

«مقاله پژوهشی»

بررسی خواص ساختاری و الکترونی و مغناطیسی نانولوله آیندیم فسفید آلاییده با کروم،
کبالت، مس و روی براساس نظریه تابعی چگالی

خدارحم قندی¹، سید مهدی بیضایی^{2*}

1. دکتری، گروه فیزیک، دانشگاه ولی عصر (عج)، رفسنجان، ایران

2. دانشیار، گروه فیزیک، دانشگاه ولی عصر (عج)، رفسنجان، ایران

تاریخ دریافت: 1401/10/20 تاریخ پذیرش: 1401/11/29

Investigating the Structural and Electronic and Magnetic Properties of
Indium Phosphide Nanotube Doped with Cr, Co, Cu and Zn Using Density
Functional Theory

Kh. Ghandi¹, S.M. Baizae^{*2}

1. Ph.D., Department of Physics, Vali-e-Asr University, Rafsanjan, Iran

1. Associate Professor, Department of Physics, Vali-e-Asr University, Rafsanjan, Iran

Received: 2023/01/10

Accepted: 2023/02/18

Abstract

In this research, the structural features, electronic and magnetic properties of armchair (5, 5) indium phosphide nanotube doped with Cr, Co, Cu and Zn have been investigated using first principles calculations. Calculations were performed by the PWscf code using a density functional theory. The metals Cr, Co, Cu and Zn were replaced by P atomic position in this nanotube. The optimal angles between them and the bond length were calculated. The calculations illustrate that there is a structural distortion around Cr and Co impurities, and also show that the magnetic moments are consistent with the predicted value of Hund's rule. Furthermore, the observations revealed that the indium phosphide nanotube doped with Cr and Co is a ferromagnetic metal, while the indium phosphide nanotube doped with Cu and Zn is a non-magnetic metal. The present results predict that indium phosphide nanotubes doped with Cr and Co are useful for industrial applications in Nano magnets. To identify the most stable configuration, the binding energy and the cohesive energy were calculated for all compounds. Finally, our results show that the InP nanotube doped with Cobalt is more stable than others.

Keywords

Nanotube, Indium Phosphide, The Structural Properties, Density Functional Theory, Nano Magnets

چکیده

در این پژوهش به بررسی ویژگی‌های ساختاری، خواص الکترونیکی و مغناطیسی نانولوله آیندیم فسفید (5, 5) آلاییده با کروم، کبالت، مس و روی با استفاده از محاسبات اصول اول پرداخته شده است. محاسبات توسط کد PWscf با استفاده از تئوری تابعی چگالی انجام شد. فلزات کروم، کبالت، مس و روی با موقعیت فسفید در این نانولوله جایگزین شده‌اند. زوایای بهینه بین آنها و طول پیوند محاسبه شد. نتایج نشان داد که یک اعوجاج ساختاری در اطراف ناخالصی‌های کروم و کبالت، وجود دارد و تغییرات گشتاور مغناطیسی با مقدار پیش‌بینی شده قانون هوند مطابقت دارد. مشاهدات نشان داد که نانولوله آیندیم فسفید آلاییده با کروم و کبالت، فلز فرومغناطیسی است، در حالی که نانولوله آیندیم فسفید آلاییده با مس و روی، یک فلز غیر مغناطیسی است. نتایج حاضر پیش‌بینی می‌کنند که نانولوله آیندیم فسفید آلاییده با کروم، کبالت، برای کاربردهای صنعتی در نانو مغناطیس‌ها مفید هستند. برای شناسایی پایدارترین پیکربندی، انرژی بستگی و انرژی هم‌دوستی برای همه ترکیبات محاسبه شد. در نهایت نانولوله آیندیم فسفید (5, 5) آلاییده با کروم، کبالت پایدارتر از سایرین بود.

واژه‌های کلیدی

نانولوله، آیندیم فسفید، خواص ساختاری، تئوری تابعی چگالی، نانومغناطیس‌ها

مقدمه

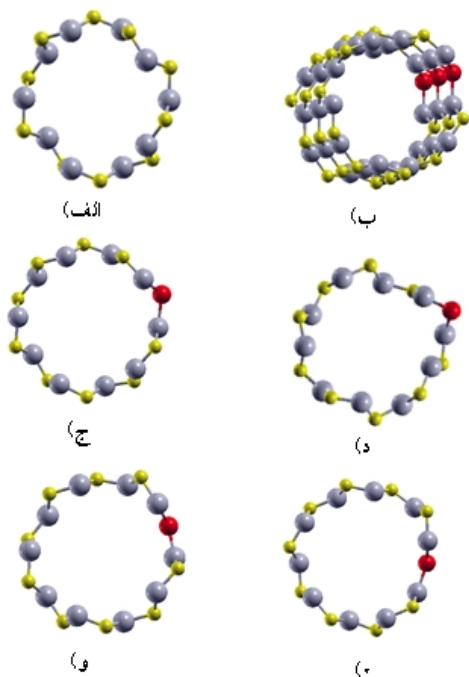
در سال‌های اخیر، نانولوله‌ها و نانوسیم‌ها به دلیل پتانسیلی که در کاربردهای نانو دستگاه‌های پیشرفته دارند، مورد توجه ویژه قرار گرفته‌اند [1]. اسپیترونیک حوزه نسبتاً جدیدی در سطح الکترونیک است که بر اساس درجه آزادی اسپین حامل‌ها (الکترون حفره) به اضافه بار الکتریکی آنها است. هدف اسپیترونیک فهم و درک برهم‌کنش اسپین و محیط حالت جامد اطرافش به منظور ساخت و طراحی قطعات مفید بر اساس این دانش به دست آمده است [2]. نانولوله‌ها با خواص منحصر به فرد الکترونیکی، نوری و مکانیکی خود، جایگزین مناسبی برای اکثر مواد مورد استفاده در صنایع هستند. هنگامی که کسری از اتم‌های یک نیمه‌رسانای غیر مغناطیسی با یون‌های مغناطیسی جایگزین می‌شود، اسپین اتمی این ناخالصی‌های مغناطیسی با برهم‌کنش با حامل‌های شبکه، خواص مغناطیسی را در ماده ایجاد می‌کند، در نتیجه این ماده هم خاصیت نیمه‌رسانا و هم خاصیت مغناطیسی دارد که به آن نیمه‌رسانای مغناطیسی رقیق¹ (DMS) می‌گویند و معمولاً از طریق جایگزین اتم‌ها یک نیمه‌رسانای شکاف باند وسیع مانند III-V یا II-VI با ناخالصی‌های یون مغناطیسی مانند آهن، کروم، نیکل، منگنز، یا کبالت (دارای اسپین خالص) به دست می‌آیند [3-11]. کشف نیمه‌رساناهای مغناطیسی رقیق منجر به فعالیت‌های نظری و تجربی فراوانی شده است. آنها مواد مناسبی برای کاربردهای اسپیترونیک هستند و در حالی که دستگاه‌های نیمه‌رسانای سنتی از الکترون‌های s و p و دستگاه‌های مغناطیسی معمولی از الکترون‌های d استفاده می‌کنند، دستگاه‌های اسپیترونیک مبتنی بر مواد نیمه‌رساناهای مغناطیسی رقیق برای استفاده از الکترون‌های d ناخالصی‌های فلزات واسطه و الکترون‌های s و p نیمه‌رساناهای میزبان برای انجام فعالیت مغناطیسی خود پیشنهاد می‌شوند [12-14]. اگرچه تا کنون بسیاری از مواد نیمه‌رساناهای مغناطیسی رقیق گزارش شده است، [15، 16] اما هنوز هم یافتن مواد جدید این نیمه‌رساناها، به ویژه در مواد نانو مقیاس، بسیار ضروری است؛ زیرا نانو ساختارهای مغناطیسی به دلیل کاربردهای جالبی در بسیاری از زمینه‌ها،

