Nanomeghyas
www.nanomeghyas.ir
نانومقیاس

بررسی ویژگی نیم‌فلزی تک‌لایه SiC آلایش یافته با اتم‌های منگنز به منظور کاربرد در نانو اسپینترونیک

محمد رستمی[۱،۲*] | محمد افکنی[۱] | مائده عابدی[۱] | پوریا امان ترکمن[۱]

[۱] دانشکده فیزیک، دانشگاه خوارزمی، تهران
[۲] پژوهشکده علوم کاربردی، دانشگاه خوارزمی، کرج

چکیده: در این پژوهش، ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و مغناطیسی تک لایه **SiC** آلایش یافته با اتم‌های منگنز مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج مربوط به ویژگی الکتریکی نشان می‌دهد که تک لایه **SiC** خالص، بر خلاف گرافین خالص، دارای گاف نواری قابل توجهی است، که باعث کابرد آن در صنعت الکترونیک می‌شود. پایدارترین ساختار با در نظر گرفتن اتم‌های منگنز بر ر اتم‌های کربن، اتم سیلیسیم و مرکز شش ضلعی با انجام واهلش کامل موقعیت‌های اتمی و پارامترهای شبکه، مشخص شد. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که پایدارترین حالت این ترکیب برای حالتی است که اتم‌های منگنز روی اتم‌های کربن قرار می‌گیرند. بنابراین، برای این ساختار، ویژگی الکترونی و مغناطیسی محاسبه شده است. نمودارهای چگالی حالات جزئی و کلی بیانگر وجود ویژگی نیم–فلزی در این ترکیب است. در نتیجه از این تک لایه می‌توان در ساخت قطعات نانواسپینترونیکی و شیرهای اسپینی استفاده کرد. همچنین در این مقاله تلاش شده که با رسم نمودارهای ساختار نواری وابسته به اسپین و مقایسه آن با چگالی حالات جزئی، سازوکار ایجاد خاصیت نیم–فلزی در این مواد مورد بررسی قرار گیرد.

واژگان کلیدی: نانو اسپینترونیک؛ تک لایه‌های اتمی؛ فرومغناطیس‌های نیم‌فلزی؛ ساختار نواری

mrostami@khu.ac.ir

۱- مقدمه

نانواسپینترونیک که عبارت است از نقش اسپین الکترون در قطعات حالت جامد با ابعاد نانو برای کاربردهایی مانند هدهای خواندن و نوشتن و ذخیره اطلاعات، سهم قابل توجهی در پیشرفت فناوری اطلاعات داشته است [۱]. از جمله این قطعات نانو اسپینترونیکی می توان به مقاومت‌های مغناطیسی بزرگ اشاره کرد که امروزه در هدهای خواندن و نوشتن موجود در دیسک‌های سخت مورد استفاده قرار می‌گیرند و از آن‌ها به عنوان نخستین کاربرد نانو فناوری در صنعت یاد می‌شود. در واقع این قطعات سنگ بنای توسعه پردازش اطلاعات کوانتومی است [۲و۳]. این موضوع از این حقیقت ناشی می‌شود که استفاده از اسپین الکترون به عنوان یک حامل اطلاعات کوانتومی، باعث ایجاد ابزارهایی با ابعاد کوچک برای توسعه قطعاتی با سرعت بالا و مصرف کم انرژی می‌شود [۲و۴].

یکی از اهداف و چالش های مهم در دستگاه‌های نانواسپینترونیکی تولید جریان های قطبیده اسپینی است. از جمله راه‌های قابل اطمینان برای تولید جریان‌های قطبیده اسپینی استفاده از نیم–فلزات می‌باشد. این نوع از مواد دارای ویژگی الکترونی متفاوتی برای حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین هستند، به طوری که برای یکی از حالات اسپینی، رفتار فلزی از

تاریخ دریافت : ۱۳۹۸/۰۳/۲۶
تاریخ پذیرش : ۱۳۹۸/۰۸/۲۵

خود نشان می‌دهند و برای حالت دیگر مانند نیم‌رسانا رفتار می‌کنند [۵].

