

انرژی برانگیختگی پایین ساختارهای هیبریدی گرافن-TMDC

بادپیمان، پریا^۱؛ گودرزی، هادی^۱؛ خضرلو، مریم^۲

^۱ گروه فیزیک، دانشگاه ارومیه، ارومیه

^۲ بنیاد ملی نخبگان

چکیده

همایلتونی مؤثر و رابطه پاشندگی انرژی فرمیون‌های دیراک گونه ساختار هیبریدی گرافن- ترکیبات فلزات واسطه چالکوژن را مورد بررسی قرار می‌دهیم. بر اثر مجاورت گرافن با TMDC جفت‌شدگی اسپین-مدار قابل ملاحظه در گرافن ظاهر می‌شود. با توجه به مقادیر جفت‌شدگی اسپین-مدار در ترکیبات مختلف فلزات واسطه با چالکوژنها، میزان گاف دیراک و جدانشدگی اسپینی در ساختار نواری مورد بحث و بررسی قرار می‌گیرد.

Low-energy excitation of graphene-TMDC hybrid structures

Badpeyma, Paria¹ ; Goudarzi, Hadi¹ ; Khezerlou, Maryam^{1,2}

¹Department of Physics, Urmia University, Urmia

^{1,2}National Elite Foundation

Abstract

We investigate the effective Hamiltonian and dispersion energy of graphene-transition metal dichalcogenides hybrid structures. The sizeable spin-orbit coupling is created in graphene under proximity of a TMDC. Considering the various TMDC structures with different SOC, we study the Dirac band gap and spin-splitting effect in the low-energy excitations.

PACS No. 61, 68

می‌یابد. ترکیبات فلزات واسطه با چالکوژنها (TMDC)^۲ یک دسته مواد با فرمول MX_2 می‌باشد که M فلز انتقال (M=W, Mo, T, ... و X نیز چالکوژن (X=S, Se, Te) است که به صورت مواد لایه‌ای می‌باشد و عموماً به عنوان مواد دوبعدی شناخته شده هستند [۲]. یکی از این ترکیبات مولیبدن دی سولفاید (MoS_2) تک لایه است که دارای باند گپ مستقیم 1.9eV می‌باشد و حجمی دارای باند گپ غیرمستقیم در حدود 1.3eV است. TMDC دارای یک جفت‌شدگی اسپین-مدار بزرگ و عدم تقارن معکوس فضایی

مقدمه

گرافن شبه فلزی بدون گاف انرژی است که ساختار نواری آن در منطقه بریلوئن^۱ مخروطی شکل است و نوار هدایت و ظرفیت همدیگر را در نقطه دیراک قطع می‌کند، بنابراین فاقد گاف میان باند هدایت و ظرفیت می‌باشد [۱]. جفت‌شدگی اسپین-مدار در گرافن بسیار ضعیف می‌باشد. برای افزایش جفت‌شدگی اسپین-مدار در گرافن راههای مختلفی وجود دارد. با استفاده از لایه نشانی گرافن بر روی زیرلایه‌های فلزی، جفت‌شدگی اسپین-مدار افزایش

^۲ Transition-metal Dichalcogenides

^۱ Brillouin

$$H_R = \lambda_R (\kappa \sigma_x s_y - \sigma_y s_x) \quad (2)$$

$$H_{PLA} = \frac{a}{2} [\lambda_{PLA}^A (\sigma_z + \sigma_0) + \lambda_{PLA}^B (\sigma_z - \sigma_0)] (k_x s_y - k_y s_x)$$

در این روابط λ_I^A و λ_I^B پارامترهای اسپین-مدار ذاتی برای زیرشبکه های A و B، λ_R شدت جفت شدگی راشبا، λ_{PLA}^A و λ_{PLA}^B پارامترهای اسپین-مدار تقارن وارون شبه اسپین، s_i نشان دهنده ماتریس های پائولی اسپین و $a = 2.46 \text{ \AA}$ ثابت شبکه گرافن می باشد.

