بیست و هفتمین کنفرانس بهاره فیزیک
۵-۳ تیرماه ۱۳۹۹

تاثیر کرنش بر تک لایه ی VSe2

مهدی نجدی[1]، میثم باقری تاجانی[1]، سحر ایزدی ویشکایی[2]

[1] *دانشکده ی علوم پایه ی دانشگاه گیلان*

[2] *پژوهشکده ی فیریک پژوهشگاه دانش های بنیادی*

چکیده

دیکلکوژنیدهای فلزات واسطه، TMD، به دلیل داشتن خاصیت مغناطیسی و قطبیدگی و خاصیت فرومغناطیسی ذاتی موجود در آن ها بسیار مورد توجه قرارگرفته اند. ما در این تحقیق خصوصیات مغناطیسی تک لایه ی VSe2را با استفاده ازنظریه ی تابعی چگالی (DFT) واز لحاظ ساختاری این ماده را در دوفاز Tو H بررسی می کنیم. بررسی ما نشان می دهد که فازTیک فرومغناطیس و فاز H یک نیمه رسانای اسپینی است. نتایج برآمده ازمحاسبات نظری وتجربی دیگر نشان می دهد تک لایه 1T-VSe2 فلز می باشد، پس با اعمال استرین(کرنش)۰تا۱۳٪ در می یابیم که مغناطش و دمای کوری(Tc) به میزان کرنش واردشده بستگی دارند.

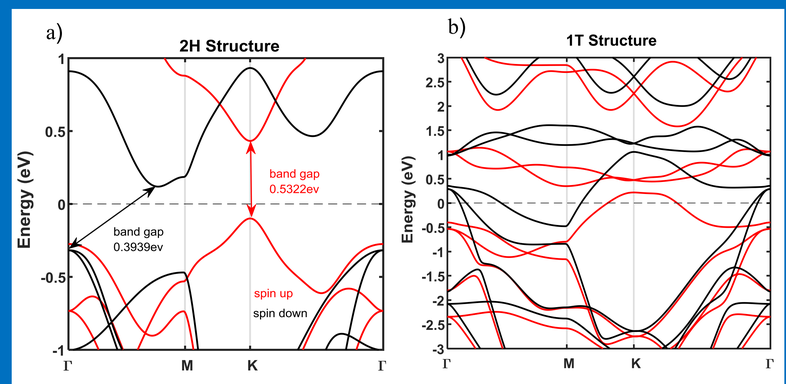
مقدمه

درTMDها 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]. اخیرا TMDs های دو بعدی مانند VS2با موفقیت ستنز شده است [2]. این طرح می تواند برای بقیه ی TMDs مانند VSe2 مورد استفاده قرار گیرد. مغناطیس ذاتی و برنامه های کاربردی بالقوه باعث جذب علاقه ی زیادی شده است. بررسی سیستمی درمورد الکترونیک وخاصیت مغناطیسی تک لایه های VSe2،VS2 و همچنین اتصال بین کرنش و خواص مغناطیسی به وسیله ی محاسبات DFT به ما نشان می دهد که تک لایه های VS2و VSe2خاصیت مغناطیسی دارند[3].

روش های محاسباتی

محاسبات ساختار الکترونیکی تک لایه برای موج PBEوتقریب شیب تعمیم یافته(GGA)انجام شده و در QuantumWise به اجرا درآمده است. تمامی محاسبات شامل آرایش هندسی و محاسبات ساختارالکترونیکی برپایه ی اسپین-مغناطیس نظریه تابعی چگالی(DFT) انجام شده است. ناحیه بریلوئن با مش ۲۰ × ۲۰ ×۱ برای نقاط k نگاشت گردید. انرژی برابر 100Ha، فضای خلا جهت جلوگیری از برهم کنش لایه با تصویرش برابر با 20A و معیار همگرایی انرژی 10^{-5} ev در نظر گرفته شد. در طول بهینه سازی ساختار بیشینه نیرو وارد بر هراتم 10^{-3}eV/Å و بیشینه استرس وارد بر سلول واحد 10^{-3} GP در نظر گرفته شده است.

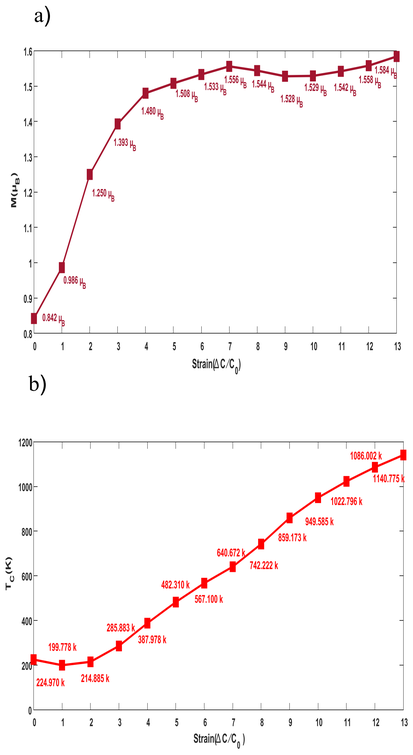
تجزیه و تحلیل نتایج



شکل۱) ساختارنواری تک لایه ی VSe2 درفاز 2H (a) و (b) فاز 1Tرا نشان داده شده است. رنگ قرمز بیانگر اسپین بالا (spin up) و رنگ مشکی بیانگر اسپین پایین (spin down) است.

