

مطالعه قطبش اسپینی و خواص الکترونی پیوندگاه‌های $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{GaAs}(001)$

ناهید قادری^۱، سید جواد هاشمی‌فر^۱، هادی اکبرزاده^۱ و ماریا پرسی^۲

۱. دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

۲. گروه فیزیک، دانشگاه تریست، ایتالیا

چکیده

اخیراً آلیاژ هویسلر Co_2MnSi به علت داشتن خاصیت نیم‌فلزی برای کاربرد در صنعت اسپینترونیک که در آن کمیت اصلی در ترابری، اسپین حامل‌ها می‌باشد، مورد توجه قرار گرفته است. بررسی اثرات سطح مشترک و طراحی سطوح مشترک ایده‌آل با نیم‌رسانا که در آنها ماهیت نیم‌فلزی Co_2MnSi حفظ شود برای اهداف صنعتی بسیار حائز اهمیت است. در اینجا خواص الکترونی و مغناطیسی $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{GaAs}(001)$ با محاسبات اولیه کوانتومی در چارچوب نظریه تابعی چگالی اسپینی و با استفاده از روش شبه پتانسیل و با تقریب GGA برای انرژی تبادل-همبستگی ارائه شده است. در این محاسبات تنها پیوندگاه MnMn-As در نظر گرفته شد که در آن با جایگزین کردن Mn به جای Si یک لایه اضافی MnMn در پیوندگاه ایجاد کردیم. در نمودار نوارهای انرژی و منحنی چگالی حالت‌ها تعداد کمی از حالت‌های سطح مشترک درگاف حالت اقلیت اسپینی مشاهده شد که بر روی اتم‌های واقع در پیوندگاه جای‌گزیده می‌باشند. با این وجود قطبش اسپینی بالای ۹۰٪، در سیستم وجود دارد که نسبت به مقدار تجربی، ۱۲٪، به میزان قابل توجهی افزایش یافته است. همچنین ناپیوستگی نواری و نمودار سد شاتکی در محل پیوندگاه برای دوکانال اسپینی اکثریت و اقلیت به دست آمد.

واژه‌های کلیدی: محاسبات ابتدا به ساکن، تکنیک شبه پتانسیل، آلیاژ هویسلر Co_2MnSi ، مرز مشترک نیم فلز/نیم رسانا

Spin polarization and electronic properties of $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{GaAs}(001)$ heterojunction

N.Ghaderi¹, S.J.Hashemifar¹, H.Akbarzadeh¹, and M.Peressi²

1. Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran

2 Department of Physics, University of Trieste, Trieste, Italy

Abstract: Co_2MnSi Heusler alloy, due to its half metallic properties and its potential applications in spintronic industry has attracted substantial attractions in recent years. Investigation of the interface properties of this alloy with well known semiconductors, such as GaAs, is of special interest. Hence, we studied the electronic and magnetic properties of $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{GaAs}(001)$ heterojunction by using spin density functional ab-initio method. The electron core interaction was approximated by pseudo potential method and the exchange correlation energy was calculated within Generalized Gradient Approximation (GGA). We limited our calculation to MnMn-As interface that was constructed by substituting Si with Mn atom. By examining the energy band and density of state curves we found out that a few interface states exist in the minority energy gap. However, the calculated spin polarization is 90%, much higher than the experimental 12% value. Furthermore, the band alignments were extracted for minority and majority spin channels.

