

اثر تقارن زوجی اسپین سه گانه f بر سطوح انرژی آندریف در تک لایه MoS_2

رضایی ساداتی، طاهره؛ نوروزی، میلاد؛ خضرلو، مریم؛ گودرزی، هادی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ارومیه، ارومیه

چکیده

در کار حاضر، سطوح مقید آندریف در اتصال جوزفسون ابررسانا/نرمال/ابررسانا با پایه مولیبدن دی سولفاید محاسبه می شود، بطوریکه ناحیه نرمال دارای عرض متناسب با طول همدوسی می باشد. تقارن پارامتر نظم در نظر گرفته شده در این ساختار جفت شدگی غیر معمول اسپین سه گانه نوع f می باشد این تقارن زوجی با توجه مقدار بالای اندازه حرکت اوربیتالی آن ($l = 3$) گاف پیچیده ای دارد. این گاف از طریق اثر مجاورت در مولیبدن دی سولفاید القا می شود. اثر پارامترهای مختلف ساختار نظیر زاویه ابررسانایی θ_S بر روی سطوح مقید آندریف بررسی می شود.

Effect of spin-triplet f -wave pairing symmetry on Andreev energy state in monolayer MoS_2

Rezaei Sadati, Tahereh; Norouzi, Milad; Khezerlou, Maryam; Goudarzi, Hadi

Department of Physics, Faculty of Science, Urmia University, Urmia

Abstract

In this work, we analytically calculate the Andreev bound states in monolayer molybdenum disulfide superconductor/normal/superconductor Josephson of junction, in which the width of normal region is order of coherent length. The symmetry of pairing order, in this structure, is taken to be unconventional spin-triplet f -wave pairing. This pairing symmetry presents a complicated superconducting gap due to having a large orbital angular momentum ($l=3$). This gap is induced to the monolayer MoS_2 by the proximity-effect. We investigate the influence of structural parameters, such as superconductor incidence angle θ_S , on Andreev bound states.

PACS No. 74 و 78

مقدمه

ساختار ساندویچی شکل می باشد که یک لایه اتم های مولیبدن بین دو لایه سولفاید محصور شده است [۳]. در یک لایه یک اتم مولیبدن با شش اتم سولفاید و یک اتم سولفاید با سه اتم مولیبدن توسط پیوند کوالانسی به هم متصل می شوند. در مولیبدن دی-سولفاید حجمی لایه ها توسط پیوند واندروالسی روی هم قرار گرفته اند. وجود پیوند کوالانسی قوی بین لایه مولیبدن و سولفاید موجب شده است این ماده سخت تر از فولاد باشد [۴ و ۵]. مولیبدن

کشف ساختارهای دو بعدی نظیر گرافن و مولیبدن دی سولفاید [۱ و ۲]، شروعی برای مطالعات گسترده روی مواد دیراکی می باشد که در تولیدات آینده نانو ابزارها، به دلیل خواص منحصر به فرد آنها به کار گرفته می شود. ترکیب فلزات انتقال با چالکوژن ها مانند مولیبدن دی سولفاید در ساختار تک لایه ای دارای باند گپ قابل توجهی نسبت به گرافن می باشند. مولیبدن دی سولفاید دارای

توسط پارامترهای $s = \pm 1$ و $\tau = \pm 1$ معین می‌شوند. پارامترهای توپولوژیکی و تفاوت جرم الکترون-حفره در هامیلتونی بالا به ترتیب عبارتند از: $\beta = 2/21$ و $\alpha = 0/43$ [۱۲]. پتانسیل شیمیایی دو ناحیه نرمال μ_N و ابرسانا $\mu_S = E_F - U(x)$ می‌باشند. پتانسیل جفت شدگی ابرسانا، برای جفت شدگی نوع f به فرم زیر می‌باشد [۹]:

$$\hat{\Delta}_s(\vec{k}) = [d(\vec{k}) \cdot \sigma] i \sigma_y, \quad d(\vec{k}) = \Delta_f(\vec{k}) \hat{z} \quad (3)$$

$$\Delta_f = \Delta_0 \cos \theta_s (\cos^2 \theta_s - 3 \sin^2 \theta_s) \quad (4)$$

اگر پارامترهای A و B به صورت زیر تعریف شود

$$A = \Delta_f + \frac{\hbar^2 |k|^2}{2m_0} \left(\frac{\alpha}{2} + \frac{\beta}{2} \right) - E_f + U(x)$$

$$B = -\Delta_f + 2\lambda s \tau + \frac{\hbar^2 |k|^2}{2m_0} \left(\frac{\alpha}{2} - \frac{\beta}{2} \right) - E_f + U(x)$$

در نتیجه می‌توان با محاسبات پیچیده تحلیلی انرژی پراکندگی الکترون-حفره را برای ناحیه ابرسانا به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$\varepsilon = \xi \sqrt{\left(\frac{A+B}{2} + v_s \sqrt{\frac{(A-B)^2}{4} + v_f^2 \hbar^2 k^2 + |\Delta_f|^2 (1-\eta^2)} \right)^2 + |\Delta_s|^2 \eta^2} \quad (5)$$

که در آن $\eta^2 = 1 - \left(\frac{A-B}{A+B} \right)^2$ پارامتر $\xi = \pm 1$ می‌باشد.