همانطوری که در شکل۱(a)می بینید ساختارنواری تک لایـه ی VSe2 در فـاز 2Hمشخص شده است که دارای گاف نواری مستقیم 0.5329ev بـرای اسـپین بالاوگاف نواری غیر مستقیم 0.3939ev برای اسپین پایین است. وجود این گاف ها نشان می دهد که این تک لایه درفاز 2H یک نیمـه رسـانای اسـپینی اسـت. درشکل۱(b) ساختارنواری تک لایه ی در فاز 1Tمشخص شده است، که حاکی از آن است، این تک لایه در فاز1T یک فرومغناطیس اسـت چراکـه هـیچ گونـه گاف نواری درآن وجود ندارد[4].

بعد از این که از فرومغناطیس بودن اطمینان حاصل کـردیم، حـال بـه بررسـی تاثیرات کرنش برروی تک لایه 1T-VSe2 می پردازیم. ما به این تک لایه کرنش ۰تا۱۳٪ اعمال کردیم و نتایج این بررسی را در شکل۲نشان داده ایم.



شکل۲) اعمال کرنش ۰تا۱۳٪ بر تک لایه ی VSe2وتاثیری که بر(a) مغناطش وانادیم و (b)دمای کوری دارد.

شکل۲(a) نشان می دهد که تکانه ی مغناطیسی وانادیم با افزایش کرنش، ابتداتا زمانی که این تکانه $1.480\ \mu_B$ شود(کرنش ۴٪)،با شیب تندی افزایش می یابد و سپس افزایش آن با شیب کمتری صورت می گیرد و بیشترین افزایش مرتبط به کرنش ۲٪ می باشد چراکه شیب تندتری دارد و سپس شیب افزایشی تکانه ی مغناطیسی، کاهش می یابد.

در تک لایه ی TaSe2 ، هنگامی که کرنش۴٪اعمال کنیم تغییرخاصی در تکانه ی مغناطیسی اتم Taمشاهده نمی شود اما با افزایش کرنش تا۱۲٪شاهد افزایش میزان آن هستیم [5]. اعمال کرنش تا۱۰٪ در CrI3، باعث افزایش تکانه ی مغناطیسی Crاز $2.966\ \mu_B$ تا $3.364\ \mu_B$ می شود [6]. در MaTe2 با اعمال کرنش تا۱۰٪با افزایش اندک تکانه ی مغناطیسی منگنزتا $4.3\ \mu_B$ روبه رو هستیم [7]. ما و همکارانش نیز تاثیرافزایشی تکانه ی مغناطیسی وانادیم رابراثرکرنش در VS2 اثبات کردند[1].

برای بررسی دمای کوری ما به روابط زیر نیازمندیم.

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

$$\Delta E = \frac{E_{ex}}{3} \qquad T_C = \left(\frac{2}{3}\right)\Delta E = \left(\frac{2}{3}\right)\frac{\Delta E}{K_B} \qquad (2)$$

برای دست آوردن دمای کوری از روابط(۱)و(۲) استفاده میکنیم. همانطوری که درشکل۲ (b)مشخص است، هنگامی که کرنش اعمال می کنیم(کرنش ۱٪) اندکی دمای کوری پایین آمده تا زمانی که این دما 199.778 kشود، با افزایش کرنش(تا۱۳٪) دمای کوری با شیب ملایمی افزایش می یابد. پس در حالت کلی افزایش کرنش موجب افزایش دمای کوری می شود. در MnSe2 هم با اعمال کرنش۵٪، دمای کوری از 330kتا 375kافزایش می یابد[8] . در CrI3با اعمال کرنش۳٪دمای کوری با شیب ملایمی افزایش یافته و از 44.4kبه 51.4k می رسد[9] . در Fe3GeTe2 هنگامی که کرنش۱٪ اعمال شود، کاهش دمای کوری را باشیب زیادی شاهد هستیم اما با اعمال کرنش تا۶٪، این دما با شیب کمتری کاهش پیدا می کند[10] . درMaTe2 با اعمال کرنش تا ۱۰٪، با افزایش دمای کوری از100k تا 440kمواجه می شویم[7] .

نتیجه گیری

در کل با DFTخواص مغناطیسی را در فازهای 1T,2H بررسی کردیم،گاف نواری در فاز 1T برابر صفراست و نشان دهنده ی فرومغناطیس بودن ساختار و در فاز 2Hدارای گاف نواری و یک نیمه رسانای اسپینی است. اعمال کرنش از ۰تا ۱۳٪بر روی مغناطش وانادیم ودمای کوری تک لایه 1T-VSe2 تاثیر گذار است.

منابع

[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 2 H− TaS e 2." *Physical Review Materials* **3(8): 084004**.
[6] Wu, Z., et al. (2019). "Strain-tunable magnetic and electronic properties of monolayer CrI 3." *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 mnx 2 (x= s, se) monolayers." *Physical Chemistry Chemical Physics* **16(10): 4990-4994.**
[9] Leon, A., et al. (2020). "Strain-induced phase transition in CrI 3 bilayers." *2D Materials*:**2053-1583.**
[10] Yuan, D., et al. (2017). "Tuning magnetic properties in quasi-two-dimensional ferromagnetic Fe3− y Ge1− x As x Te2 (0⩽ x⩽ 0.85)." *Materials Research Express* **4(3): 036103.**