جهت تهیه فایل WORD این مقاله به سایت DaneshResan.com مراجعه نمایید و عنوان مقاله را جستجو کنید
بیش از ۲ میلیون مقاله فارسی در این سایت موجود میباشد

مطالعه خواص الکترونی و ساختاری آلیاژ هویسلر $Co_2Cr_{0.5}Fe_{0.5}Al$ و مرز مشترک آن با GaAs

زارعی، ساره هاشمی‌فر، سید جواد اکبرزاده، هادی

آزمایشگاه تحقیقاتی ماده‌چگال محاسباتی، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

چکیده

آلیاژ هویسلر $Co_2Cr_{0.6}Fe_{0.4}Al$ به علت داشتن خاصیت نیم‌فلزی، اخیراً مورد توجه بسیاری از محققان علوم و فناوری اسپینترونیک قرار گرفته است. در این مقاله، ما با استفاده از محاسبات اولیه کوانتومی در چارچوب نظریه تابعی چگالی اسپینی، ابتدا خواص الکترونی و مغناطیسی آلیاژ هویسلر $Co_2Cr_{05}Fe_{05}Al$ را در حالت انبوهه مورد بررسی قرار داده‌ایم و سپس به مطالعه خواص مرز مشترک آن با نیم رسانای GaAs پرداخته ایم. نتایج به دست آمده، ضمن تایید رفتار نیم‌فلزی در حالت انبوهه، نشان می‌دهد که در مرز مشترک به دلیل پیدایش حالت های سطحی خاصیت نیم‌فلزی از بین می‌رود.

Theoretical study of the structural and electronic properties of $Co_2Cr_{0.5}Fe_{0.5}Al$ Heusler alloy and its interface with GaAs

S. Zarei S.J. Hashemifar H. Akbarzadeh

Computational Condensed Matter Research Lab., Physics Department, Isfahan University of Technology

Abstract

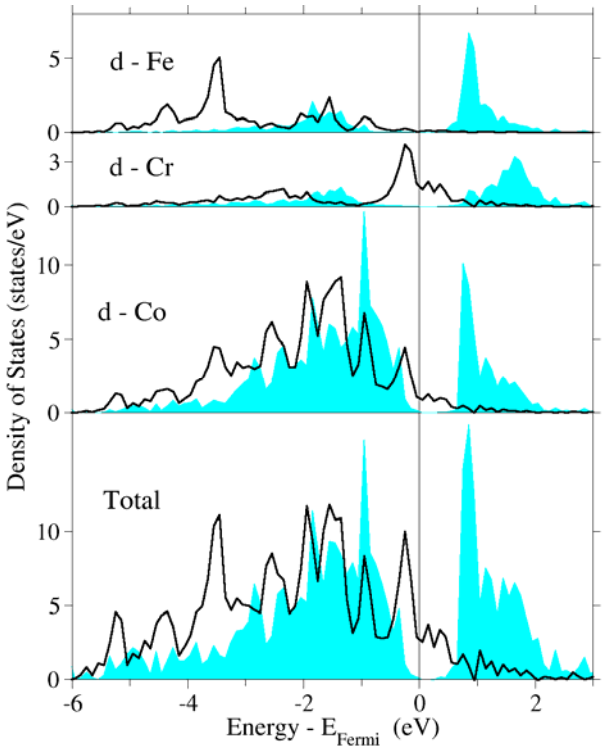
The $Co_2Cr_{0.6}Fe_{0.4}Al$ half metal ferromagnetic Heusler alloy has recently attracted much interest in the developing field of spintronics. In this paper, we first investigated the electronic and magnetic properties of bulk $Co_2Cr_{0.5}Fe_{0.5}Al$ alloy by performing first-principle calculation within the spin density functional theory and then its interfaces with GaAs(001) were exploited. Our results, although confirms the half metallicity of bulk state, show that the additional surface states diminish this property at the $Co_2Cr_{0.5}Fe_{0.5}Al$/GaAs(001) junction.