Keywords: Co_2MnSi , spintronic, $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{GaAs}(001)$

E-mail of corresponding author (s): : nahid.ghaderi@ts.inf.n.it

مقدمه

می‌شود که علاوه بر آنکه سرعت محاسبات را بالا می‌برد برای مطالعه خواصی که از رفتار الکترون‌ها در نزدیکی هسته تأثیر نمی‌پذیرند، مناسب می‌باشد. شبه پتانسیل‌های از نوع بسیار نرم در این محاسبات به کار گرفته شده است و توابع موج الکترونی بوسیله مجموعه امواج تخت با انرژی قطع ۳۵ ری‌دبرگ بسط داده شده‌اند. منطقه اول بریلوئن ابرسلولی که سطح مشترک را توصیف می‌کند با سلول بندی منخورست-پک (۱ ۸ ۸) [۶] تقسیم‌بندی شد و ترکیب حالت‌های الکترونی به روش نقاط ویژه [۶،۷] انجام شد. ضمناً انتگرال‌گیری روی نقاط k در منطقه اول بریلوئن برای Co_2MnSi و سطح مشترک به روش اسمیرینگ، smearing [۸] و با پهن‌شدگی ۰/۰۱ انجام شده است.

ساختار سطح مشترک

سطح مشترک $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{GaAs}(001)$ به وسیله یک ساختار تراگونال حاوی ۲۹ اتم که محورهای آن 45° نسبت به محورهای ساختار مکعبی چرخیده‌اند ساخته شد (شکل ۱) که در آن پارامتر شبکه در صفحه Co_2MnSi مساوی با پارامتر شبکه GaAs انتخاب شد. Co_2MnSi در حالت انبوه دارای ساختار کریستالی مرکز سطحی با پارامتر شبکه تجربی ۵/۶۷ آنگستروم می‌باشد [۳] که بسیار نزدیک به پارامتر شبکه GaAs ، ۵/۶۵ آنگستروم، است. پارامتر شبکه محاسباتی Co_2MnSi حدود ۵/۶۴ آنگستروم به دست آمد که نزدیک به مقدار تجربی اما بسیار کوچک‌تر از پارامتر شبکه تنوری GaAs ، ۵/۷۴ آنگستروم است. این تفاوت بیان‌گر آن است که در شبیه‌سازی ما با مساوی گرفتن پارامتر شبکه در صفحه Co_2MnSi با مقدار نظیر در GaAs ، نیم فلز را عملاً تحت تنش بسیار بزرگتر از واقعیت قرار می‌دهیم. در مقابل از آنجائی که در نظر گرفتن پارامتر شبکه تجربی GaAs موجب اعمال تنش کمتری نزدیک به تجربه می‌شود، لذا در این محاسبات

Co_2MnSi در زمره آلیاژهای هویسلر قرار دارد که به علت دارا بودن خاصیت نیم فلزی و دمای کوری بالا اخیراً برای کاربرد به عنوان منبع تزریق حامل‌های اسپین قطبیده در صنعت اسپینترونیک بسیار مورد توجه قرار گرفته است [۱،۲]. خاصیت نیم‌فلزی این ترکیب از وجود گاف انرژی برای تنها یکی از حالت‌های اسپینی نشأت می‌گیرد که قطبش اسپینی ۱۰۰٪ در سطح فرمی آن را موجب می‌شود. ساختار Co_2MnSi مکعبی مرکز سطحی و نزدیک به ساختار اکثر نیم‌رساناهای معمول در صنعت الکترونیک است. از این‌رو بر روی آنها قابل رشد می‌باشد. اما اثرات سطح مشترک می‌توانند تأثیر مخرب بر خاصیت نیم فلزی داشته باشند، لذا طراحی سطح مشترک مناسب نیم‌فلز-نیم‌رسانا و بررسی خواص الکترونی آن از اهمیت به‌سزایی برخوردار است. رشد Co_2MnSi بر روی GaAs در جهت [۰۰۱] اخیراً گزارش شده است اما متأسفانه به علت وجود ناکاملی‌ها در رشد، قطبش اسپینی بالایی مشاهده نشد (تنها ۱۲٪) [۳]. بنابر این بر آن شدیم تا سطح (۰۰۱) مشترک بین Co_2MnSi با GaAs را شبیه‌سازی نموده و با استفاده از محاسبات مبتنی بر اصول اولیه کوانتومی و بررسی خواص الکترونی، سطح مشترک مناسب برای حفظ خاصیت نیم فلزی را حدس بزنیم. کار حاضر نتایج حاصل از بررسی یکی از پیوندگاه‌هاست.

