

## مطالعه ساختار نواری $\text{GeCH}_3$ تک لایه و ساختار تحت کشش بر اساس مدل تنگابست

رضائی، محسن<sup>1</sup>؛ فضیله، فرهاد<sup>1</sup>

<sup>1</sup>دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

### چکیده

در این مطالعه یک مدل تنگابست برای ساختار دوبعدی  $\text{GeCH}_3$  پیشنهاد شده و ساختار نواری حاصل با تنظیم ضرایب اسلاتر-کستر تطابق بسیار خوبی در نزدیکی انرژی فرمی با محاسبات ابتدا به ساکن دارد. با استفاده از این مدل تنگابست وجود گذار فاز توپولوژیک در این ماده تحت کشش تایید شده است.

## Study the band structure of single-layer $\text{GeCH}_3$ and structures under biaxial tensile strain on the tight-binding model

Rezaei, Mohsen<sup>1</sup>; Fazileh, Farhad<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan

### Abstract

In this study we propose a tight-binding model for two dimensional structure  $\text{GeCH}_3$ . With proper tuning of Slater-Koster parameters the band structure of this model is in very good agreement with ab-initio calculations close to the Fermi energy. Using this tight-binding model it is shown that this system has a topological phase transition under strain.

PACS No.

لایه که دارای ساختار لانه زنبوری باکلینگ است بر اساس مدل تنگابست مطالعه انجام دادیم و نشان دادیم که ساختار نواری این ماده بر اساس مدل تنگابست با نتایج DFT [3] بدون اعمال کشش و با اعمال کشش همخوانی دارد. و تحت اعمال کشش شکاف انرژی بسته شده و دوباره باز می شود.

$\text{GeCH}_3$  سنتز شده است [4] و برخلاف  $\text{GeH}$  (ژرمانین) دارای پایداری حرارتی بیشتری است که آن را یک کاندیدای مناسب برای نارسانای توپولوژیک دمای بالا می کند. امید است که این مدل بتواند رفتار توپولوژیک پیش بینی شده برای این ماده را توضیح دهد.

ساختار اتمی و ثابت های شبکه  $\text{GeCH}_3$  تک لایه  $\text{GeCH}_3$  دارای ساختار شبکه لانه زنبوری باکلینگ است که در شکل 1 نشان داده شده است. هر اتم Ge به سه اتم Ge و یک مولکول  $\text{CH}_3$  وصل شده است، به صورتی که لایه چین خورده Ge بین دو لایه  $\text{CH}_3$  ساندویچ شده است شکل 1(ب).

### مقدمه

اخیرا نارساناهای توپولوژیکی دو بعدی توجه فیزیکدانان زیادی را به خود جلب کرده است. این مواد دارای انبوهه عایق و حالت های لبه ای فلزی هستند [1]. رابطه پاشندگی حالت های لبه ای در نزدیکی سطح فرمی مانند فرمیون های دیراک خطی است که این موضوع می تواند در ترابرد حامل های بار در قطعات الکترونیکی بسیار موثر باشد.

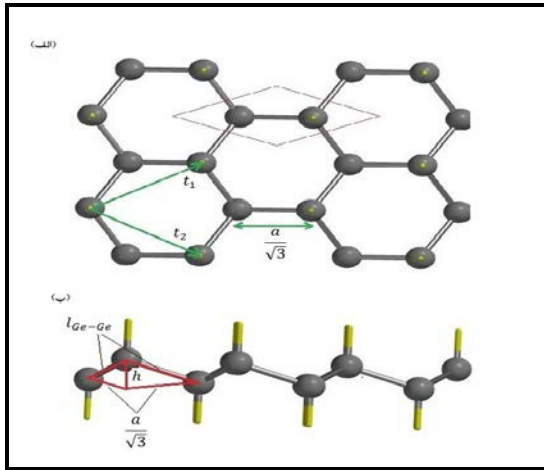
یکی از ساختارهای پیشنهادی برای نارساناهای توپولوژیکی، مواد با ساختار لانه زنبوری باکلینگ<sup>2</sup> است. این مواد عمدتا از اتم های گروه IV جدول تناوبی که به دلیل داشتن هسته سنگین دارای اثر اسپین مدار قویتری هستند، ساخته می شوند. [2]

