

بررسی خواص ساختاری و الکترونی و مغناطیسی نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم (AIPNT) آلاینده با منگنز (Mn)

انصاریان، محدثه^۱؛ بیضائی، سید مهدی^۱؛ صابری، حسن^۱

^۱دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه ولی عصر (عج)، رفسنجان

چکیده

در این پژوهش، ویژگی‌های ساختاری و خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید در حالت (5,5) که جزء گروه دسته‌بندی است، پیش و پس از افزودن ناخالصی منگنز مورد بررسی قرار می‌گیرد. محاسبات بر اساس نظریه تابعی چگالی با استفاده از نرم افزار PWscf از بسته نرم افزارهای کوانتوم اسپرسو به علت قابلیت‌های بالای آن انجام شده است. این برنامه بر اساس نظریه تابعی چگالی و با در نظر گرفتن امواج تخت به عنوان توابع موج پایه در بسط توابع موج الکترونی بنا شده است. نتایج نيمرسانایی نانولوله ی AIP دارای گاف غیر مستقیم ۲/۶۴ الکترون ولت را تأیید می‌کند و نشان می‌دهد که نانولوله نیتريد آلومینیوم آلاینده با منگنز حالت نیمرسانایی خود را حفظ می‌کند و فقط گاف آن تغییر میکند.

The investigation of structural and electronic and magnetic properties of Aluminum Phosphid nanotube (AIPNT) doped by Mn

Ansarian, Mohadeseh¹; Baizae, Seyyed Mahdy¹; Saberi, Hasan¹

¹Department of Physics, Valie - e - Asr University, Rafsanjan

Abstract

In this paper, structural, electronic and magnetic properties of aluminium phosphid nanotube which is from armchair group with and without Mn in the state of (5,5) are investigated. The computations are performed based on the Density Functional Theory (DFT) and using PWscf software of Espresso quantum software. The results illustrate that the nanotube is semiconductor and has indirect band gap with 2.64 eV.

مقدمه

ایزوالکترونیکی و اپتوالکترونیکی می‌باشند [۸-۱۳]. همچنین تحقیقات نشان داده‌اند که نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید به لحاظ انرژی دارای ساختار پایداری است. لیسنکوف و همکاران، در سال ۲۰۰۵، خواص الکترونی و ساختار نانولوله‌های غیر کربنی AIP را مورد مطالعه قرار دادند [۱۵].

میرزایی و همکاران، در سال ۲۰۱۰، از طریق روش محاسبه‌ای تابعی چگالی خواص نانولوله آلومینیوم فسفید را بررسی کردند [۱۱]. همچنین آنها در سال ۲۰۱۱ با ترکیب عنصر کربن با نانولوله آلومینیوم فسفید توانستند به خواص متفاوتی از این ترکیب دست یابند [۱۶]. علاوه بر این در همان سال به بررسی آلاینده نیتروژنی

بعد از کشف نانولوله‌های کربنی توسط ایجیما [۱] تحقیقات فراوانی برای کشف خواص و کاربردهای این مواد جدید انجام شده است [۴-۲]. اما سنتز نانولوله‌ها برای اهداف خاص کاری دشوار بوده است زیرا آنها رفتارهایی فلزی یا نیمه رسانایی بسته به قطرها و کایرال‌های لوله‌ای مختلف از خود نمایش می‌دهند [۵]. تلاش‌های قابل توجهی جهت بررسی نانولوله‌های غیر کربنی با ویژگی‌های وابسته به عوامل منحصر به فرد عناصر گروه سوم و پنجم انجام شده است [۷-۶]. از میان این عناصر میتوان به BN، AIN، BP و AIP اشاره نمود که دارای خاصیت

تحلیل و بررسی

ساختار برای نانولوله‌ی دسته‌صندلی (۵و۵) فسفید آلومینیوم بهینه شد. شکل (۱) نشان‌دهنده‌ی سلول واحد نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید پیش از افزودن ناخالصی و شکل (۲) نانولوله آلومینیوم فسفید بعد از افزودن ناخالصی را نشان می‌دهند



شکل ۱: نانولوله فسفید آلومینیوم خالص



شکل ۲: نانولوله فسفید آلومینیوم آلاینده با منگنز

خواص الکترونی نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم خالص و نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم آلاینده با منگنز که شامل نمودار چگالی حالت‌ها و ساختار نواری می‌باشند، بررسی می‌شود. شکل (۳) چگالی حالت الکترونی نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم خالص و شکل (۴) نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم آلاینده با منگنز و در شکل (۵) ساختار نواری مربوط به نانولوله فسفید آلومینیوم خالص و در شکل (۶) نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم آلاینده با منگنز برای دو حالت اسپین بالا و اسپین پایین رسم شده است. همان طور که در شکل (۵) مشخص است