رهیافت محاسباتی

محاسبات ما بر پایه نظریه تابعی چگالی [۴] و با تقریب گرادیان تعمیم یافته، GGA ، برای انرژی تبادل-همبستگی و با استفاده از کد $PWscf$ [۵] که از روش شبه پتانسیل استفاده می‌کند انجام شده است. از آنجائی که پیوندهای شیمیایی و اکثر رفتارهای فیزیکی از الکترون‌های والانس نشأت می‌گیرند لذا در این روش پتانسیل الکترون-یون در نزدیکی هسته تقریب زده

آمد. ساختار شبیه‌سازی شده دارای ۲۲ لایه و ۸ عمل‌گر تقارنی است.

خواص الکترونی و مغناطیسی

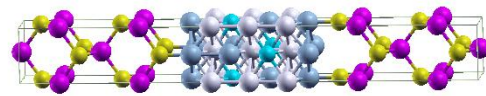
بعد از یافتن مکان ایده‌آل اتم‌های نزدیک پیوندگاه خواص الکترونی و مغناطیسی این ساختار قابل استخراج است. بررسی نمودار چگالی حالت‌های ابرسلول مقدار کمی از حالت‌های سطح مشترک را در گاف حالت اقلیت اسپینی نشان می‌دهد (شکل ۲).

با این وجود قطبش اسپینی در سطح فرمی در حدود ۹۰٪ است که در مقایسه با مقدار تجربی، ۱۲٪، [۳] بهبود یافته است. نمودار نوارهای انرژی نزدیک سطح فرمی نیز در شکل (۳) آورده شده است. همان‌گونه که دیده می‌شود تنها دو حالت به میزان کمی انرژی فرمی را قطع کرده‌اند که عموماً ناشی از اثرات سطح مشترک بوده و در Mn و As واقع در پیوندگاه جای‌گزیده می‌باشند.

به منظور بررسی کیفی اثرات مغناطیسی سطح مشترک، می‌توان مغناطش اتم‌های سطح مشترک را از تفاضل چگالی حالت‌های اتمی دوکانال اسپینی، تعیین کرد. مغناطش اتمی Mn اصلی در پیوندگاه را $4/11 \mu_B$ به دست آوردیم که بزرگ‌تر از مقدار محاسبه شده در حالت انبوه $3/30 \mu_B$ است. به نظر می‌رسد برهم‌کنش فرومغناطیس Mn ها در پیوندگاه عامل اصلی این افزایش قابل توجه نسبت به حالت انبوه که در آن Mn با Si برهم‌کنش پاد فرومغناطیس دارد، می‌باشد.

مغناطش As نیز در پیوندگاه نسبت به حالت انبوه افزایش یافته و به مقدار غیر صفر اما کوچک $0/37 \mu_B$ می‌رسد که ناشی از اثرات سطح مشترک است. این اتم با Mn جایگزین شده در پیوندگاه به جای Si برهم‌کنش پاد فرومغناطیس دارد و موجب کاهش مغناطش آن، $3/27 \mu_B$ ، در مقایسه با Mn واقع در جایگاه اصلی می‌شود. مقدار اندازه‌گیری شده در آزمایشگاه $2/6 \mu_B$

