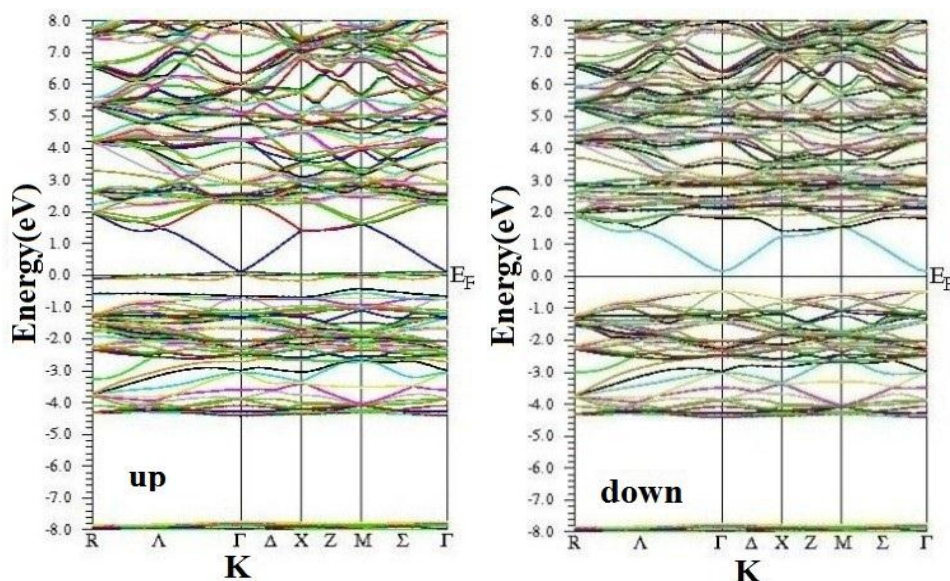
چگالی حالت های جزئی محاسبه شده برای نمونه های کادمیم تلوراید آلائیده با کبالت نیز نشان دهنده هیبریداسیون اوربیتال های Te-5p و Co-3d در نوارهای ظرفیت و رسانش مربوط به اسپین

های بالا و پایین است. همچنین مشاهده می شود که تراز فرمی برای حالت های اسپین پایین توسط اوربیتال های d کبالت اشغال شده است.

۵-۵ ساختار نواری نمونه ها

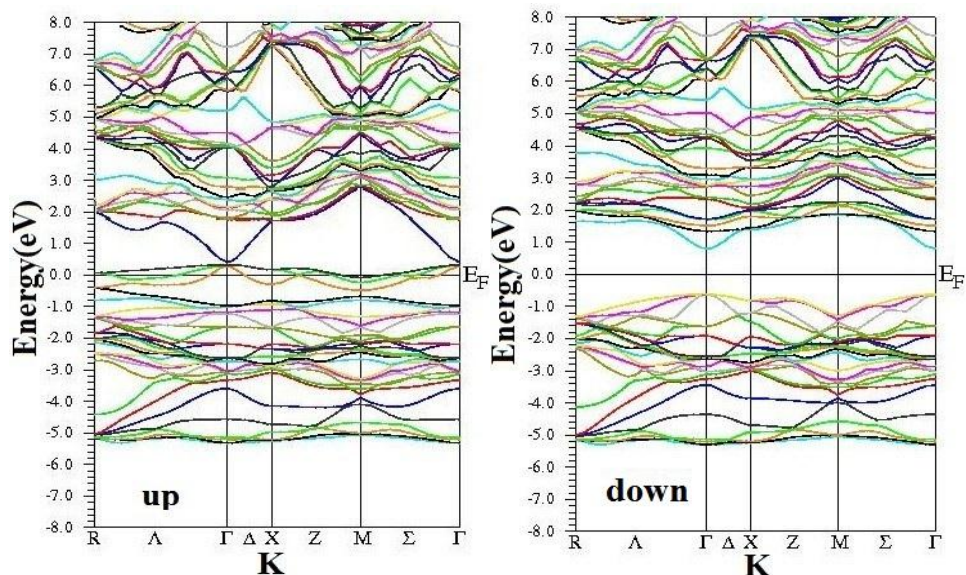
۵-۵-۱ ساختار نواری کادمیم تلوراید آلائیده با کروم

ساختار نواری محاسبه شده برای کادمیم تلوراید آلائیده با کروم برای حالت های اسپین بالا و پایین در شکل (۵-۱۶) نشان داده شده است. همان گونه که در این شکل مشاهده می کنیم هر سه ترکیب دارای گاف نواری مستقیم در نقطه Γ هستند. در نوار ظرفیت از تراز فرمی تا انرژی حدود ۵ eV- نوارهای Te-5p گسترده شده اند. دو نوار نزدیک تراز فرمی عمدتاً از حالت های Cr-3d و سهم کوچکی از Te-5p که رفتار فلزی این ترکیب را برای اسپین بالا کنترل می کند، ناشی می شود. در کانال اسپین پایین هیچ نواری درون تراز فرمی یا بالای آن وجود ندارد. برای تمام ترکیبات فوق گاف انرژی در جهت اسپین پایین و گاف نیم فلزی محاسبه و مقادیر آن ها در جدول (۵-۸) گزارش شده است. گاف نیم فلزی به کمینه مقدار بین قدرمطلق ΔE^C و ΔE^V اطلاق می شود.

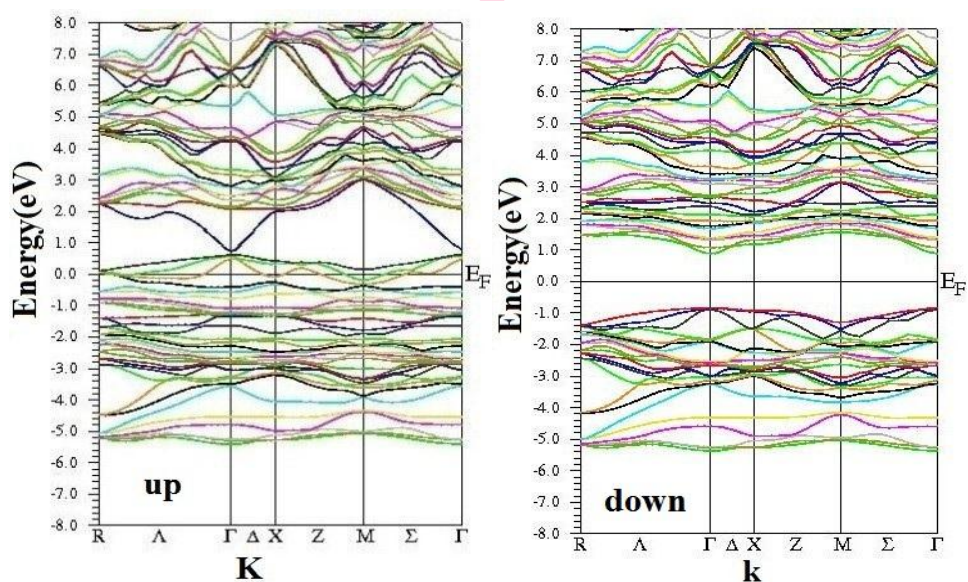


الف

شکل (۵-۱۶): ساختارهای نواری $\text{Cd}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Te}$ با اسپین بالا و پایین برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ کروم در فاز فرومغناطیس.



الف



ب

ادامه شکل (۵-۱۶) : ساختارهای نواری $\text{Cd}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Te}$ با اسپین بالا و پایین برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ کروم در فاز فرومغناطیس.

بررسی ساختارهای نواری محاسبه شده نشان می دهند که گاف انرژی اسپین پایین با افزایش غلظت کروم افزایش می یابد؛ که همان نتیجه ای است که از مقایسه چگالی حالت های محاسبه شده بدست آمد. این رفتار به تمایل حالت های Cr-3d برای جایگزیدگی بیشتر در غلظت های پایین تر نسبت داده می شود. در نوار ظرفیت اسپین بالا در محدوده انرژی -8 eV تا -9 eV اوربیتال های Cr-3d و در

محدوده انرژی ۰ eV تا ۵ eV - اوربیتال های Cr-3d و Te-5p جایگزیده اند. در نوار رسانش اسپین پایین تنها دو تراز Cr-3d و Te-5p در محدوده انرژی ۰ eV تا ۵ eV جایگزیده اند.

جدول (۵-۸): مقادیر محاسبه شده گاف نیم فلزی و گاف نواری اسپین پایین ترکیبات $Cd_{1-x}Cr_xTe$ در فاز فرومغناطیس.