تاکنون مواد بسیاری همچون آلیاژهای نیم–هویسلر و اکسیدهای فلزی در حالت توده‌ای رفتار نیم–فلزی را از خود نشان داده‌اند. اما اکثر این مواد در تماس با بسترهای نیم–رسانا، همچون بسترهای سیلیسیمی، در اثر برهمکنش‌های الکترونی خاصیت نیم‌فلزی خود را از دست می‌دهند.

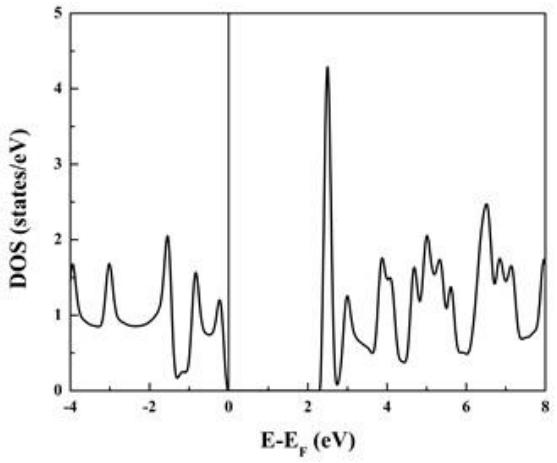
در سال ۲۰۰۴ با کشف ماده گرافین [۶] ،نازک ترین ماده دوبعدی، مسیر جدیدی در علم مواد به روی دانشمندان گشوده شد. ویژگی غیرمعمول این ماده مانند وجود حامل‌های الکترون با تحرک پذیری بالا در دمای اتاق [۷] باعث شده است که در ساخت ترازیستورها ماده ایده‌آلی به شمار برود و در نتیجه توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است. اما تحقیقات بر کاربرد های گرافین به دلیل عدم وجود گاف نواری و تطابق نداشتن این ماده با وسایل الکترونیکی با پایه سیلیکون چالش برانگیز بوده است. بنابراین علاوه برتحقیقات بر روی کاربرد گرافین خالص، ساختار های گرافین–مانند نیز مورد توجه قرارگرفته اند با این انتظار که این مواد با وسایل الکترونیکی که امروزه مورد استفاده است تطابق بیشتری پیدا کنند. تا به امروز مواد دوبعدی گرافین–مانند زیادی همچون ژرمانن [۸] و یا TMDها [۹–۱۳] ، با فرمول شیمیایی $MX2$ (M: فلزواسطه، X: کالکوجنید) که مهم‌ترین آنها ترکیبات MoS_2 ،WS_2 هستند، به صورت تجربی سنتز شده اند و به همین دلیل محققین بسیاری نیز بر روی اینگونه مواد تحقیق کرده‌اند [۱۴و۱۵]. اما هیچ یک دارای ویژگی فیزیکی و شیمیایی دلخواه برای استفاده در صنعت نبوده‌اند. تحقیقات دانشمندان برروی مواد دوبعدی به دلیل ویژگی این مواد در حفظ خاصیت نیم–فلزی، در حالتی است که روی بستر قرار می‌گیرند. چراکه این مواد غالبا از طریق پیوندهای واندروالسی، با مواد دوبعدی دیگر و همچنین بسترها برهمکنش می‌کنند [۱۶]. مواد دوبعدی دارای تحرک پذیری بسیار بالایی هستند، و از این رو، دارای عملکرد مناسبی در قطعات نانو اسپیترونیکی هستند [۲۰–۱۷]. افزون بر این، مواد با ابعاد کوچک و با مقیاس نانو دارای کارایی بهتر در قطعات نانو اسپینترونیکی هستند [۱۷].

اما به منظور آنکه این مواد دوبعدی دارای ویژگی‌هایی برای کاربرد در قطعات نانو اسپینترونیکی شوند، معمولا ویژگی‌های الکترونی و مغناطیسی آنها را از طریق قرار دادن عناصر واسطه مغناطیسی تغییر می‌دهند چراکه اکثر مواد دوبعدی خالص، غیرمغناطیسی بوده و دارای خاصیت شبه‌فلزی یا نیم‌رسانایی هستند. پس، تحقیقات گسترده‌ای در زمینه نحوه تغییر ویژگی مواد دوبعدی با قرار دادن عناصر واسطه بر آنها در حال انجام است [۲۱].