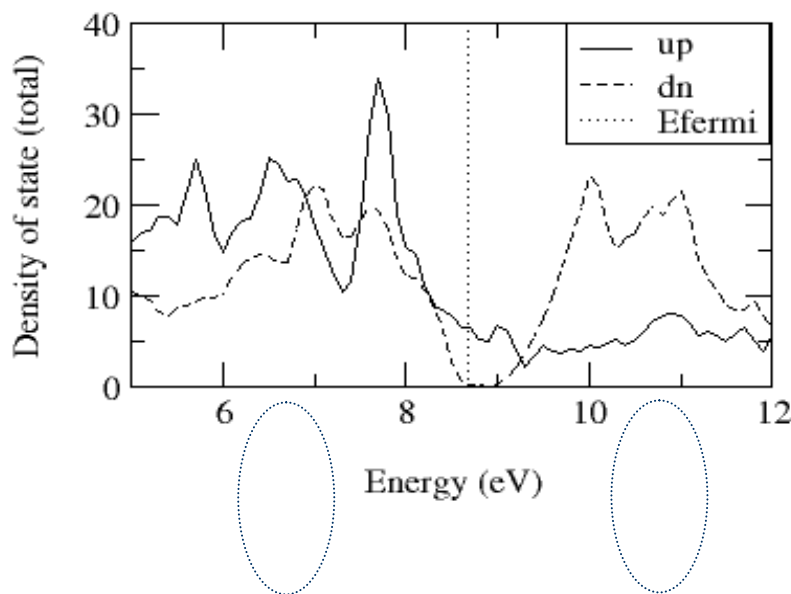
پارامتر شبکه تجربی GaAs در نظر گرفته شد. پایه GaAs ثابت و فاصله بین لایه‌های آن بدون تغییر باقی می‌ماند و فاصله بین لایه‌های Co_2MnSi با بهینه کردن حجم آن در حالت انبوه هنگامی که پارامتر شبکه در صفحه آن مساوی با پارامتر شبکه تجربی GaAs است و با مینیمم کردن انرژی یا صفر کردن تنش در جهت [۰۰۱] به دست آمد.



شکل ۱. ابرسلول به کار گرفته شده در محاسبات. محدوده پیوندگاه با نقطه چین مشخص شده است.

مطالعه سطوح (001) Co_2MnSi ، سطح MnMn را انتخاب مناسبی برای حفظ خاصیت نیم‌فلزی آن پیش بینی کرده است [۹]. لذا در ابرسلول طراحی شده سطح انتهایی Co_2MnSi را در دو سمت، لایه MnSi گرفتیم که در آن Si با Mn جایگزین شده است و آخرین سطح GaAs با لایه As به Co_2MnSi وصل شد (جذب سطحی Mn روی GaAs نشان داده است که Mn بیشتر تمایل به تشکیل پیوند با As دارد و پیوند Mn-As از Mn-Ga قویتر است [۱۰]). Mn اصلی در صفحه (001) به صورت ضربدری با As [۱۰] و در فاصله $d = 2/11 \text{ \AA}^0$ در هر دو طرف آن قرار دارد و مکان دیگر آن در صفحه که به جای Si در این لایه جایگزین شده، با As لایه زیرین یکسان است. طول ابرسلول به کار گرفته شده یا پارامتر شبکه عمود آن $c = 33/84 \text{ \AA}^0$ است و ترتیب قرارگیری لایه‌ها به صورت زیر می‌باشد.

$\text{As-Ga-As-(MnMn)-Co-MnSi...MnSi-Co-(MnMn)-As-Ga-As...}$
لازم به ذکر است که فاصله d و به تبع آن پارامتر شبکه عمود c بعد از بهینه سازی ساختاری ابرسلول یعنی کمینه کردن انرژی به همراه صفرکردن نیروها به منظور یافتن مکان ایده‌آل اتم‌های نزدیک پیوندگاه، به دست



شکل ۲. نمودار چگالی حالت‌های کل. گاف حالت اقلیت اسپینی مقدار کمی پر شده است.