از نظر فناوری و علمی مواد جذابی به عنوان اسپیترونیک، ثبت مغناطیسی و مغناطیس دائمی هستند [14]. نانولوله‌های تک جداره، در مقایسه با نیمه‌رساناهای مرکب III-V و II-VI، فقط دو سطح دارند که ناخالصی‌های بین بافتی را می‌توان راحت‌تر حذف کرد. همچنین، جایگزینی کاتیون‌ها و آنیون‌ها با اتم‌های واسطه را می‌توان با استفاده از تکنیک جایگزینی اتم به اتم توسط میکروسکوپ تونل‌زنی روشی با ولتاژ بایاس کنترل شده پیشنهاد شده توسط کیچن و همکاران، به راحتی در آزمایشات یافت [17]. بنابراین انتظار می‌رود نانولوله‌های III-V آلیاژ شده با عناصر واسطه در پیشرفت دستگاه‌های نیمه‌رسانای اسپیترونیک در مقیاس نانو به دلیل ویژگی‌های منحصر به فردشان در قطبش اسپین الکترون، حیاتی باشند. نیمه‌رساناهای III-V به طور گسترده در زمینه‌های میکرو و الکترونیک نوری و همچنین دستگاه‌های الکترونیکی با سرعت بالا استفاده شده‌اند [18]. [19]. ایندیم فسفید یک ماده نیمه‌رسانای III-V جالب است که دارای یک شکاف باند مستقیم $1/35\text{eV}$ در دمای اتاق است و مطابق با طول موج نزدیک به مادون قرمز 923 نانومتر می‌تواند به عنوان بستری برای رشد، هم‌پایه سایر نیمه‌رساناهای III-V مورد استفاده قرار گیرد [20-22]. در طول چند سال گذشته، ایندیم فسفید به دلیل خواص فیزیکی منحصر به فرد خود مانند پایداری دمایی خوب، فاصله باند مستقیم خوب، سرعت الکترون بالا، هدایت الکتریکی خوب، اتلاف گرما خوب و پاسخ فرکانس بالا توجه زیادی را به خود جلب کرده است [23-25]. دستگاه‌های نیمه‌رسانای مبتنی بر ایندیم فسفید یک بعدی با ویژگی‌های اپتوالکترونیکی و الکترونیکی سودمند، میدانی را نشان می‌دهند که به سرعت ظاهر می‌شود؛ زیرا خواص جالب متعددی مانند انتقال فوق‌العاده الکترون و اثرات کوانتومی دارند. این باعث می‌شود که این نانولوله‌ها و نانوسیم‌های جایگزین‌های بسیار مناسبی برای ساخت مدارهای یکپارچه نانویی پایدار شوند [26]. در این مقاله خواص الکترونیکی، مغناطیسی و ساختاری نانولوله ایندیم فسفید (InPNT^2) آلیاژ شده با کروم، کبالت، مس و روی با استفاده از رویکرد پتانسیل موج تقویت شده (PAW) برای

2. نانولوله‌ی ایندیم فسفید

1. Dilute Magnetic Semiconductor

کربنی ساخت. ابتدا پارامترهای مهم شامل تعداد مش‌های منطقه اول بریلوئن (تعداد نقاط k)، انرژی قطع برای تابع موج و پارامتر شبکه بهینه شده است؛ زیرا این پارامترها باید به نحوی انتخاب شوند که حجم محاسبات سنگین نشود در ضمن محاسبات از دقت کافی برخوردار باشند. سپس ساختار نانولوله دسته‌صندلی (5,5) برای ایندیم فسفید خالص و آلیایده ابتدا بهینه شده است. طول پیوند In-P محاسبه شده قطر متوسط و زاویه پیوند متوسط (P-In-P) به ترتیب حدود 2/52، 11/49 انگستروم و 119/30 درجه که مطابق با مقادیر گزارش شده قبلی هستند [30-33]. شکل 1 مدل‌های ساختاری بهینه‌سازی شده نانولوله ایندیم فسفید خالص، ابر یاخته و نانولوله‌های ایندیم فسفید آلیایده شده با کروم، کبالت، مس و روی را نشان می‌دهد که یون فلز عناصر واسطه که با یک جایگزای آتیونی (جای فسفید) در یک نانولوله ایندیم فسفید خالص (5,5) آلیایده شده است به طوری که سه الکترون به پیوندهای آویزان کاتیونی (ایندیم)



شکل 1. ساختار بهینه شده نانولوله (الف) ایندیم فسفید خالص، (ب) سلول یاخته واحد و نانولوله ایندیم فسفید آلیایده شده با (ج) کروم، (د) کبالت (و) مس و (ه) روی. کره‌های خاکستری، زرد و قرمز به ترتیب نشان دهنده اتم‌های ایندیم، فسفید و عناصر واسطه (کروم، کبالت، مس و روی) هستند.