با توجه به تمامی این موارد، در این پژوهش به بررسی ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و مغناطیسی تک‌لایه SiC خالص و حالت آلایش یافته با اتم‌های منگنز، پرداخته‌ایم. سازکار فیزیکی این ماده نیز درنظر گرفته شده است، و در نهایت امکان کاربرد آن در ساخت قطعات نانو اسپینترونیکی مورد بررسی قرار گرفته است.

۲– نحوه انجام محاسبات

محاسبات این پژوهش در قالب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم–اسپرسو انجام شده است [۲۲]. از روش شبه پتانسیل برای شبیه‌سازی برهمکنش های الکترون–یون و یون–یون، و همچنین از تقریب شیب تعمیم یافته برای برهمکنش‌های تبادلی–همبستگی استفاده شده است. برای نمونه‌گیری منطقه اول بریلوئن از روش منخورست–پک و با مش بندی ۷×۷×۱ استفاده شده است. حد همگرایی انرژی و نیرو نیز برابر با $1\times10^{-4}\ au$ در نظر گرفته شده‌است.



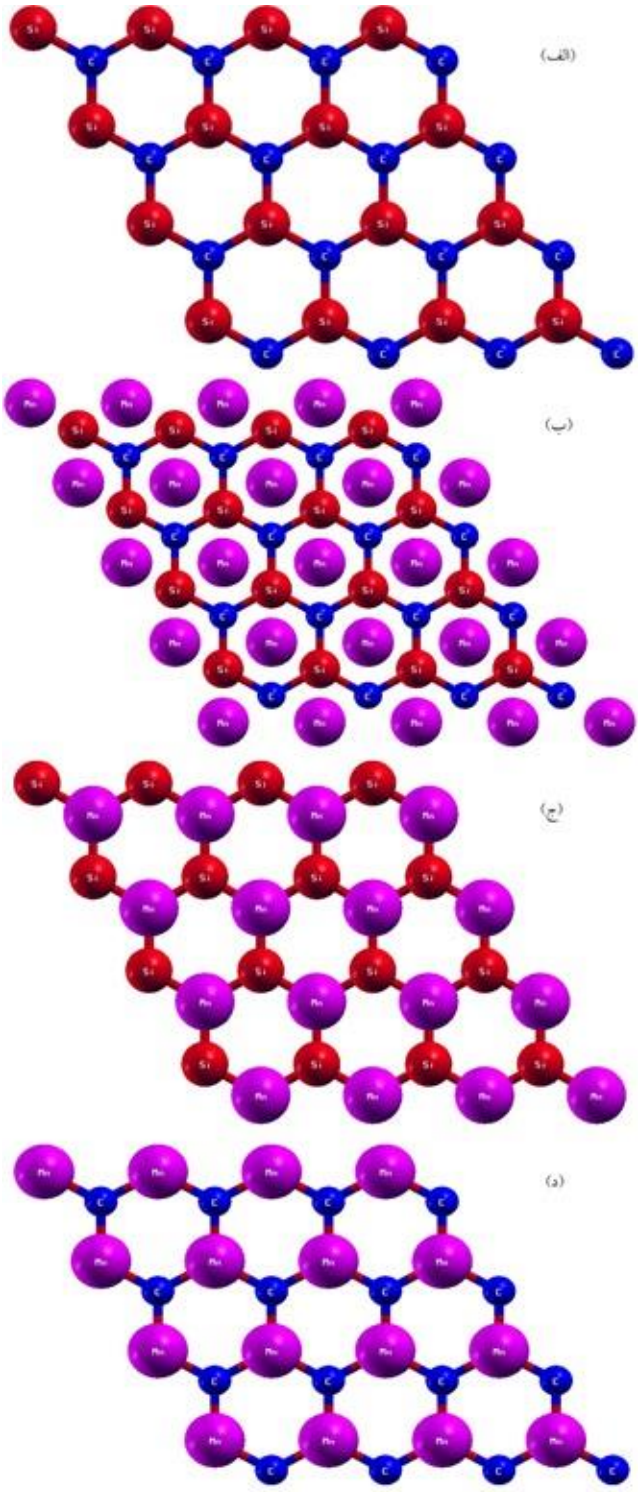
شکل۱ : نمودار چگالی حالات مربوط به تک‌لایه SiC خالص.

