عنوان الرسالة: دراسة نظرية لتطعيم مركب أكسيد الزنك متناهي الصغر بعنصر المنجنيز

اسم الطالبة: غادة سعيد الغامدي

اسم المشرف: أ. د/ خورشيد اطهر صديقي

المستخلص

يخضع تطوير أشباه الموصلات المغناطيسية المخففة حاليًا للدراسة بسبب إمكانية استخدامها في أجهزة الإلكترونيات المغزلية؛ إذ إن هذه الأجهزة مثيرة للاهتمام بسبب السلوك المغناطيسي للمواد غير المغناطيسية المطعمة بالفلزات الانتقالية. المعالجات النظرية الحديثة تتنبأ بأن أشباه الموصلات التي لها نطاق فجوة واسع - بما في ذلك أكسيد الزنك - يمكن أن تظهر صفات مغناطيسية عندما تطعم بالفلزات الانتقالية.

هذه الدراسة تركِّز على إمكانية استخدام أكاسيد أشباه الموصلات ذوات نطاق الفجوة الواسع - بما فيها أكسيد الزنك - موادَ للإلكترونيات المغزلية. دُرستْ الخصائص التركيبية والمغناطيسية والإلكترونية لأكسيد الزنك غير المطعم والمطعم بالمنجنيز باستخدام نظرية دالة الكثافة وطريقة الجهد الزائف للموجة المستوية. ولقد تم إجراء الحسابات الأولية للتحقق من الخصائص التركيبية والإلكترونية لبنية أكسيد الزنك. لقد كشفت الحسابات الحالية - على عكس الدراسات السابقة - أن الرابطة بين الزنك والأكسجين ذات طبيعة أيونية نقية بدون أي نسبة تساهمية. كما وجد أن أعلى المستويات المشغولة وأقل المستويات غير المشغولة تنشأ من مدارات p من ذرات الزنك، مما يشير إلى وجود طريقة مختلفة لانتقال الشحنة بين ذرتي الزنك والأكسجين.

لقد دُرستْ الخصائص الأساسية التركيبية والإلكترونية لبنية أكسيد الزنك وقُورنتْ بالدراسات الأخرى. كما تحققتْ الدراسة من الخصائص التركيبية والمغناطيسية والإلكترونية لبنية أكسيد الزنك المطعم بالمنجنيز باستخدام التقريب GGA لنظرية دالة الكثافة. وجد أن ذرة المنجنيز تفضل أن تحل محل إحدى ذرات الزنك. تشير الحسابات التي استُخدم فيها جهد هابرد إلى تغيرات متنوعة وتعديلات في خصائص أكسيد الزنك المطعم بالمنجنيز كما تبين أن تركيب النطاق الالكتروني في النظام نصف معدني؛ فهو معدني في حالة الغزل العلوي وشبه موصل في حالة الغزل السفلي. كما عُدِّلَ العزم المغناطيسي للنظام إذ يمكن تفسير السيناريو الإلكتروني لنظام أكسيد الزنك المطعم بالمنجنيز بالسيناريو $3d^5$+ acceptor states. خلصت الدراسة إلى أن أكسيد الزنك المطعم بالمنجنيز شبه موصل مغناطيسي مخفف.

Thesis Title: Theoretical Investigation Of Mn-Doped ZnO Nanostructure

Student Name: Ghadah Saeed Al Ghamdi

Supervisor Name: Prof. Khursheed A. Siddiqui

Abstract

The development of dilute magnetic semiconductors (DMS) is currently understudy for their possible use in spintronic devices. These devices are quite interesting due to the exhibition of ferromagnetic behavior of nonmagnetic materials doped with transition metals. Recent theoretical treatments predict that wide band-gap semiconductors, including ZnO, can exhibit ferromagnetic ordering when doped with transition metals. This work focuses on the possibility of using wide band-gap oxide semiconductors as potential spintronic materials.

Structural, magnetic and electronic properties of undoped and Mn doped ZnO structures have been studied within the framework of the density functional theory and plane wave pseudopotential method.

Ab initio calculations have been performed to investigate the structural and electronic properties of ZnO structure. In contrast to recent studies, present calculations reveal that the Zn-O bonds have a pure ionic nature and no appreciable degree of covalency has been observed. The highest occupied and lowest unoccupied states have been found to originate from the p orbitals of the Zn atoms, suggesting different approach of charge transfer between the O and Zn atoms. Detailed calculations on the fundamental structural and electronic properties of the ZnO structure have been examined and compared with the available studies.

The structural, magnetic, and electronic properties of Mn-doped ZnO structure have been investigated using the spin- generalized gradient approximation (DFT–σGGA) of density functional theory. It is found that the Mn atom prefers to substitute one of the Zn atoms. Employing the Hubbard potential U within the calculations suggests various changes and modifications in the properties of the Mn-doped ZnO. The electronic band structure of the system, within the σGGA+U, is half-metallic, with metallic nature for the majority state and semiconducting nature for the minority state. The magnetic moment has also been modified and the electronic scenario of Mn–ZnO system can be explained by $3d^5$+ acceptor states scenario. It has been shown that Mn doped ZnO is a dilute magnetic semiconductor.