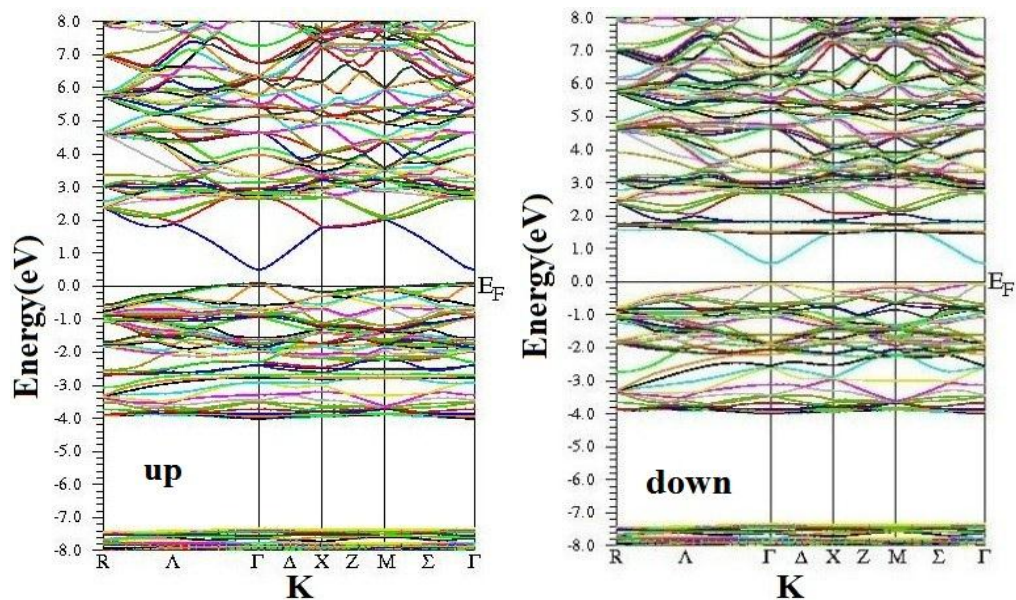
عنصر واسطه	گاف نواری اسپین پایین (eV)		گاف نیم فلزی (eV)
	کارهای تئوری دیگران	این کار	
$Cr_{0.0625}$	---	۰/۶۵	۰/۰۵
$Cr_{0.125}$	[۲۶] ۱/۱۰	۱/۳	۰/۰۸
$Cr_{0.25}$	[۲۶] ۱/۵۸	۱/۷۵	۰/۱۵

مقادیر محاسبه شده برای گاف انرژی اسپین پایین این ترکیبات در توافق خوبی با نتایج گزارش شده توسط گروه ساینی می باشد [۲۶].

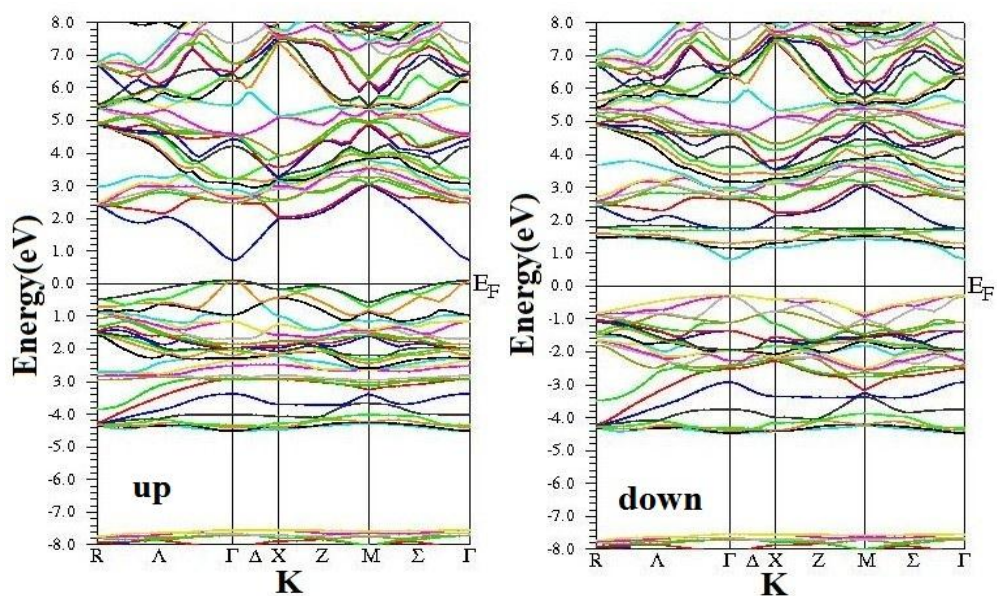
۵-۵-۲ ساختار نواری کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز

۵-۵-۱-۲ ساختار نواری کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز در فاز فرومغناطیس

در شکل (۵-۱۷) ساختار نواری محاسبه شده برای نمونه های کادمیم تلوراید آلاییده با منگنز در فاز فرومغناطیس در دو جهت اسپین بالا و پایین نشان داده شده است.

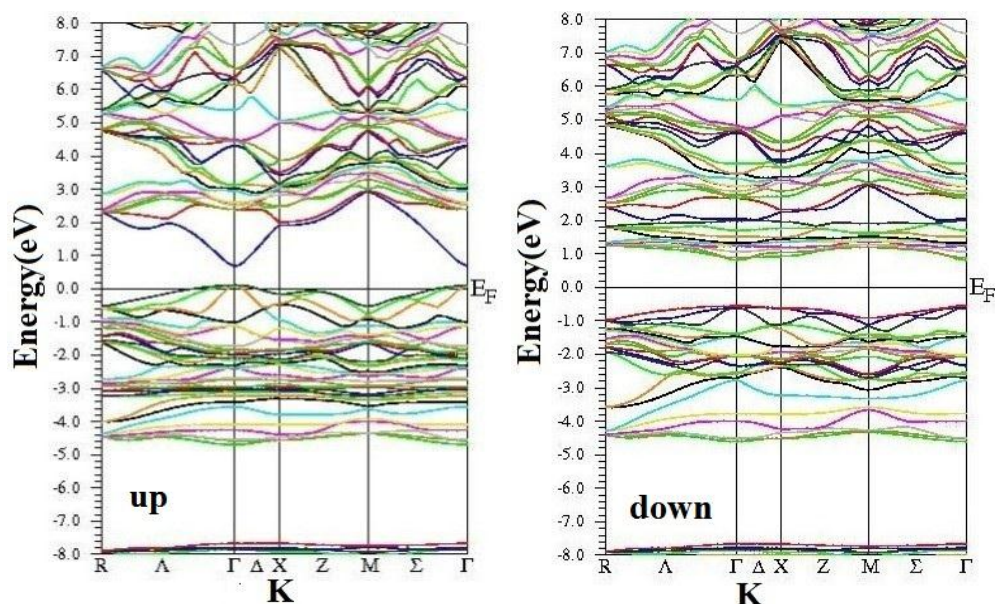


ب-۰



ج-۰

شکل (۵-۱۷) : ساختارهای نواری $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ با اسپین بالا و پایین برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ منگنز در فاز فرومغناطیس.



ج

ادامه شکل (۵-۱۷): ساختارهای نواری $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ با اسپین بالا و پایین برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ منگنز در فاز فرومغناطیس.

از این ساختارهای نواری مشاهده می کنیم که بیشینه نوار ظرفیت و کمینه نوار رسانش در نقطه Γ در منطقه اول بریلوئن قرار دارند که این در توافق با ساختار نواری ترکیب کادمیم تلوراید مادر است. همچنین مشاهده می کنیم که گاف انرژی اسپین بالا با افزایش غلظت منگنز زیاد می شود. ساختار نواری محاسبه شده برای اسپین پایین نشان می دهد که افزایش در غلظت منگنز تراز فرمی را به سمت انرژی بالاتر جابجا می کند. در جدول (۵-۹) مقادیر محاسبه شده برای گاف انرژی و گاف نیم فلزی ترکیبات $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ در فاز فرومغناطیس گزارش شده است.

جدول (۵-۹): مقادیر محاسبه شده گاف نیم فلزی و گاف نواری اسپینی ترکیبات $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ در فاز فرومغناطیس.