تئوری چگالی (DFT) در تقریب گرادیان تعمیم یافته [27(GGA)] در بسته کوانتوم اسپرسو مورد بررسی قرار گرفته است. علیرغم مطالعات مختلف بر روی نانولوله ایندیم فسفید، هیچ مطالعه قبلی بر روی خواص نانولوله ایندیم فسفید آلیایده با کروم، کبالت، مس و روی انجام نشده است. بنابراین هدف از این تحقیق بررسی خواص مغناطیسی، الکترونیکی و ساختاری نانولوله ایندیم فسفید آلیایده با کروم، کبالت، مس و روی است.

روش انجام محاسبات

تمام محاسبات برای نانولوله ایندیم فسفید حاضر با استفاده از تئوری تابعی چگالی (DFT) در میدان خودسازگار و از بسته محاسباتی ESPRESSO اجرا شد. روش DFT روشی کارآمد برای مطالعه چگالی حالت‌ها، ساختار نواری و ضریب انتقال نانوساختارها است که در آن کد PWSCF استفاده شده، گزینه برتر برای سیستم نانولوله است [28]. در این روش برای امواج تخت گسترش یافته از روش تابع موج الکترون لایه ظرفیت و برای الکترون‌های هسته از روش شبه‌پتانسیل استفاده شده است. انرژی تبادل و همبستگی الکترون‌ها با استفاده از فرمول (PBE) از تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) تامین می‌شود. همه محاسبات برای یک نانولوله ایندیم فسفید دسته‌صندلی با بردار کایرال (5,5) در یک ابریاخته هگزاگونال با ضخامت 25 \AA انجام می‌شود. الکترون‌های d ، $2s^2 2p^3$ و $3s^2 3p^1$ به ترتیب به عنوان الکترون‌های ظرفیتی برای اتم‌های ناخالصی TM، P و In در نظر گرفته می‌شوند. برای کاهش هزینه عددی ادغام ناحیه بریلوئن با استفاده از طرح Monkhorst-Pack [29] برای یک شبکه $1 \times 1 \times 22$ از فضای k انجام شده است، علاوه بر این، انرژی قطع شده برای تابع موج و چگالی بار به ترتیب 90 Ry و 600 Ry است. بهینه‌سازی هندسه مولکول‌ها در نانولوله تا زمانی ادامه می‌یابد که تحمل همگرایی کل انرژی‌های دو مرحله متوالی آخر کمتر از 1 mRy و همچنین حداکثر نیروی وارد بر هر اتم کمتر از 1 mRy/Bohr باشد.

تحلیل و بررسی

نانولوله ایندیم فسفید را می‌توان با چرخاندن ورقه گرافن مانند ایندیم فسفید در جهت خاصی، شبیه به نانولوله‌های

کمک می‌کند.

در شکل 1 کره‌های خاکستری، زرد و قرمز به ترتیب نشان دهنده اتم‌های ایندیم، فسفید و عناصر واسطه (کروم، کبالت، مس و روی) هستند. این نتایج نشان می‌دهد که روش مورد استفاده در محاسبات برای توصیف ویژگی‌های نانولوله ایندیم فسفید آلیایده شده مناسب است. ما محاسباتی را بر روی نیمه هادی‌های مغناطیسی رقیق مبتنی بر نانولوله ایندیم فسفید با استفاده از یک سلول واحد $\text{In}_{10}(\text{TM})\text{P}_9$ برای نانولوله ایندیم فسفید آلیایده شده با TM^1 ارائه می‌کنیم که 5 درصد این سلول واحد مربوط به ناخالصی کروم، کبالت، مس و روی است.

مقایسه ساختار هندسی

در جدول 1 و 2 مشخصات ساختاری از جمله پارامتر شبکه، قطرهای کوچک و بزرگ (فاصله بین دو فسفید و یا یک فسفید و ناخالصی)، میانگین طول پیوند بین اتم ناخالصی و نزدیک‌ترین اتم‌های همسایه (ایندیم‌ها)، میانگین طول پیوند بین اتم ایندیم و فسفید و میانگین زاویه بین اتم ناخالصی و نزدیک‌ترین اتم‌های همسایه (ایندیم‌ها) مربوط به نانولوله ایندیم فسفید آلیاژ شده گزارش شده است. همان‌طور که از جدول مشخص است طول پیوند میانگین و پارامتر شبکه نانولوله آلیاژ شده افزایش یافته است. این افزایش به ازای ناخالصی‌های مختلف روند مشخصی دارد و با شعاع اتمی ناخالصی‌ها در حالت اتمی، نسبت مستقیم دارد که روندی افزایشی است.

در جدول 1 و 2 طول نزدیک‌ترین پیوند In-P به ناخالصی‌ها و همچنین طول پیوند ناخالصی‌ها با سه اتم ایندیم مجاور نیز گزارش شده است.