۳- نتایج و بحث

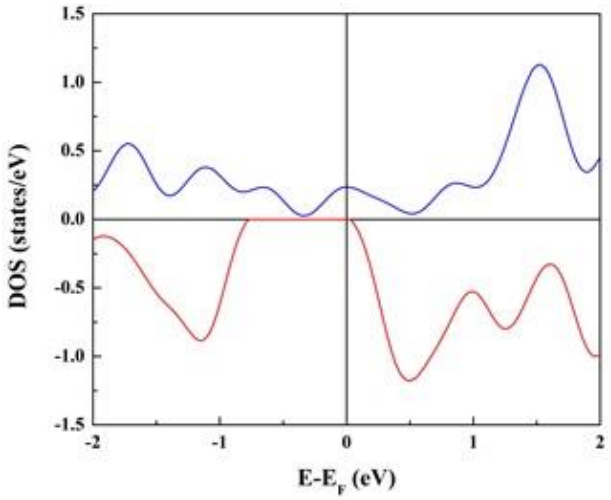
یکی از نقص‌های گرافین با وجود تمام مزایای آن از جمله تحرک پذیری بالا و ابعاد کوچک، عدم وجود گاف نواری است، که باعث کاربرد کم آن در برخی از قطعات الکترونیکی می‌شود [۲۳و۲۴]. لذا دانشمندان به دنبال موادی تک‌لایه با گاف غیر صفر هستند. در واقع، نشان داده شده است که گاف نواری بین ۱ تا ۲ الکترون–ولت برای کاربردهای عملی بسیار مناسب است [۲۵و۲۶]. لذا در ابتدا محاسبات مربوط به تک‌لایه خالص SiC انجام شد. شکل ۱ نمودار چگالی حالات مربوط به تک‌لایه خالص SiC را نشان می‌دهد. همانطور که از این شکل مشخص است، این ماده نیمرسانایی با گاف نواری ۲/۳۴ الکترون–ولت است. همانطورکه پیشتر اشاره شد، گاف نواری مناسبی جهت کاربردهای الکترونیکی است.در ابتدا، پایدارترین ساختار با در نظر گرفتن موقعیت اتم‌های منگنز برروی اتم‌های کربن، اتم سیلیسیم و مرکز شش ضلعی با انجام واهلش کامل موقعیت‌های اتمی و پارامترهای شبکه، مشخص شد. شکل ۲ این سه ساختار و همچنین ساختار تک‌لایه خالص سیلیسیم کرباید را نشان می‌دهد. با توجه به نتیج محاسبات، پایدارترین حالت این ترکیب برای حالتی است که اتم‌های منگنز برروی اتم‌های کربن قرار می-گیرند. بنابراین برای این ساختار، ویژگی الکترونی و مغناطیسی محاسبه شده است.

جدول ۱: نحوه اشغال اوربیتال‌های اتم‌های موجود در ترکیب برای حالات اسپینی بالا و پایین و قطبش حاصل از آن.

اتم	منگنز	کربن	سیلیسیم
s بالا	۰/۲۹۱۱	۰/۳۶۸۰	۰/۲۵۴۱
s پایین	۰/۲۳۸۷	۰/۳۶۶۵	۰/۲۵۶۰
p بالا	۰/۶۴۰۱	۱/۶۲۲۲	۰/۸۰۶۶
p پایین	۰/۵۴۰۴	۱/۶۱۱۲	۰/۸۳۱۰
d بالا	۴/۹۳۷۰	۰/۴۰۸۲	۰/۶۵۵۷
d پایین	۰/۰۶۱۵	۰/۴۱۲۳	۰/۶۵۶۲
قطبش	۵/۰۴۸۱	۰/۰۰۸۴	−۰/۰۲۶۵