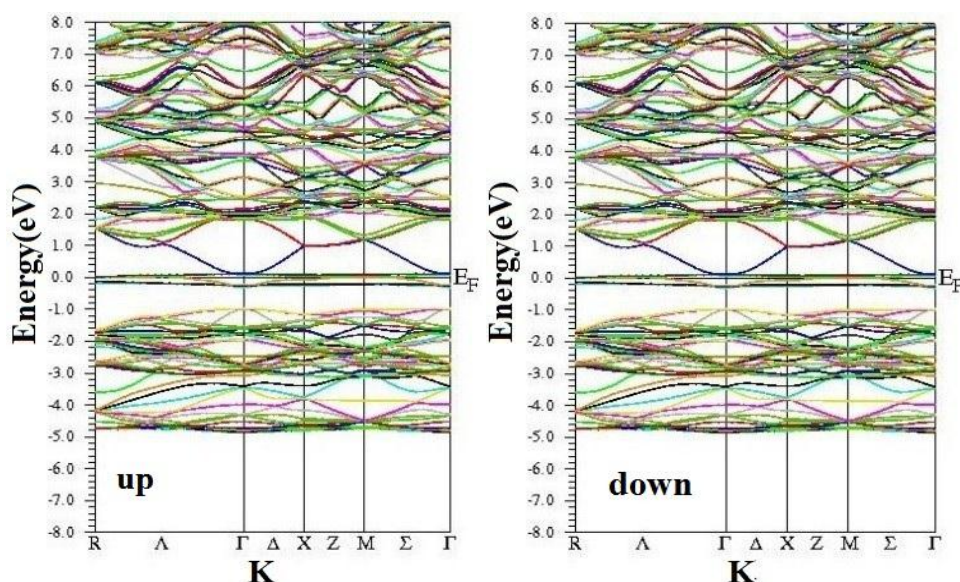
عنصر واسطه	گاف نواری اسپینی این کار (eV)		گاف نواری اسپینی کارهای تئوری دیگران (eV)		گاف نیم فلزی (eV)
	بالا	پایین	بالا	پایین	
$\text{Mn}_{0.0625}$	۰/۴	۰/۵۳	---	---	۰/۴۷
$\text{Mn}_{0.125}$	۰/۵۵	۱	[۲۷] ۰/۴۹	[۲۷] ۰/۸۵	۰/۰۹
$\text{Mn}_{0.25}$	۰/۶	۱/۳	[۲۷] ۰/۵۰	[۲۷] ۱/۵	۰/۱۵

مقادیر گزارش شده در جدول (۵-۹) نشان دهنده توافق نسبتاً خوب نتایج بدست آمده در این کار با نتایج گزارش شده توسط گروه شارما^۱، برای نمونه های کادمیم تلوراید آلاینده با غلظت های ۱۲/۵٪، ۲۵٪ و ۵۰٪ منگنز است [۲۷].

۵-۲-۵ ساختار نواری کادمیم تلوراید آلاینده با منگنز در فاز آنتی

فرومغناطیس

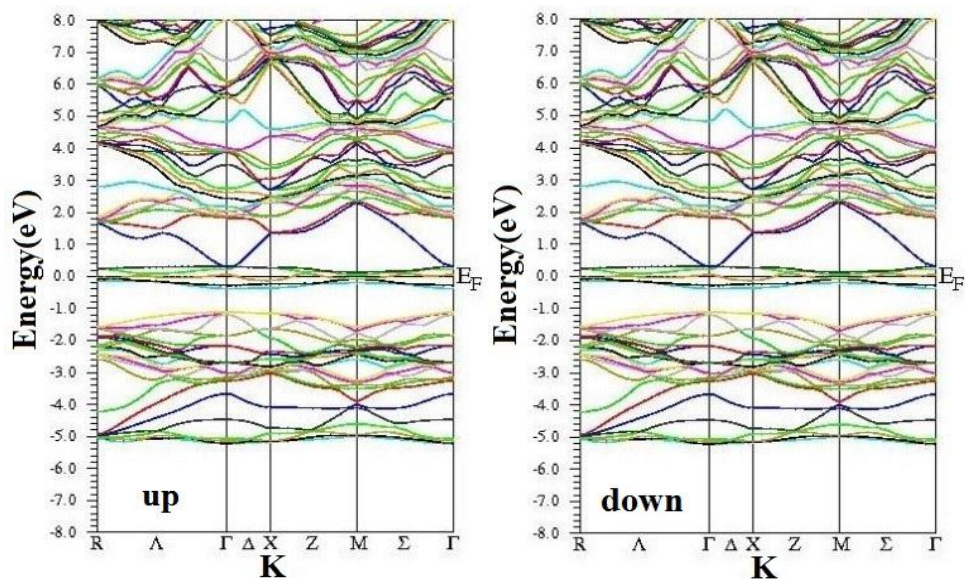
ساختار نواری محاسبه شده برای کادمیم تلوراید آلاینده با منگنز در فاز آنتی فرومغناطیس در شکل (۵-۱۸) نشان داده شده است. بررسی ساختار نواری محاسبه شده نشان می دهد که این آلیاژها در این فاز دارای گاف نواری مستقیم صفر در نقطه Γ بوده و بنابراین رفتار فلزی دارند. بررسی ساختار نواری نمونه ها نشان می دهد که با افزایش غلظت منگنز تراکم نوارها در تراز فرمی بیشتر می شود. ساختار نواری محاسبه شده برای حالت های اسپین بالا و پایین کاملاً مشابه است.



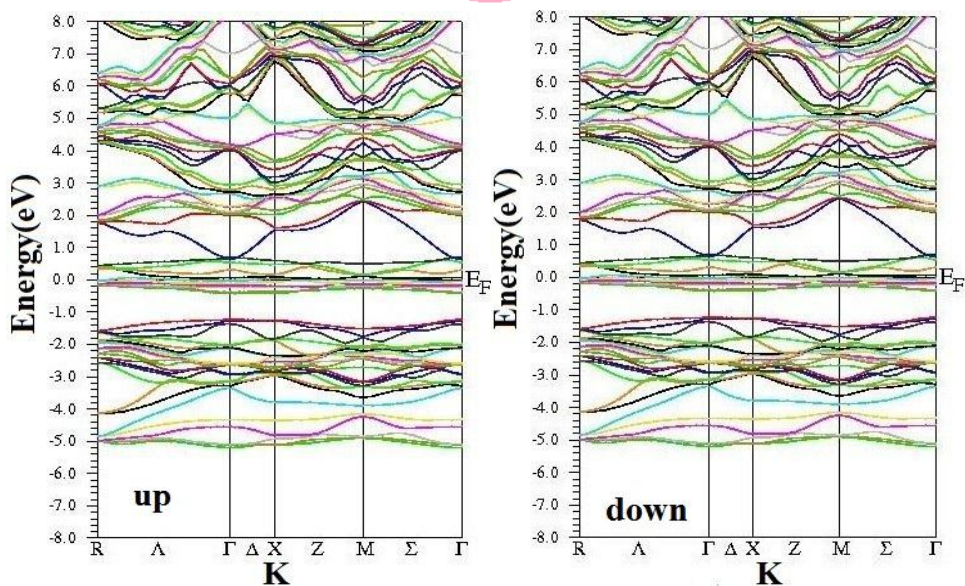
الف

شکل (۵-۱۸) : ساختارهای نواری $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ با اسپین بالا و پایین برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ منگنز در فاز آنتی فرومغناطیس.