برانگیختگی‌های شبه الکترون و شبه حفره را نشان می‌دهد در صورتیکه $v = \pm 1$ بیانگر باند رسانش و باند ظرفیت است. نمودار انرژی پراکندگی معادله (5) را برای ناحیه ابرسانا برحسب K به صورت زیر داده می‌شود.

دی‌سولفاید حجمی دارای باند گاف غیرمستقیم $1/2$ الکترون ولت و مولیبدن دی‌سولفاید تک لایه دارای باند گاف مستقیم $1/9$ الکترون ولت می‌باشد [۶ و ۷]. مولیبدن دی‌سولفاید نیز مانند گرافن خاصیت ابرسانایی ندارد، ولی با استفاده از اثر مجاورت می‌توان خاصیت ابرسانایی را در این ماده القا کرد برای این کار یک الکتروود ابرسانا را در روی ورقه مولیبدن دی‌سولفاید قرار می‌دهند. ساختار شش‌گوشه این مواد شرایط لازم برای جفت شدگی‌های تقارن‌های مختلف ابرسانایی را فراهم می‌کند [۸]. در سال‌های اخیر، در چنین ساختارهایی مباحث مختلفی مانند رسانندگی زیرگاف و جریان جوزفسون بررسی شده است [۸-۱۱]. در این مقاله، سطوح انرژی آندریف در پیوند دو اتصالی ابرسانا/نرمال/ابرسانا (S/N/S) با پایه مولیبدن دی‌سولفاید را محاسبه می‌کنیم که تقارن جفت شدگی نوع f در نظر گرفته شده است. در آخر با استفاده از محاسبات عددی نمودارهای طیف انرژی آندریف برحسب اختلاف فاز ابرسانایی رسم می‌شود.

انرژی برانگیختگی ابرسانای سه‌گانه

برای بدست آوردن انرژی برانگیختگی‌های الکترون-حفره کم انرژی، معادله دیراک بوگولیوبوف-دوژن (DBdG) معرفی شده باید در مولیبدن دی‌سولفاید نوشته شود [۹] و سپس ویژه‌مقادیر محاسبه شود.

هامیلتونی ناحیه ابرسانا MoS_2 ، به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = \begin{pmatrix} h_0 - E_f + U(x) & \Delta_f \\ \Delta_f^* & -h_0 + E_f - U(x) \end{pmatrix} \quad (1)$$

که در آن:

$$h_0 = \hbar v_f \vec{k} \cdot \vec{\sigma}_\tau + \Delta \sigma_z + \lambda s \tau (1 - \sigma_z) \quad (2)$$

$$+ \frac{\hbar^2 |k|^2}{2m_0} \left(\frac{\alpha}{2} + \frac{\beta}{2} \sigma_z \right).$$

$\sigma_\tau = (\tau \sigma_x, \sigma_y)$ ماتریس‌های پائولی هستند. برهم‌کنش اسپین مدار با ثابت جفت شدگی $\lambda = 40 \text{ meV}$ واقع می‌شود و سرعت فرمی $v_f = 0/53 \times 10^6 \text{ m/s}$ می‌باشد. اسپین و چاهک به ترتیب

$$\psi_S^R = t \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 e^{i\tau\theta_s} \\ e^{i\tau\theta_s} e^{-i\varphi_e} e^{-i\varphi_2} \\ e^{-i\varphi_e} e^{-i\varphi_2} \end{pmatrix} e^{ik_s x} + t' \begin{pmatrix} \xi_3 \\ -\xi_4 e^{-i\tau\theta_s} \\ -e^{-i\tau\theta_s} e^{-i\varphi_h} e^{-i\varphi_2} \\ e^{-i\varphi_h} e^{-i\varphi_2} \end{pmatrix} e^{-ik_s x} \quad (6)$$

همچنین اسپینور ابرسانای سمت چپ اتصال بدست می‌آید:

$$\psi_S^L = r \begin{pmatrix} \xi_1 \\ -\xi_2 e^{-i\tau\theta_s} \\ -e^{-i\tau\theta_s} e^{-i\varphi_e} e^{-i\varphi_1} \\ e^{-i\varphi_e} e^{-i\varphi_1} \end{pmatrix} e^{-ik_s x} + r' \begin{pmatrix} \xi_3 \\ \xi_4 e^{i\tau\theta_s} \\ e^{i\tau\theta_s} e^{-i\varphi_h} e^{-i\varphi_1} \\ e^{-i\varphi_h} e^{-i\varphi_1} \end{pmatrix} e^{ik_s x} \quad (7)$$

