پژوهشگاه دانش‌های بنیادی

شماره مقاله : ۱۱

مقاله‌نامه بیست و سومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۰-۲۹ اردیبهشت ۱۳۹۵)

جدا شدگی اسپینی ساختار نواری نانو صفحه‌های فسفرین در اثر نواقص شبکه

امیری، سعید؛ چراغچی، حسین

سمنان، دامغان، *دانشگاه دامغان، دانشکده فیزیک*

چکیده

در این مطالعه تاثیر تهی‌جای و دررفتگی اتم در نانو صفحه‌های فسفرین بررسی شد. نواقص در نانو صفحه بشدت ساختار نواری را دستخوش تغییر می‌کند. بارزترین تأثیر وجود تهی‌جای در شبکه بسته شدن گاف در ساختار نواری است. نقص‌هایی مانند دررفتگی اتم از جایگاه اصلی خود، نسبت به فاصله‌ی آن از صفحه، سبب تغییرات چشم‌گیری همچون تغییر گاف مستقیم به غیر مستقیم و جداشدگی اسپینی ساختار نواری می شوند.

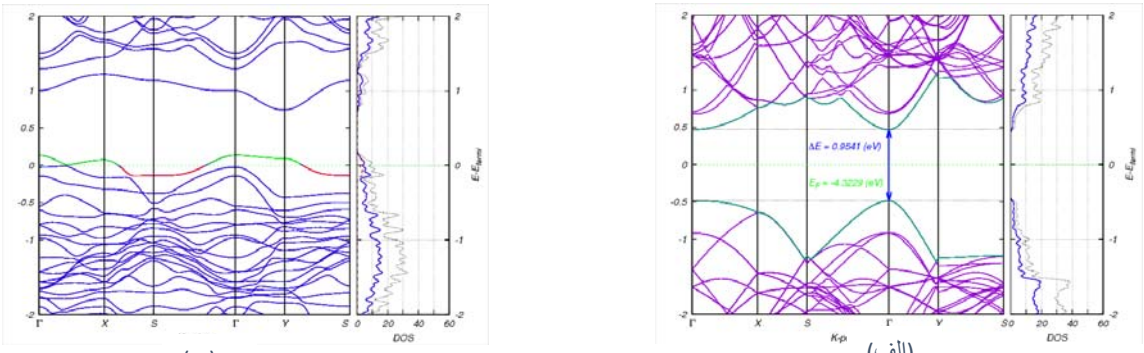
شمار بسیاری از مواد دو بعدی مانند سیلیسن، ژرمانن و TMDS در دوره پسا-گرافین [۱] مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. بیشتر این مطالعات به امید غلبه بر کمبودهای موجود در گرافین مانند گاف نواری صفر حول نقاط دیراک انجام می‌شوند [۲]. زیرا گاف نواری به عنوان مشخصه‌ای از سیستم برای کنترل جریان قطع/ وصل بکار برده می‌شود [۱]. سرعت و کنترل جریان قطع/ وصل مهمترین خاصیت از مواد دو بعدی برای کاربرد در ترانزیستورهای اثر میدان است [3].

مهمترین مشکل مواد دو بعدی سهولت در واکنش پذیری آن‌ها با هوا است که سبب ناپایداری‌شان می‌شود. سیلیسن در سال 2012 ساخته شد ولی به دلیل تاثیرات زیر لایه‌ی فلزی که سیلیسن بر روی آن رشد داده می‌شود بر خواص الکتریکی آن، این ماده قابل به‌کارگیری در ابزارهای الکترونیکی امروزی نیست [1]. یکی از مواد پیشنهادی جایگزین، فسفرین می باشد.

فسفرین، تک لایه‌ای از اتم‌های فسفر سیاه در شبکه شش گوشه‌ای گرافین- مانند، ولی اندکی چین خورده و به ضخامت یک اتم است که نسبت به مواد دو بعدی مشابه پایداری بیشتری از خود نشان می‌دهد. به علت داشتن گاف نواری ذاتی، فسفرین ماده‌ای نوید بخش برای استفاده در ابزارهای نانو الکترونیکی نوین می‌باشد [۱و3و4]، چرا که وجود گاف نواری قابل تنظیم، می‌تواند فسفرین را از نارسانا به رسانا تبدیل کند [۱].