^۱Sharma



الف

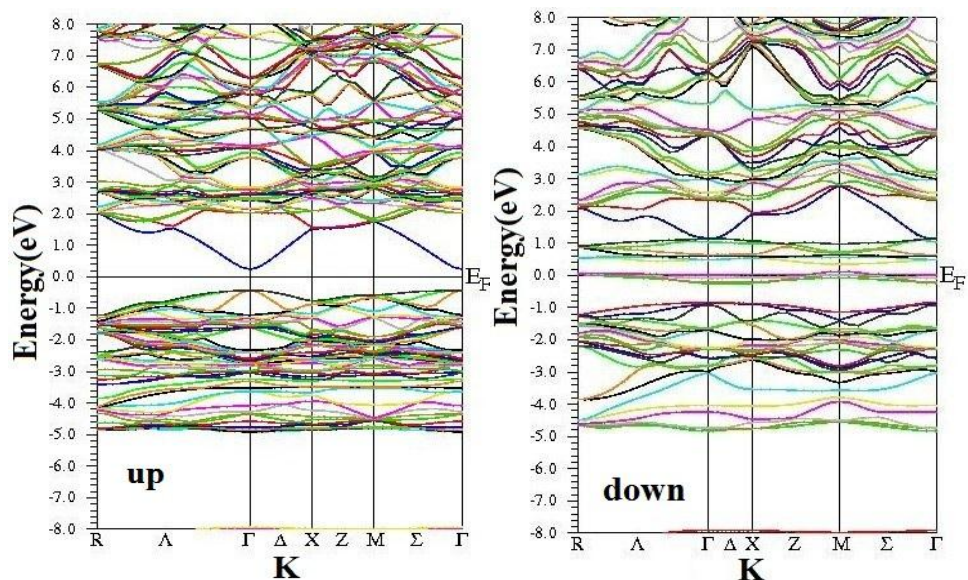


ج

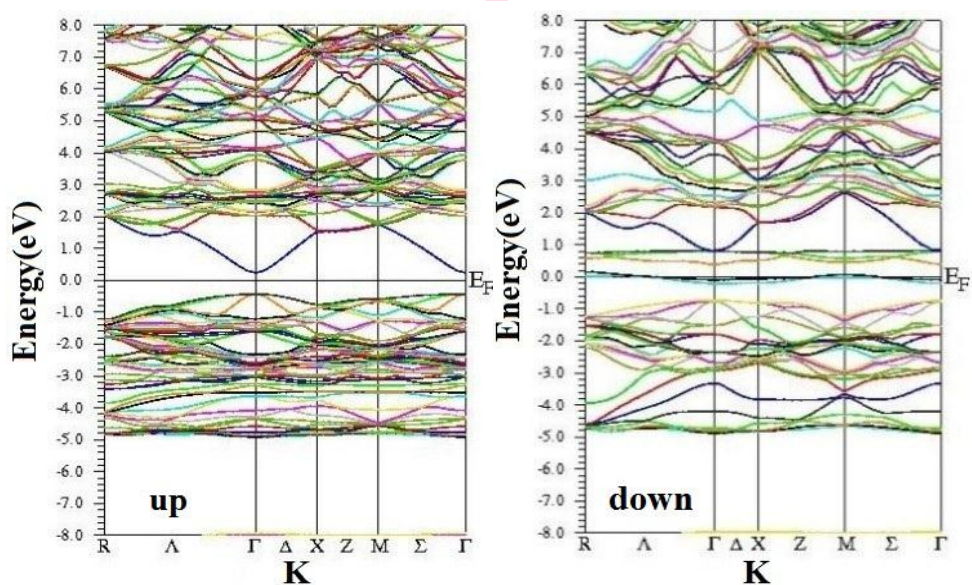
ادامه شکل (۵-۱۸): ساختارهای نواری $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ با اسپین بالا و پایین برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ منگنز در فاز آنتی فرومغناطیس.

۵-۳ ساختار نواری کادمیم تلوراید آلائیده با آهن

ساختارهای نواری محاسبه شده برای کادمیم تلوراید آلائیده با آهن نیز نشان دهنده گاف نواری مستقیم این ترکیبات (در نقطه Γ) هستند. در شکل (۵-۱۹) ساختارهای نواری محاسبه شده برای اسپین های بالا و پایین این ترکیبات نشان داده شده است.

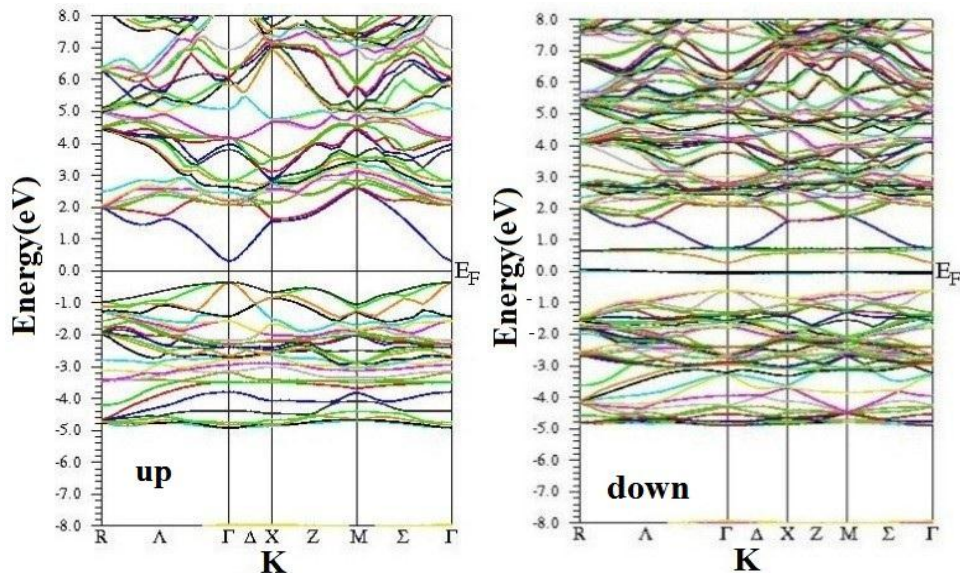


۱۹-۵



۲۰-۵

شکل (۱۹-۵) : ساختارهای نواری $\text{Cd}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Te}$ با اسپین بالا و پایین برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ آهن در فاز فرومغناطیس.



ج

ادامه شکل (۵-۱۹): ساختارهای نواری $\text{Cd}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Te}$ با اسپین بالا و پایین برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ آهن در فاز فرومغناطیس.

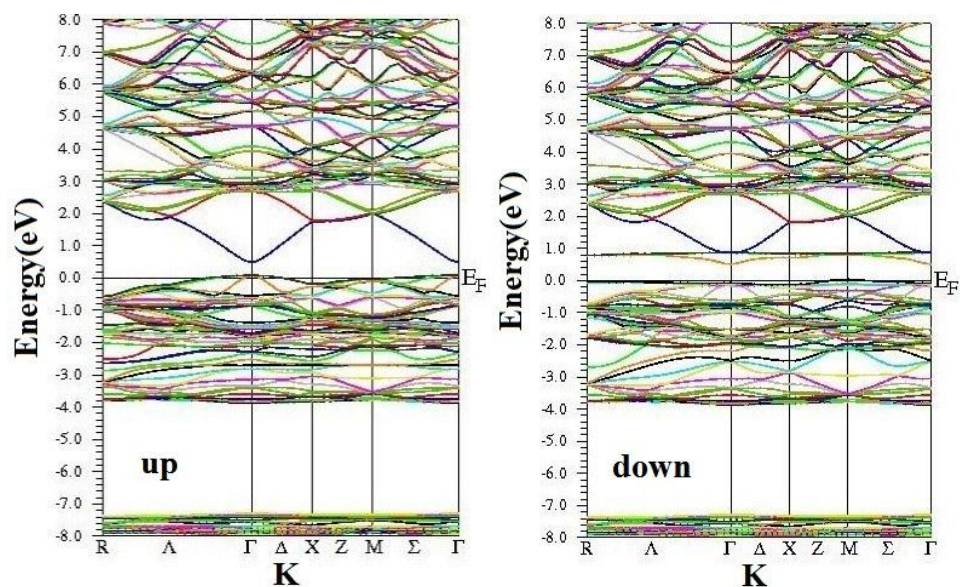
بررسی ساختارهای نواری محاسبه شده نشان می دهد که در ساختارهای نواری مربوط به اسپین پایین گاف انرژی وجود نداشته و بنابراین در این کانال اسپینی ماده رفتار فلزی از خود نشان می دهد. برای ساختار نواری مربوط به اسپین های بالا گاف انرژی قابل مشاهده، با افزایش غلظت آهن افزایش می یابد. مقادیر گاف های انرژی و همچنین گاف نیم فلزی محاسبه شده برای این آلیاژها در جدول (۵-۱۰) گزارش شده است.

جدول (۵-۱۰): مقادیر محاسبه شده گاف نیم فلزی و گاف نواری اسپینی ترکیبات $\text{Cd}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Te}$ در فاز فرومغناطیس.

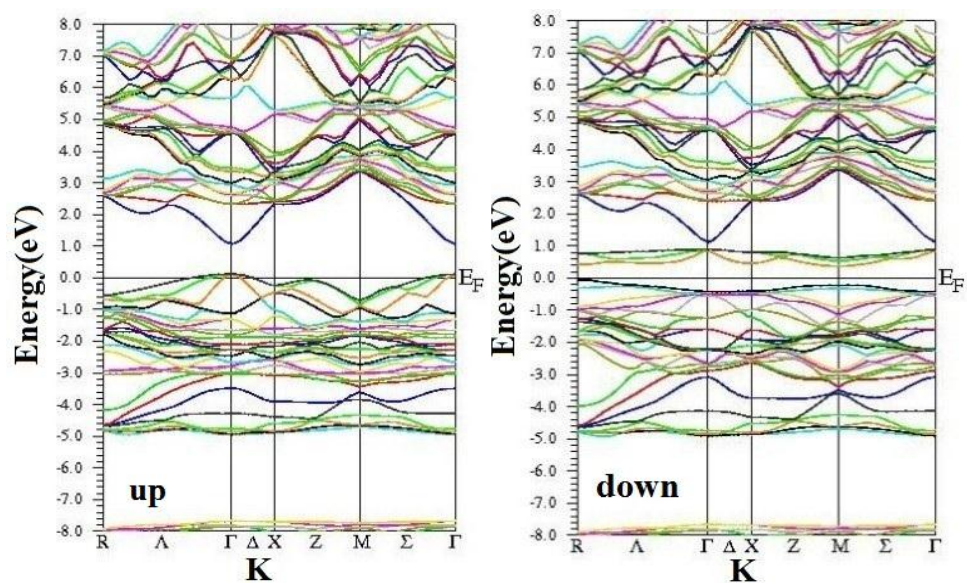
عنصر واسطه	گاف نواری اسپین بالا (eV)	گاف نواری اسپین پایین (eV)	گاف نیم فلزی (eV)
$\text{Fe}_{0.0625}$	۰/۶۵	۰	۰/۰۵
$\text{Fe}_{0.125}$	۰/۶۷	۰	۰/۵
$\text{Fe}_{0.25}$	۰/۷۳	۰	۰/۶

۵-۴ ساختار نواری کادمیم تلوراید آلاییده با کبالت

ساختار نواری بدست آمده برای کادمیم تلوراید آلاییده با کبالت در شکل های (۵-۲۰) نشان داده شده است. در این نمودارها نیز گاف انرژی مستقیم است و با افزایش غلظت کبالت افزایش می یابد.

