

تاثیر کرنش بر تک لایه ی VSe_2

مهدی نجدی^۱، میثم باقری تاجانی^۱، سحر ایزدی ویشکایی^۲

^۱ دانشکده ی علوم پایه ی دانشگاه گیلان

^۲ پژوهشکده ی فیزیک پژوهشگاه دانش های بنیادی

چکیده

دیکلکوژنیدهای فلزات واسطه، TMD، به دلیل داشتن خاصیت مغناطیسی و قطبیدگی و خاصیت فرومغناطیسی ذاتی موجود در آنها بسیار مورد توجه قرار گرفته اند. ما در این تحقیق خصوصیات مغناطیسی تک لایه ی VSe_2 را با استفاده از نظریه ی تابعی چگالی (DFT) و از لحاظ ساختاری این ماده را در دوفاز 1T و 2H بررسی می کنیم. بررسی ما نشان می دهد که فاز 1T یک فرومغناطیس و فاز 2H یک نیمه رسانای اسپینی است. نتایج برآمده از محاسبات نظری و تجربی دیگر نشان می دهد تک لایه VSe_2 - 1T فلز می باشد، پس با اعمال استرین (کرنش) ۰ تا ۱۳٪ در می یابیم که مغناطش و دمای کوری (Tc) به میزان کرنش وارد شده بستگی دارند.

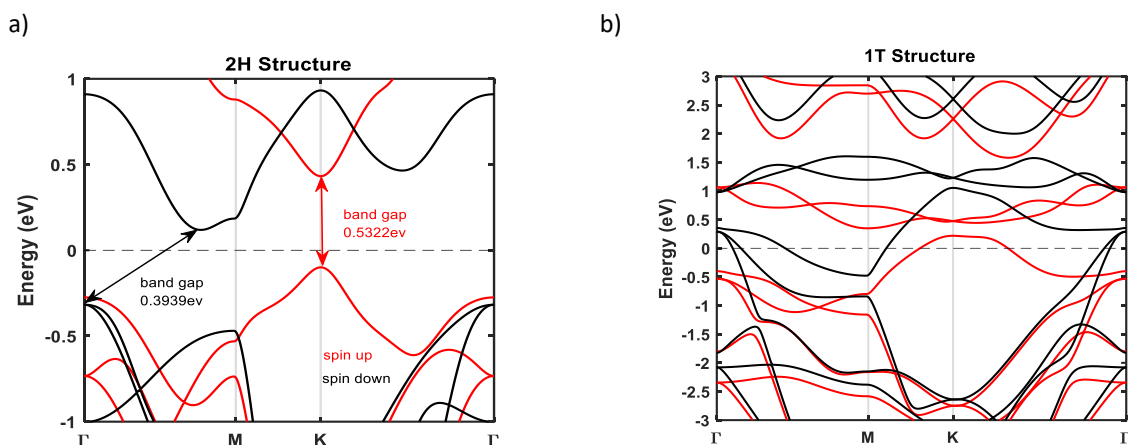
متن مقاله

در TMD ها به دلیل ویژگی های خاصی که دارند می توانند در نسل های جدید ترانزیستورها، وسیله های انتشار عکس، منبع های هیدروژنی و دستگاه های اسپینترونیک مورد استفاده قرار گیرند [1]. اخیراً TMD های دو بعدی مانند VS_2 با موفقیت سنتز شده است [2]. این طرح می تواند برای بقیه ی TMD مانند VSe_2 مورد استفاده قرار گیرد. مغناطیس ذاتی و برنامه های کاربردی بالقوه باعث جذب علاقه ی زیادی شده است. بررسی سیستمی در مورد الکترونیک و خاصیت مغناطیسی تک لایه های VSe_2 ، VS_2 و همچنین اتصال بین کرنش و خواص مغناطیسی به وسیله ی محاسبات DFT به ما نشان می دهد که تک لایه های VSe_2 و VS_2 خاصیت مغناطیسی دارند [3].

محاسبات ساختار الکترونیکی تک لایه برای موج PBE و تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انجام شده و در QuantumWise به اجرا درآمده است. تمامی محاسبات شامل آرایش هندسی و محاسبات ساختار الکترونیکی بر پایه ی اسپین-مغناطیس نظریه تابعی چگالی (DFT) انجام شده است. ناحیه بریلوئن با مش $1 \times 20 \times 20$ برای نقاط k نگاشت گردید. انرژی برابر $100Ha$ ، فضای خلا جهت جلوگیری از برهم کنش لایه با تصویرش برابر با 20Å و معیار همگرایی انرژی $10^{-5} eV$ در نظر گرفته شد. در طول بهینه سازی ساختار بیشینه نیرو وارد بر هر اتم $10^{-3} eV/\text{Å}$ و بیشینه استرس وارد بر سلول واحد $10^{-3} GP$ در نظر گرفته شده است.