در این کار ما روی ماده  $\text{GeCH}_3$  (ژرمانین متیل جایگزین<sup>3</sup>) تک

<sup>1</sup> Bulk

<sup>2</sup> Buckling

<sup>3</sup> Methyl-substituted Germanane



شکل 2: یاخته اصلی  $\text{GeCH}_3$  تک لایه،  $t_1$  و  $t_2$  بردارهای انتقال شبکه (الف) و طول پیوند بین اتم های  $\text{Ge}$  و میزان انحراف از صفحه  $h$  (ب) ترکیب  $\text{CH}_3$  در نظر گرفته نشده

### هامیلتونی مدل تنگابست بدون اثر اسپین مدار

به دلیل اینکه حالت های موثر در نزدیکی سطح فرمی ناشی از اوربیتال های  $4s$ ،  $4p_x$  و  $4p_y$  اتم  $\text{Ge}$  است ما برای این سیستم هامیلتونی مدل تنگابست شامل اوربیتال های  $s$ ،  $p_x$  و  $p_y$  اتم  $\text{Ge}$  پیشنهاد داده ایم که در نمایش کوانتس دوم بدون در نظر گرفتن اثر اسپین مدار به صورت

$$H_0 = \sum_{i,\alpha} \varepsilon_i^\alpha c_i^{\alpha\dagger} c_i^\alpha + \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha, \beta} t_{ij}^{\alpha\beta} (c_i^{\alpha\dagger} c_j^\beta + h.c) \quad (1)$$

نوشته می شود، که  $\alpha$  و  $\beta$  نشان دهنده اوربیتالهای اتمی و  $i$  و  $j$

شماره اتم را نمایش می دهد. انرژی اوربیتال  $\alpha$  اتم

$i$  اتم،  $c_i^{\alpha\dagger}$  و  $c_i^\alpha$  به ترتیب عملگرهای خلق و فنا برای یک الکترون

در اوربیتال  $\alpha$ ، در اتم  $i$  اتم است. بیانگر دامنه پرش بین

اوربیتال های  $\alpha$  و  $\beta$  از اتم  $i$  به اتم  $j$  است.

بردار بین اتمی را با  $\vec{r}_{ij} = (r_x, r_y, r_z) = d(l, m, n)$  نشان می

دهیم طوری که  $d$  فاصله بین اتم ها و  $l$ ،  $m$  و  $n$  کسینوس زاویه

های هادی بین نزدیکترین اتم ها با محورهای مختصات باشد.

مطابق با نظریه تنگابست [5] دامنه های پرش بین اتمی با روابط

زیر داده می شود

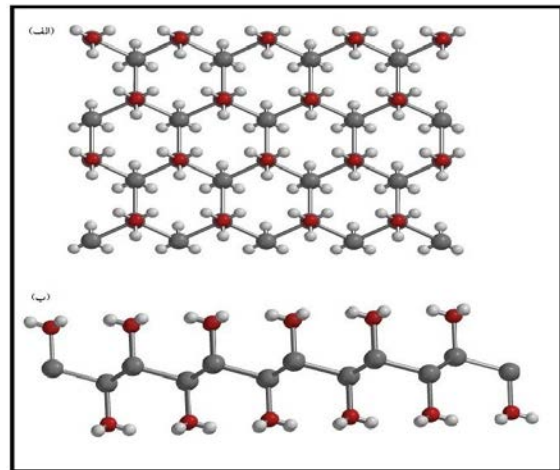
$$t_{ij}^{ss} = V_{ss\sigma} \quad (2)$$

$$t_{ij}^{sp_x} = lV_{sp\sigma} \quad (3)$$

$$t_{ij}^{sp_y} = mV_{sp\sigma} \quad (4)$$

$$t_{ij}^{p_x p_x} = l^2 V_{pp\sigma} + (1-l)^2 V_{pp\pi} \quad (5)$$

$$t_{ij}^{p_y p_y} = m^2 V_{pp\sigma} + (1-m)^2 V_{pp\pi} \quad (6)$$



شکل 1: ساختار  $\text{GeCH}_3$  تک لایه از بالا (الف) و از پهلو (ب)، گوی های خاکستری اتم  $\text{Ge}$ ، گوی های قرمز اتم کربن و گوی های سفید نشان دهنده اتم هیدروژن هستند.