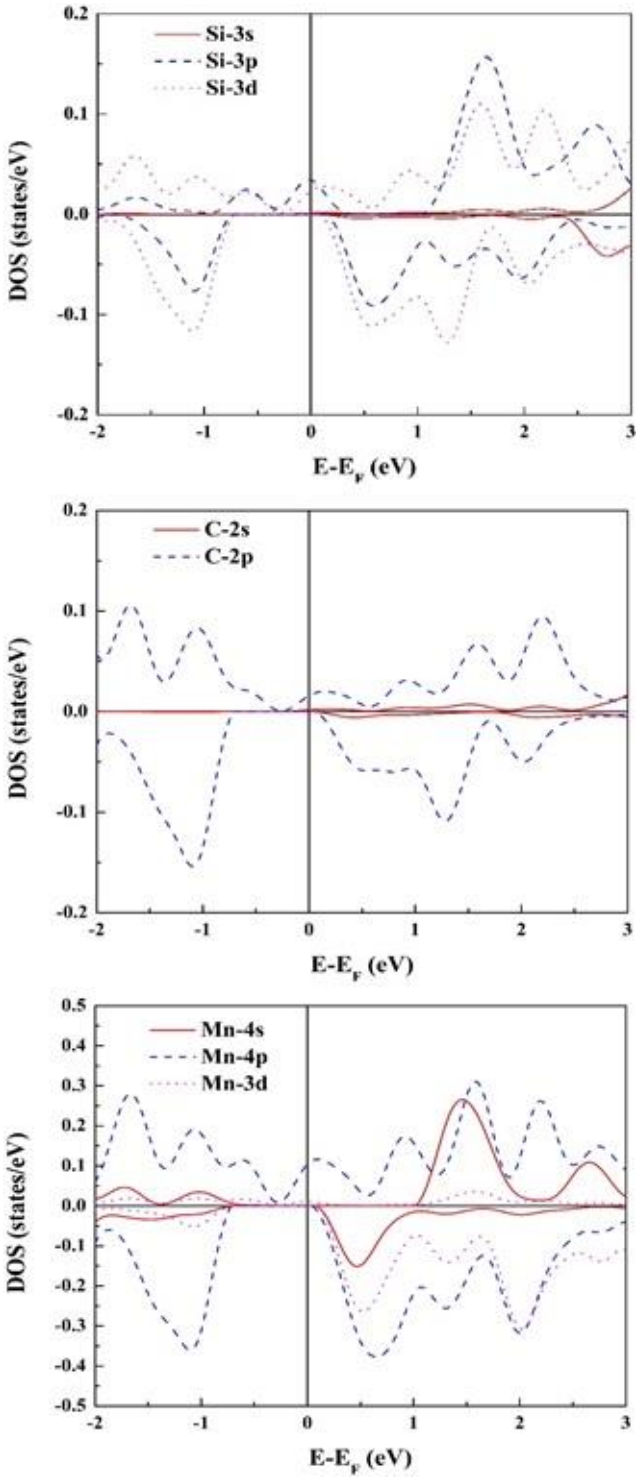
شکل۲ : ساختارهای بلوری (الف) تک‌لایه‌ی SiC خالص و حالت‌هایی که لایه‌ی منگنز برروی (ب) مرکز شش گوشی، (ج) اتم کربن و (د) اتم سیلیسیم قرار میگیرد.



شکل۳ : نمودار چگالی حالات مربوط به حالتی که اتم‌های منگنز برروی اتم‌های کربن در تک‌لایه سیلیسیم کرباید قرار می‌گیرند.

شکل ۳ نمودار چگالی حالات کلی مربوط به این ترکیب را نشان می‌دهد. همانطور که از شکل مشخص است، در سطح فرمی تنها حالت‌های اسپین بالا وجود دارد، و لذا این ماده دارای خاصیت نیم–فلزی می‌باشد. شکل ۴ نمودارهای چگالی حالات جزئی و شکل ۵ نمودارهای ساختار نواری وابسته به اسپین نمونه‌ها را نشان می‌دهد. با توجه به این شکل‌ها نیز وجود خاصیت نیم–فلزی در این مواد تایید می‌شود.

