

تأثیر کرنش بر ساختار نواری تک‌لایه دی‌سلناید منگنز

زینب چوپانی دیگه سرا^۱، سحرایزدی ویشکایی^۲، میثم باقری تاجانی^۱

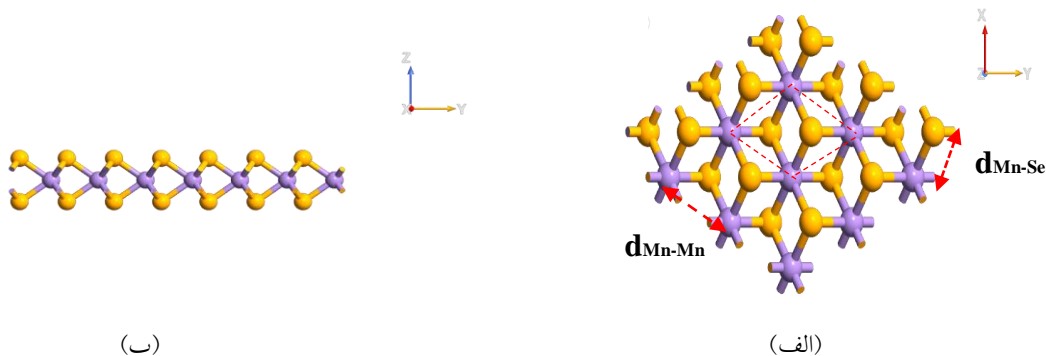
^۱گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه گیلان، رشت

^۲پژوهشکده فیزیک، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی، تهران

چکیده

در این مطالعه، تأثیر کرنش برخواص الکترونیکی تک‌لایه دی‌سلناید منگنز را با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) بررسی نمودیم. برای اعمال صحیح برهم‌کنش‌های کولونی الکترون‌های d ، رهیافت $DFT+U$ با استفاده از روش تصحیح هابارد به کار گرفته شد. ساختار نواری با اعمال کرنش کششی و فشاری بررسی شد. تحقیقات نظری ما نشان می‌دهد که تک‌لایه دی‌سلناید 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 می‌باشیم.

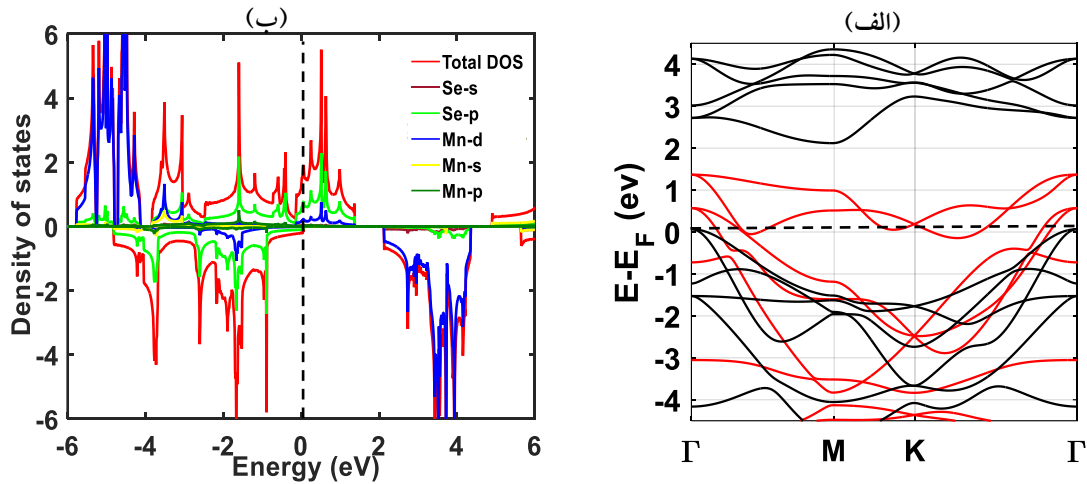
بعد از ساخت موفق گرافن، مواد دو بعدی به دلیل خاصیت مکانیکی و الکترونیکی بی‌نظیر و همچنین کاربردهای بالقوه متعدد، به طور گسترده مورد مطالعه قرار گرفته‌اند [۱]. در این بین دسته‌ای از مواد بنام ترانزیشن متال دیکلوژنید به فرم MX_2 ، با داشتن خواص الکترونی جالب و منحصر به فردشان بسیار مورد توجه و بررسی قرار گرفتند [۲]. این خواص الکترونیکی با اعمال کرنش قابل تنظیم و تغییر است [۳]. در مطالعات نظری گزارش شده است که تک‌لایه دی‌سلناید 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 دو لایه از اتم‌های سلناید قرار گرفته، تشکیل شده است و هر اتم منگنز در مرکز، با شش اتم سلناید در اطراف خود یک هشت ضلعی تشکیل داده است.



شکل ۱ ساختار اتمی تک‌لایه دی‌سلناید 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. (d_{Mn-Se}) طول پیوند اتم منگنز و سلناید، (d_{Mn-Mn}) طول پیوند بین اتم‌های سلناید است.