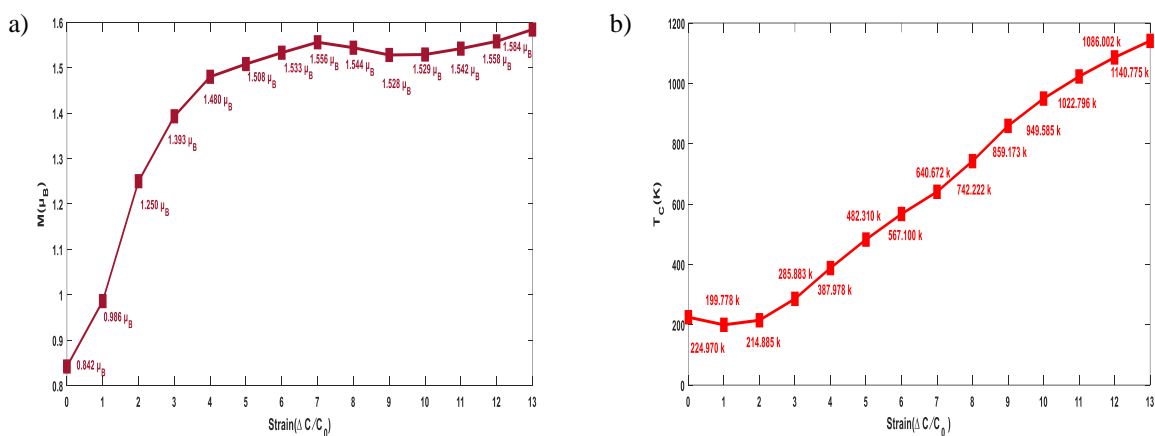
همانطوری که در شکل ۱(a) می بینید ساختار نواری تک لایه ی VSe_2 که در فاز 2H مشخص شده است، دارای گاف نواری مستقیم $0.5329 eV$ برای اسپین بالا و گاف نواری غیرمستقیم $0.3939 eV$ برای اسپین پایین است. وجود این گافها نشان می دهد که این

تک لایه در فاز 2H یک نیمه رسانای اسپینی است. در شکل ۱ (b) که ساختار نواری تک لایه‌ی VSe_2 در فاز 1T مشخص شده است، که نشان می‌دهد این تک لایه در فاز 1T یک فرومغناطیس است چراکه هیچ گونه گاف نواری در آن وجود ندارد [4].



شکل ۱) ساختار نواری تک لایه‌ی VSe_2 در (a) فاز 2H و (b) فاز 1T نشان داده شده است. رنگ قرمز بیانگر اسپین بالا (spin up) و سیاه بیانگر اسپین پایین (spin down) است.

بعد از این که از فرومغناطیس بودن تک لایه‌ی VSe_2 - 1T اطمینان حاصل کردیم، حال به بررسی تاثیرات کرنش بر روی این تک لایه می‌پردازیم. ما به تک لایه‌ی VSe_2 - 1T کرنش ۰ تا ۱۳٪ اعمال کردیم و نتایج این بررسی را در شکل ۲ نشان داده‌ایم.



شکل ۲) نمودار اعمال کرنش ۰ تا ۱۳٪ بر تک لایه‌ی VSe_2 - 1T و تاثیر آن بر (a) مغناطیس و (b) دمای کوری دارد.

شکل ۲ (a) نشان می‌دهد که تکانه‌ی مغناطیسی و انادیم با افزایش کرنش، ابتدا تا زمانی که این تکانه $1.480 \mu_B$ شود (کرنش ۴٪)، با شیب تند افزایش می‌یابد و سپس افزایش آن با شیب کمتری صورت می‌گیرد و بیشترین افزایش مرتبط به کرنش ۲٪ می‌باشد، چراکه شیب تندتری دارد و سپس شیب افزایشی تکانه‌ی مغناطیسی، کاهش می‌یابد. در تک لایه‌ی $TaSe_2$ ، هنگامی که کرنش ۴٪ اعمال کنیم تغییر خاصی در تکانه‌ی مغناطیسی اتم Ta مشاهده نمی‌شود اما با افزایش کرنش تا ۱۲٪ شاهد افزایش میزان آن هستیم [5]. اعمال کرنش تا ۱۰٪ در CrI_3 باعث افزایش تکانه‌ی مغناطیسی Cr از $2.966 \mu_B$ تا $3.364 \mu_B$ می‌شود [6]. در $MaTe_2$ با اعمال کرنش تا ۱۰٪ با افزایش اندک تکانه‌ی مغناطیسی منگنز تا $4.3 \mu_B$ روبه‌رو هستیم [7]. ما و همکاران نیز تاثیر افزایشی تکانه‌ی مغناطیسی و انادیم را بر اثر کرنش در VS_2 اثبات کردند [1].

