بسم الله الرحمن الرحیم

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه:

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته فیزیک حالت جامد

عنوان:

بررسی خواص ساختاری و مغناطیسی نیم‌رسانای رقیق شده ترکیب $Zn_{1-x}Mn_xO$

استاد راهنما:

دکتر منوچهر بابائی‌پور

استاد مشاور:

دکتر فریدون سموات

پژوهشگر:

فریبا ایمانیان

آبان ماه ۱۳۹۰

همه امتیازهای این پایان نامه به دانشگاه بوعلی سینا تعلق دارد. در صورت استفاده از تمام یا بخشی از مطالب پایان نامه در مجلات، کنفرانس ها و یا سخنرانی ها، باید نام دانشگاه بوعلی (یا استاد یا اساتید راهنمای پایان نامه) و نام دانشجو با ذکر ماخذ و ضمن کسب مجوز کتبی از دفتر تحصیلات تکمیلی دانشگاه ثبت شود. در غیر این صورت مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت.

دانشگاه بوعلی سینا

مشخصات رساله/پایان نامه تحصیلی

عنوان:

بررسی خواص ساختاری و مغناطیسی نیم رسانای رقیق شده ترکیب $Zn_{1-x}Mn_xO$.

نام نویسنده: فریبا ایمانیان

نام استاد راهنما: دکتر منوچهر بابائی‌پور

نام استاد مشاور: دکترفریدون سموات

دانشکده : علوم	**گروه آموزشی: فیزیک**	
رشته تحصیلی: فیزیک	**گرایش تحصیلی: حالت جامد**	**مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد**
تاریخ تصویب:۱۱ /۱۳۹۰/۱۰	**تاریخ دفاع: ۱۳۹۰/۸/۲۲**	**تعداد صفحات: ۱۲۲**

چکیده:

یکی از مسائل مهم در زمینه اسپینترونیک، تزریق جریان پلاریزه اسپینی از یک فلز فرومغناطیس به یک نیمرسانا است. در سالهای اخیر فرومغناطیس‌های نیمه‌فلز به دلیل توانایی بالا در تولید جریان قطبیده اسپینی مورد توجه بسیاری قرار گرفته‌اند. نیمه‌فلزات موادی هستند که برای یک نوع اسپین رفتار فلزی و برای نوع دیگر رفتار نیم‌رسانایی از خود نشان می‌دهند و لذا این مواد در سطح فرمی خود دارای قطبش ۱۰۰ درصدی اسپینی هستند.

ما نیز در این رساله قصد داریم که با بررسی نیمرسانای ZnO و وارد کردن فلز واسطه مغناطیسی منگنز به عنوان ناخالصی، به مطالعه خواص الکترونی و مغناطیسی این ترکیب بپردازیم.

در فصل اول تئوری تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفت. در فصل دوم به مطالعه خواص نیمرسانائی و مغناطیسی پرداخته شد. در فصل سوم خواص ساختاری و مغناطیسی سه ساختار انبوهه ZnO مورد بررسی قرار گرفت. برای اینکار ابتدا ابریاخته مناسب تولید و سپس آلائیدن با درصدهای مختلف به عنوان ناخالصی مغناطیسی مورد بررسی قرار دادیم. سپس خواص الکترونی و مغناطیسی لایه نازک خالص و آلائیده شده با منگنز را برای هر سه ساختار اکسیدروی مورد مطالعه قراردادیم.

واژه‌های کلیدی: نیمرسانای مغناطیسی رقیق شده،تئوری تابعی چگالی،چگالی حالات،ZnO

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول: تئوری تابعی چگالی	۱
مقدمه	۲
۱-۱ روش‌های محاسبه انرژی بلور	۲
۱-۲ تقریب بورن- اپنهایمر	۴
۱-۳ تقریب هارتری	۶
۱-۴ تقریب هارتری- فوک	۷
۱-۵ چگالی الکترونی	۷
۱-۶ نظریه توماس- فرمی	۸
۱-۷ نظریه توماس-فرمی-دیراک	۱۰
۱-۸ روش تابعی چگالی	۱۱
۱-۸-۱ معادلات کوهن- شم	۱۲
۱-۹ روشهای حل انرژی تبادلی-همبستگی	۱۶
۱-۹-۱ تقریب چگالی موضعی	۱۶
۱-۹-۲ شیب تعمیم یافته	۱۷