جدول ۱: مقادیر عددی پارامترهای λ_I^A ، λ_I^B ، λ_R و Δ برای مواد مختلف ذکر شده است.

TMDC	t (ev)	Δ (mev)	λ_I^A (mev)	λ_I^B (mev)	λ_R (mev)
MoS ₂	۲/۶۶۸	۰/۵۲	-۰/۲۳	۰/۲۸	۰/۱۳
MoSe ₂	۲/۵۲۶	۰/۴۴	-۰/۱۹	۰/۱۶	۰/۲۶
WS ₂	۲/۶۵۷	۱/۳۱	-۱/۰۲	۱/۲۱	۰/۳۶
WSe ₂	۲/۵۰۷	۰/۵۴	-۱/۲۲	۱/۱۶	۰/۵۶

با در نظر گرفتن جملات جفت شدگی اوربیتالی، ذاتی و راشبا هامیلتونی سیستم گرافن بر روی TMDC به صورت زیر نوشته می شود:

$$H = \begin{pmatrix} \Delta + \lambda_I^A & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} at(k_x - ik_y) & 0 \\ 0 & \Delta - \lambda_I^B & 2i\lambda_R & \frac{\sqrt{3}}{2} at(k_x - ik_y) \\ \frac{\sqrt{3}}{2} at(k_x + ik_y) & -2i\lambda_R & -\Delta - \lambda_I^B & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} at(k_x + ik_y) & 0 & -\Delta + \lambda_I^B \end{pmatrix} \quad (3)$$

مقادیر λ_{PLA} ، TMDC ها بسیار کوچک تر از دیگر جفت شدگی ها است که از آن صرف نظر کردیم. با حل معادله ی ویژه مقدری، انرژی پاشندگی حول نقاط دیراک به صورت زیر بدست می آید:

$$E = \pm \frac{(a_1 + a_2 |k|^2)}{2} \pm \sqrt{\frac{(a_1 + a_2 |k|^2)^2}{4} - a_4 - \frac{a_2}{2} |k|^2 + a_5} \quad (4)$$

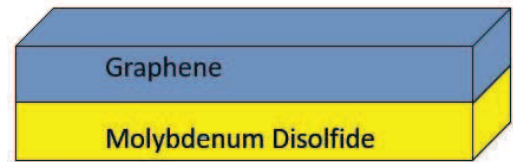
که در آن

است [۳]. از ترکیبات فلزهای انتقال با چالکوگنیدها می توان به - عنوان زیرلایه گرافن استفاده کرد.

مجاورت ترکیب فلز انتقال چالکوگنید با تک لایه گرافن، تقارن انعکاسی را می شکند بنابراین جملات جفت شدگی اسپین-مدار، راشبا و تقارن زیرشبکه در هامیلتونی ایجاد می شود. اخیراً پیش بینی شده است که MoS₂ تک لایه، یک جفت شدگی اسپین-مدار قوی در حدود ۱ meV در گرافن ایجاد می کند [۴]. جفت شدگی اسپین-مدار گرافن بر روی فلز انتقال چالکوگنید با افزایش عدد اتمی فلز انتقال افزایش می یابد [۵]. در این مقاله ما به بررسی طیف انرژی گرافن همبافته شده روی لایه TMDC می پردازیم. ساختار نواری این ترکیبات به پلاریزاسیون اسپین شدیداً وابسته است. این موضوع می تواند تراورد اسپینی را در ساختارهای مربوطه مطرح کند.

فرمالیسم مسئله

هامیلتونی گرافن همبافته شده روی زیرلایه MoS₂، MoSe₂ WS₂ و WSe₂ تک لایه که در شکل ۱ نشان داده شده است دارای دویخش اوربیتالی و اسپین-مدار می باشد.