برای اسپینور ناحیه نرمال هم داریم:

$$\psi_N = a(1 \ \tau\alpha e^{i\tau\theta} \ 0 \ 0)^T e^{ik_N^+ x} + b(1 \ -\tau\alpha e^{-i\tau\theta} \ 0 \ 0)^T e^{-ik_N^+ x} \quad (8)$$

$$+ c(0 \ 0 \ 1 \ \tau\alpha_h e^{i\tau\theta_h})^T e^{-ik_N^+ x} + d(0 \ 0 \ 1 \ \tau\alpha_h e^{-i\tau\theta_h})^T e^{ik_N^+ x}$$

سطوح انرژی آندریف با شرایط مرزی زیر بدست می‌آید:

$$\psi_S^L = \psi_N \Big|_{x=0}, \quad \psi_N = \psi_S^R \Big|_{x=d}$$

بعد از محاسبات بسیار طولانی سطح انرژی آندریف به صورت زیر بدست می‌آید.

$$\varepsilon = \frac{-Y_2 \pm \sqrt{Y_2^2 - Y_1 Y_3}}{2Y_1} \quad (9)$$

که در آن

$$Y_1 = e^{2i\varphi} (K\alpha_1 - W\alpha_1)^2 + 1$$

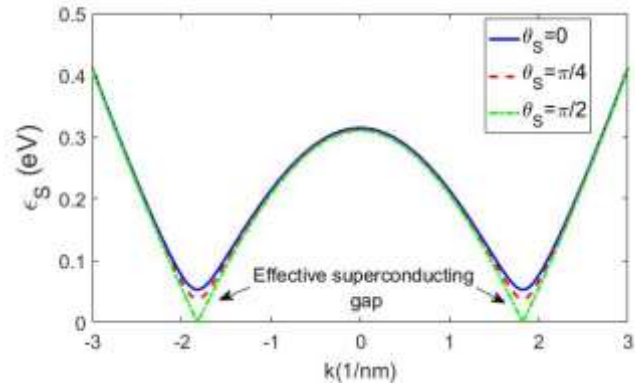
$$Y_2 = e^{i\varphi} (K\alpha_1 - W\alpha_1) (e^{-i\varphi_e} e^{-i\varphi_h}) \eta^2$$

$$\left[-\alpha_1 T (1 + e^{2i\varphi}) + e^{i\varphi} (XC + (Y + Z)D) - e^{i\varphi} (K\alpha_1 - W\alpha_1) \right] + \eta^2$$

$$Y_3 = \left[\eta^2 (e^{-i\varphi_e} e^{-i\varphi_h}) \left[-\alpha_1 T (1 + e^{2i\varphi}) + e^{i\varphi} (XC + (Y + Z)D) \right] - e^{i\varphi} \eta^2 (K\alpha_1 - W\alpha_1) \right]^2$$

Y و C و X و T و W و K و Z توابع پیچیده و بزرگ وابسته به اسپینورهای نواحی نرمال و ابرسانا هستند.

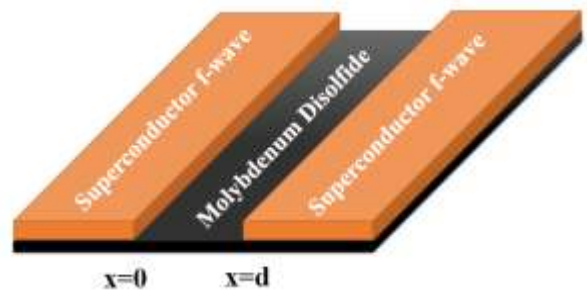
سطوح انرژی آندریف



شکل ۱: نمودار انرژی پراکندگی الکترون-حفره ابرسانای نوع f

در شکل ۱، به ازای زوایای مختلف انرژی برانگیختگی ناحیه ابرسانایی رسم شده است که وابستگی گاف موثر ابرسانایی به زاویه تابش قابل مشاهده است. مشاهده می‌شود که با افزایش زاویه تابش اندازه گاف موثر ابرسانایی کاهش می‌یابد. به طوری که به ازای $\theta_s = \frac{\pi}{2}$ اندازه گاف ابرسانایی به صفر می‌رسد که باید انتظار داشته باشیم در چنین حالتی انعکاس آندریف متوقف شود. در رسم این نمودار اندازه انرژی فرمی برابر $1/1 \text{ eV}$ در نظر گرفته‌ایم و اندازه دامنه پارامتر نظم $0/1 \text{ eV}$ می‌باشد، که در این صورت بیشترین گاف ابرسانایی مربوط به حالت $\theta_s = 0$ است.