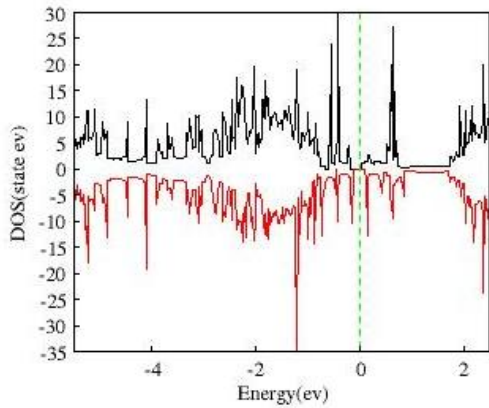
بر روی نانولوله‌های آلومینیوم فسفید به روش DFT پرداختند [۱۷]. جیانینگ، در سال ۲۰۱۱، به بررسی پایداری و ساختارهای الکترونیکی نانولوله تک لایه آلومینیوم فسفید پرداخت [۱۸]. بهشتیان و همکاران، در سال ۲۰۱۲، مطالعه‌ی تئوری از جاذب CO، بر روی سطح نانولوله‌های آلومینیوم فسفید ارائه دادند [۱۹]. سلطانی و همکاران، در سال ۲۰۱۲، اصول اولیه جذب شیمیایی SCN، بر روی سطح آلومینیوم فسفید و دیگر نانولوله‌ها را مورد مطالعه و بررسی قرار دادند [۲۰].

روش انجام محاسبات

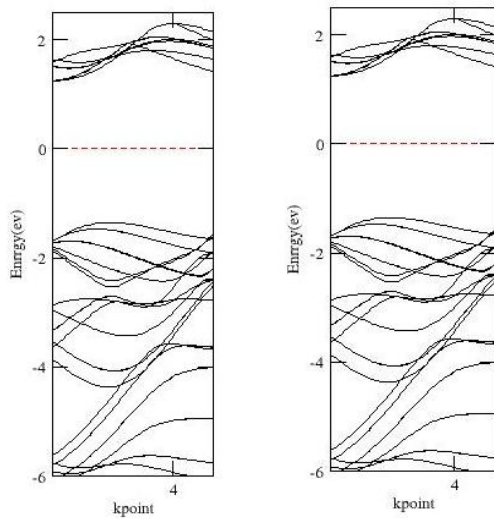
یاخته‌ی بسط نانولوله مورد مطالعه در این مقاله، هگزاگونال است. ساختار نانولوله فسفید آلومینیوم در این یاخته بسط، دسته‌صندلی با بردار کایرال (۵،۵) انتخاب شده است، بنابراین یاخته‌ی یکه شامل ۱۰ اتم آلومینیوم و ۱۰ اتم فسفر می‌باشد.

تمام محاسبات مربوط به ویژگی ساختاری و الکترونی و مغناطیسی در این پژوهش با استفاده از نرم افزار PWscf از بسته محاسباتی ESPRESSO [۲۱] انجام شده است. در این روش برای امواج تخت گسترش یافته از روش تابع موج الکترون لایه‌ی ظرفیت و برای الکترونهای هسته از روش شبه پتانسیل PBE استفاده شده است. چگالی حالت‌های یک سیستم (DOS) تعداد حالت‌های هر بازه از انرژی در هر تراز انرژی که برای اشغال شدن توسط الکترون‌ها موجود است را توصیف می‌کند. همچنین ویژگی‌های مغناطیسی، الکتریکی و اپتیکی هر ماده وابسته به چگالی حالت‌های آن ماده است.

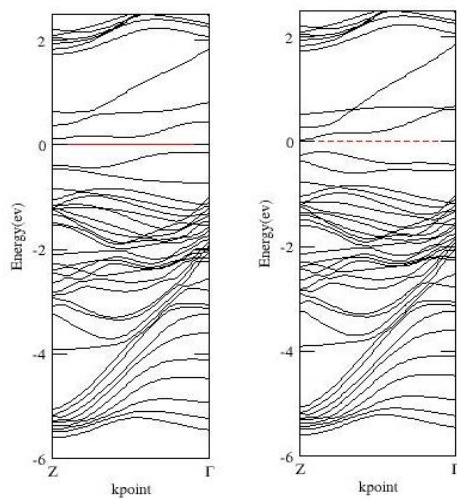
همه محاسبات در یک ابریاخته هگزاگونال با ضخامت 18 \AA انجام می‌شود. که در منطقه اول بریلوئن با استفاده از یک شبکه با ابعاد $10 \times 10 \times 1$ و انرژی قطع شده برای تابع موج و چگالی بار به ترتیب 40 Ry و 400 Ry می‌باشد. برای رسیدن به حداقل انرژی با واهلش دقیق از موقعیت‌های اتمی با دقت انرژی 1 mRy و نیروهای کمتر از 1 mRy/bohr برای تمام ساختارها بهینه‌سازی شده‌اند.