۱-۹-۳ تقریب LDA + C ۱۸
۱-۹-۴ تقریب LDA + U ۱۸
۱-۱۰ روشهای حل معادلات کوهن- شم ۱۹
۱-۱۰-۱ روش امواج تخت بهبودیافته ۱۹
۱-۱۰-۲ روش امواج تخت بهبودیافته خطی ۲۲
۱-۱۰-۳ روشAPW+Lo ۲۵
۱-۱۰-۴ روش APW + LO + lo ۲۶
۱-۱۰-۵ روش FP + LAPW ۲۷
فصل دوم: نیمرساناومغناطیس ۲۸
مقدمه ۲۹
۲-۱ انواع نیمرسانا ۳۱
۲-۱-۱ نیمرساناهای ذاتی ۳۱
۲-۱-۲ نیمرساناهای غیر ذاتی ۳۲
۲-۱-۳ پایه علمی نیمرسانای نوعn ۳۳
۲-۱-۴ پایه علمی نیمرسانای نوعp ۳۵
۲-۲ آمار نیمرسانا ۳۶
۲-۲-۱ ناحیه ذاتی ۳۶
۲-۲-۲ ناحیه غیرذاتی ۳۷

۲-۳ گاف نواری ۳۹
۲-۳-۱ وابستگی گاف نواری به دما ۴۰
۲-۳-۲ انواع گاف نواری ۴۰
۲-۴ حامل‌های بار در نیمرساناها ۴۱
۲-۵ سطوح فرمی ۴۴
۲-۶ باند انرژی ۴۵
۲-۷ مدل الکترون آزاد ۴۵
۲-۸ نوار انرژی نیمرساناها ۴۶
۲-۹ فلزات واسط ۴۷
۲-۱۰ نیمرساناهای اکسیدی ۴۷
۲-۱۱ مغناطیس ۴۸
۲-۱۱-۱ رفتار مغناطیسی مواد ۴۸
۲-۱۲ تقسیم‌بندی مواد مغناطیسی ۵۰
۲-۱۲-۱ مواد پارامغناطیس ۵۰
۲-۱۲-۱-۱رفتار پارامغناطیس مواد ۵۱
۲-۱۲-۲ مواد دیامغناطیس ۵۲
۲-۱۲-۲-۱رفتار دیامغناطیس مواد ۵۲

۲-۱۲-۳ مواد فرومغناطیس ۵۲
۲-۱۲-۳-۱ مواد فرومغناطیس نرم ۵۴
۲-۱۲-۳-۲ مواد فرومغناطیس سخت ۵۴
۲-۱۳ پادفرومغناطیس ۵۵
۲-۱۴ فری‌مغناطیس ۵۶
۲-۱۵ تقسیم بندی مواد مغناطیسی از نظر دمایی ۵۶
۲-۱۵-۱ فرومغناطیس ۵۶
۲-۱۵-۲ فری مغناطیس ۵۷
۲-۱۵-۳ پادفرومغناطیس ۵۷
فصل سوم: خواص ساختاری والکترونی و مغناطیسی اکسیدروی ۵۸
مقدمه ۵۹
۳-۱ معرفی اکسیدروی ۶۱
۳-۲ روش انجام محاسبات ۶۶
۳-۳ بهینه‌سازی پارامترهای محاسباتی ۶۶
۳-۳-۱ بهینه کردن تعداد RKmax ۶۶
۳-۳-۲ Kpoint ۶۸
۳-۳-۳ بهینه‌سازی پارامترهای شبکه ۷۰