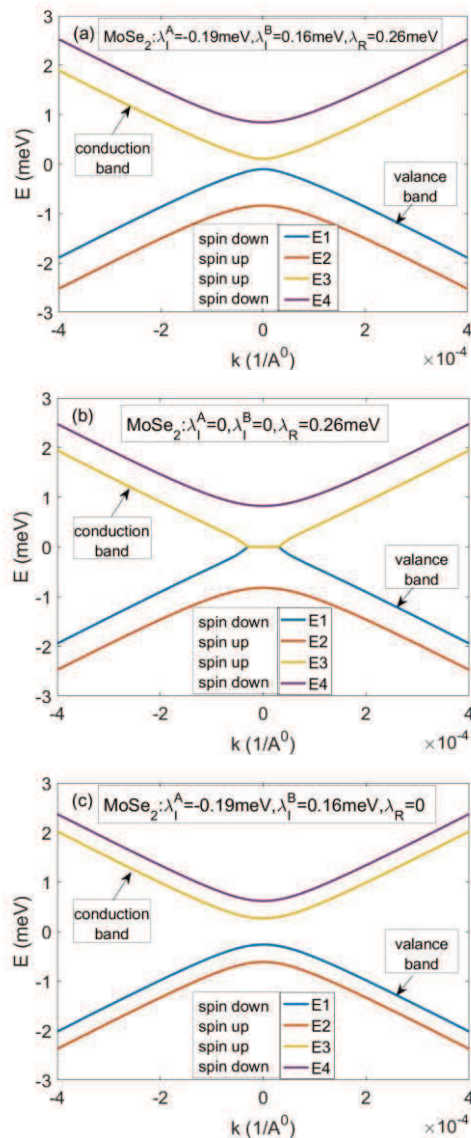


شکل ۱: ساختار گرافن همبافته شده روی زیرلایه مولیبدن دی سولفاید تک لایه بخش اوربیتالی، توصیف حالت های دیراک گاف دار می باشد که به صورت زیر نشان داده شده است:

$$H_{orb} = \hbar v_f (\kappa \sigma_x k_x + \sigma_y k_y) + \Delta \sigma_z \quad (1)$$

سرعت فرمی الکترون های دیراک، $v_f = \sqrt{3}/2 \frac{at}{\hbar}$ شبکه الکترون های گرافن، Δ گاف انرژی مستقیم، σ_i ماتریس های پائولی شبه اسپین، k_x و k_y مؤلفه های بردار موج الکترون و κ اندیس چاهک به ازای نقاط دیراک مختلف مقادیر ۱ و -۱ را می گیرد. هامیلتونی اسپین-مدار دارای سه بخش ذاتی، راشبا، تقارن وارون شبه اسپین می باشد. جفت شدگی های ذاتی، راشبا، تقارن وارون شبه اسپین به ترتیب به صورت زیر مشخص می شود:

$$H_I = \frac{1}{2} [\lambda_I^A (\sigma_z + \sigma_0) + \lambda_I^B (\sigma_z - \sigma_0)] k s_z$$



شکل ۳: ساختار نواری گرافن MoSe_2 در مجاورت نقاط دیراک. (a) در حضور سه پارامتر λ_I^A ، λ_I^B و λ_R در عدم حضور λ_I^A و λ_I^B (b) در عدم حضور λ_I^A و λ_I^B (c) در عدم حضور λ_R .

در شکل ۳a مشاهده می‌کنیم که در این ساختار جدانشدگی نوار هدایت و ظرفیت وجود دارد. اما در شکل ۳b زمانیکه λ_I^A و λ_I^B صفر باشد نوار هدایت مربوط به اسپین بالا و نوار ظرفیت مربوط به اسپین پایین هم‌پوشانی دارند و گاف انرژی صفر است. و در شکل ۳c در عدم حضور λ_R میزان این جدانشدگی در نوار هدایت و ظرفیت کاهش می‌یابد و گاف انرژی افزایش می‌یابد.