مقدمه

یکی از موضوعات مهم در زمینه اسپینترونیک، تزریق اسپینی از فلز فرومغناطیس به درون نیم‌رسانا است و برای افزایش هرچه بیشتر بازده این فرایند امروزه تلاش زیادی برای کشف فرومغناطیس های جدید بعمل می اید. به همین دلیل، نیم‌فلزات فرومغناطیس، یعنی موادی که برای یک نوع اسپین رفتار فلزی دارند و برای اسپین نوع دیگر همچون نیم رسانا عمل می کنند، به دلیل قطبیدگی اسپینی ۱۰۰٪ آنها در تراز فرمی مورد توجه زیادی قرار گرفته‌اند. آلیاژ Co_2CrAl از جمله نیم‌فلزهایی است که گرچه اخیراً مورد توجه قرار گرفته است [۱] اما از آنجایی که این ترکیب دمای کوری پایینی دارد، لذا آن را با آهن می‌آلایند تا دمای کوری آن بالا رفته و پایداری مغناطیسی آن افزایش یابد. نتایج تجربی نشان می‌دهد که اگر ٤٠٪ از اتم‌های کروم در این آلیاژ با آهن جایگزین شوند ($Co_2Cr_{0.6}Fe_{0.4}Al$)علاوه بر این که خاصیت نیم‌فلزی سیستم حفظ می‌شود، دمای کوری آن نیز تا حدود ٦٤٠K افزایش می‌یابد [۲]. به همین خاطر این آلیاژ جدید توجه زیادی را به خود جلب کرده است و طی آزمایش‌های تجربی، مغناطو-مقاومت ۳۰٪ و مغناطو- مقاومت تونل‌زنی ۱۹٪ برای آن اندازه‌گیری شده است [۳].

علی‌رغم این که محاسبات مبتنی بر نظریه تابعی چگالی (و در برخی موارد اندازه‌گیری‌های تجربی) خاصیت نیم‌فلزی بسیاری از آلیاژهای هویسلر را در حالت انبوهه تایید می‌کنند، لیکن نتایج متعدد تجربی و نظری مبین آن است که چنین رفتاری لزوما در سطوح و مرزهای مشترک پایدار نخواهد بود و لذا قطبش اسپینی اندازه‌گیری شده در این موارد با مقدار ایده‌آل آن تفاوت زیادی دارد. بنابراین یافتن مرزهای مشترک مناسب ، که در

جهت تهیه فایل WORD این مقاله به سایت DaneshResan.com مراجعه نمایید و عنوان مقاله را جستجو کنید
بیش از ۲ میلیون مقاله فارسی در این سایت موجود میباشد



شکل ۱ : نمودار چگالی حالات کل در مقایسه با چگالی حالات اربیتال‌های d اتم‌های Co, Cr, Fe. خطوط توپر نمایانگر حالت‌های اسپینی اکثریت و مساحت هاشورزده نشان‌دهنده حالت‌های اسپینی اقلیت هستند.

آنها خاصیت نیم‌فلزی حفظ شود، برای صنعت بسیار حائز اهمیت است. در این مقاله، ما با قرار دادن آلیاژ مورد نظر بر روی نیم‌رسانای GaAs در راستای بلوری [۰۰۱]، مرز مشترک آنها را شبیه‌سازی نموده و با استفاده از اصول اولیه کوانتومی به بررسی خواص ساختاری، الکترونی، مغناطیسی و قطبش اسپینی در این مرز پرداخته‌ایم.

رهیافت محاسباتی

محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی- شبه پتانسیل [٤] در تقریب گرادیان تعمیم یافته GGA، و با استفاده از نرم افزار PWscf انجام شده است [٥]. شبه‌پتانسیل‌های به کار برده شده از نوع فوق نرم[1] هستند. توابع موج الکترونی توسط مجموعه امواج تخت با انرژی قطع ٤٣ ریدبرگ بسط داده شدند و انرژی قطع ٦٨٨ ریدبرگ برای چگالی بار الکترونی و شبه‌پتانسیل‌ها استفاده شد.