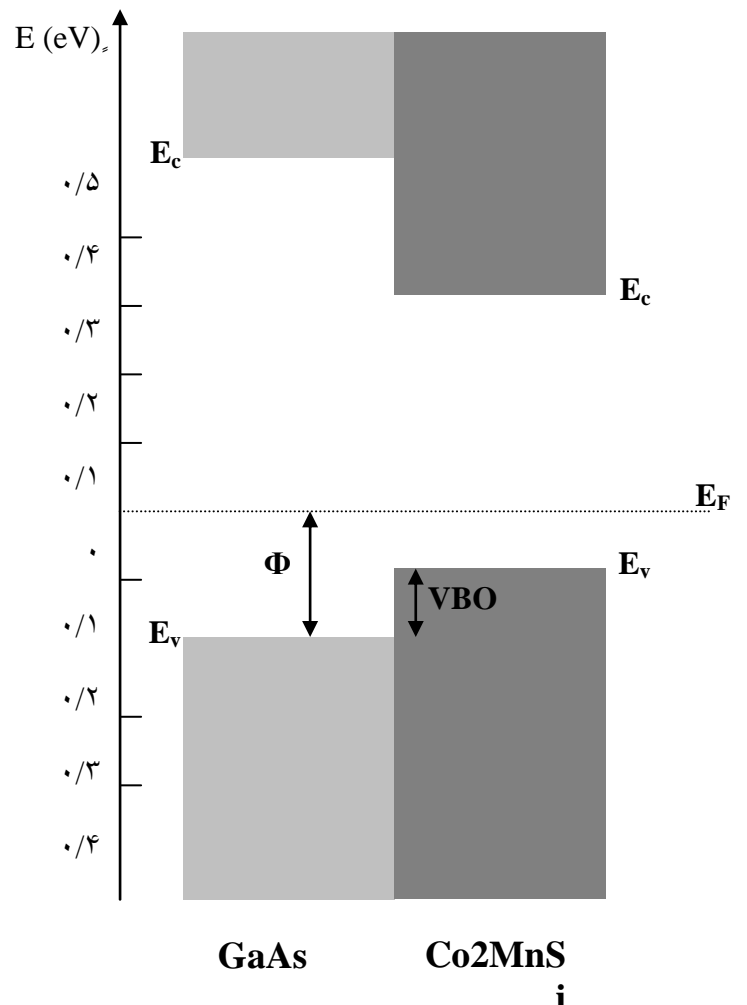
ظرفیت و رسانش نیم‌رسانای پایه و نیم فلز رونشستی کنترل می‌شود. در حالت اکثریت اسپینی که حالت‌های الکترونی در سطح فرمی نیم فلز اشغال شده‌اند محل اتصال مشابه با پیوندگاه فلز - نیم‌رسانا عمل می‌کند. نمودار نواری سد شاتکی در این حالت تفاوت بین انرژی فرمی در ابرسلول، که توسط نیم‌فلز تعیین می‌شود، و انرژی لبه بالایی نوار ظرفیت GaAs است. این سد با Φ در شکل (۴) مشخص شده است. برای حالت اقلیت اسپینی پیوندگاه همانند اتصال ناهمگن نیم رسانا - نیم‌رسانا عمل می‌کند و اختلاف انرژی لبه نوار ظرفیت، VBO ، که موجب انحنای نواری در پیوندگاه می‌شود، از اختلاف بین انرژی بالاترین لبه نوار ظرفیت در GaAs و حالت اقلیت اسپینی Co_2MnSi به دست می‌آید [۱۳]. در عمل لایه‌های میانی رفتار انبوه‌گونه دارند و لبه بالایی نوار ظرفیت به وسیله حالت‌های p عنصر As در GaAs و d عنصر Mn در Co_2MnSi تعیین می‌شود. لذا ناپیوستگی نواری در پیوندگاه با استفاده از چگالی حالت‌های اتمی As و Mn لایه‌های