$$a_1 = 2\Delta^2 + (\lambda_I^A)^2 + (\lambda_I^B)^2 + 4(\lambda_R)^2$$

$$a_2 = \frac{3}{2}a^2t$$

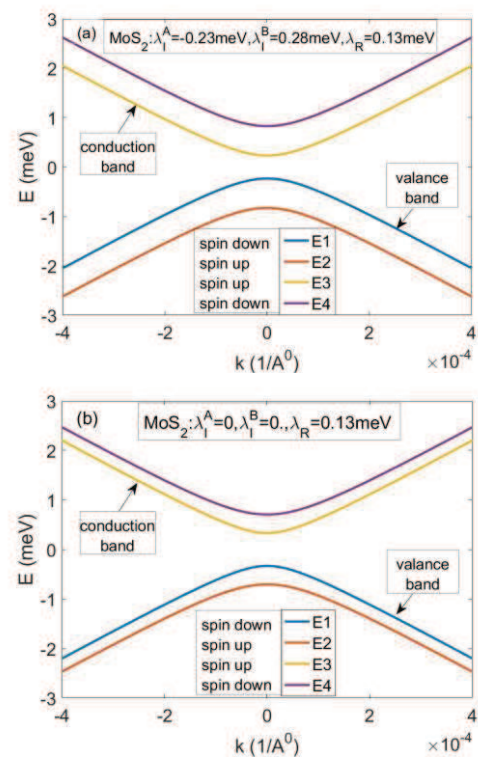
$$a_3 = 2(\lambda_I^A + \lambda_I^B)[\Delta(\lambda_I^A - \lambda_I^B) + 2(\lambda_R)^2]$$

$$a_4 = (\Delta^2 + \lambda_I^A \lambda_I^B)$$

$$a_5 = \Delta^2(\lambda_I^A + \lambda_I^B)^2 + 4(\lambda_R)^2(\Delta^2 - \Delta\lambda_I^B + \Delta\lambda_I^A - \lambda_I^A \lambda_I^B)$$

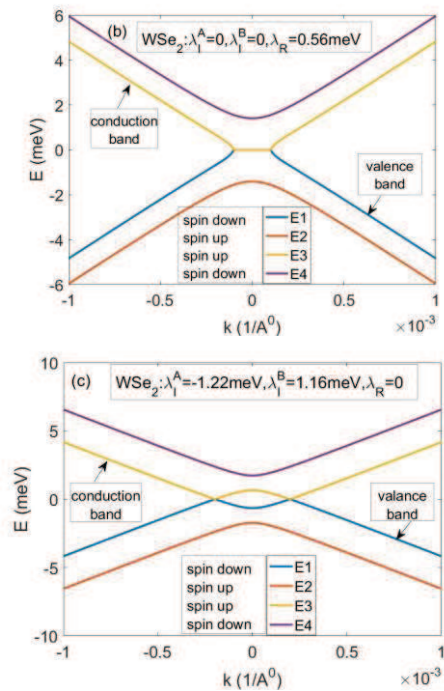
نتایج و بحث

انرژی بدست آمده این ساختار را برحسب عدد موج رسم کردیم و تأثیر پارامترهای λ_R ، λ_I^A و λ_I^B را برای ماده ذکر شده در جدول ۱ مورد بررسی قرار می‌دهیم:



شکل ۴: ساختار نواری گرافن MoS_2 در مجاورت نقطه دیراک. (a) در حضور سه پارامتر λ_I^A ، λ_I^B و λ_R در عدم حضور λ_I^A و λ_I^B (b).

همانطور که در شکل ۲a مشاهده می‌کنیم در این ساختار جدانشدگی نوار هدایت و ظرفیت وجود دارد. اما در شکل ۲b زمانیکه λ_I^A و λ_I^B صفر باشد میزان این جدانشدگی در نوار هدایت و ظرفیت کاهش می‌یابد و گاف انرژی افزایش پیدا می‌کند. عدم حضور λ_R تأثیری بر ساختار نواری نمی‌گذارد.