منطقه اول بریلوئن برای انبوهه توسط روش Methfessel-Paxton با تعداد (٨٨٦) یاخته سلول بندی شد [٦] و برای ابریاخته‌ای که مرز مشترک را توصیف می‌کند، تعداد یاخته ها به (٨٨١) کاهش یافت. ضمناً انتگرال‌گیری در منطقه اول بریلوئن برای انبوهه و ابریاخته به روش اسمیرینگ[2] [٧] و با پهن‌شدگی ۰/۰۲ ریدبرگ انجام شد. اگرچه نتایج تجربی برای آلیاژ $Co_2Cr_{0.6}Fe_{0.4}Al$ حاصل شده است لیکن چون شبیه سازی این آلیاژ نیاز به ابریاخته بزرگ و در نتیجه حجم محاسبات زیادی دارد، لذا ما غلظت x=۰/۵ را که معادل ترکیب $Co_2Cr_{0.5}Fe_{0.5}Al$ است برای انجام محاسبات انتخاب کردیم. این غلظت در عین حال که به ابریاخته کوچکتری نیاز دارد، به آلیاژ بررسی شده تجربی نیز نزدیک است.

نتایج و مباحث

۱- ساختار الکترونی

آلیاژ $Co_2Cr_{0.5}Fe_{0.5}Al$ در حالت انبوهه دارای ساختار مرکز سطحی (fcc) با پایه ٤ اتمی و پارامتر شبکه محاسباتی ۵/۷۰ آنگستروم است. جایگاه‌های شبکه توسط اتم‌های Co در (0,0,0) و (0.5,0.5,0.5)، Al در (0.75,0.75,0.75) و Fe و Cr مشترکاً در (0.25,0.25,0.25) اشغال شده اند. منحنی چگالی حالات کل وجود یک گاف انرژی به اندازه حدود ۰/۳ الکترون‌ولت در نوار اسپین اقلیت در اطراف تراز فرمی را نشان می‌دهد، در حالی که الکترون‌های اسپین اکثریت رفتار فلزی دارند. لذا قطبش اسپینی انبوهه ۱۰۰٪ است. ضمنا مقدار نسبتا کوچک گاف اسپینی بیانگر پایداری کم خاصیت نیم‌فلزی این آلیاژ است. همچنین در سطح فرمی نوار اکثریت نیز یک تکینگی Van Hove مشاهده می‌شود.

با بررسی منحنی چگالی حالات جزئی (شکل ۱) می‌بینیم که گاف انرژی موجود در نوار اقلیت عمدتا توسط ویژه‌حالت‌های کبالت احاطه شده است. ضمنا بیشترین سهم در چگالی حالات کل متعلق به اربیتال‌های d اتم‌های Co و Fe و Cr است. اربیتال‌های s و p

جهت تهیه فایل WORD این مقاله به سایت DaneshResan.com مراجعه نمایید و عنوان مقاله را جستجو کنید
بیش از ۲ میلیون مقاله فارسی در این سایت موجود میباشد

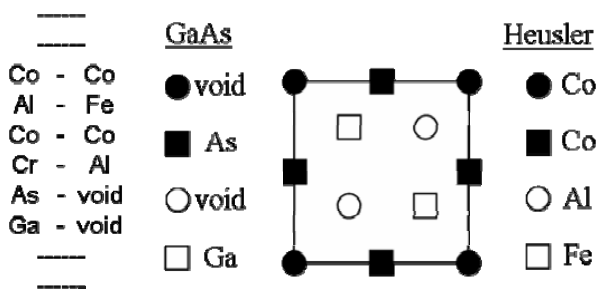
اتم Al بسیار پایین‌تر از سطح فرمی قرار گرفته‌اند و سهم آنها در چگالی حالات کل بسیار ناچیز است.

مغناطش اتم‌های Co, Fe, Cr و Al محاسبه شد و به ترتیب مقادیر ۱/۸۳، ۲/۸۹، ۰/۹۳ و ۰/۱۸- بدست امد (با واحد μ_B) . لذا تمامی اتم‌های واسطه با یکدیگر برهم‌کنش فرومغناطیس دارند، در حالی که اتم Al با سایر اتم‌های موجود در ترکیب برهم‌کنش پادفرومغناطیس دارد. مغناطش کل به دست آمده برای هر یاخته بسیط انبوهه μ_B ۳/۹۸ است که رفتار اسلیتر پاؤلینگ مشاهده شده در آلیاژهای کامل هویسلر($M_t=Z_t-24$) را تایید می‌کند[8] . M_t مغناطش کل برای هر یاخته بسیط و Z_t تعداد کل الکترون های والانس است.