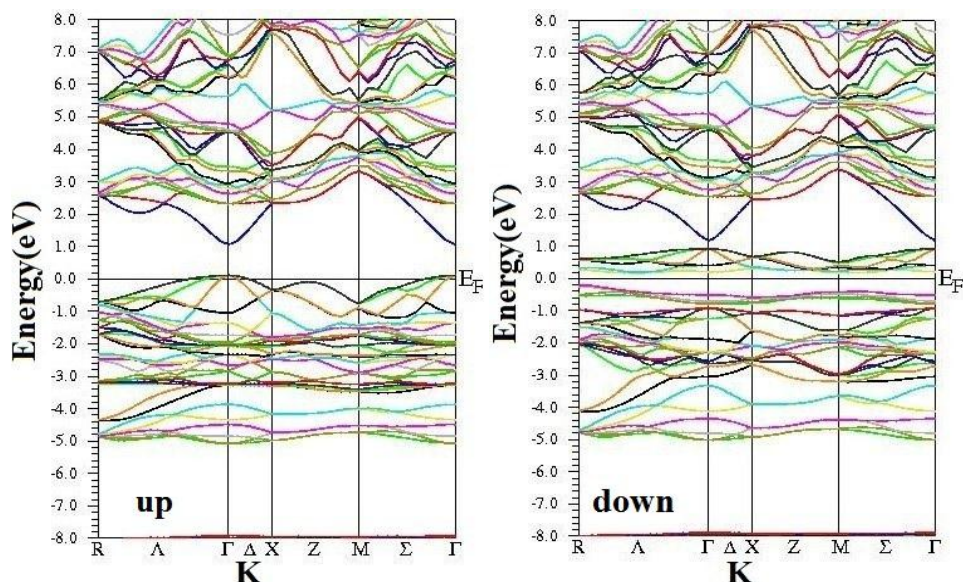


ب



ا

شکل (۵-۲۰) : ساختارهای نواری $\text{Cd}_{1-x}\text{Co}_x\text{Te}$ با اسپین بالا و پایین برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ کبالت در فاز فرومغناطیس.



ج

ادامه شکل (۵-۲۰): ساختارهای نواری $\text{Cd}_{1-x}\text{Co}_x\text{Te}$ با اسپین بالا و پایین برای غلظت های الف) ۰/۰۶۲۵، ب) ۰/۱۲۵ و ج) ۰/۲۵ کبالت در فاز فرومغناطیس.

همچنین بررسی ساختارهای نواری نشان می دهد که با افزایش غلظت کبالت در ناحیه انرژی eV ۸- از تراکم ترازها کاسته می شود. مقادیر بدست آمده برای گاف انرژی و گاف نیم فلزی این ترکیبات در جدول (۵-۱۱) گزارش شده است.

جدول (۵-۱۱): مقادیر محاسبه شده گاف نیم فلزی و گاف نواری اسپین بالای ترکیبات $\text{Cd}_{1-x}\text{Co}_x\text{Te}$ در فاز فرومغناطیس.

عنصر واسطه	گاف نواری اسپین بالا (eV)		گاف نیم فلزی (eV)
	کارهای دیگران	این کار	
$\text{Co}_{0.0625}$	---	۰/۳۶	۰/۱۸
$\text{Co}_{0.125}$	---	۰/۸۵	۰/۱
$\text{Co}_{0.25}$	[۲۸] ۰/۸	۰/۹	۰/۱۵

نتایج این بررسی ها نشان می دهد که کادمیم تلوراید آلائیده با اتم های کروم و منگنز دارای گاف انرژی عریض برای حالت های اسپین پایین و کادمیم تلوراید آلائیده با عناصر مغناطیسی آهن و کبالت دارای گاف انرژی عریض برای حالت های اسپین بالا می باشند. از میان نمونه های آلائیده

بیشترین گاف انرژی مربوط به ساختار $\text{Cd}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{Te}$ و کمترین گاف انرژی مربوط به ساختار $\text{Cd}_{0.9375}\text{Co}_{0.0625}\text{Te}$ است.

۵-۶ بررسی خواص مغناطیسی نمونه ها

۵-۶-۱ ثابت های تبدالی

ثابت های تبدالی نوار ظرفیت و نوار رسانش با استفاده از روابط (۱-۲) و (۱-۳) محاسبه و نتایج آن در جدول (۵-۱۲) گزارش شده است.

جدول (۵-۱۲): مقادیر محاسبه شده ثابت های تبدالی ترکیبات $\text{Cd}_{1-x}\text{TM}_x\text{Te}$ (TM=Cr, Mn, Fe, Co).

عنصر واسطه	$N_{0\alpha}$ محاسبه شده	$N_{0\alpha}$ پژوهش های تئوری دیگران	$N_{0\beta}$ محاسبه شده	$N_{0\beta}$ پژوهش های تئوری دیگران
$\text{Cr}_{0.0625}$	۰/۴۸	---	-۵/۸۳	---
$\text{Cr}_{0.125}$	۰/۳۸	---	-۴/۶	---
$\text{Cr}_{0.25}$	۰/۳۷	[۲۵]۰/۴۵	-۲/۲۷	[۴]-۱/۶۹
$\text{Mn}_{0.0625}$	۰/۸۶	---	-۳/۶۷	---
$\text{Mn}_{0.125}$	۰/۳۹	[۲۷]۰/۳۲	-۱/۲۳	[۲۷]-۱/۴۲
$\text{Mn}_{0.25}$	۰/۲۹	[۵۷]۰/۳۸۷	-۱/۴۲	[۵۷]-۱/۲۸
$\text{Fe}_{0.0625}$	۰/۲	---	-۲/۰	---
$\text{Fe}_{0.125}$	۲/۵	---	-۲/۹	---
$\text{Fe}_{0.25}$	۱/۹۹	---	-۱/۴۹	---
$\text{Co}_{0.0625}$	۶/۵۱	---	-۲/۵۵	---
$\text{Co}_{0.125}$	۰/۷۴	---	-۲/۹۷	---
$\text{Co}_{0.25}$	۰/۰۵۵	[۲۸]۰/۰۷۴	-۱/۸۳	[۲۸]-۱/۵۹

نتایج بدست آمده نشان می دهند در آرایش با کروم ثابت های تبدالی با افزایش غلظت کروم کاهش پیدا کرده اند. برای آرایش منگنز نیز همین روند را برای ثابت تبدالی $N_{0\alpha}$ داریم. مقدار منفی ثابت

تبادلی $N_0\beta$ (که بیانگر مقدار منفی برای ΔE_V است) نشان می دهد که پتانسیل موثر برای اسپین پایین جاذبتر از اسپین بالا است، که از ویژگی های سیستم های قطبیده اسپینی می باشد.

۵-۶-۲ گشتاور مغناطیسی

گشتاور مغناطیسی کل به ازاء سلول واحد و گشتاورهای مغناطیسی موضعی محاسبه شده در مکان هر اتم در جدول های (۵-۱۳) تا (۵-۱۷) گزارش شده اند. گشتاورهای مغناطیسی محاسبه شده برای کادمیم تلوراید آلاییده با عناصر کروم و آهن به مقدار $4\mu_B$ نزدیک است، زیرا این دو اتم چهار الکترون جفت نشده در لایه آخر خود دارند و سهم هر الکترون $1\mu_B$ است. اما عناصر منگنز و کبالت به ترتیب پنج و سه الکترون جفت نشده در لایه d خود داشته و گشتاور مغناطیسی آن ها به ترتیب اعداد صحیح $5\mu_B$ و $3\mu_B$ هستند. گشتاور مغناطیسی کل این ترکیبات عمدتاً سهم عنصر واسطه مغناطیسی است و اتم های دیگر سهم ناچیزی در این گشتاور دارند [۵۵]. در تمام نمونه های بررسی شده گشتاور مغناطیسی عناصر واسطه از مقدار مورد انتظار به دلیل هیبریداسیون قوی بین حالت های d عنصر واسطه و Te-p کوچکتر است و تفاوت در بارها به دلیل ایجاد گشتاورهای مغناطیسی موضعی کوچک در مکان اتم های کادمیم و تلوراید است.