بر اساس داده‌های گزارش شده در جدول 1 و 2، به وضوح می‌توان نتیجه گرفت که میانگین طول پیوند In-P روند افزایشی دارد. از طرفی طول پیوندهای TM-In از طول پیوند In-P بزرگ‌تر است که مربوط به کوچک‌تر بودن شعاع اتمی فسفید در حالت اتمی نسبت به ناخالصی‌ها است. همچنین میانگین زاویه پیوند (P-TM-P) در اطراف این ناخالصی‌ها متفاوت است و بیشترین و کمترین

مقدار میانگین زاویه (In-Tm-In) برابر با 119/539 و 101/116 درجه که به ترتیب متعلق به روی و کبالت است.

جدول 1. مشخصات ساختاری نانولوله ایندیم فسفید آلیایده شده با کروم و کبالت

آلیایده با کروم		آلیایده با کبالت	
نمونه		نمونه	
4/265	4/27	پارامتر شبکه (Å)	
12/073	12/675	قطر کوچک (Å)	
13/034	12/912	قطر بزرگ (Å)	
2/537	2/830	میانگین طول پیوند TM-In (Å)	
2/518	2/516	میانگین طول پیوند In-P (Å)	
101/116	110/965	میانگین زاویه In-TM-In	

در شکل 1 مشاهده می‌شود که ناخالصی‌های مس و روی در این نانولوله‌ها به سمت داخل در حالی که ناخالصی‌های کروم و کبالت به سمت بیرون تمایل دارند و همچنین سطح مقطع نانولوله‌های آلیایده با کروم، کبالت، مس و روی به بیضی نزدیک شده‌اند که اندازه قطر کوچک (فاصله بین فسفید و ناخالصی‌های کروم و کبالت) و قطر بزرگ (فاصله بین فسفید و ناخالصی‌های مس و روی) آنها در جدول گزارش شده است. این نتایج نشان می‌دهد که بدیهی است در اطراف ناخالصی‌های کروم، کبالت، مس و روی اعوجاج وجود دارد. بنابراین ساختار هندسی به دلیل اعوجاج مشاهده شده در اطراف این ناخالصی‌ها تحت تأثیر قرار می‌گیرد.

مغناطش و ویژگی‌های ساختاری

آلاییدن نانولوله با ناخالصی منجر به تغییراتی در پایداری سیستم می‌شود. به عنوان یک مطالعه مقایسه‌ای، ابتدا به منظور بررسی پایداری نسبی نانولوله‌های آلیاژ شده، انرژی بستگی و هم‌دوسی آنها محاسبه و در جدول 3 گزارش شده است. انرژی بستگی و هم‌دوسی به ترتیب طبق روابط (1) و (2) تعریف شده‌اند [34, 35].

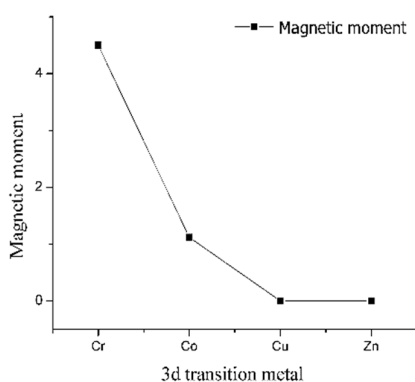
$$E_{\text{bind}} = E_{\text{InPNT-TM}} - E_{\text{InPNT}} - E_{\text{TM}} + E_{\text{P}} \quad (1)$$

$$E_{\text{coh}} = E_{\text{InPNT-TM}} - 10E_{\text{In}} - 9E_{\text{P}} - E_{\text{TM}} \quad (2)$$

که در این روابط $E_{\text{InPNT-TM}}$ انرژی کل نانولوله آلیاژ شده، E_{InPNT} انرژی کل نانولوله خالص، E_{TM} ، E_{In} و E_{P} به ترتیب انرژی منزوی اتم‌های ناخالصی، ایندیم و فسفید هستند.

1. عناصر واسطه (کروم، کبالت، مس و روی)

شدن نانولوله‌ها بعد از آلاییده شدن، به مغناطش ناخالصی‌ها مربوط است که نمودار نیز این امر را تأیید می‌کند. همچنین با توجه به شکل 2 به طور جالبی، مشاهده می‌شود کل تغییرات گشتاور مغناطیسی به نانولوله آلاییده شده با کروم حداکثر خود را دارد و سپس این روند با افزایش عدد اتمی ناخالصی‌ها کاهش می‌یابد که بیانگر هم‌خوانی سیستم با قانون هوند¹ است. مشابه این گشتاورهای مغناطیسی در نانولوله AlN , ZnO BP آلاییده شده با عناصر واسطه 3d نیز به دست آمد [33,36,37].



شکل 2. نمودار مغناطش بر حسب عدد اتمی مربوط به نانولوله ایندیم فسفید آلاییده با کروم، کبالت، مس و روی

خواص الکترونی

آلیاژ کردن نانولوله علاوه بر اینکه خواص ساختاری را تغییر می‌دهد، بر خواص الکترونی سیستم نیز اثر می‌گذارد که در این بخش به مقایسه خواص الکترونی پرداخته شده است.

در شکل (3) نمودار چگالی حالت‌ها $(\text{DOS})^2$ مربوط به اسپین بالا و پایین بر حسب انرژی در بازه -3eV تا 3eV برای نانولوله ایندیم فسفید آلاییده شده رسم شده است. لازم به ذکر است که سطح فرمی بر روی انرژی صفر تنظیم شده و با خط چین عمودی و افقی در نمودارها نشان داده شده است. همان‌طور که از شکل 3 می‌توان دید نمودار چگالی حالت‌ها همه نانولوله ایندیم فسفید آلاییده شده سطح فرمی را قطع می‌کنند و تأییدی بر رسانا بودن نانولوله و فلز بودن آنها هستند.