برای بررسی دمای کوری ما به روابط زیر نیازمندیم.

$$\Delta E = E_{AFM} - E_{FM} \quad (1)$$

$$\Delta E = \frac{E_{ex}}{3} \quad (2)$$

$$T_C = \left(\frac{2}{3}\right) \Delta E = \left(\frac{2}{3}\right) \frac{\Delta E}{k_B}$$

برای دست آوردن دمای کوری از روابط (1) و (2) استفاده می‌کنیم. همانطوری که در شکل 2(b) مشخص است، هنگامی که کرنش اعمال می‌کنیم (کرنش 1٪) اندکی دمای کوری پایین آمده تا زمانی که این دما 199.778 k شود، با افزایش کرنش (تا 13٪) دمای کوری با شیب ملایمی افزایش می‌یابد. پس در حالت کلی افزایش کرنش موجب افزایش دمای کوری می‌شود. در $MnSe_2$ هم با اعمال کرنش 5٪، دمای کوری از 330k تا 375k افزایش می‌یابد [8]. در CrI_3 با اعمال کرنش 3٪ دمای کوری با شیب ملایمی افزایش یافته و از 44.4k به 51.4k می‌رسد [9]. در Fe_3GeTe_2 هنگامی که کرنش 1٪ اعمال شود، کاهش دمای کوری را با شیب زیادی شاهد هستیم اما با اعمال کرنش تا 6٪، این دما با شیب کمتری کاهش پیدا می‌کند [10]. در $MaTe_2$ با اعمال کرنش تا 10٪، با افزایش دمای کوری از 100k تا 440k مواجه می‌شویم [7].

نتیجه‌گیری

در کل با DFT خواص مغناطیسی VSe_2 را در فازهای 1T, 2H بررسی کردیم، گاف نواری در فاز 1T برابر صفر است و نشان دهنده‌ی فرومغناطیس بودن ساختار و در فاز 2H دارای گاف نواری است و یک نیمه‌رسانای اسپینی است. اعمال کرنش از 0 تا 13٪ روی مغناطش و انادیم و دمای کوری تک‌لایه VSe_2 - 1T تاثیر گذار است.

مرجع‌ها

- [1] Ma, Y., et al. (2012). "Evidence of the existence of magnetism in pristine VX₂ monolayers (X= S, Se) and their strain-induced tunable magnetic properties." *Acs Nano* **6**(2): **1695-1701**.
- [2] Feng, J., et al. (2011). "Metallic few-layered VS₂ ultrathin nanosheets: high two-dimensional conductivity for in-plane supercapacitors." *Journal of the American Chemical Society* **133**(44): **17832-17838**.
- [3] Fuh, H.-R., et al. (2016). "Metal-insulator transition and the anomalous Hall effect in the layered magnetic materials VS₂ and VSe₂." *New Journal of Physics* **18**(11): **113038**.
- [4] Li, F., et al. (2014). "Versatile electronic properties of VSe₂ bulk, few-layers, monolayer, nanoribbons, and nanotubes: A computational exploration." *The Journal of Physical Chemistry C* **118**(36): **21264-21274**.
- [5] Chowdhury, S., et al. (2019). "Strain-controlled magnetic and optical properties of monolayer 2H-TaS₂." *Physical Review Materials* **3**(8): **084004**.
- [6] Wu, Z., et al. (2019). "Strain-tunable magnetic and electronic properties of monolayer CrI₃." *Physical Chemistry Chemical Physics* **21**(15): **7750-7755**.
- [7] Chen, W., et al. (2020). "Tuning magnetic properties of single-layer MnTe₂ via strain engineering." *Journal of Physics and Chemistry of Solids*: **109489**.
- [8] Kan, M., et al. (2014). "Ferromagnetism in mx₂ (x= s, se) monolayers." *Physical Chemistry Chemical Physics* **16**(10): **4990-4994**.
- [9] Leon, A., et al. (2020). "Strain-induced phase transition in CrI₃ bilayers." *2D Materials*: **2053-1583**.

[10] Yuan, D., et al. (2017). "Tuning magnetic properties in quasi-two-dimensional ferromagnetic $\text{Fe}_{3-y}\text{Ge}_{1-x}\text{As}_x\text{Te}_2$ ($0 \leq x \leq 0.85$)." *Materials Research Express* **4(3)**: 036103.