شکل ۴: نمودار چگالی حالت نانولوله فسفید آلومینیوم آلیپده با منگنز در دو حالت اسپین بالا و اسپین پایین

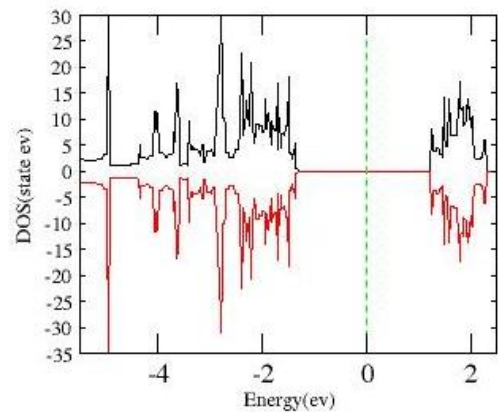


شکل ۵: ساختار نواری الکترونی نانولوله فسفید آلومینیوم خالص در دو حالت اسپین بالا و اسپین پایین



شکل ۶: ساختار نواری الکترونی نانولوله فسفید آلومینیوم آلیپده با منگنز در دو حالت اسپین بالا و اسپین پایین

نمودار ساختار نواری نانولوله فسفید آلومینیوم خالص تراز فرمی نوارهای انرژی را قطع نکرده که حاکی از این است که نیم‌رساناست و بر طبق محاسبات انجام شده دارای گاف غیرمستقیم ۲/۶۴ الکترون ولت می‌باشد و همچنین از شکل (۶) مشخص است نمودار ساختار نواری نانولوله فسفید آلومینیوم آلیپده با منگنز تراز فرمی نوارهای انرژی را قطع نکرده که تأیید بر نیم‌رسانا بودن آن است و دارای گاف غیر مستقیم ۰/۲۱۸۴ الکترون ولت است. همچنین از نمودار چگالی حالت می‌توان دید که هیچ حالتی برای اشغال شدن در تراز انرژی فرمی وجود ندارد. تأییدی بر نیم‌رسانا بودن نانولوله فسفید آلومینیوم خالص و نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم آلیپده با منگنز است. از نمودار چگالی حالت‌ها (شکل (۳)) همچنین می‌توان مشاهده کرد که منحنی اسپین بالا که نشان‌دهنده‌ی تعداد حالت‌ها با اسپین بالاست با منحنی اسپین پایین که بیان‌گر تعداد حالت‌ها با اسپین پایین است کاملاً شبیه به هم است که حاکی از غیرمغناطیسی بودن نانولوله فسفید آلومینیوم خالص است و همچنین یکسان بودن نمودار ساختار نواری برای اسپین بالا و اسپین پایین (شکل (۵)) تأییدی بر این امر است. اما در نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم آلیپده با منگنز نمودار چگالی حالت‌ها (شکل (۴)) در حالت اسپین بالا و پایین با هم متفاوت است که نشان‌دهنده مغناطیسی بودن نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم آلیپده با منگنز است و نمودار ساختار نواری برای اسپین بالا و اسپین پایین (شکل (۶)) یکسان نیست که تأیید مغناطیسی بودن نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم آلیپده با منگنز است.



شکل ۳: نمودار چگالی حالت نانولوله فسفید آلومینیوم خالص در دو حالت اسپین بالا و اسپین پایین