در واقع از رابطه (1) می‌توان پایداری نسبی سیستم را

جدول 2. مشخصات ساختاری نانولوله ایندیم فسفید آلاییده شده

با مس و روی		
نمونه	آلاییده با مس	آلاییده با روی
پارامتر شبکه (Å)	4/275	4/287
قطر کوچک (Å)	11/966	11/940
قطر بزرگ (Å)	12/910	13/109
میانگین طول پیوند TM-In (Å)	2/607	2/752
میانگین طول پیوند In-P (Å)	2/520	2/521
میانگین زاویه In-TM-In	119/312	119/539

نتیجه گرفت در حالی که رابطه (2) پایداری کلی سیستم را گزارش می‌کند؛ یعنی مقدار منفی بیانگر پایداری سیستم و مقدار مثبت بیانگر ناپایداری سیستم است.

مقادیر مربوط به انرژی بستگی و همدوسی و مغناطش مربوط به نانولوله ایندیم فسفید آلاییده با کروم، کبالت، مس و روی در جدول 3 گزارش شده است. همان‌طور که داده‌های جدول نشان می‌دهند و طبق آن چه گفته شد نانولوله ایندیم فسفید آلاییده با هر چهار ناخالصی، پایدار هستند و با توجه به مقداری انرژی همدوسی می‌توان گفت که نانولوله آلاییده با کبالت از همه پایدارتر $(-2/4200\text{eV/atom})$ و نانولوله آلاییده با روی $(-2/3262\text{eV/atom})$ پایداری کم‌تری نسبت به بقیه دارد. این نتایج را مقادیر مربوط به انرژی همدوسی گزارش شده در جدول نیز تأیید می‌کند. بنابراین، با توجه به این پایداری می‌توان تأیید کرد که این نانولوله‌ی آلاییده می‌توانند وجود داشته باشند. همچنین با توجه به زاویه بزرگتر و کوچکتر مربوط به نانولوله‌های آلیاژ شده با روی و کبالت جدول 1 و 2 می‌توان چنین نتیجه‌ای گرفت. به منظور بررسی مغناطش نانولوله آلاییده شده، در شکل 2 نمودار مغناطش بر حسب عدد اتمی رسم شده است. از آنجا که نانولوله ایندیم فسفید خالص غیرمغناطیسی است، می‌توان فهمید که علت مغناطیسی

جدول 3. انرژی بستگی، انرژی همدوسی و مغناطش محاسبه شده برای نانولوله ایندیم فسفید آلیاژ شده

نمونه	انرژی بستگی (eV/atom)	انرژی همدوسی (eV/atom)	مغناطش (B μ)
آلاییده با کروم	0/0724	-2/3696	4/50
آلاییده با کبالت	0/0221	-2/4200	1/12
آلاییده با مس	0/0431	-2/3990	0/00
آلاییده با روی	0/1158	-2/3262	0/00

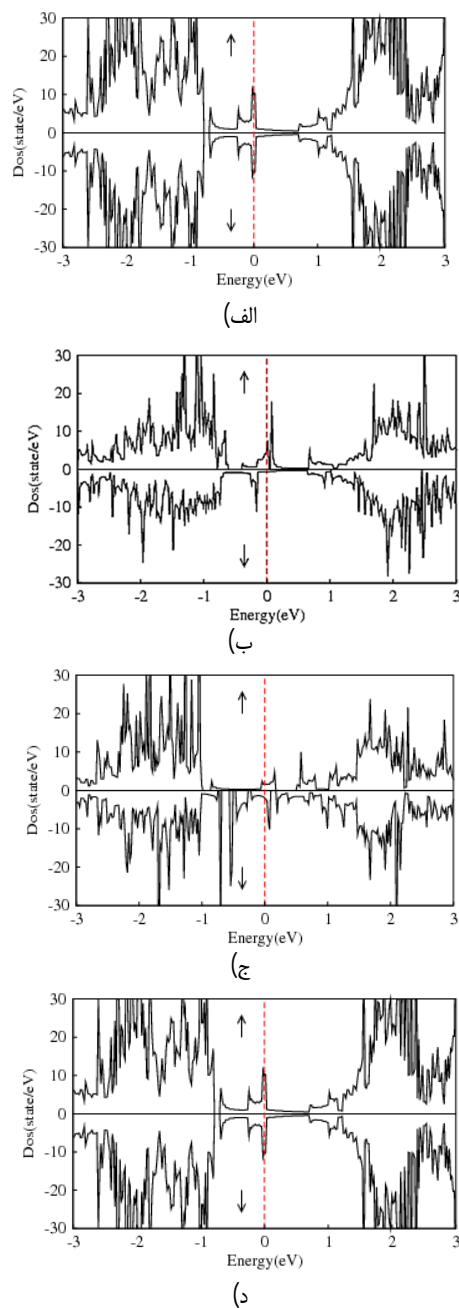
- Hund's Rule
- Density of States

برای هر دو اسپین پایین و بالا نامتقارن هستند (نمودار چگالی حالتها برای دو اسپین پایین و بالا در اطراف سطح انرژی فرمی مشابه نیستند) در نتیجه این دو نانولوله فلز مغناطیسی هستند و برای کاربردهای صنعتی در نانومغناطیسها می‌توانند مفید باشند در حالی که نمودارهای شکل 3 (ج) و (د) نشان می‌دهد که چگالی حالت‌های کل به‌دست آمده برای نانولوله ایندیم فسفید آلیبده شده با مس و روی در اطراف سطح انرژی فرمی برای اسپین‌های پایین و بالا در تقارن کامل با چگالی حالت‌های مربوط به اسپین‌های بالا می‌باشد، لذا این دو نانولوله فلز غیرمغناطیسی هستند.

برای درک بیشتر ساختار الکترونیکی و مغناطیسی، ساختار نواری مربوط به نانولوله ایندیم فسفید آلیبده شده با کروم، کبالت، مس و روی برای دو حالت اسپین بالا و اسپین پایین در شکل 4 رسم شده است. از آنجا که تراز فرمی نوارهای انرژی را قطع کرده، این نتیجه حاصل می‌شود که نانولوله ایندیم فسفید آلیبده شده خواص فلزی پیدا می‌کند و رسانا می‌شود. نمودارهای هر دو اسپین پایین و بالایی در اطراف سطح انرژی فرمی نانولوله‌های ایندیم فسفید آلیبده شده با کروم و کبالت شکل 4 (الف) و (ب) یکسان نیست در حالی که برای نانولوله‌های ایندیم فسفید آلیبده شده با مس و روی شکل 4 (ج) و (د) یکسان است که از نمودار چگالی حالتها همین نتیجه گرفته شده است.

