

فرمی در انرژی صفر با خط چین مشکی مشخص شده است.

با تغيير فاز از فلز به نيم فلز، اين تکلايه پتانسيل بسيار خوبي براي کاربرد در صنعت اسپینترونیک، الکترودهای نیمه فلزی و همچنین می توان در حوزه ساخت ترانزیستور اثر اسپین استفاده نمود [۸]. با افزایش کرنش کششی نوارهای اسپین بالا (رنگ قرمز) همچنان از سطح انرژی فرمی عبور میکنند، اما نوارهای اسپین پایین ( رنگ مشکی) با افزایش کرنش از سطح انرژی فرمی پايين تر امدهاست.

نتيجه گيري

با توجه مشاهده گاف نواری غیر مستقیم در کانال اسپینهای پایین بر اثر اعمال کرنش، تکلایه دی سلناید منگنز را می توان به عنوان نامزد مناسبی برای استفاده در ترانزیستور های اثر اسپین، و کاربرد های اپتوالکترونیکی مطرح کرد. یافتههای ما از تغییر فاز الکترونیکی به محققان نظری و تجربی کمک می کند تا درک بیشتری از خواص الکترونیکی قابل تنظیم در تکلایه دی سلناید منگنز و ساختارهای مشابه ان برای کاربرد در حوزه صنعت اسپینترونیک داشته باشند.

- Jin, C., Lin, F., Suenaga, K., and Iijima, S., (2009), "Fabrication of a freestanding boron nitride single layer and its defect assignments", Physical review letters, Vol. 102, No. 19, p.
- [7] Kou, L., Frauenheim, T., and Chen, C., (2013), "Nanoscale multilayer transition-metal dichalcogenide heterostructures: band gap modulation by interfacial strain and spontaneous polarization", The journal of physical chemistry letters, Vol. 4, No. 10, pp. 1730-1736.
- [r] He, K., Poole, C., Mak, K. F., and Shan, J., (2013), "Experimental demonstration of continuous electronic structure tuning via strain in atomically thin MoS2", Nano letters, Vol. 13, No. 6, pp. 2931-2936.
- [1] Ataca, C., Sahin, H., and Ciraci, S., (2012), "Stable, single-layer MX2 transition-metal oxides and dichalcogenides in a honeycomb-like structure", The Journal of Physical Chemistry C, Vol. 116, No. 16, pp. 8983-8999.
- [o] Perdew, J. P., Burke, K., and Ernzerhof, M., (1996), "Generalized gradient approximation made simple", Physical review letters, Vol. 77, No. 18, p. 470.
- [٦] Kan, M., Adhikari, S., and Sun, Q.," ,(Υ·١٤) Ferromagnetism in mnx 2 (x= s, se)
- monolayers", Physical Chemistry Chemical Physics, Vol. 16, No. 10, pp. 4990-4994.
- [V] Webster, L. and Yan, J.-A., (2018), "Strain-tunable magnetic anisotropy in monolayer CrCl 3, CrBr 3, and CrI 3", *Physical Review B*, Vol. 98, No. 14, p. 144411.

شکل۲ (الف) ساختار نواری در حالت تعادل، اسپینهای بالا و پایین به ترتیب با رنگ قرمز و مشکی مشخص شده اند. چگالی حالت ها تکلایه دی سلناید منگنز در شکل (ب) رسم شده است. با توجه به اینکه، اسپینهای بالا (پایین) به رنگ قرمز (مشکی) تراز فرمی را قطع نموده اند، در نتیجه تکلایه دی سلناید منگنز فلز میباشد. بررسی منحنی چگالی حالتها در نمودار (ب) شکل ۲ نشان میدهد که الکترونهادرنواحی نزدیک به نوار رسانش و ظرفیت مربوط به اوربیتال d اتم منگنز و اوربیتال p اتم سلنیوم نسبت به سایر اوربیتال.ها در چگالی حالت.ها سهم و نقش بیشتری دارند ساختار نواری تکلایه دی سلناید منگنز تحت کرنش کششی در شکل۳ نشان داده شده است. کرنش دو محوره به صورت 100  $imes \frac{a-a_0}{a} imes 2$  تعریف می شود که در آن ao و a به ترتیب ثابت های شبکه در حالت های تعادل و کرنش یافته هستند[۷]. در شکل ۳ به وضوح مشخص است که با افزایش کرنش کششی، نوارهای انرژی با شیب ملایم تمایل به صاف شدن و در کرنش ۲٪+ برای تکلایه دی سلناید منگنز با ایجاد ۲.۲ الکترون ولت گاف غیر مستقیم در کانال اسپین های پایین، شاهد تغيير فاز از فلز به نيم فلز مى باشيم.

تاثیر کرنش بر ساختار نواری تکلایه دی سلناید منگنز زینب چوپانی دیگه سرا <sup>۱</sup>، سحرایزدی ویشکایی <sup>۲</sup>، میثم باقری تاجانی <sup>۱</sup> آگروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه گیلان، رشت <sup>۲</sup> پژوهشکده فیزیک، پژوهشگاه دانش های بنیادی، تهران

ناحیه بریلوئن به ۱×۲۱×۲۱ نقطه k تقسیم شده است. مقدار ۲۵ آنگستروم خلا عمود بر صفحه برای جلوگیری از برهمکنش بین تک لایههای مجاور استفاده شده است. برای بهینه سازی نیروی قابل تحمل v/۰۰۱eV/Å و تنش قابل تحمل GPa ۰/۰۰۱ و انرژی قطع ۳۰۰Ha در نظر گرفته شده است. پارامترهای شبکه، اندازه و شکل سلول واحد را بیان میکنند که شامل اندازهٔ هر یک از وجوه سلول واحد و زاویههای بین این وجو می باشند. بعد از بهینه سازی، ثابت شبکه، طول پیوند منگنز با سلناید و طول پیوند منگنز با منگنز به ترتیب، 🗛 ۲/۵۸ ، ۲/۵۸۸ و ۲/۸٤ محاسبه شد. نتایج ما توافق خوبی با کارهای نظری انجام شده توسط مینکان و



شکل ۱ ساختار اتمی تکلایه دی سلناید منگنز از نمای (الف) بالا (ب) پهلو . سلول واحد این تکلایه، لوزی رخ با دو اتم سلناید(به رنگ زرد) و یک اتم منگنز(به رنگ بنفش) میباشد که با خط چین قرمز در شکل (الف) نشان داده شده است. (dMn-Se)طول پیوند اتم منگنز و سلناید، (**C**Mn-Mn) طول پیوند بین اتمهای سلناید است. ساختار نواری و چگالی حالتها در شکل ۲ رسم شده است. سطح انرژی صفر، بیانگر موقعیت انرژی فرمی میباشد که با خط چین افقی مستقیم در ساختار نواری و خط عمودی راست در چگالی حالتها نشان داده شده است (ev) andian

-3





-4 M K



چکيده

در این مطالعه، تآثیر کرنش برخواص الکترونیکی تکلایه دی سلناید منگنز را با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی بررسی نمودیم. برای اعمال صحیح برهم کنش های کلونی الکترون های d، رهیافت DFT+U با استفاده از روش تصحيح هابارد به كار گرفته شد. ساختار نواری با اعمال کرنش کششی و فشاری بررسی شد. تحقیقات نظری ما نشان می دهد که تکلایه دی سلناید منگنز به طور ذاتی و در حالت پایه رفتار فلزی دارد، اما در کرنشهای بالاتر از ۲٪ شاهد تغییر فاز از فلز به نیمه فلز مىباشىم.

## نتايج و بحث

بعد از ساخت موفق گرافن، مواد دو بعدی به دلیل خاصیت مکانیکی و الکترونیکی بینظیر و همچنین کاربردهای بالقوه متعدد، به طور گسترده مورد مطالعه قرار گرفته اند[۱]. در این بین دسته ای از مواد بنام ترانزيشن متال ديكلكوژنيد به فرم MX2 ، با داشتن خواص الكتروني جالب و منحصر به فردشان بسیار مورد توجه و بررسی قرار گرفتند[۲]. این خواص الكترونيكي با اعمال كرنش قابل تنظیم و تغییر است[۳]. در مطالعات نظری گزارش شده است که تکلایه دی سلناید منگنز در فاز **T**پایدار است[۴] و رفتار فلزی دارد. این تکلایه همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده است، از یک لایه اتم منگنز که بین دولایه از اتمهای سلناید قرار گرفته، تشکیل شده است و هر اتم منگنز در مرکز، با شیش اتم سلناید در اطراف خود يک هشت ضلعي تشکيل داده است. در مطالعه حاضر، برای محاسبات اصول اوليه از نظريه تابعي چگالی با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) از روش پردیو-برک-انزرهوف [0] استفاده شده است. برای توصيف الکترون،های اوربیتال d اتم منگنز و بر همکنش های کولنی روش در GGA+Uبا اسپین قطبیده، مقدار ترم هابارد **۳.۹ الکترون ولت درنظر گرفته** شده است[7].