۳- ۴ خواص الکترونی و مغناطیسی اکسیدروی ۷۳

۳-۴-۱ خواص الکترونی و مغناطیسی ابرسلول اکسیدروی خالص ۷۳

۳-۵ خواص الکترونی و مغناطیسی ابرسلول اکسیدروی آلائیده شده با **Mn** ۷۵

۳-۶ خواص ساختاری و الکترونی و مغناطیسی لایه نازک ۸۲

۳-۶-۱ خواص ساختاری لایه نازک ۸۲

۳-۶-۳۲ خواص الکترونی لایه نازک ۸۳

نتیجه‌گیری ۹۰

پیشنهادات ۹۱

پیوست ۹۲

مراجع ۱۱۹

فهرست جدول‌ها

عنوان صفحه

جدول۳-۱ تغییرات انرژی(ev) برحسب RKmax. ۶۷

جدول ۳-۲ تغییرات انرژی(ev) برحسب Kpoint. ۶۹

جدول ۳-۳ مقادیر ثابت‌های شبکه بدست آمده و مقایسه با داده های تجربی ۷۰

جدول ۳-۴مقادیر ثابت‌های شبکه بدست آمده و مقایسه با داده های تجربی ۷۲

جدول ۳-۵ مقادیر ثابت‌های شبکه بدست آمده و مقایسه با داده های تجربی ۷۳

جدول۳-۶ قطبش و شکافت تبادلی درصدهای مختلف منگنز ۸۱

جدول ۳-۷ مقادیر FERMI,MMTOT,MMI ۸۲

جدول۳-۸ مقادیر Energy,Fermi,MMTOT برای سه ساختار فیلم نازک اکسیدروی ۸۹

جدول۳-۹ مقادیر Energy, Fermi, MMTOT,MMI برای سه ساختار اکسیدروی آلائیده شده با منگنز ۸۹

جدول ۱: اعداد کوانتومی نسبیتی ۱۰۶

فهرست شکل‌ها

عنوان صفحه

۱-۱ نمایش نواحی کرات مافین‌تین و نواحی بین کرات ۲۰

۱-۲ ساختار نواری نیمرسانا ۲۹

۲-۲ نمایش ساختار نواری رسانا، عایق، نیمرسانا ۳۰

۲-۳ فرآیند آلائیدن ۳۲

۲-۴ ناخالصی نوع n ۳۳

۲-۵ ترازهای الکترون طرد شده در باند ممنوع ۳۴

۲-۶ ناخالصی نوع p ۳۵

۲-۷ نوار رسانش، نوار ظرفیت و نوار ممنوعه (گاف نواری) را در رسانا،نارسانا و نیمه‌رسانا... ۳۹

۲-۸ گاف نواری نیمرسانا ۴۰

۲-۹ الف)گاف نواری مستقیم ب) گاف نواری غیرمستقیم ۴۱

۲-۱۰ نمایش الکترونها و حفره‌ها ۴۲

۲-۱۱الف: نمایش گاف نواری ۴۲

۲-۱۱ب: حرکت الکترون از باند ظرفیت به باند رسانش ۴۳

۲-۱۲ تأثیر میدان الکتریکی بر الکترون‌ها ۴۳

۲-۱۳ ایجاد جریان الکتریکی ۴۴

۲-۱۴ مدل الکترون آزاد از فلز ۴۵

۲-۱۵ نمودار ساده باند انرژی مورد استفاده برای توصیف نیمرساناها ۴۶

۲-۱۶ جدول تناوبی عناصر ۵۰

۲-۱۷ رفتار پارامغناطسی مواددر حضور میدان مغناطیسی(سمت راست)، در غیاب میدان مغناطیسی(سمت چپ) ۵۱

۲-۱۸ حوزه‌های مغناطیسی در یک ماده فرومغناطیس ۵۳

۲-۱۹ فرومغناطیس در حضور میدان مغناطیسی(سمت راست)، در غیاب میدان مغناطیسی(سمت چپ) ۵۴

۲-۲۰ ساختار پادفرومغناطیس ۵۶

۲-۲۱ ساختارفری مغناطیس ۵۶

۳-۱ نمایش نیمرسانای غیرمغناطیسی(شکل سمت چپ)، نیمرسانای مغناطیسی رقیق شده(شکل سمت راست) ۶۱