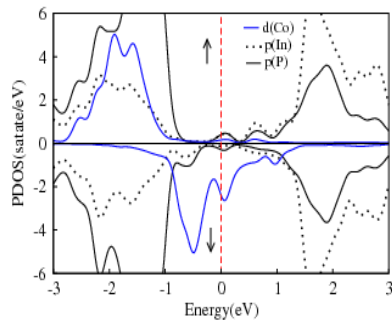
برای بررسی و چگونگی مشارکت اوربیتال‌های مختلف در نوارهای رسانش و ظرفیت، چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اوربیتال p اتم‌های In و P و اوربیتال d اتم‌های کروم، کبالت، مس و روی برای دو حالت اسپین بالا و اسپین پایین در شکل 5 رسم شده است.

باتوجه به نمودار شکل 5 (الف) مشاهده می‌کنیم که مشارکت عمده اوربیتال p اتم‌های In و P و اوربیتال d اتم کروم مربوط به اسپین بالا به نوار رسانش است در حالی که در شکل 5 (ب) مشارکت عمده اوربیتال p اتم p برای هر دو اسپین بالا و پایین یکسان و مشارکت عمده اوربیتال In اتم کبالت مربوط به اسپین پایین است و اوربیتال p اتم In مشارکت ناچیزی در ته نوار رسانش دارند و همچنین با توجه

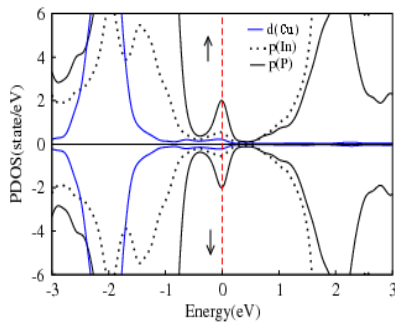


شکل 3. نمودار چگالی حالتها مربوط به اسپین بالا و پایین برای نانولوله ایندیم فسفید آلیبده شده با 5% ناخالصی (الف) کروم، (ب) کبالت، (ج) مس و (د) روی. (خطچین عمودی نشان دهنده انرژی فرمی است که بر صفر منطبق شده است)

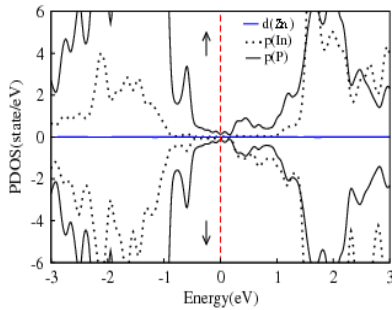
از طرفی با توجه به شکل 3 (الف) و (ب) این نمودارها نشان می‌دهد که چگالی حالتها در اطراف سطح انرژی فرمی نانولوله ایندیم فسفید آلیبده شده با کروم و کبالت



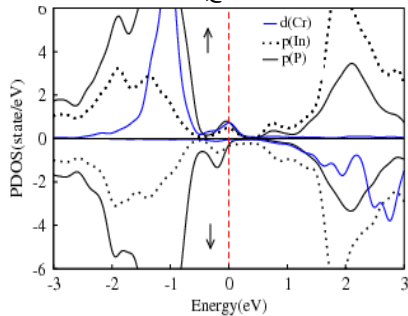
(الف)



(ب)

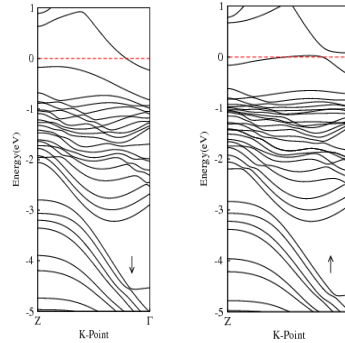


(ج)

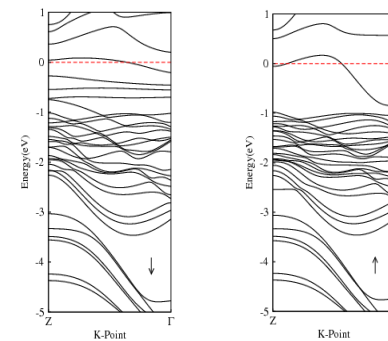


(د)

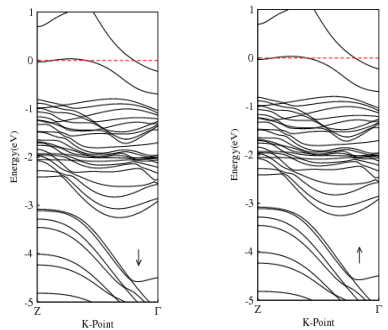
شکل 5. چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اوربیتال p اتم‌های ایندیم و فسفید، و اوربیتال d اتم‌های کروم، کبالت، مس و روی برای نانولوله ایندیم فسفید آلیاژ با 5% ناخالصی (الف) کبالت، (ب) مس، (ج) روی و (د) کروم. به جای اتم فسفید برای حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین (خط چین عمودی نشان‌دهنده انرژی فرمی است که بر صفر منطبق شده است)



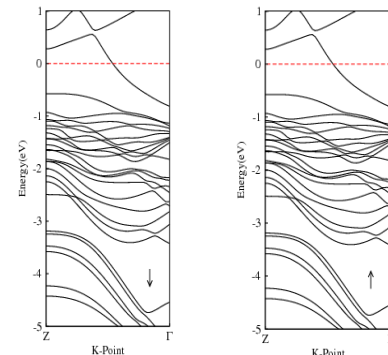
(الف)