دررفتگی اتم‌ها و تهی‌جای‌های شبکه در نیم‌رساناها به روش‌های مختلف و به شدت خواص الکتریکی آن‌ها را دستخوش تغییر می‌کنند. در بیشتر شرایط، دستیابی به یک سیستم ایده‌آل بسیار سخت بوده و حضور نواقص شبکه عموماً در نمونه‌ها قابل مشاهده می‌باشد. از سوی دیگر نواقص شبکه می‌توانند برای کنترل خواص الکتریکی ابزارهای نانو الکترونیکی مورد استفاده قرار گیرند [5].

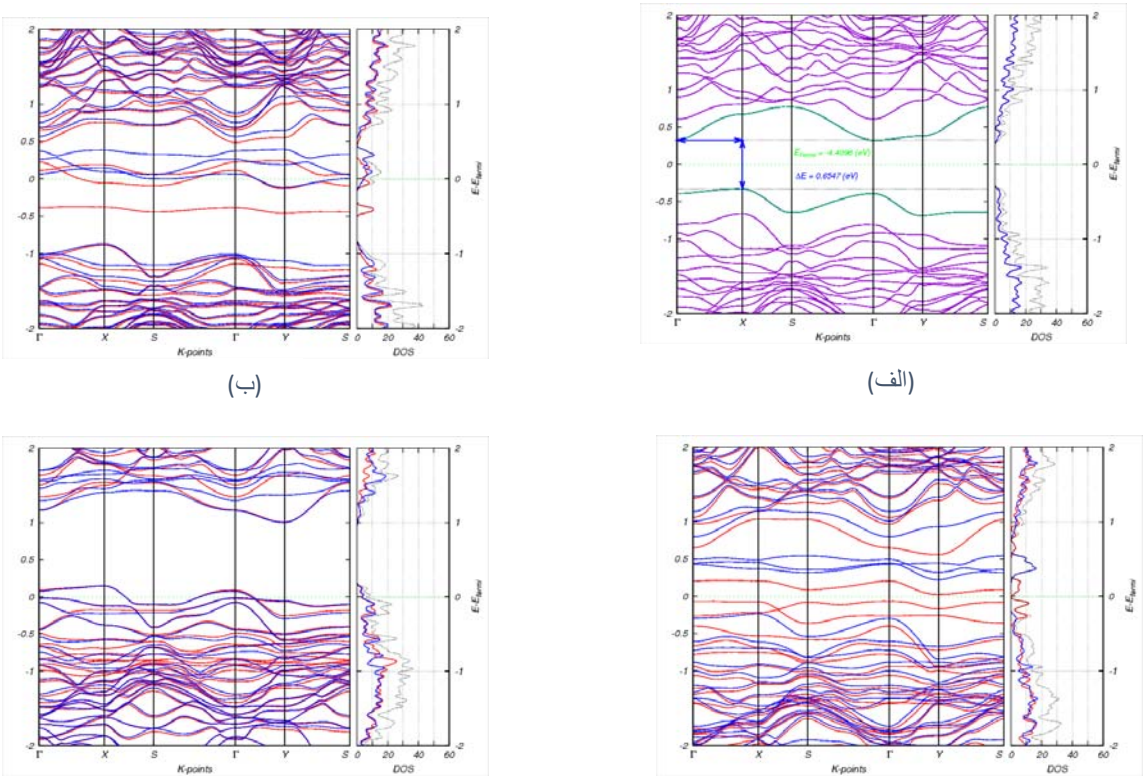
در این پژوهش، کد محاسباتی سی‌استا (Siesta) به‌کار گرفته شد که بر پایه‌ی نظریه تابعی چگالی به حل خودسازگار معادلات کوهن- شم می‌پردازد [6]. برای این محاسبات، روش GGA پیشنهاد شده توسط پدرو-بوک-ارتزنهف (PBE) و همچنین پایه‌های اتمی قطبیده زتای-دوگانه برای اتم‌های فسفر به‌کار رفته است. در محاسبات، انرژی قطع 180 ریدبرگ و مش‌بندی منطقه اول بریلوئن به صورت ۱×۸×۸ در نظر گرفته شده است. میزان ناخالصی در این مطالعه کمتر از 78/2 ٪ می‌باشد و برای نادیده گرفتن نیروی بین صفحه‌های فسفرین، فاصله بین آن‌ها ۱۰ آنگستروم تنظیم شده است.