مطابق شکل 2 یاخته اصلی  $\text{GeCH}_3$  همان یاخته شبکه لانه زنبوری است به طوری که در هر یاخته دو اتم  $\text{Ge}$  و دو ترکیب  $\text{CH}_3$  وجود دارد. ثابت شبکه این ماده،  $a = 3.954 \text{ \AA}$  و طول پیوند بین اتم های  $\text{Ge}$ ،  $2.415 \text{ \AA}$  و طول پیوند بین اتم های  $\text{Ge}$  و کربن  $\text{CH}_3$  برابر  $1.972 \text{ \AA}$  است [3]. میزان انحراف از صفحه  $h$  بین دو اتم  $\text{Ge}$  برابر  $0.788 \text{ \AA}$  است.

بر اساس محاسبات DFT در نزدیکی سطح فرمی حالت های موثر ناشی از اوربیتال های  $4s$  و  $4p$  اتم  $\text{Ge}$  بدون در نظر گرفتن اثر اسپین مدار در نقطه  $\Gamma$  شکاف انرژی در ساختار نواری این ماده برابر  $1.07 \text{ eV}$  است. در نقطه  $\Gamma$  بالاترین نوار ظرفیت (VBM)<sup>5</sup> دارای تبهگنی دوگانه ناشی از اوربیتال های  $p_x$  و  $p_y$  است. وقتی اثر اسپین مدار اعمال شود این تبهگنی با یک شکاف به اندازه  $193 \text{ meV}$  برداشته می شود. پایین ترین نوار هدایت (CBM)<sup>6</sup> به وسیله حالت های اوربیتال  $4s$  اتم  $\text{Ge}$  اشغال شده است [1].

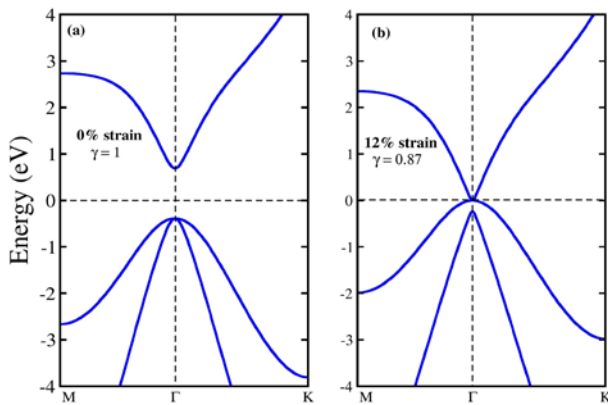
<sup>4</sup> Buckling high  
<sup>5</sup> Valance Band Maximum  
<sup>6</sup> Valance Band Minimum

### اعمال اثر اسپین مدار

هدف ما به دست آوردن یک هامیلتونی مدل تنگابست شامل اثر اسپین مدار است که بتواند نتایج حاصل از DFT را توضیح دهد. در حالت کلی عبارت اسپین مدار برای یک سیستم دو بعدی با رابطه

$$H_{SOC} = -\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\nabla V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} \quad (8)$$

داده می شود که در اینجا  $\hbar$  ثابت پلانک و  $m_0$  جرم الکترون



شکل 3: ساختار نواری مدل تنگابست بدون اعمال کشش (a) و با اعمال کشش (b).

آزاد و  $c$  سرعت نور،  $V$  انرژی پتانسیل،  $p$  تکانه و  $\sigma$  ماتریس های پائولی هستند. عمده سهم تزویج اسپین مدار ناشی از اوربیتال های حول هسته اتم است به همین دلیل می توان انرژی پتانسیل  $V(r)$  را با یک پتانسیل اتمی کروی تقریب زد. با میانگین گیری روی درجه آزادی شعاعی داریم

$$H_{i,\alpha,\beta}^{SOC} = \lambda_i \langle \vec{L} \cdot \vec{\sigma} \rangle_{\alpha,\beta} \quad (9)$$

$\lambda_i$  شدت تزویج اسپین مدار و  $\vec{L}$  عملگر تکانه زاویه ای است. عناصر ماتریس ناشی از اوربیتال های  $(\beta\alpha)$  در اتم نام است [7]. در سیستم های دو بعدی عناصر ماتریس  $\vec{L} \cdot \vec{\sigma}$  برای

$$t_{ij}^{p_x p_y} = \text{Im}(V_{pp\sigma} - V_{pp\pi}) \quad (7)$$

که ضرایب  $V_{pp\sigma}$ ،  $V_{sp\sigma}$ ،  $V_{ss\sigma}$  و  $V_{pp\pi}$  همان ضرایب اسلاتر-کوستر هستند.