(ب)



(ج)



(د)

شکل 4. ساختارهای نواری برای نانولوله ایندیم فسفید با 5% ناخالصی (الف) کروم، (ب) کبالت، (ج) مس و (د) روی به جای اتم فسفید برای حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین

همدوسی نتیجه می‌شود که نانولوله آلاییده با کبالت می‌تواند ساختار پایدارتری نسبت به نانولوله آلاییده با دیگر ناخالص‌ها داشته باشد. از مشاهدات ساختارهای بهینه شده، این نتیجه حاصل می‌شود که ناخالصی‌های جایگزین شده با فسفر، تقارن نانولوله خالص را می‌شکند و باعث ایجاد اعوجاج ساختاری در اطراف ناخالصی‌های کروم، کبالت، مس و روی می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که تغییرات گشتاورهای مغناطیسی کل ناشی از ناخالصی‌های آلاییده شده کروم، کبالت، مس و روی از قانون هوند پیروی می‌کند. تجزیه و تحلیل نمودارهای چگالی الکترونیکی حالت‌ها، ساختارهای نواری و چگالی حالت‌های جزئی نشان می‌دهد که نانولوله ایندیم فسفید آلاییده با کروم و کبالت، فلز فرومغناطیسی است، در حالی که نانولوله ایندیم فسفید آلاییده با مس و روی، یک فلز غیر مغناطیسی است. پیشنهاد ما این است که نانولوله ایندیم فسفید آلاییده با کروم و کبالت می‌تواند برای کاربردهای صنعتی در نانومغناطیس‌ها مفید باشند.

منابع

- [1] Ikejiri K, Ishizaka F, Tomioka K, Fukui T. Bidirectional growth of indium phosphide nanowires. *Nano Lett.* 2012;12(9):4770-4.
- [2] Wolf SA, Awschalom DD, Buhrman RA, Daughton JM, von Molnár VS, Roukes ML, Chtchelkanova AY, Treger DM. Spintronics: a spin-based electronics vision for the future. *science.* 2001 Nov 16;294(5546):1488-95.
- [3] Doped C, Cr G, Gan D, Medvedeva JE, Delley B, Newman N, et al. Role of embedded clustering in dilute magnetic semiconductors: Cr doped GaN. *APS [Internet]* 2005 Dec 16 [cited 2023 Apr 4];95(25).
- [4] Cui XY, Delley B, Freeman AJ, Stampfl C. Magnetic metastability in tetrahedrally bonded magnetic III-nitride semiconductors. *Phys Rev Lett.* 2006; 97(1):7-10.
- [5] Picozzi S, Shishidou T, Freeman AJ, Delley B. First-principles prediction of half - metallic ferromagnetic

به شکل 5 ج) مشارکت عمده اوربیتال p اتم‌های In و P و اوربیتال d اتم مس برای هر دو اسپین بالا و پایین یکسان و همچنین مشاهده می‌شود که مشارکت اوربیتال p اتم p بیشتر است. در آخر با توجه به شکل 5 د) چگالی حالت، مشارکت مربوط به اوربیتال p اتم p است و برای هر دو اسپین بالا و پایین یکسان است و مشارکت اوربیتال p اتم In و اوربیتال d اتم روی در ته نوار رسانش بسیار ناچیز است. در شکل 5، مقیاس انرژی صفر نشان دهنده تراز فرمی است و سطح انرژی فرمی همه اوربیتال‌ها را قطع کرده است که تأیید کننده رسانا بودن نانولوله ایندیم فسفید آلاییده شده با کروم، کبالت، مس و روی است.

نتیجه گیری

با استفاده از روش DFT، خواص ساختاری، مغناطیسی و الکترونیکی نانولوله ایندیم فسفید آلاییده شده با کروم، کبالت، مس و روی مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است. با توجه به مقادیر به دست آمده از انرژی بستگی و همدوسی مشخص شد که نانولوله ایندیم فسفید آلاییده با هر چهار ناخالصی، پایدار هستند و با توجه به مقدار انرژی

- semiconductors: V- and Cr-doped BeTe. *Phys Rev B - Condens Matter Mater Phys.* 2003 Apr 16;67(16).
- [6] Du X, Li Q, Su H, Yang J. Electronic and magnetic properties of V-doped anatase Ti O₂ from first principles. *Phys Rev B - Condens Matter Mater Phys.* 2006;74(23).
- [7] Litvinov V I, Dugaev V K. Ferromagnetism in magnetically doped III-V semiconductors. *Phys Rev Lett.* 2001 Jun 11;86(24):5593-6.
- [8] Luo X, Martin RM. Jahn-Teller distortion and ferromagnetism in the dilute magnetic semiconductors GaAs:Mn and cubic GaN:Mn. *Phys Rev B - Condens Matter Mater Phys.* 2005 Jul 15;72(3).
- [9] Schilfgaarde M van, Mryasov ON. Anomalous exchange interactions in III-V dilute magnetic semiconductors. *Phys Rev B - Condens Matter Mater Phys.* 2001;63(23).