(ب) (الف)

شکل 1: ساختار نواری و چگالی حالت‌های نانو صفحه برای فسفرین در حالت الف) بدون ناخالصی و ب) با تهی‌جای.

شکل 1- الف ساختار نواری و چگالی حالت‌های نانو صفحه برای حالت خالص بیان‌گر وجود گاف انرژی مستقیم 95/0 الکترون ولت در ساختار نواری است. در شکل 1- ب تاثیر تهی‌جای بر روی ساختار نواری دیده می‌شود. مشاهده می‌گردد که نقص شبکه سبب بسته شدن گاف نواری با بوجود آوردن یک نوار نیمه پر بالای نوار ظرفیت شده است. این نوع نقص شبکه همانند وجود ناخالصی نوع p در فسفرین عمل می‌کند [5].



(ب) (الف)

(د) (ج)

شکل 2: ساختار نواری و چگالی حالت‌های فسفرین در حالت‌هایی که اتم در فاصله الف) 5/2 ب) 3 ج) 5/3 د) 4 آنگستر می صفحه قرار گرفته است.

شکل 2، ساختار نواری را برای حالت‌های از جادررفتگی اتم در نانوصفحه نشان می‌دهد. یک اتم از جای خود خارج شده و با فاصله d بر حسب آنگستروم نسبت به جایگاه خود در خارج صفحه قرار گرفته و پس از واهلش سیستم ساختار نواری و چگالی حالت‌های آن‌ها مورد مطالعه قرار گرفته‌اند.

در حالت d= 5/2 آنگستروم (شکل 2– الف)، گاف نواری از مستقیم (در حالت خالص) به غیر مستقیم تغییر کرده و به مقدار 65/0 الکترون ولت کاهش می‌یابد. در این حالت نیز دررفتگی تأثیری همانند حضور ناخالصی نوع p بر روی فسفرین دارد. اما برای حالت d=3 آنگستروم (شکل 2–ب)، نوار مربوط به اسپین‌های بالا و پایین از یکدیگر جدا می‌شوند. این جداشدگی اسپینی نوارها تا 4d= آنگستروم (شکل‌های 2–ج و 2-د) مشاهده می‌شود. برای فواصل بزرگتر از 4 آنگستروم، ساختار نواری در این حالات مانند ساختار صفحه با تهی‌جای (شکل 1–ب) می‌شود.

نتیجه‌گیری

گزارش‌ها حاکی از این است که جداشدگی اسپینی در نانو نوارهای فسفرین با لبه‌ی زیگزاگ نیز اتفاق می‌افتد و به حضور نوار انرژی نیمه‌پر در سطح فرمی برمی‌گردد [7]. شکل 1-ب، نیز نشان می‌دهد در صفحه با نقص تهی‌جا چنین حالتی از نوار نیمه‌پر در سطح فرمی بوجود می‌آید. جداشدگی اسپینی حاصل از دررفتگی را نیز می‌توان به همین نوار نیمه‌پر نسبت داد. تحلیل نمودارها نشان می‌دهد دررفتگی اتم در صفحه مانند نزدیک کردن یک اتم فسفر به صفحه با تهی‌جای می‌باشد.

مرجع‌ها:

(1) Reich, Eugenie Samuel. "Phosphorene excites materials scientists." *Nature* 506.7486 (2014): 19.

(2) Liang, Liangbo, et al. "Electronic bandgap and edge reconstruction in phosphorene materials." *Nano letters* 14.11 (2014): 6400-640

(3) Qingyun Wu, Lei Shen , Ming Yang, Yongqing Cai, Zhigao Huang, and Yuan Ping Feng, *Phys. Rev. B 92* (2015): 035436

(4) Bagheri, Samira, Negar Mansouri, and Ermia Aghaie. "Phosphorene: A new competitor for graphene." *International Journal of Hydrogen Energy* 41.7 (2016): 4085-4095

(5) Farooq, M. Umar, Arqum Hashmi, and Jisang Hong. "Anisotropic bias dependent transport property of defective phosphorene layer." *Scientific reports* 5 (2015).

(6) Soler, José M., et al. "The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation." *Journal of Physics: Condensed Matter* 14.11 (2002): 2745.

(7) Du, Yongping, et al. "Unexpected Magnetic Semiconductor Behavior in Zigzag Phosphorene Nanoribbons Driven by Half-Filled One Dimensional Band." *Scientific reports* 5 (2015).