با توجه به شکل ۶، که مربوط به نمودار چگالی الکترونی ماده مورد بررسی است، الکترونگاتیوی بالاتر اتم کربن باعث شده است که بخشی از بار اتم‌های منگنز و سیلیسیم به اتم کربن منتقل شود. همچنین با توجه به جدول ۱ بخش اعظمی از قطبش نهایی مربوط به اتم‌های منگنز است و قطبش اتم‌های سیلیسیوم مرکزی بسیار کوچک است. میدان مغناطیسی ناشی از اتم‌های منگنز، به دلیل قطبش بالای آنها، باعث تفاوت در انرژی اوربیتال‌های p کربن و اوربیتال‌های p و d اتم سیلیسیم شده - است. به نحوی که تحت تاثیر این میدان مغناطیسی، الکترون-های با اسپین پایین در انرژی‌های بالاتری نسبت به الکترون‌های با اسپین بالا قرار دارند و در نهایت سطح فرمی در نوار رسانش، برای اسپین‌های بالا و در گاف، برای اسپین‌های پایین قرار می-گیرد که این موضوع باعث ایجاد خاصیت نیم–فلزی در این ترکیب شده است.



شکل ۴: نمودار چگالی حالات اتمی مربوط به اتم های سیلیسیوم، کربن و منگنز در تک لایه SiC آلایش یافته با اتم های منگنز.

۴- نتیجه‌گیری

امروزه مواد دوبعدی با توجه به سازگاری بیشتر با بسترهای نیم-رسانا به دلیل وجود پیوندهای واندروالسی بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. در این تحقیق، تک‌لایه SiC آلایش یافته با اتم‌های منگنز مورد بررسی قرار گرفته است. با بررسی انرژی این ترکیب برای مکان‌های گوناگون منگنز، مشخص شد که در حالتی که اتم منگنز بر روی اتم کربن قرار می‌گیرد، سیستم در انرژی کمتری می‌باشد و لذا در این ساختار پایدارتر است. نتایج مربوط به نمودارهای چگالی حالات جزئی و کلی بیانگر آن است که این ترکیب دارای خاصیت نیم–فلزی است. به همین دلیل از این مواد می‌توان در زمینه تولید قطعات نانو اسپینترونیکی استفاده کرد.

۵- مراجع

[1] G. Torosyan, S. Keller, L. Scheuer, R. Beigang, E.T. Papaioannou, “Optimized Spintronic Terahertz Emitters Based on Epitaxial Grown Fe/Pt Layer Structures”, Scientific Reports, 8, 1311-1318, 2018.

[2] H. Cheng, J. Zhou, M. Yang, L. Shen, J. Linghu, Q. Wu, P. Qian, Y.P. Feng, “Robust two-dimensional bipolar magnetic semiconductors by defect engineering”, J. Mater. Chem. C, 6, 8435–8443, 2018.

[3] X. Li, J. Yang, ”First-principles design of spintronics materials”, Natl. Sci. Rev., 3, 365–381, 2016.