- [10] Seong MJ, Alawadhi H, Miotkowski I, Ramdas AK, Miotkowska S. Raman electron paramagnetic resonance in $Zn_{1-x}Co_xTe$ and $Cd_{1-x}Co_xTe$. *Phys Rev B - Condens Matter Mater Phys*. 2001;63(12):1252081–7.
- [11] McNorton RD, Schuler TM, MacLaren JM, Stern RA. Systematic trends of first-principles electronic structure computations of $Zn_{1-x}Ax$ B diluted magnetic semiconductors. *Phys Rev B - Condens Matter Mater Phys*. 2008 Aug 26;78(7).
- [12] Jungwirth T, Sinova J, Mašek J, Kučera J, MacDonald AH. Theory of ferromagnetic (III,Mn)V semiconductors. *Rev Mod Phys*. 2006;78(3):809–64.
- [13] Śliwa C, Dietl T. Electron-hole contribution to the apparent s-d exchange interaction in III-V dilute magnetic semiconductors. *Phys Rev B - Condens Matter Mater Phys*. 2008 Oct 28;78(16).
- [14] Žutić I, Fabian J, Sarma S Das. Spintronics: Fundamentals and applications. *Rev Mod Phys*. 2004 Apr;76(2):323–410.
- [15] Zhou S, Potzger K, Von Borany J, Grötzschel R, Skorupa W, Helm M, et al. Crystallographically oriented Co and Ni nanocrystals inside ZnO formed by ion implantation and postannealing. *Phys Rev B - Condens Matter Mater Phys*. 2008 Jan 24;77(3).
- [16] Chou H, Lin CP, Huang JCA, Hsu HS. Magnetic coupling and electric conduction in oxide diluted magnetic semiconductors. *Phys Rev B - Condens Matter Mater Phys*. 2008 Jun 25;77(24).
- [17] Kitchen D, Richardella A, Tang JM, Flatté ME, Yazdani A. Atom-by-atom substitution of Mn in GaAs and visualization of their hole-mediated interactions. *Nat* 2006 4427101 [Internet] 2006 Jul 27 [cited 2023 Apr 30];442(7101):436–9
- [18] Wang Y, Yang X, He TC, Gao Y, Demir H V, Sun XW, et al. Near resonant and nonresonant third-order optical nonlinearities of colloidal InP/ZnS quantum dots. *aip.scitation.org* [Internet] 2013 Jan 14 [cited 2023 Apr 5];102(2):3321.
- [19] Xuyong Yang C, Zhao D, Swee Leck K, Tiam Tan S, Xin Tang Y, Zhao J, et al. Full visible range covering InP/ZnS nanocrystals with high photometric performance and their application to white quantum dot light-emitting Diodes. *Wiley Online Libr* [Internet] 2012 Aug 8 [cited 2023 Apr 5];24(30):4180–5.
- [20] Wada O (Osamu), Hasegawa H (Hideki). InP-based materials and devices: physics and technology. 1999;592.
- [21] Wang T, Zeng X, Wen J, Pang F, Chen Z. Characteristics of photoluminescence and Raman spectra of InP doped silica fiber. *Appl Surf Sci*. 2009 Jun 15;255(17):7791–3.
- [22] Bliss D. Recent Highlights of Bulk Indium Phosphide (InP) Crystal Growth in the USA: Compound (< Special Issue> Bulk Crystals for Human Activity in the New Millennium). *J Japanese Assoc Cryst Growth* [Internet] 2000 [cited 2023 Apr 5];27(2):45–7.
- [23] Tian S, Wei Z, Li Y, Zhao H, Fang X, Tang J, et al. Surface state and optical property of sulfur passivated InP. *Mater Sci Semicond Process* [Internet] 2014;17:33–7.
- [24] Zhao H, Shahrjerdi D, Zhu F, Kim HS, Ok I, Zhang M, et al. Inversion-type InP MOSFETs with EOT of 21 Å using atomic layer deposited Al₂O₃ gate dielectric. *Electrochem Solid-State Lett* [Internet] 2008 Jun 11 [cited 2023 Apr 5];11(8):H233.
- [25] Sridaran S, Chavan A, Dutta P. Carrier transport properties of AlCdS/GaSb structures. *Appl Phys Lett* [Internet] 2006 Oct 5 [cited 2023 Apr 5];89(14):142116.
- [26] Tang C, Bando Y, Liu Z, Golberg D. Synthesis and structure of InP nanowires and nanotubes. *Chem Phys Lett*. 2003;376(5–6):676–82.
- [27] Perdew JP, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys Rev Lett*. 1996;77(18):3865–8.
- [28] Chandiramouli R. Band structure and transport studies on InP nanotube – A first-principles investigation. *Superlattices Microstruct* [Internet] 2015 Jul;83:193–209.

- [29] Monkhorst HJ, Pack JD. Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys Rev B*. 1976;13(12):5188–92.
- [30] Mahmoodabadi MJJ, Baizaei SMM, Saberi H, Ansarian M. Structural, electronic and magnetic properties of aluminium phosphide nanotube doped by cobalt, nickel and manganese. *Chinese J Phys [Internet]* 2019 Apr;58(December 2018):8–17.
- [31] García G, Sánchez-Palencia P, Palacios P, Wahnón P. Transition metal-hyperdoped InP semiconductors as efficient solar absorber materials. *Nanomaterials*. 2020;10(2):5–8.
- [32] Roy S, Springborg M. Structural and electronic properties of indium phosphide nanotubes. *J Phys Chem C*. 2009;113(1):81–6.
- [33] Khademi M, Baizaei SM, Mohammadi M. Structural, Electronic, and Magnetic Properties of 3d Transition Metal-Doped BP Nanotubes by First Principle Calculations. *J Supercond Nov Magn*. 2021;34(3):749–61.
- [34] Kaloni TP. Tuning the structural, electronic, and magnetic properties of germanene by the adsorption of 3d transition metal atoms. *J Phys Chem C*. 2014;118(43):25200–8.
- [35] Malek A, Movlarooy T, Pilehrood SH. Ground-State Magnetic Phase in Transition-Metal-Doped Boron Nitride Nanosheet with (5,0) Chirality. *IEEE Magn Lett*. 2019;10:1.
- [36] Movlarooy T. Transition metals doped and encapsulated ZnO nanotubes: Good materials for the spintronic applications. *J Magn Magn Mater [Internet]* 2017;441:139–48.
- [37] Zhang JM, Li HH, Zhang Y, Xu KW. Structural, electronic and magnetic properties of the 3d transition-metal-doped AlN nanotubes. *Phys E Low-Dimensional Syst Nanostructures [Internet]* 2011;43(6):1249–54.

COPYRIGHTS



© 2022 by the authors Licensee PNU, Tehran, Iran This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4 0 International (CC BY4 0) (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0>)