مغناطش As نیز در پیوندگاه نسبت به حالت انبوه افزایش یافته و به مقدار غیر صفر اما کوچک $0.37 \mu_B$ می‌رسد که ناشی از اثرات سطح مشترک است. این اتم Mn جایگزین شده در پیوندگاه به جای Si برهم‌کنش پاد فرومغناطیس دارد و موجب کاهش مغناطش آن، $3.27 \mu_B$ ، در مقایسه با Mn واقع در جایگاه اصلی می‌شود. مقدار اندازه‌گیری شده در آزمایشگاه $2.6 \mu_B$ [۳]، بسیار کوچک‌تر از هر دو مقدار به دست آمده در پیوندگاه و حالت انبوه است که بنا بر محاسبات Sasioglu و همکارانش این اختلاف زیاد بین نتایج نظری و تجربی به علت حضور برخی بی‌نظمی‌های بلوری نظیر بدجانشینی اتم‌های Mn به جای Co است [۱۱]. اثرات سطح مشترک بعد از چند لایه به شدت تضعیف می‌شود به طوری که مغناطش اتمی Mn در لایه‌های میانی $3.33 \mu_B$ ، بسیار نزدیک به حالت انبوه $3.30 \mu_B$ به دست آمد که اندکی کوچک‌تر از مقدار محاسبه شده توسط Picozzi [۱۲]، $2.92 \mu_B$ ، است. خواص ترابری در این ساختار با نمودار نوار الکترونی در محل پیوندگاه، خصوصاً بوسیله ناپیوستگی نوارهای

مراجع

1. R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. Van Engen, and K. H. J. Buschow, *Phys. Rev. Lett.* 50 , 1983 , 2024
2. P. J. Brown, K. U. Neumann, P. J. Webster, and K. R. A. Ziebeck, *J. Phys. Condens. Matter* 12 , 2000 , 1827
3. W. H. Wang, M. Przbylski, W. Kuch, L. I. Cheralaru, J. Wang, Y. F. Lu, J. Barthel, H. L. Meyerheim, and J. Kirschner, *Phys. Rev. B* 71 , 2005 , 144416
4. R. O. Jones, o. Gunnarson, *Rev. Mod. Phys.* 61, 1989 , 689
5. S. Baroni, A. Dalcorso, S. de Gironcoli, P. Giannozzi, <http://www.pwscf.org>
6. H. J. Monkhorst, J. D. Pack, *Phys. Rev. B* 13 , 1976 , 5188
7. A. Baldereschi, *Phys. Rev. B* 7 , 1973 , 8412
8. D.J. Chadi, *Phys. Rev. B* 16 , 1977 , 1746
9. N. Marzari, D. Vanderbilt, M. c. Payne, *Phys. Rev. Lett.* 79 , 1997 , 1337
10. S. J. Hashemifar, P. Kratzer, and M. Scheffler, *Phys. Rev. Lett.* 94 , 2005 , 096402
11. Z. Yang, K. Zhang, S. Ke, and X. Xie, *Phys. Rev. B* 56 , 1997 , 6727
12. E. Sasioglu, L. Sadratskii, and P. Bruno (*unpublished*) cited in reference [3]
13. S. Picozzi, A. Continenza, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* 66 , 2002 , 094421
14. M. Peressi, N. Binggli, A. Baldereschi, *J. Phys. D. Appl. Phys.* 31 , 1998 , 1273
15. A. Debernardi, M. Peressi, A. Baldereschi, *Computational Materials science* , 33 , 2005 , 263

میانی در دو سمت پیوندگاه قابل استخراج است. شکل (۴) نمودار نواری در پیوندگاه را نشان می‌دهد.



شکل (۴): ناپیوستگی نواری در پیوندگاه

نتیجه‌گیری

در بررسی پیوندگاه $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{MnMn}/\text{GaAs}(001)$ تعداد کمی حالت‌های سطح مشترک در گاف کانال اسپینی اقلیت مشاهده شد. اثرات سطح مشترک روی قطبش اسپینی در سطح فرمی بسیار حائز اهمیت است از جمله موجب از بین رفتن ماهیت نیم فلزی Co_2MnSi در محل اتصال با نیم رسانا می‌شود. با این وجود قطبش اسپینی بالایی در سطح فرمی، حدود ۹۰٪، به دست آمد که در مقایسه با مقدار تجربی افزایش قابل توجهی داشته است.