جدول (۵-۱۳): مقادیر محاسبه شده گشتاورهای مغناطیسی کل و موضعی هر اتم شرکت کننده در ترکیب $Cd_{1-x}Cr_xTe$ در فاز فرومغناطیس.

گشتاور مغناطیسی کروم (μ_B)	گشتاور مغناطیسی تلوراید (μ_B)	گشتاور مغناطیسی کادمیم (μ_B)		گشتاور مغناطیسی کل (μ_B)		گشتاور مغناطیسی کل محاسبه شده (μ_B)	درصد آرایش کروم
		کارهای تئوری دیگران	این کار	کارهای تئوری دیگران	تجربی		
---	۳/۴۲	---	-۰/۰۰۶	---	۰	---	۶/۲۵
۳/۷۸۲ [۲۶]	۳/۲۹ [۲۶]	-۰/۰۵۶ [۲۶]	-۰/۰۰۹	۰/۰۲۱ [۲۶]	۰	۳/۹۹۴ [۲۶]	۱۲/۵
۳/۷۷۷ [۲۶]	۳/۲۸ [۲۶]	-۰/۰۵۹ [۲۶]	-۰/۰۰۹	۰/۰۱۴ [۲۶]	۰/۰۲	۳/۹۹۹ [۲۶]	۲۵

مقادیر گزارش شده در جدول (۵-۱۳) نشان می دهند که گشتاور مغناطیسی القا شده به اتم های کادمیم و تلوراید بسیار کوچک و برای عنصر کادمیم موازی عنصر واسطه است و بنابراین این اتم برهمکنش فرومغناطیسی با کروم دارد. اما گشتاور القا شده به اتم تلوراید منفی بوده و بنابراین این اتم برهمکنش آنتی فرومغناطیس با کروم دارد. همچنین مقایسه مقادیر بدست آمده نشان می دهد که با افزایش غلظت کروم از گشتاور مغناطیسی آن کم و به گشتاورهای مغناطیسی دو اتم دیگر افزوده می شود. در جدول (۴-۱۴) مقادیر گشتاور مغناطیسی کل ترکیبات $Cd_{1-x}Mn_xTe$ و مقادیر گشتاور مغناطیسی موضعی هر عنصر در فاز فرومغناطیس گزارش شده است. مقادیر محاسبه شده نشان می دهند که گشتاور مغناطیسی القا شده به اتم تلوراید مثبت است. مقادیر گشتاورهای مغناطیسی اتم های منگنز نیز نشان می دهد که ترازهای $Mn-3d$ گشتاورهای مغناطیسی موضعی دائمی در این ترکیبات تولید می کنند. بسیاری از ویژگی های جالب این مواد از برهمکنش های تبادلی بین یون های مغناطیسی و الکترون ها (یا حفره ها) در نزدیکی لبه های نواری حاصل می شود.

جدول (۵-۱۴): مقادیر محاسبه شده گشتاورهای مغناطیسی کل و موضعی هر اتم شرکت کننده در ترکیب $Cd_{1-x}Mn_xTe$ در فاز فرومغناطیس.

درصد آلایش منگنز	گشتاور مغناطیسی کل محاسبه شده (μ_B)	گشتاور مغناطیسی کل (μ_B)		گشتاور مغناطیسی کادمیم (μ_B)		گشتاور مغناطیسی تلوراید (μ_B)		گشتاور مغناطیسی منگنز (μ_B)	
		تجربی	کارهای تئوری دیگران	این کار	کارهای تئوری دیگران	این کار	کارهای تئوری دیگران	این کار	کارهای تئوری دیگران
۶/۲۵	۴/۹۹۸	۵	---	۰	---	۰/۰۳	---	۴/۰۹	---
۱۲/۵	۴/۹۹۹	۵	۴/۹۹۹ [۲۷]	۰/۰۰۱	۰/۰۰۵ [۲۷]	۰/۰۰۸	۰/۰۱۸ [۲۷]	۴/۰۲	۴/۰۷۴ [۲۷]
۲۵	۴/۹۹۹	۵	۴/۹۹۱ [۵۷]	۰/۰۲۴	۰/۱۲ [۵۷]	۰/۰۳۵	۰/۰۶۸ [۵۷]	۴/۰۴۳	۴/۲۱ [۵۷]

در جدول (۵-۱۵) نیز مقادیر گشتاورهای مغناطیسی موضعی در مکان دو اتم منگنز با اسپین های مخالف در فاز آنتی فرومغناطیس نمونه های $Cd_{1-x}Mn_xTe$ گزارش شده است.

جدول (۵-۱۵): مقادیر محاسبه شده گشتاورهای مغناطیسی کل و موضعی دو اتم منگنز با اسپین های مخالف در ترکیبات $Cd_{1-x}Mn_xTe$ در فاز آنتی فرومغناطیس.

گشتاور مغناطیسی اتم منگنز ۲ (μ_B)	گشتاور مغناطیسی اتم منگنز ۱ (μ_B)	گشتاور مغناطیسی کل محاسبه شده (μ_B)	درصد آلایش منگنز
-۴/۰۷	۴/۰۸	۰	۶/۲۵
-۴/۰۱	۴/۰۲۲	۰	۱۲/۵
-۴/۰۴	۴/۰۳	۰	۲۵

در جدول های (۵-۱۶) و (۵-۱۷) نیز مقادیر گشتاورهای مغناطیسی محاسبه شده کل و موضعی ترکیبات $Cd_{1-x}Fe_xTe$ و $Cd_{1-x}Co_xTe$ گزارش شده است.

جدول (۵-۱۶): مقادیر محاسبه شده گشتاورهای مغناطیسی کل و موضعی هر اتم شرکت کننده در ترکیبات $Cd_{1-x}Fe_xTe$ در فاز فرومغناطیس.

گشتاور مغناطیسی آهن (μ_B)	گشتاور مغناطیسی تلوراید (μ_B)	گشتاور مغناطیسی کادمیم (μ_B)	گشتاور مغناطیسی کل تجربی (μ_B)	گشتاور مغناطیسی کل محاسبه شده (μ_B)	درصد آلایش آهن
۳/۱۸۹	۰/۰۰۶	۰/۰۰۱	۴	۳/۹۹	۶/۲۵
۳/۱۹۶	۰/۰۱	۰/۰۰۲	۴	۴	۱۲/۵
۳/۲۱	۰/۰۷۹	۰/۰۲	۴	۴	۲۵

جدول (۵-۱۷): مقادیر محاسبه شده گشتاورهای مغناطیسی کل و موضعی هر اتم شرکت کننده در ترکیبات $Cd_{1-x}Co_xTe$ در فاز فرومغناطیس.

گشتاور مغناطیسی کبالت (μ_B)	گشتاور مغناطیسی تلوراید (μ_B)	گشتاور مغناطیسی کادمیم (μ_B)		گشتاور مغناطیسی کل محاسبه شده (μ_B)		گشتاور مغناطیسی کل محاسبه شده (μ_B)	درصد آلایش کبالت
		کارهای تئوری دیگران	این کار	تجربی	کارهای تئوری دیگران		
۲/۲۶	---	۰/۰۰۸	---	۰/۰۰۱	۳	۲/۹۹	۶/۲۵
۲/۱۵	---	۰/۰۲	---	۰/۰۰۲	۳	۲/۹۹	۱۲/۵
۲/۲۲ [۲۸]	۲/۱۸	۰/۰۷۸ [۲۸]	۰/۰۸	۰/۰۱ [۲۸]	۰/۰۱۸	۳/۰۰۵	۲۵

در مورد آلاینده‌های آهن و کبالت نیز مشاهده می‌شود که با افزایش غلظت این عناصر به گشتاورهای القا شده به عناصر غیر مغناطیسی کادمیم و تلوراید افزوده می‌شود.

نتیجه گیری

نظریه تابعی چگالی یکی از مهمترین روش های مطالعه سیستم های بس ذره ای در حالت پایه است؛ که با استفاده از تقریب ها و روش های مختلف به محاسبه ویژه مقادیر و ویژه توابع این سیستم ها می پردازد. در این پایان نامه با استفاده از این نظریه و کد محاسباتی Wien2k به بررسی ساختار الکترونی و خواص مغناطیسی و اپتیکی حالت پایه کادمیم تلوراید خالص و آلائیده با عناصر واسطه (کروم، منگنز، آهن و کبالت) در غلظت های ۶/۲۵ و ۱۲/۵ و ۲۵ درصد پرداخته شده است.