اتصال جوزفسون



شکل ۲: ساختار اتصال جوزفسون با پایه مولیبدن دی سولفاید (S/N/S)

با استفاده از هامیلتونی (۱) اسپینورهای ناحیه ابرسانا برای دو سمت راست و چپ به صورت زیر بدست می‌آید که t و t' و r و r' ضرایب احتمالات مربوطه هستند.

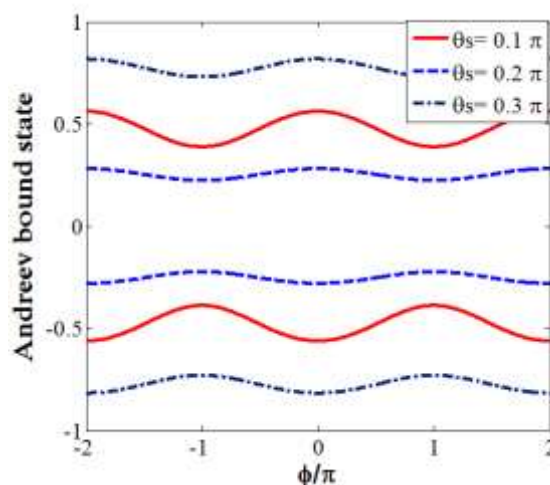
برای اسپینور ناحیه ابرسانای سمت راست داریم:

اختلاف فاز ابرسانایی رسم گردید. دیده شد که سطوح انرژی پریودیک آندریف با پریود 2π حاصل می‌شوند و وابستگی این سطوح انرژی به پارامتر گاف ابرسانایی موج f یعنی θ_s شدید می‌باشد.

مرجع‌ها

- [1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, *science*, **306** (2004) 666-669
 [2] K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, and T. F. Heinz, *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010) 136805.
 [3] A. Kuc, N. Zibouche, T. Heine, *Phys. Rev. B* **83** (2011) 245213.
 [4] R. Tenne, M. Redlich, *Chem. Soc. Rev* **39** (2010) 1423-1434.
 [5] K. F.Mak, C.Lee, J. Hone, J. Shan, T. F. Heinz, *Phys. Rev. Lett* **105** (2010)136805.
 [6] M. Chhowalla, H. S. Shin, G. Eda, L. J. Li, K. P. Loh, H. Zhang, *Nature Chemistry* **5** (2013) 263-275.
 [7] S. Lebegue, O. Eriksson, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 115409.
 [8] Y. Rahnavard, G. Rashedi, T. Yokoyama, *J. Phys.: Condens. Matter* **22** (2010) 415701
 [9] H. Goudarzi, M. Khezerlou, H. Sedghi, and A. Ghorbani. *Superlattices Microstruct.* **104** (2017) 1-9.
 [10] H. Goudarzi, M. Khezerlou, S. F. Ebadzadeh. *Superlattices Microstruct.* **93** (2016) 73-81.
 [11] M. Khezerlou, H. Goudarzi. *Phys. Rev B* **93**, (2016) 115406.
 [12] H. Rostami, A. G. Moghaddam, and R. Asgari. *Phys. Rev. B*, **88**, (2013) 085440.

نمودار سطوح مقید انرژی آندریف بر حسب اختلاف فاز به صورت زیر است.



شکل ۳: سطوح مقید انرژی آندریف بر حسب اختلاف فاز به ازای θ_s مختلف.

با توجه به شکل ۳، سطوح انرژی آندریف بر حسب اختلاف فاز دو ناحیه ابرسانا دارای گاف انرژی هستند. گاف سطوح انرژی آندریف به ازای زوای تابش حامل‌های بار تغییر می‌کند. نکته مهم این است که سطوح انرژی تابع نوسانی با پریود 2π دارند که این نتیجه مشخصه اصلی اتصالات جوزفسون در حضور ساختارهای دو بعدی دیراک محسوب می‌شود. با تغییرات زاویه فرود الکترون به فصل مشترک در ناحیه ابرسانا اندازه انرژی مقید آندریف تغییر می‌یابد. شیب این نمودارها متناسب با مقدار ابر جریان جوزفسون تونلی از این ساختار خواهد بود که دیده می‌شود که یک جریان مشابه سینوسی برای جریان جوزفسون حاصل شود. به دلیل پیچیدگی فرم گاف ابرسانایی اسپین سه گانه f ، سطوح انرژی آندریف وابستگی شدیدی به مقدار θ_s دارند.

نتیجه گیری

طیف انرژی آندریف برای اتصال ابرسانا/نرمال/ابرسانا با جفت‌شدگی نوع f بر پایه مولیبدن دی سولفاید به صورت دقیق بدست آمد و با استفاده از محاسبات عددی نمودار این نتایج بر حسب