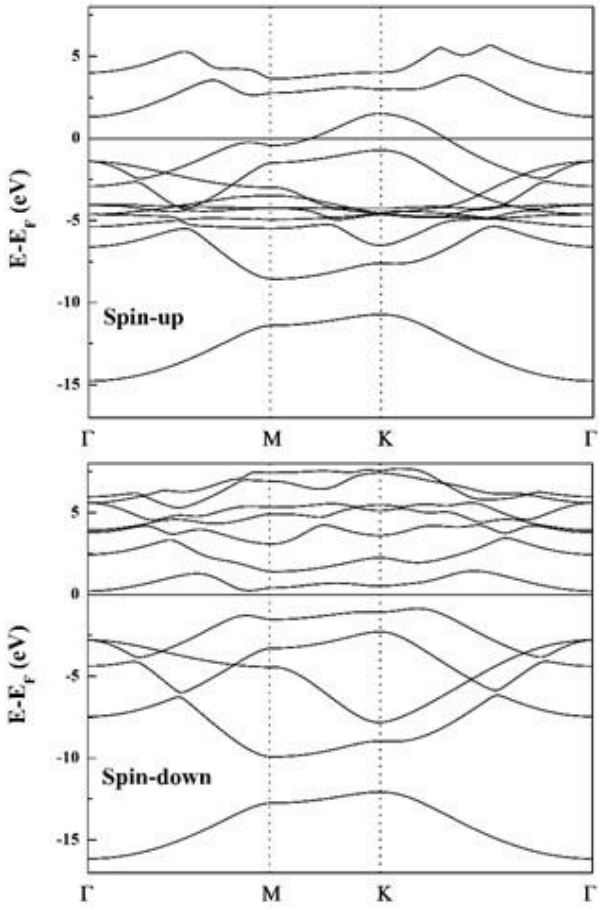
[4] R. Jansen, “Silicon spintronics”, Nat. Mater., 11, 400-415, 2012.

[5] M. Rostami, “Half-metallic property of the bulk and (001) surfaces of MNaCs (M=P, As) half-Heusler alloys: A density functional theory approach”, Surface Science, 674, 103-114, 2018.

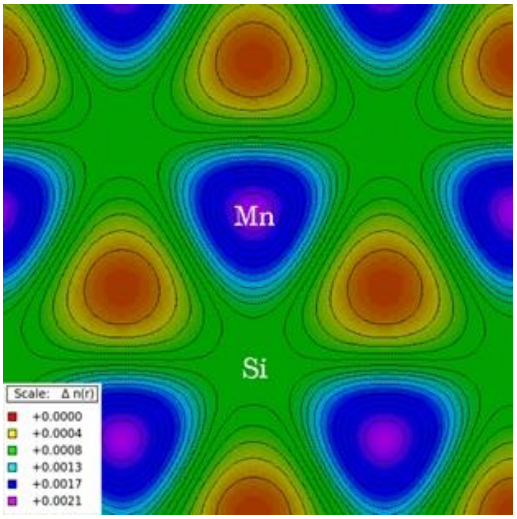
[6] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, “Electric feld eff ect in atomically thin carbon flms”, Science, 306, 666–669, 2004.

[7] X. Du, I. Skachko, A. Barker, E.Y. Andrei, “Approaching ballistic transport in suspended graphene”, Nat. Nanotechnol., 3, 491, 2008.

[8] S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Aktürk, H. Şahin, S. Ciraci,”Two-and one-dimensional



شکل۵ : نمودارهای ساختار نواری وابسته به اسپین.



شکل۶ : نمودار چگالی الکترونی تک لایه SiC آلایش یافته با اتم های منگنز در حالتی که اتم‌های منگنز بر روی اتم‌های کربن قرار گرفته اند.