برای نمونه کادمیم تلوراید خالص ابتدا با بهینه سازی حجم سلول واحد، انرژی تعادلی با دو تقریب GGA و LDA محاسبه و مقدار ثابت شبکه بدست آمد. انرژی تعادلی محاسبه شده با تقریب GGA کمتر از انرژی تعادلی با تقریب LDA بود. همچنین مقدار طول و زاویه پیوند Cd-Te، مدول حجمی، بار داخل و خارج کرات مافین-تین محاسبه شدند. چگالی حالت های کل کادمیم تلوراید و جزئی اتم های Cd و Te و همچنین ساختار نواری این ترکیب محاسبه شدند. تقارن چگالی حالت های کل مربوط به اسپین بالا و پایین نشان داد که این ماده خاصیت مغناطیسی ندارد. شکافتگی (گاف) مشاهده شده در حوالی تراز فرمی نشان داد که این ترکیب خواص نیم فلزی دارد. مقدار گاف انرژی با استفاده از هر دو تقریب محاسبه شد. ساختار نواری محاسبه شده نشان داد که این ماده یک نیم رسانای مستقیم با گاف انرژی حدود ۰/۷۵ eV است. در مطالعه خواص اپتیکی از تقریب GGA استفاده شد و پارامترهای وابسته به خواص اپتیکی ماده نظیر تابع دی الکتریک، رسانندگی اپتیکی، ضریب شکست و خاموشی، ضریب جذب، بازتابندگی، طیف اتلاف انرژی برای نمونه خالص CdTe محاسبه شدند.

برای نمونه های کادمیم تلوراید آلائیده با عناصر مغناطیسی ابتدا به بهینه سازی حجم و محاسبه حجم و انرژی تعادلی و یافتن ثابت شبکه پرداخته شد و سپس برای تعیین فاز پایدار مغناطیسی، انرژی سیستم در فازهای فرومغناطیس، آنتی فرومغناطیس و پارامغناطیس با هم مقایسه شدند. مقایسه مقادیر انرژی ها نشان دادند که همه ترکیبات آلائیده به جز نمونه آلائیده با منگنز دارای فاز

پایدار فرومغناطیس هستند. فاز پایدار نمونه آلائیده با منگنز آنتی فرومغناطیس محاسبه شد که این نتیجه با نتایج گزارش شده توسط گروه های تحقیقاتی دیگر در توافق است. همچنین با استفاده از تقریب GGA ساختار الکترونی و خواص مغناطیسی نمونه های آلائیده با یون های مغناطیسی محاسبه شدند. نتیجه این بررسی نشان داد که کادمیم تلوراید آلائیده با کروم خواص نیم فلزی، آلائیده با منگنز در فاز فرومغناطیس خواص نیم فلزی و در فاز آنتی فرومغناطیس خواص فلزی و آلائیده با آهن و کبالت خواص نیم فلزی دارد. مقادیر گاف های انرژی برای حالت های اسپین بالا و پایین و همچنین گاف نیم فلزی محاسبه شدند و مقایسه گاف های انرژی نشان داد که ترکیب $\text{Cd}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{Te}$ در بین ترکیبات بررسی شده دارای بیشترین گاف انرژی است. در بررسی چگالی حالت ها هیبریداسیون اوربیتال d عناصر واسطه با اوربیتال p اتم های آنیون (تلوراید) مشاهده گردید. در بررسی خواص مغناطیسی ثابت های تبادلی نمونه های آلائیده محاسبه و مقایسه شدند و در نهایت نیز گشتاورهای مغناطیسی عناصر واسطه محاسبه شدند. نتیجه این بررسی نشان داد که سهم عمده در ایجاد گشتاور مغناطیسی کل مربوط به عناصر واسطه است و عناصر میزبان دارای گشتاوری کوچک (نزدیک به صفر) می باشند که به علت هیبریداسیون p - d بین اوربیتال Te-p و d عناصر واسطه ایجاد می شود.

- [١] Ozan A., (2011), **PhD. thesis, “Electronic, spintronic and transport properties of carbon based nanowires”**,Phys.depart. Izmir university.
- [٢] Ouendadji S. and Ghemid S. and Meradji H.(2011) “Theoretical study of structural electronic and thermal properties of CdS CdSe and CdTe compounds”**J. of computational materials science**, 50, pp 1460.
- [٣] Caballero F. (2011), “**CdTe-based compounds growth by Vapor Phase Techniques**”, Vol. 1, Editorial de la Universidad de Granada pp.5.
- [٤] Triboulet R. and Siffert P. (2010) “**CdTe and related compounds**”, Vol. 1, first edition , Elsevier, pp. 125.
- [٥] Venkatachalm T. and Velumani S. and Ganesan K. (2008) “**Band structure and optical properties of CdTe and CdSn₃Te₄ thin films**”, American Institute of Physics pp.273.
- [٦] Bell R. (2003), “Review of optical applications of CdTe”**J. of Applied physics**. pp 589.
- [٧] Panchuk O. and Savitsky A. and Feychuk P. (2000) “IV group dopant compensation effect in CdTe”**J. of. crystal growth**. 197, pp 607.
- [٨] Wei S. and Zhang S. (2001) “Theoretical study of doping limits of CdTe”**J. of. Applied physics**. 587, pp 968.
- [٩] Cullity B.D. and Graham C.D. (2009), “**Intoduction to magnetic materials**”, Vol. 1, IEEE Press, pp.87.
- [١٠] Sato K. (2010) “**Reviews of modern physics**”, Vol. 82, American physical society, pp.1633-1690.
- [١١] Tauat S.A. and Litimein F. (2010) “ The spin effect in zinc-blende Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te and Zn_{0.5}Mn_{0.5}Te diluted magnetic semiconductors: FP-LAPW study”**J. of. Physica B**.101, pp57.
- [١٢] Liu Y. and Liu B. (2006) “Ferromagnetism in transition-metal-doped II-VI compounds”**J. of. magnetism and magnetic materials**, 307, pp245.
- [١٣] Merad A. and Kanoun M. and Cibert j. (2009) “Ab-initio study of electronic structures and magnetism in CdMnTe and ZnMnTe diluted magnetic semiconductors”, **J. of. Magnetism and Magnetic Materials**, pp536-542.
- [١٤] Kolkovsky V.,(2008), **PhD. thesis, “Planar nanostructures made of diluted magnetic semiconductors-epitaxial growth and transport properties**”, Institute of physics polish academi of siences.
- [١٥] Cottenir S. (2004) “**Density functional theory and the family of (L)APW – methods: a step by step introduction**”, Vol. 1, pp.3-25.

- [۱۶] Kieron B. (2003), "The ABC of DFT", Department of chemistry , Rutgers university, pp.43.
- [۱۷] Omar M. (2008), "Beyond the independent-electron approximations", Department of chemistry, university press, pp.140.
- [۱۸] Parr R.G. and Yang w. (1989), "Density functional theory of atoms and molecules", Oxford university press, New York, pp.10.
- [۱۹] Sahni V. (2009), "Quantal density functional theory", Vol. 1, Springer Press, UK.1,pp.64.
- [۲۰] آریانی محمدیه ح، (۱۳۹۰)، پایان نامه ارشد: "مطالعه تئوری سیستم NdMnO_3 "، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود.
- [۲۱] Kohanoff J. and Gidopoulos N.I. (2003), "Density functional theory:basics, new trends end applications", Vol. 2, University Belfast, UK. pp.532-568.
- [۲۲] صالحی ح، (۱۳۸۶) "روشهای محاسباتی در فیزیک حالت جامد" چاپ اول، دانشگاه شهید چمران، اهواز، ص ۳۲۵.
- [۲۳] Blaha P. and Schwarz K. and Madsen G. and Kvasnicka D. and Luitz J. (2011), "Wien2k", Viena university press, Austria, pp.76.
- [۲۴] Hosseini S.M. (2008) "Optical properties of cadmium telluride in zinc-blende and wurzite structures" **J. of. Physica B**, 403 pp1907-1915.
- [۲۵] Noor N.A. and Ali s. and Shaukat A. (2011) "First principlis study of half-metallic ferromagnetism in Cr-doped CdTe" **J.of. Physics and chemistry of solids**, 72pp836-841.
- [۲۶] Saini S. and Reshak A. and Kashyap K. (1988) "Variation of half metallicity and magnetism of $\text{Cd}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Z}$ (Z=S,Se,Te) DMS compounds on reducing dilute limit" **J. of. Magnetism and Magnetic Materials**, 63pp3279.
- [۲۷] Sharma s. and Devi N. and Rajaram P. (2011) "Ab-initio investigation of structural, electronic, magnetic and optical properties of ferromagnetic $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ " **J. of. Physica B**, 406, pp4547-4553.
- [۲۸] Saeed Y. and Nazir S. and Shaukat A. and Reshak A.H. (2010) "Ab-initio calculations of Co-based diluted magnetic semiconductors $\text{Cd}_{1-x}\text{Co}_x\text{X}$ (X=S,Se,Te)" **J. of. Magnetism and Magnetic Materials**, 322, pp3214-3222.
- [۲۹] Razikov T.M. and Chornukur G.C. (2009) "Structural, Photoluminescent and electrical properties of CdTe films with different compositions fabricated by CMBD" **J. of. soler energy** 83, pp90-93.
- [۳۰] Boutaiba F. and Zaoui A. and Ferhat (2009) "Fundamental and transport properties of ZnX , CdX and HgX (X=S,Se,Te) compounds" **J. of. Superlattices and Microstructures**, 46, pp823-832.
- [۳۱] Neil W.Ashcroft and N. Mermin (1976) "Solid state physics" Vol. 1, Cornell university, pp.158.