ساختار مرز مشترک

برای شبیه‌سازی مرز مشترک در راستای [001] از یک ابریاخته شامل ۱۳ لایه آلیاژ هویسلر و ۱۶ لایه نیم‌رسانا استفاده کردیم. ضخامت آلیاژ و نیم‌رسانا به گونه‌ای انتخاب شدند که لایه‌های میانی آنها خواص انبوهه داشته باشند. برای رشد آلیاژ بر روی نیم‌رسانا، پارامتر شبکه آلیاژمی‌بایست مساوی با پارامتر شبکه نیم‌رسانا انتخاب شود. از آنجایی که پارامتر شبکه محاسباتی $Co_2Cr_{0.5}Fe_{0.5}Al$ در حالت انبوهه ۵/۶۹ آنگستروم و مقدار نظیر برای GaAs ، ۵/۷٤ آنگستروم است، لذا با مساوی گرفتن پارامتر شبکه آلیاژ با پارامتر تجربی GaAs که برابر۵/٦٥ آنگستروم است، تنش وارد بر نیم‌فلز کمتر خواهد شد. به همین دلیل محاسبات با پارامتر تجربی شبکه GaAs انجام شد. پایه GaAs ثابت و فاصله بین لایه‌های آن بدون تغییر فرض شد لیکن فاصله بین لایه‌های $Co_2Cr_{0.5}Fe_{0.5}Al$ با بهینه کردن حجم آن در حالت انبوهه هنگامی که پارامتر شبکه در صفحه آن مساوی با پارامتر شبکه تجربی GaAs است و با مینیمم کردن انرژی یا صفر کردن تنش در راستای[001] به دست آمد.

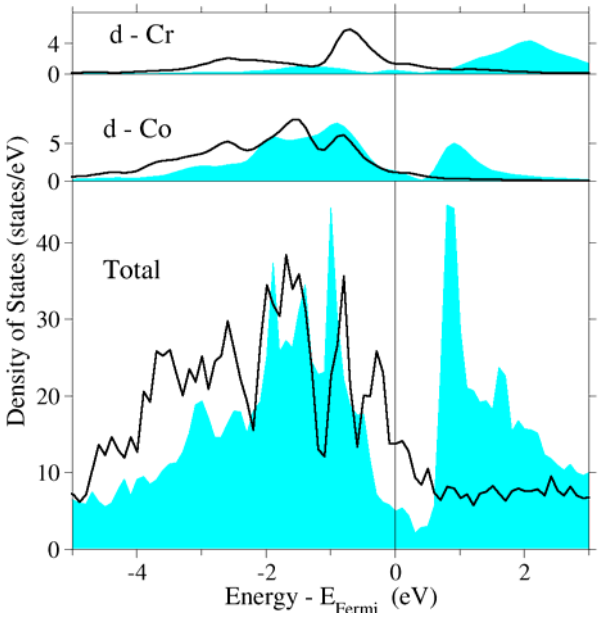
خواص الکترونی ومغناطیسی مرز مشترک



شکل۲ : نمای مرز مشترک بین آلیاژ هویسلر $Co_2Cr_{0.6}Fe_{0.4}Al$ و GaAs، سمت راست نشان دهنده موقعیت اتم‌های آلیاژ هویسلر و نیم-رسانای GaAs نسبت به یکدیگر در راستای (۰۰۱) است و سمت چپ لایه‌های مجاور مرز مشترک را نشان می‌دهد