ما مقدار انرژی اوربیتال  $s$  را برابر  $\epsilon_i^s = -12.00 \text{ eV}$  قرار دادیم و بقیه پارامترها را با نتایج به دست آمده از DFT بهینه

است:  $V_{pp\sigma} = 3.60$ ،  $V_{sp\sigma} = 2.56$ ،  $V_{ss\sigma} = -2.38$ ،  $\epsilon_i^p = -3.00 \text{ eV}$  و

$V_{pp\pi} = -1.14$ . با توجه به اینکه در هر یاخته دو اتم، و به ازای هر اتم سه اوربیتال در نظر گرفته شده است در نتیجه هامیلتونی

مدل تنگابست (رابطه 1) بدون در نظر گرفتن اثر اسپین مدار یک

ماتریس  $6 \times 6$  است. با قرار دادن مقادیر اسلاتر-کوستر در

هامیلتونی و قطری سازی آن توسط بسته LAPACK و ترسیم

ساختار نواری مشاهده می کنیم که در نزدیکی سطح فرمی نوارهای

انرژی تطابق خوبی با نتایج DFT دارد. شکل 3a

### اثر کشش در $\text{GeCH}_3$ تک لایه

کشش می تواند حالت های لبه ای را در بسیاری از مواد با اثر

اسپین مدار قوی، به وجود آورد بطوری که می تواند در دسته

جدیدی از مواد به نام نارساها یا توپولوژی نقش مهمی ایفا کند.

با اعمال یک کشش دو محوری  $\gamma$ ، ساختار لانه زنبوری بدون

تغییر باقی می ماند و فقط ثابت شبکه آن افزایش پیدا می کند از

این رو میزان کشش را به صورت  $\tau = \frac{\Delta a}{a_0}$  تعریف می شود بطوری

که  $a = a_0 + \Delta a$  و  $a_0$  ثابت شبکه بدون اعمال کشش است [3][6].

با اعمال کشش فاصله بین اتم ها افزایش پیدا می کند و این افزایش

فاصله باعث کاهش مقدار ضرایب اسلاتر-کوستر می شود و ما برای

نشان دادن اثر کشش تمام مقادیر  $t_{ij}^{\alpha\beta}$  را در ضریب  $\gamma$  ( $0 \leq \gamma \leq 1$ )

ضرب می کنیم و مقادیر انرژی اوربیتال ها را بدون تغییر نگه می

داریم. زمانی که هیچ کششی وجود نداشته باشد  $\gamma = 1$  است و با

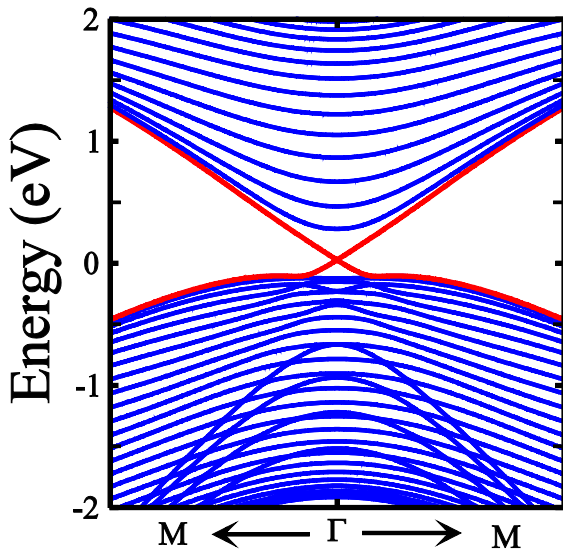
افزایش میزان کشش عامل  $\gamma$  کاهش پیدا می کند. با بهینه سازی

نوارهای انرژی با نتایج DFT فهمیدیم که به ازای  $\gamma = 0.87$

شکاف انرژی بسته می شود شکل (3) که این مقدار  $\gamma$  معادل 12%

کشش دو محوری در محاسبات DFT است [3]. شکل 3b

پهنای حدود 8nm در شکل 6 و در حضور کشش رسم شده است و حالت های لبه ای در این سیستم کاملاً مشخص است.



شکل 6: ساختار نواری نانو نوار زیگزاگ و حالت های لبه ای (نوارهای قرمز)

### نتیجه گیری

یکی از عوامل موثر برای گذار فاز توپولوژی اعمال یک تنش مانند کشش در سیستم است که تقارن وارونی زمان را حفظ می کند و مدل تنگابست ما به خوبی می تواند ساختار نواری این ماده را در نزدیکی سطح فرمی و رفتار توپولوژیکی این ماده را تحت کشش توضیح دهد.