- [6] A. Loiseau, F. Willaime, N. Demoncey, N. Schramcheko, G. Hug, C. Colliex, H. Pascard, Boron nitride nanotubes, *Carbon* 36 (1998) 743-752.
- [7] X. Chen, J. Ma, Z. Hu, Q. Wu, Y. Chen, AlN Nanotube: Round or Faceted?, *Journal of the American Chemical Society* 127 (2005) 7982-7983.
- [8] X. Balasé, A. Rubio, S.G. Louie, M.L. Cohen, Stability and Band Gap Constancy of Boron Nitride Nanotubes, *Europhysics Letter* 28 (1994) 335-340.
- [9] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, Band parameters for nitrogen-containing semiconductors, *Journal of Applied Physics* 94 (2003).
- [10] C.Y. Su, W.Y. Chu, Z.Y. Juang, K.F. Chen, B.M. Cheng, F.R. Chen, K.C. Leou, C.H. Tsai, Large-Scale Synthesis of Boron Nitride Nanotubes with Iron-Supported Catalysts, *Journal of Physical Chemistry C* 113 (2009) 14732-14738.
- [11] M. Mirzaei, M. Mirzaei, Aluminum phosphide nanotubes: Density functional calculations of aluminum-27 and phosphorus-31 chemical shielding parameters, *Journal Molecular Structure* 951 (2010) 69-71.
- [12] M. Mirzaei, M. Giahi, Computational studies on boron nitride and boron phosphide nanotubes: density functional calculations of boron-11 electric field gradient tensors, *Physica E* 42 (2010) 1667-1669.
- [13] A. Ahmadi, J. Beheshtian, N.L. Hadipour, Interaction of NH₃ with aluminum nitride nanotube: Electrostatic vs. covalent, *Physica E* 43 (2011) 1717-1719.
- [14] M. Zhao, Y. Xia, D. Zhang, L. Mei, M. Zhao, Y. Xia, D. Zhang, L. Mei, Stability and electronic structure of AlN nanotubes, *Physical Review B* 68 (2003) .
- [15] S. V. Lisenkov, G. A. Vinogradov, N. G. Lebedev, New class of non-carbon AIP nanotubes: Structure and electronic properties, *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 81 (4) (2005) 185-189.
- [16] M. Mirzaei, M. Mirzaei, A DFT study of N-doped AIP nanotubes, *Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly* (2011) 142:115-118.
- [17] M. Mirzaei, M. Mirzaei, The C-doped AIP nanotubes: a computational study, *Solid State Sciences* 13 (2011) 244-250.
- [18] S. Jianping, Stability and Electronic Structures of Single-Walled Alp Nanotubes by First Principle Study, *Procedia Engineering* 15 (2011) 5062 - 5066.
- [19] J. Beheshtian, M. T. Baei, A. A. Peyghan, Theoretical study of CO adsorption on the surface of BN, AlN, BP and AIP nanotubes, *Surface Science* 606 (2012) 981-985.
- [20] A. Soltani, M. R. Taghartapeh, H. Mighani, A. A. Pahlevani, R. Mashkoor, A first-principles study of the SCN⁻ chemisorption on the surface of AlN, AIP, and BP nanotubes, *Applied Surface Science* 259 (2012) 637- 642.
- [21] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car.Cavazzoni, D. Ceresoli, G.L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A.D. Corso, S.d. Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A.P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, R.M. Wentzcovitch, *J. Phys.: Condens. Matter* 21 (2009).

در جدول ۱، مشخصات ساختاری مربوط به نانولوله‌های خالص و آلاییده گزارش شده است. همانطور که مشخص است طول پیوند پس از آلیاژ شدن افزایش یافته و پارامتر شبکه کاهش یافته است.

ALPNT-Mn	خالص	نمونه
۲/۲۹۷۷	۲/۲۷۷۲	طول پیوند AL-P (A ⁰)
۲/۳۱۵۹	-	طول پیوند Mn-P (A ⁰)
۱۱/۸۲۲۹	۱۱/۶۱۸۷	قطر بزرگ (A ⁰)
۱۰/۵۰۵۰	۱۰/۵۵۱۰	قطر کوچک (A ⁰)
۳/۶۹	۳/۷۲	پارامتر شبکه (A ⁰)

جدول ۱. مشخصات ساختاری مربوط به نانولوله‌های خالص و آلاییده با منگنز.

نتیجه گیری

در این پژوهش مطالعه بر روی خواص ساختاری و الکترونی نانولوله فسفید آلومینیوم خالص و نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم آلاییده با منگنز در حالت (۵،۵) انجام شده است که نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم خالص نیم‌رسانایی با گاف غیرمستقیم ۲/۶۴ الکترون ولت است و نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم آلاییده با منگنز نیم‌رسانایی با گاف غیرمستقیم ۰/۲۱۸۴ است و همچنین نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم خالص پایدارتر از نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم آلاییده با منگنز است. نانولوله فسفید آلومینیوم خالص خاصیت غیرمغناطیسی و نانولوله‌ی فسفید آلومینیوم آلاییده با منگنز خاصیت مغناطیسی دارد..

مرجع‌ها

- [1] S. Iijima, Helical microtubules of graphitic carbon, *Nature* 354 (1991) 56-58.
- [2] H. Terrones, F. López-Urías, E. Muñoz-Sandoval, J.A. Rodríguez-Manzo, A. Zamudio, A.L. Elías, M. Terrones, Magnetism in Fe-based and carbon nanostructures: Theory and applications, *Solid State Sciences* 8 (2006) 303-320.
- [3] F. Moreau, R. Langlet, P.h. Lambin, P.P. Kuzhir, D.S. Bychanok, S.A. Maksimenko, Onion-like-carbon-based composite films: Theoretical modeling of electromagnetic response, *Solid State Sciences* 11 (2009) 1752-1756.
- [4] R. Joshi, J. Engstler, P. Haridoss, J.J. Schneider, Formation of carbon nanotubes from a silicon carbide/carbon composite, *Solid State Sciences* 11 (2009) 422-427.
- [5] P.J.F. Harris, Carbon Nanotubes and Related Structures. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.