با مطالعه سطوح مختلف $Co_2Cr_{0.5}Fe_{0.5}Al$ مشاهده شد که سطح CrAl دارای بیشترین قطبش اسپینی (۸۵٪)در مقایسه با سایر سطوح است. لذا در شبیه‌سازی مرز مشترک ، سطح انتهایی $Co_2Cr_{0.5}Fe_{0.5}Al$ را CrAl و سطح نهایی GaAs در مرز مشترک را صفحه حاوی As در نظر گرفتیم. اتم As واقع در پیوندگاه نسبت به اتم های Al و Cr در موقعیت پل (bridge) قرار داده شد (شکل ۲). فاصله مرز مشترک، یعنی حد فاصل بین آخرین لایه آلیاژ و اولین لایه نیم‌رسانا در مرز مشترک، پس از بهینه کردن انرژی و صفر کردن نیروها به منظور یافتن مکان تعادلی اتم‌های نزدیک پیوندگاه، برابر 1/8 آنگستروم به دست آمد. بررسی اثرات مرز مشترک، نشان می‌دهد که مغناطش اتمی Cr واقع در پیوندگاه افزایش یافته وبه μ_B ۳ می‌رسد. در حالی که مغناطش اتم‌های Cr در لایه‌های میانی به مغناطش اتمی Cr در حالت انبوهه μ_B ۱/۸۳ بسیار نزدیک است. تغییر زیاد در مغناطش اتمی Cr ناشی از اثرات مرز مشترک است، چون اتم Cr در این حالت، نسبت به حالت انبوهه، ٤ تا از نزدیک‌ترین همسایه‌های کبالت خود را از دست داده است. مغناطش اتمی As واقع در مرز مشترک نیز نسبت به مقدار صفردر حالت انبوهه کاهش یافته و به مقدار μ_B ۰/۱۲- می‌رسد. لذا اتم As با Cr واقع در پیوندگاه برهم‌کنش پادفرومغناطیس دارد. اثرات مغناطیسی مرز مشترک در لایه‌های بعدی بسیار ضعیف می‌شود، به گونه‌ای که مغناطش اتم‌های Co و Fe در لایه‌های بعدی به مغناطش آنها در حالت انبوهه بسیار نزدیک است.

بررسی نمودار چگالی حالات (شکل ۳) نشان می‌دهد که



شکل۳ : نمودار چگالی حالات کل ابر یاخته برای پیوندگاه CrAl/As به همراه سهم اربیتال های d اتم های مجاور مرز مشترک . خطوط توپر نمایانگر حالت‌های اسپینی اکثریت و مساحت هاشورزده نشان‌دهنده حالت‌های اسپینی اقلیت هستند

خاصیت نیم‌فلزی از بین رفته است و در نتیجه قطبش اسپینی در سطح فرمی تا مقدار حدود ۳۴٪ کاهش یافته است. همچنین با مطالعه چگالی حالات جزئی پیش‌بینی می‌شود که حالات سطحی ایجاد شده در گاف انرژی اقلیت اسپینی، عمدتا ناشی از اتم‌های Cr قرار گرفته در مرز مشترک و اتم‌های Co در لایه بعدی است.

نتیجه گیری

با بررسی پیوندگاه CrAl/As در مرز مشترک $Co_2Cr_{0.5}Fe_{0.5}Al$ و GaAs در راستای [001] مشاهده شد که بروز تعداد کمی از حالات سطحی در گاف اسپینی باعث از بین رفتن خاصیت نیم‌فلزی شده است . لذا می‌بایست با یررسی سایر پیوندگاه‌ها مرز مشترکی را که بالاترین قطبش اسپینی را داراست بیابیم.

مراجع

[1] E. Clifford,M.Venkatesan , J. Solid. State. Comm, 131, 2004, 61
[2] G. Jakob, *F. Casper* , Magn. Magn. Mater, 290, 2005, 1140
[3] S. Okamura,R. Goto, J. Tezuka, J. Appl. Phys, 96, 2004, 6561
[4] R. O. Jones, O. Gunnarson, Rev. Mod . Phys. 61, 1989, 689
[5] H. J. Monkhorst, J. D. Pack, Phys. Rev. B 13, 1976, 5188
[6] S. Baroni, A. Dalcorso, S. de Gironcoli, P. Giannozzi, http://www.pwscf.org
[7] N. Marzari, D. Vanderbilt, M. C. Payne, Phys. Rev. Lett. 79, 1997,1337
[8] I. Galanakis, P. H. Dederichs, Phys .Rev .B 66, 2002, 174429

[1] ultrasoft [2] smearing