### سپاسگزاری

از همکاری آقای اسماعیل تقی زاده سی سخت و خانم زهرا اصلانی کمال تشکر و قدر دانی را داریم.

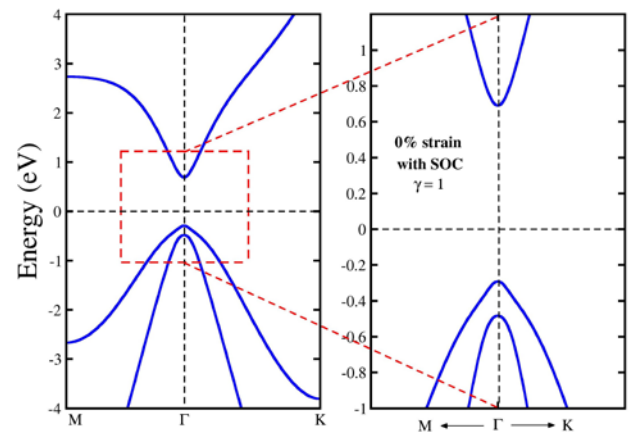
### مرجع ها

- [1] M.Z.Hasan, C.L.Kane; "Topological insulators; Rev. Mod. Phys **82**, 3045
- [2] Y.Ren, Z.Qiao "Topological phase in two-Dimensional Material: A Brief Review" " arXiv preprint arXiv:1509.09016 (2015)
- [3] Y.Ma, Y.Dai, W.Wei, B.Huang and M.H.Whanhbo "Strain-induced quantum spin Hall effect in methyl-substituted germanane Scientific reports **4** (2014): 7297
- [4] S.Jiang, et al. "Improving the stability and optical properties of germanane via one-step covalent methyl-termination." Nature communications **5**, 3389 (2014).
- [5] J.Grosso "solid state physics"; 3<sup>th</sup> edition
- [6] M.Zhao, X.Chen, L.Li, X.Zhang "Driving a GaAs film to a large-gap topological insulator by tensile strain"; Scientific reports **5** (2015)
- [7] L.Li, X.Zhang, X.Chen, M.zhao "Giant Topological Nontrivial Band Gap in Chloridized Gallium Bismuthide"; Nano Letters **15.2** (2015): 1296-1301

اوربیتال های  $s$ ,  $p_x$  و  $p_y$  به صورت

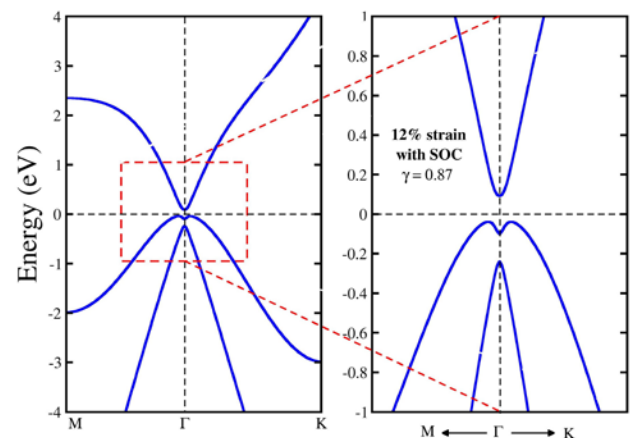
$$\vec{L} \cdot \vec{\sigma} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -is_z \\ 0 & is_z & 0 \end{bmatrix} \quad (10)$$

است. با بهینه سازی ویژه مقادیر هامیلتونی کل ( $H=H_0+H_{so}$ ) با نتایج DFT مقدار شدت تزویج اسپین مدار  $\lambda_i=0.096$  به دست می آید. با ترسیم ساختار نواری در دو حالت عدم وجود کشش و وجود کشش دو محوری، همانطور که در شکل های 4 و 5



شکل 4: ساختار نواری  $GeCH_3$  با وجود اثر اسپین مدار بدون اعمال کشش

دیده می شود تطابق خوبی در نزدیکی سطح فرمی بین مدل تنگابست و محاسبات DFT وجود دارد.



شکل 5: ساختار نواری  $GeCH_3$  با وجود اثر اسپین مدار و اعمال 12٪ کشش

### فاز توپولوژیک در $GeCH_3$

یکی از روش های تشخیص فاز توپولوژی وجود حالت های لبه ای در نانو نوار سیستم است که برای نانو نوار زیگزاگ  $GeCH_3$  با