honeycomb structures of silicon and germanium", Phys. Rev. Lett., 102, 236804, 2009.
[9] Y. Shi, H. Li, L.-J. Li, "Recent advances in controlled synthesis of two-dimensional transition metal dichalcogenides via vapour deposition techniques", Chem. Soc. Rev., 44, 2744–2756, 2015.
[10] Z. Yu, Z.Y. Ong, S. Li, J.-B. Xu, G. Zhang, Y.W. Zhang, Y. Shi, X. Wang, "Analyzing the carrier mobility in transition-metal dichalcogenide MoS_2 field-eff ect transistors", Adv. Funct. Mater, 27, 1604093-1604099, 2017.
[11] X. Wei, Y. Wang, Y. Shen, G. Xie, H. Xiao, J. Zhong, G. Zhang, "Phonon thermal conductivity of monolayer MoS_2: a comparison with single layer graphene", Appl. Phys. Lett., 105, 103902, 2014 .
[12] Y. Cai, H. Zhou, G. Zhang, Y.-W. Zhang, "Modulating carrier density and transport properties of MoS_2 by organic molecular doping and defect engineering", Chem. Mater., 28, 8611–8621, 2016.
[13] X. Liu, G. Zhang, Y.-W. Zhang, "Thermal conduction across the one-dimensional interface between a MoS2 monolayer and metal electrode", Nano Res., 9, 2372–2383, 2016.
[14] Q.H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J.N. Coleman, M.S. Strano, "Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides", Nat. Nanotechnol., 7, 699, 2012.
[15] H.-P. Komsa, J. Kotakoski, S. Kurasch, O. Lehtinen, U. Kaiser, A.V. Krasheninnikov, "Two-dimensional transition metal dichalcogenides under electron irradiation: defect production and doping", Phys. Rev. Lett., 109, 035503-035512, 2012.
[16] D.L. Duong, S.J. Yun, Y.H. Lee; "van der Waals Layered Materials: Opportunities and Challenges", ACS Nano, 11, 11803-11830, 2017.
[17]M.Zeng,Y.Xiao,J.Liu,K.Yang,L.Fu,
"Exploring two-dimensional materials toward the next-generation circuits: from monomer design to assembly control", Chem. Rev., 118, 6236–6296, 2018.
[18] K. Kalantar-zadeh, J.Z. Ou, T. Daeneke, A. Mitchell, T. Sasaki, M.S. Fuhrer, "Two dimensional and layered transition metal oxides", Appl. Mater. Today, 5, 73–89, 2016.
[19] H. Tao, Y. Gao, N. Talreja, F. Guo, J. Texter, C. Yan, Z. Sun, "Two-dimensional nanosheets for electrocatalysis in energy generation and conversion", J. Mater. Chem. A, 5, 7257–7284, 2017.
[20] B. Xu, H. Xiang, J. Yin, Y. Xia, Z. Liu, "A two-dimensional tetragonal yttrium nitride monolayer: a ferroelastic semiconductor with switchable anisotropic properties", Nanoscale, 10, 215–221, 2018.
[21] Z. Xu, Y. Li, Z. Liu, S. Liu, "Electronic and magnetic behaviors of B, N, and 3d transition metal substitutions in germanium carbide monolayer", Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 541, 799-807, 2018.
[22] P. Giannozzi, et al., "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials", Journal of Physics: Condensed Matter, 21, 395502-395512, 2009.
[23] Z. Xu, Y. Li, Z. Liu, C. Li, "Dependence of electronic and optical properties of multilayer SiC and GeC on stacking sequence and external electric field", Phys. E Low dimensional Syst. Nanostruct., 79, 198–205, 2016.
[24] W. Choi, N. Choudhary, G.H. Han, J. Park, D. Akinwande, Y.H. Lee, "Recent development of two-dimensional transition metal dichalcogenides and their applications", Mater. Today, 20, 116–130, 2017.

Nanomeghyas
www.nanomeghyas.ir
نانومقیاس

The Investigation of the Half-metallic Properties of Mn-doped SiC Monolayer for Nanospintronic Applications

M. Rostami[1,2*], M. Afkani[1], M. Abedi[1], P. Aman Torkaman[1]

[1] Faculty of Physics, Kharazmi University, Tehran
[2] Applied Science Research Center, Kharazmi University, Karaj, Iran

Abstract: In this study, the structural, electronic and magnetic properties of silicon carbide monolayer coated with manganese have been investigated. The results of the electrical properties show that, in contrast to graphene, the pristine SiC monolayer has a sizeable band-gap which makes it suitable for application in electronics industry. The most stable structure was identified by considering manganese atoms on carbon atoms, silicon atoms, and hexagon centers with doing the complete relaxations of atomic positions and cell parameters. The results of the calculations show that the most stable state of this compound is related to the case when manganese atoms are deposited on carbon atoms. Therefore, the electronic and magnetic properties are calculated for this structure. The partial and total density of states indicate the existence of half-metallicity in this compound. As a result, this monolayer can be used to make Nano spintronic components and spin valves. Also, in this paper, we tried to study the mechanism for the formation of half-metallic by plotting spin-dependent band structure diagrams and comparing them with the partial density of states.

Keywords: Nano spintronic; Atomic monolayers; Half-metallic ferromagnets, Band structure

*Correspondent Author Email: *mrostami@khu.ac.ir*