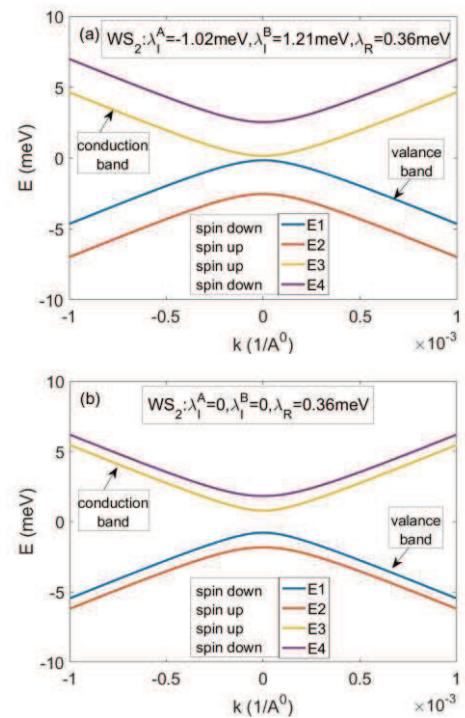
شکل ۵: ساختار نواری گرافن WSe_2 در مجاورت نقاط دیراک. (a) در حضور سه پارامتر λ_I^A ، λ_I^B و λ_R (b) در عدم حضور λ_I^A و λ_I^B (c) در عدم حضور λ_I^A و λ_I^B در شکل ۵b می بینیم در عدم حضور λ_I^A و λ_I^B ، نوار هدایت مربوط به اسپین بالا و نوار ظرفیت مربوط به اسپین پایین هم پوشانی دارند و گاف انرژی صفر است. و در شکل ۵c در عدم حضور λ_R باند هدایت مربوط به اسپین بالا و باند ظرفیت مربوط به اسپین پایین حول نقطه دیراک شیب انرژی معکوس می شود که توصیف کننده ی حالت های حفره ای می تواند باشد.

نتیجه گیری

ساختار هیبریدی گرافن-TMDC بعنوان یک ابرساختار دوبعدی خواص الکترونی منحصر بفردی دارد. ساختار نواری انرژی پایین از هامیلتونی دیراک-گونه دوبعدی تبعیت می کند که بسیار وابسته به مقادیر جفت شدگی اسپین-مدار و عدد اتمی فلز واسطه است.

مرجع ها

- [۱] B. Uchoa, V. N. Kotov, N. Peres and A. C. Neto, *Phys. Rev. Lett.* **101**, (2008) 026805.
- [۲] A. Kuc and T. Heine, *Chem. Soc. Rev.* **44**, (2015) 2603.
- [۳] L.F. Mattheis, *Phys. Rev. Lett.* **30**, (1973) 784.
- [۴] M. Gmitra and et al, *Phys. Rev. B* **92**, (2015) 155403.
- [۵] M. Gmitra, S. Konschuh, C. Ertler and C. Ambrosch-Draxl and J. Fabian, *Phys. Rev. B* **80**, (2009) 235431.
- [۶] M. Gmitra and et al, *Phys. Rev. B* **93**, (2016) 155104.



شکل ۴: ساختار نواری گرافن WS_2 در مجاورت نقطه دیراک. (a) در حضور سه پارامتر λ_I^A ، λ_I^B و λ_R (b) در عدم حضور λ_I^A و λ_I^B .

همانطور که در شکل ۴a مشاهده می کنیم در این ساختار جداسدگی نوار هدایت و ظرفیت وجود دارد. اما در شکل ۴b زمانیکه λ_I^A و λ_I^B صفر باشد میزان این جداسدگی در نوار هدایت و ظرفیت کاهش می یابد و گاف انرژی افزایش پیدا می کند. عدم حضور λ_R تأثیری بر ساختار نواری نمی گذارد.