۳-۲ ساختار Wurtzite اکسیدروی ۶۲

۳-۳ تعداد نزدیکترین همسایگان هر اتم ساختار Wurtzite ۶۳

۳-۴ ساختار Zinc blende اکسیدروی ۶۴

۳-۵ تعداد نزدیکترین همسایگان ساختار Zinc blende ۶۴

۳-۶ ساختار نمک طعام Rock salt اکسیدروی ۶۵

۳-۷ نمایش نزدیکترین همسایگان برای هر اتم از ساختار Rock salt ۶۵

۳-۸ ساختار نواری اکسیدروی کپه‌ای ۷۴

۳-۹ ابرسلول اکسیدروی با آلائیدن یک اتم منگنز ۷۶

۳-۱۰ ساختار نواری ترکیب $Zn_{۹۳/۷۵}\ Mn_{۶/۲۵}\ O$ ۷۶

۳-۱۱ هیبریداسیون‌های مختلف اوربیتال d ۷۷

۳-۱۲ ابرسلول اکسیدروی با آلائیدن دو اتم منگنز ۷۹

۳-۱۳ ساختار ابرسلول اکسیدروی با آلائیدن سه اتم منگنز ۸۰

۱ صفحه نمایش (sission) ۹۵

۲ صفحه نمایش ایجاد (Struct Generation) ۹۶

۳ صفحه نمایش (Initialization) ۹۹

۴ نمایش اعداد مربوط به انرژی‌های اوربیتالی اتم Zn در خروجی lstart..... ۱۰۲

۵ نمایش اعداد مربوط به انرژیهای اوربیتالی اتم O در خروجی lstart..... ۱۰۲

۶ نمایشی از فایل case.inst برای ساختار Zno ۱۰۴

۷ نمایش فایل case.in۱st ۱۰۶

۸ نمایش فایل case.in۲ ..... ۱۰۸

۹ نمایش فایل case.inm ۱۰۸

۱۰ صفحه نمایش اثر optimize ۱۱۲

۱۱ نمایش مرحله Edite Optimize Job ۱۱۳

۱۲ صفحه نمایش رسم چگالی حالات ۱۱۴

۱۳ نمایش فایل case.int ۱۱۵

۱۴ صفحه نمایش Band structure ۱۱۷

۱۵ نمایش فایل case.insp ۱۱۸

فهرست نمودار

عنوان صفحه

۳-۱ تغییرات انرژی (ev) بر حسب RKmax ۶۷

۳-۲ تغییرات انرژی(ev) برحسب Kpoint ۶۹

۳-۳ تغییرات انرژی برحسب حجم برای ساختار Wurtzite اکسیدروی ۷۱

۳-۴ تغییرات انرژی بر حسب حجم برای ساختار Zinc blende اکسیدروی ۷۱

۳-۵ تغییرات انرژی بر حسب حجم برای ساختار Rock salt اکسیدروی ۷۲

۳-۶ چگالی حالت الکترونی ساختار ZnO ۷۴

۳-۷ چگالی حالت‌های اوربیتال‌های $Zn\ ^{3}d$ و $O\ ^{2}p$ ۷۵

۳-۸ چگالی حالت‌های الکترونی dos بر حسب انرژی ترکیب $Zn_{۹۳/۷۵}\ Mn_{۶/۲۵}\ O$ ۷۸

۳-۹ چگالی حالت‌های الکترونی d و dxz+dyz ترکیب $Zn_{۹۳/۷۵}\ Mn_{۶/۲۵}\ O$ ۷۸

۳-۱۰ چگالی حالت‌های الکترونی dos بر حسب انرژی ترکیب $Zn_{۸۷/۵}\ Mn_{۱۲/۵}\ O$ ۷۹

۳-۱۱ چگالی حالت‌های الکترونی d و dxy ترکیب$Zn_{۸۷/۵}\ Mn_{۱۲/۵}\ O$ ۸۰

۳-۱۲چگالی حالت‌های الکترونی dos بر حسب انرژی ترکیب $Zn_{۸۱/۲۵}\ Mn_{۱۸/۷۵}\ O$ ۸۱

۳-۱۳ چگالی حالت‌های الکترونی d و dxz ترکیب$Zn_{۸۱/۲۵}\ Mn_{۱۸/۷۵}\ O$ ۸۱

۳-۱۴ چگالی حالت الکترونی dos بر حسب انرژی برای لایه نازک اکسیدروی فاز Wz ۸۳

۳-۱۵ چگالی حالت الکترونی ساختار Wz ترکیب ZnO-Mn ۸۴

۳-۱۶ نمودار چگالی حالت الکترونی d و $dx^{2}-y^{2}$ ترکیب لایه نازک ZnO-Mn ۸۵

۳-۱۷ چگالی حالت الکترونی dos بر حسب انرژی برای لایه نازک اکسیدروی فاز Zb.....۸۵

۳-۱۸ چگالی حالت الکترونی لایه نازک ترکیب ZnO-Mn ۸۶

۳-۱۹ چگالی حالت الکترونی d و deg ترکیب ZnO-Mn ۸۷

۳-۲۰ چگالی حالت الکترونی لایه نازک فاز Rs ۸۷

۳-۲۱ چگالی حالت‌های الکترونی لایه نازک ترکیب ZnO-Mn ۸۸

۳-۲۲ چگالی حالت الکترونی dو deg ترکیب ZnO-Mn ۸۸

تقدیم به پدر و مادرم

سایه‌بانان آرامش

اسوه‌های فداکاری و محبت

به پاس عاطفه سرشار و گرمای امیدبخش وجودشان که در این سردترین روزگاران بهترین پشتیبان است.