- [۳۲] Deligoz E. and Colakoglu K. and Ciftci Y. (2006) "Elastic, electronic, and lattice dynamical properties of CdS, CdSe and CdTe" **J. of. Physica B**, 373, pp124-130.
- [۳۳] Verma U.P. and Sharma S. and Devi N. and Bisht P.S. and Rajara P. (2011) "Spin-polarized structural, electronic and magnetic properties of diluted magnetic semiconductors $Cd_{1-x}Mn_xTe$ in zinc blende phase" **J. of. Magnetism and Magnetic Materials**, 323, pp394-399.
- [۳۴] Touat S.A. and Litimein F. and Tadjer A. and Bouhafs B. (2006) "Ferromagnetism in transition-metal doped II-VI compounds" **J. of. Magnetism and magnetic materials** 307, pp245-249.
- [۳۵] Singh J. (2003) "Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures" University press, pp.95.
- [۳۶] Hui Yang J. and Chen S. and Yin W. and Gong X.G. (2009) "Electronic structure and phase stability of MgTe, ZnTe, CdTe, and their alloys in the B3, B4 and B8 structures" **J. of. Physical Review B**, 79 pp2452.
- [۳۷] احمدیان ف. و میرزایی ف.، (۱۳۹۲) "مطالعه خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی آلیاژ $GaN_{1-x}P$ بر پایه اصول اولیه"، کنفرانس فیزیک ایران، ص ۵۸۴، بیرجند.
- [۳۸] Born M. and Wolf E. (1959), "Principles of optics", Vol. 1, Cambridge, University press, pp.435.
- [۳۹] Dressel M. and Gruner G. (2002), "Electrodynamics of Solids", Vol. 1 University press, pp.163.
- [۴۰] دادستانی م. و زینی وند آ.، (۱۳۹۱)، "مطالعه ابتدا به ساکن خواص اپتیکی آلیاژ $Zn_{1-x}Mg_xTe$ "، کنفرانس فیزیک ماده چگال، شاهرود.
- [۴۱] باده یان ح. و صالحی ح. و قوهستانی م. و باده یان ز.، (۱۳۹۱)، "بررسی ویژگی های اپتیکی ترکیب LiI با استفاده از تقریب های GGA و MBJ"، کنفرانس فیزیک ایران .
- [۴۲] Wooten F. (1972), "Optical properties of solids", University press, INC, pp.125.
- [۴۳] امیری ف. و محمودی ن. و حقیقی ب. و رهنمای علی آباد ح.، (۱۳۹۰)، "اثر ناخالصی منگنز بر خواص اپتیکی اکسید ایندیوم و اکسید آلومینیوم"، کنفرانس فیزیک ایران، بیرجند.
- [۴۴] هنرمند ف. و پاپی ه. و یزدان مهر م. و جلالی اسدآبادی س.، (۱۳۹۲)، "تاثیر نقص های ذاتی بر ساختار الکترونی و خواص اپتیکی اکسید روی (ZnO)"، کنفرانس فیزیک ایران، بیرجند.
- [۴۵] دادستانی م. و مومنی فیلی ر.، (۱۳۹۲)، "مطالعه خواص اپتیکی کالکوزنیدهای چهارتایی $Cu_2CdSnVI_4$ ($VI=S, Se, Te$)"، کنفرانس فیزیک ایران، بیرجند.
- [۴۶] Phillipp H.R. and Ehrenreich H. (1960) "Optical properties of semiconductors" **J. of. Phys, Rev.** ,115 pp1020.
- [۴۷] Mei J.R. and Lemos V. (1984) "Photoluminescence on CdSe and CdTe under hydrostatic pressure" **J. of. Solid state commun**, 52, pp785.

- [۴۸] Markowski R. and Podgorny M. (1991) "Optical absorbtion in Cd: d-core transition" **J.of Physics:condens.Matter**, 3, pp9041.
- [۴۹] موصلی ز. و رهنمای علی آباد ح. و جلالی اسدآبادی س. (۱۳۹۱)، "بررسی خواص الکترواپتیکی ترکیبات XRuO_3 ($\text{X}=\text{Ca}, \text{Sr}$)"، کنفرانس فیزیک ماده چگال ایران، شاهرود.
- [۵۰] Lautenschlager P. and Logothetidis S. (1958) "Ellipsometric studies of the dielectric function of $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ " **J. of. Phys. Rev. B**, 32, pp3811.
- [۵۱] حسینی م. و مولاروی ط. و کمپانی ا. (۱۳۸۵)، "مطالعه ثابت های اپتیکی بلور کادمیم تلوراید در فاز هگزاگونال با استفاده از اصول اولیه"، کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران.
- [۵۲] کعبی م. و صالحی ح. (۱۳۹۱)، "بررسی خواص اپتیکی BeO در دو فاز هگزاگونال و بلند روی"، کنفرانس فیزیک ماده چگال ایران، شاهرود.
- [۵۳] نوروزی ف. و بیضایی م. و سلطانی محمدی ا. (۱۳۹۱)، "محاسبه خواص الکترواپتیکی بلور CdSe با استفاده از نظریه تابعی چگالی"، کنفرانس فیزیک ماده چگال ایران، شاهرود.
- [۵۴] صالحی ح. و جاودانی ز. باده یان ح. (۱۳۹۱)، "بررسی خواص الکترونی و ساختاری ترکیب مونوفریت استرانسیوم (SrFe_2O_4) با استفاده از روش FP-LAPW"، کنفرانس فیزیک ایران.
- [۵۵] Yao K.L. and Gao G.Y. and Li Y. (2005) "Half –metallic ferromagnetic semiconductors of V- and Cr-doped CdTe studied from first principles pseudopotential calculations" **J. of. Physica B**, 366, pp62-66.
- [۵۶] Touat S.A. and Litimein F. and Tadjer A. (2010) "The spin effect in zinc-blende $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$ diluted magnetic semiconductors: FP-LAPW study" **J. of. Physica B**, 405, pp625-631.
- [۵۷] Merad A.E. and Kanoun M.B and Goumri-Said S. (2006) "Ab initio study of electronic structures and magnetism in ZnMnTe and CdMnTe diluted magnetic semiconductors" **J. of. Magnetism and Magnetic Materials**, 302, pp536-542.
- [۵۸] Xio W. and Lio B. (2004) "Half metallic ferromagnetism in ternary transition compounds based on ZnTe and CdTe semiconductors" **J. of. Applied Physics**, 6 pp3559-3561.
- [۵۹] Liu Y. and Liu B. (2006) "Ferromagnetism in transition-metal-doped II-VI compounds" **J. of. Magnetism and Magnetic Materials** 307, pp245-249.

Abstract

In this thesis, we have studied the electronic and magnetic properties of transition metals (TM) - doped CdTe by Wien2k code. The generalized gradient approximation (GGA) were used for these calculations. Transition metal elements such as Cr, Mn, Fe and Co were doped in CdTe with amount of %6.25, %12.5 and %25. The energy and bulk modulus of systems were calculated by volume optimization. The results showed that all compounds except compounds doped with Mn are stable in ferromagnetic phase. The stable phase for Mn doped CdTe was anti-ferromagnetic. Cr, Fe, Co-doped CdTe for ferromagnetic phase and Mn-doped CdTe for anti-ferromagnetic phase showed semi-metal properties. Moreover, $\text{Cd}_{0.75}\text{Cr}_{0.25}\text{Te}$ compound has biggest bandgap energy.

Investigation of density of states for the system showed that in the conduction band TM-3d orbitals hybrid with Te-5p orbitals. In fact these orbitals have a major contribution in the density of states, near to the Fermi energy.

Key words:

Cadmium Telluride, Density functional theory, Wien2k, generalized gradient approximation, magnetic properties.



Shahrood University

Faculty of Physics

Solid state Physics

Master of Science Thesis

**Study of the electronic and magnetic properties of transition
metals doped Cadmium Telluride**

Somaye Nikzad

Supervisors:

Dr. Morteza Izadifard

Dr. Mohammad Ebrahim Ghazi

January 2014