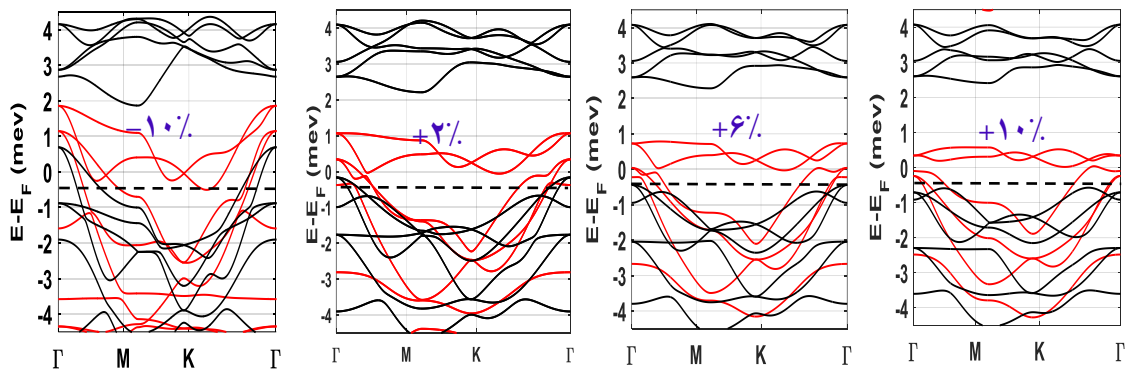
در مطالعه حاضر، برای محاسبات اصول اولیه از نظریه تابعی چگالی با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) از روش پردیو-برک-انزروهوف [۵] استفاده شده است. برای توصیف الکترون‌های اوربیتال d اتم منگنز و برهمکنش‌های کولونی در روش $GGA+U$ با اسپین قطبیده، مقدار ترم هابارد ۳٫۹ الکترون ولت در نظر گرفته شده است [۶]. ناحیه بریلوئن به $1 \times 1 \times 2$ نقطه k تقسیم شد. مقدار ۲۵ آنگستروم خلا عمود بر صفحه برای جلوگیری از برهمکنش بین تک‌لایه‌های

مجاور استفاده شده است. برای بهینه سازی نیروی قابل تحمل 0.001 eV/\AA و تنش قابل تحمل 0.001 GPa و انرژی قطع 300 Ha در نظر گرفته شده است. پارامترهای شبکه، اندازه و شکل سلول واحد را بیان می کنند که شامل اندازه هر یک از وجوه سلول واحد و زاویه های بین این وجوه می باشند. بعد از بهینه سازی، ثابت شبکه، طول پیوند منگنز با سلناید و طول پیوند منگنز با منگنز به ترتیب، 3.65 \AA ، 2.58 \AA و 3.64 \AA محاسبه شد. نتایج ما توافق خوبی را با کار نظری انجام شده توسط مینکان و همکاران دارد [۶].



شکل ۲ (الف) ساختار نواری در حالت تعادل، اسپین های بالا و پایین به ترتیب با رنگ قرمز و مشکی مشخص شده اند. چگالی حالت ها تک لایه دی سلناید منگنز در شکل (ب) رسم شده است.

ساختار نواری و چگالی حالت ها در شکل ۲ رسم شده است. سطح انرژی صفر، بیانگر موقعیت انرژی فرمی می باشد که با خط افقی مستقیم در ساختار نواری و خط عمودی راست در چگالی حالت ها نشان داده شده است.



شکل ۳ ساختار نواری تک لایه دی سلناید منگنز در کرنش $+10\%$ ، $+6\%$ ، $+2\%$ و -10% رسم شده است. تراز فرمی در انرژی صفر با خط چین مشکی مشخص شده است.

با توجه به اینکه، اسپین های بالا (پایین) به رنگ قرمز (مشکی) تراز فرمی را قطع نموده اند، در نتیجه تک لایه دی سلناید منگنز فلز می باشد. بررسی منحنی چگالی حالت ها در نمودار (ب) شکل ۲ نشان می دهد که الکترون ها در نواحی 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 تک لایه دی سلناید منگنز تحت کرنش

کششی در شکل ۳ نشان داده شده است. کرنش دو محوره به صورت $\epsilon = \frac{a-a_0}{a_0}$ تعریف می شود که در آن a_0 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 $+1/2$ برای تک لایه دی سلناید منگنز با ایجاد ۲,۲ الکترون ولت گاف غیر مستقیم در کانال اسپین های پایین، شاهد تغییر فاز از فلز به نیم فلز می باشیم. با تغییر فاز از فلز به نیم فلز، این تک لایه پتانسیل بسیار خوبی برای کاربرد در صنعت اسپیترونیک، 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 می کنند، اما نوارهای اسپین پایین (رنگ مشکی) با افزایش کرنش از سطح انرژی فرمی پایین تر آمده است.

نتیجه گیری

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

مرجع ها

- [۱] 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. 195505.
- [۲] 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.
- [۳] 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.
- [۴] 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.
- [۵] Perdew, J. P., Burke, K., and Ernzerhof, M., (1996), "Generalized gradient approximation made simple", *Physical review letters*, Vol. 77, No. 18, p. ۳۸۶۵ .
- [۶] Kan, M., Adhikari, S., and Sun, Q., "(۲۰۱۴)", "Ferromagnetism in mxn₂ (x= s, se) monolayers", *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 16, No. 10, pp. 4990-4994.
- [۷] Webster, L. and Yan, J.-A., (2018), "Strain-tunable magnetic anisotropy in monolayer CrCl₃, CrBr₃, and CrI₃", *Physical Review B*, Vol. 98, No. 14, p. 144411.