تقدیم به:

دو برادر عزیزم، که با مهربانی و عطوفت‌های بیکرانشان و با اشتیاق نگاهشان در سراسر زندگانیم خاطرم را آرام و عزمم را طولانی کردند.

سپاسگزاری

در آغاز از خانواده عزیزم که در تمام مراحل زندگی همراه و پشتیبان من بودند صمیمانه سپاسگزاری می‌کنم.

اگر محقق را دانشجوئی بدانیم که در اقیانوس علم در جستجوی گوهر یا گوهرهای گرانبهاست، استاد را باید کسی دانست که در این اقیانوس گاهی آرام و گاهی پرتلاطم نقش ارزنده راهنمائی غواص جویای گوهر را ایفا می‌کند. از استاد راهنمای بزرگوارم، جناب آقای دکتر بابائی‌پور که در مراحل مختلف تحقیق یاریم نمودند شکر و قدردانی می‌کنم. از استاد مشاور گرامیم جناب آقای دکتر سموات تشکر می‌کنم.

در پایان بر خود واجب می‌دانم که از زحمات بی‌دریغ آقایان: جعفر جلیلیان، مسعود شاهرخی، احمد عبدالملکی تشکر و قدردانی نمایم.

فصل اول: نظریه تابعی چگالی

مقدمه

یکی از اهداف مهم در فیزیک ماده چگال بررسی خواص الکترونی و ساختاری مواد است. در مقیاس میکروسکوپی می‌توان هر ماده‌ای را یک دستگاه بس ذره‌ای دانست. هر دستگاه بس ذره‌ای شامل تعداد بسیار زیادی ذرات مشابه یا غیر مشابه است که با همدیگر برهمکنش می‌کنند.

۱-۱) روش‌های محاسبه انرژی بلور:

در بررسی نظری دستگاه‌های بس ذره‌ای دو روش در نظر گرفته شده:

۱) روش کلاسیکی
۲) روش کوانتومی

۱) در روش کلاسیکی بین اتم‌ها یا یون‌ها یک پتانسیل فرضی در نظر گرفته می‌شود. در اینجا حرفی از الکترون نمی‌زنند اثر الکترون را بطور غیر مستقیم در پتانسیل فرضی لحاظ می‌کنند. پس مبنای محاسبات، انتخاب پتانسیل فرضی است و نیروی وارد بر هر اتم و انرژی بلور با مشتق‌گیری از این پتانسیل محاسبه می‌شود. در این روش آثاری که فقط منشأ کوانتومی دارند مثل برهمکنش تبادلی را نمی‌توان لحاظ کرد و با توجه به اینکه پتانسیل واحد نیست و از ماده‌ای به ماده دیگر تغییر می‌کند این روش مشکلاتی را به وجود می‌آورد. از مزایای این روش سرعت بالای محاسبات است.

۲) در این روش فقط از اصول کوانتومی و محاسبات طولانی بهره می‌گیرند برای سیستم بس ذره‌ای تعداد زیادی توابع موج در نظر گرفته می‌شوند. بنابراین محاسبات با زمان بالائی و دقت پائین انجام می‌گیرند. با استفاده از قوانین الکترومغناطیس، برهم‌کنش‌های الکترونها و هسته‌ها با یکدیگر را مشخص کرده و با تقسیم هامیلتونی مستقل از زمان به دو بخش الکترونی و یونی، ویژه توابع و ویژه مقادیر دستگاه محاسبه می‌شود. در این روش خواصی از بلور نظیر ساختار نواری انرژی، چگونگی پیوند بین اتمها، که به رفتار الکترونها مربوط است همچنین گرادیان میدان الکتریکی و مغناطیسی فوق‌ریز اطراف هسته و ... با این روش محاسبه می‌شود. روش کوانتومی به دو صورت قابل استفاده است: