

محاسبه نوارهای انرژی برای شبکه فسفرین تنش یافته

ایزدپرست، علی؛ صاحب‌سرا، پیمان

دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان، کد پستی ۸۴۱۵۶۸۳۱۱۱ اصفهان

چکیده

در میان موادی از خانواده گرافین، فسفرین بدلیل ساختاری شبکه‌ای خاص، که باعث رفتار نیمه رسانایی این ماده نیز شده است، مورد توجه قرار دارد. فسفرین با شبکه ناهمسانگرد، گذار فاز عایق به رسانایی به هنگام اعمال تنش روی شبکه آن، نشان می‌دهد. وجود کشش یا فشار روی شبکه فسفرین، از طریق تغییر در پارامترهای پرش هابارد، باعث تغییر فاز از عایق به رسانا در فسفرین می‌شود. در این تحقیق هامیلتونی تنگ بست را در شرایطی که t_1 پرش بین دو همسایه اول ثابت در نظر گرفته شده، و پرش بین دو همسایه دوم t_2 بر حسب آن تغییر کند، می‌نویسیم. با استفاده از این هامیلتونی می‌توان علاوه بر نوارهای انرژی، تابع طیفی و چگالی حالت‌ها را به روش حل دقیق بدست آورد. در این راه از الگوریتم لنگشوز روی هامیلتونی هابارد برای محاسبه حالت پایه استفاده می‌شود.

Energy band calculation for stressed phosphorene lattice

Izadparast, Ali; Sahebsara, Peyman

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran

Abstract

Among graphene structure family, phosphorene is important because of its semiconducting behavior. It has an anisotropic three-dimensional lattice, and show a metal to insulator transition by applying stress on its lattice. Application of stress on the phosphorene's lattice cause a change to the Hubbard hopping terms, which results in the phase transition. In this research we write the tight-binding Hamiltonian, with taking a fix parameter t_1 as the hopping between the first two neighbors and an accordingly changing parameter t_2 as hopping between the second two neighbors. Using this Hamiltonian, we are able to calculate the energy bands, along with the spectral function and density of states, by using exact solution. We used Lanczos method on the Hubbard model to obtain the ground state of the system.

PACS No: ۷۳

مقدمه

که این مشاهده دلیلی بر نیمه رسانا بودن این ماده خواهد بود. در تضاد با گرافین، که دارای گاف انرژی صفر است و در فاز رساناست، فسفرین یک نیمه رسانای دو بعدی با گاف محدود است. همین طور به خاطر تحرک بالای حفره‌های آن، انتظار می‌رود فسفرین قطعه نوع p مناسبی برای موادی از نوع n مانند، MoS_2 باشد. از همین جهت فسفرین برای ساخت نانو مواد نیمه رسانا مناسب خواهد بود [۵۶]. فسفرین دارای یک شبکه برآوه دو

در سال ۲۰۱۴ یک تک لایه از فسفر سیاه جداسازی شد که به آن فسفرین گفته می‌شود [۲۱]. پیوند واندروالس بین اتم‌های فسفر در دو لایه فسفر سیاه بر قرار است [۳]. مانند گرافین که از پوسته‌های گرافیت جداسازی می‌شود، فسفرین هم از تراشیدن لایه فسفر سیاه بدست می‌آید [۴]. با استفاده محاسبات تنگابست گاف انرژی محدود (حدود $1/8 \text{ eV}$) در فسفرین مشاهده گردیده است،

بقیه پرش‌ها منفی هستند. از این مباحث نتیجه می‌گیریم که در ساختار نوارهای الکترونیکی فسفرین دو پرش اول بیشترین سهم را خواهند داشت، از همین روی محاسبات بر پایه این دو پرش انجام می‌شود. به همین منظور ما در اینجا t_1 را ثابت در نظر می‌گیریم و t_2 را به نسبت آن تغییر می‌دهیم. همان طور که از مقدار پرش‌ها هم پیداست، مقدار t_2 تقریباً سه برابر اندازه t_1 ، یعنی $t_2 \cong 3|t_1|$ است. پس با اعمال تنش در یک راستا، بطور فرض در راستای افقی، تغییرات ثابت شبکه و همچنین دو پرش اول را بررسی می‌کنیم.

هامیلتونی هابارد برای شبکه فسفرین

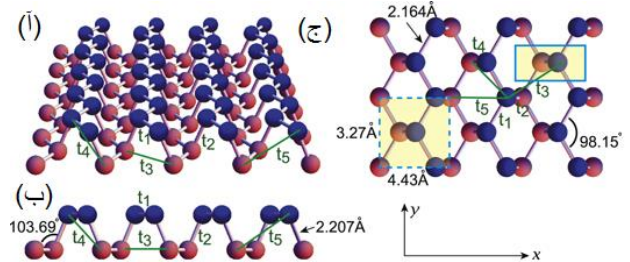
وقتی بخواهیم پارامتر هابارد را در محاسبات وارد کنیم، هامیلتونی به شکل زیر خواهد بود

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

که در آن جمع روی تمامی جایگاه‌های در نظر گرفته شده در بلور، زده می‌شود. t_{ij} نماینده پرش الکترون از اوربیتال مشخص در جایگاه i به اوربیتال مشخص در جایگاه j است. همچنین c_i^\dagger و c_j به ترتیب عملگرهای خلق و فناء فرمیونی در جایگاه‌های i و j هستند. این هامیلتونی در فضای مستقیم نوشته می‌شود. در جمله دوم U پارامتر هابارد گفته می‌شود. این جمله خاص برهمکنش درون جایگاهی است و باعث رفتار عایق در مواد می‌شود. $n_i = c_i^\dagger c_i$ عملگر شمارش خوانده می‌شود.

به دلیل در نظر گرفتن اسپین، پایه‌های بس ذره‌ای باید در نظر گرفته شوند به همین خاطر بعد ماتریس به سرعت (با ضریب 4^L که L تعداد اوربیتال‌ها است) رشد می‌کند. در اینجا تنها یک بلوک مشخص از ماتریس اصلی که شامل تمام حالت‌های نیمه‌پر است را در نظر می‌گیریم. همچنین برای اینکه مشکل محاسبات ویژه مقداری (بدست آوردن حالت پایه) با ماتریس بزرگ و تنک (خلوت) را نداشته باشیم، از الگوریتم لنگشوز استفاده می‌کنیم. این الگوریتم بسرعت به کمترین ویژه مقدار همگرا می‌شود و یک روش مناسب و بهینه برای کار با پایه‌های بس ذره‌ای است.

بعدی مستطیلی است که در هر یاخته آن چهار اتم فسفر قرار گرفته است. همان طور که در شکل (۱) هم دیده می‌شود، شبکه فسفرین بصورت اتم‌های فسفری است که به شکل زیگزاگی، و در دو لایه بروی هم قرار گرفته اند. پیوند هیبریدی sp^3 است [۷] که بین اتم‌های یک لایه اتفاق افتاده است و اگر دو بعدی در نظر گرفته شود فسفرین بصورت لانه زنبوری در خواهد آمد.

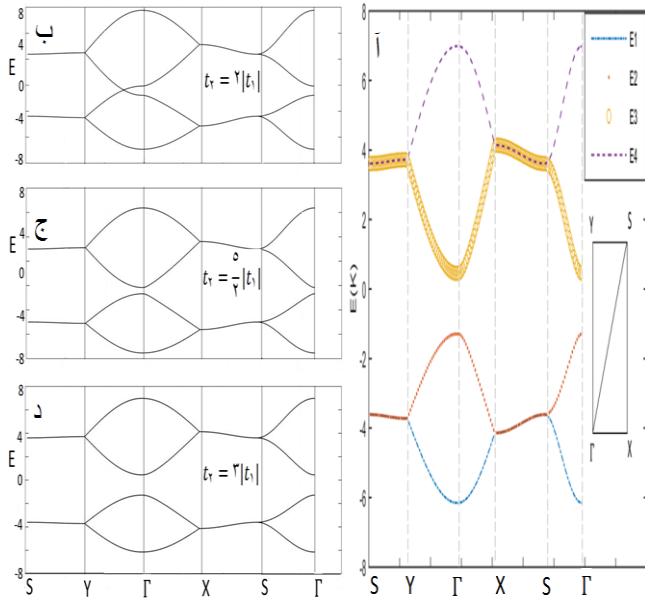


شکل ۱: ساختار شبکه ای فسفرین. (آ) نشان دهنده شبکه فسفرین در سه بعد است، که شامل دو لایه زیگزاگی از اتم‌های فسفر است. (ب) نشان دهنده این شبکه از پهلو است. (ج) اگر فسفرین را در دو بعد نگاه کنیم بصورت شبکه لانه زنبوری است که در این عکس به وضوح دیده می‌شود. همچنین در عکس‌ها وضعیت نامگذاری پرش الکترون از جایگاه‌ها مشخص شده است [۲].

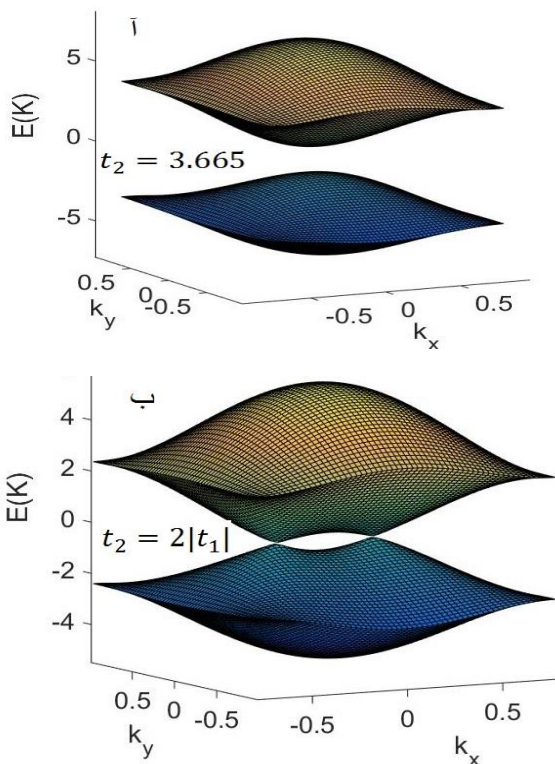
نوارهای انرژی فسفرین و مسیرهای پر تقارن در فضای معکوس در شکل ۳.آ، نشان داده شده‌اند. در آن $a=4.43 \text{ \AA}$ و $b=3.27 \text{ \AA}$ طول و عرض شبکه در فضای مستقیم است. در اینجا a_1 و a_2 بردارهای شبکه هستند که با $a_1 = a(1, 0)$ و $a_2 = b(0, 1)$ تعریف می‌شوند و n_1 و n_2 اعداد صحیح و مثبت خواهند بود. همچنین در این محاسبات، مطابق شکل، پنج پرش اول به نزدیک ترین همسایگان آورده شده است تا محاسبات از دقت کافی برخوردار باشد. مقادیر پرش برای این شبکه عبارتند از [۸]:

$$\begin{aligned} t_1 &= -1/220 \text{ eV}, \\ t_2 &= 3/665 \text{ eV}, \\ t_3 &= -0/205 \text{ eV}, \\ t_4 &= -0/105 \text{ eV}, \\ t_5 &= -0/055 \text{ eV}. \end{aligned}$$

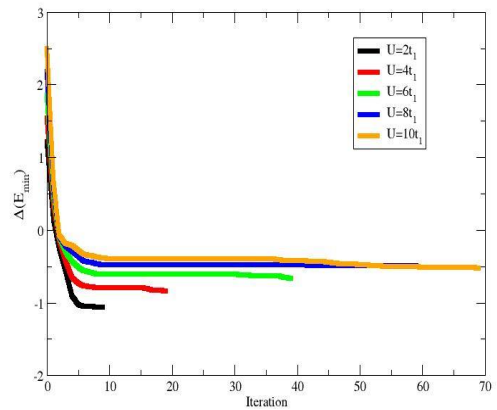
به دلیل نزدیکی اوربیتال‌های مورد نظر، اندازه t_1 و t_2 مقادیر قابل توجه‌تری نسبت به بقیه پرش‌ها دارند. همچنین علامت انتگرال‌های پرش با توجه به پتانسیل بلوری تعیین می‌شود و برای مثال مثبت بودن t_2 به نوعی مبین وجود رفتار حفره گونه می‌باشد.



شکل ۳: (آ) نشان دهنده ساختار نواری در شبکه فسفرین بدون تنش است. (ب) در اینجا تنش وارد شده است و مقدار $t_2 = 2|t_1|$ را دارد. (ج) تنش باعث $t_2 = \frac{2}{3}|t_1|$ شده است. (د) پرش $t_2 = 3|t_1|$ است.



شکل ۴: نوارهای انرژی در تمامی ناحیه اول بریلوئن برای دو حالت مورد نظر کشیده شده است. (آ) فسفرین معمولی است که در آن گاف دیده می‌شود. (ب) در شرایط $t_2 = 2|t_1|$ محاسبه شده است که به وضوح نشان دهنده نقطه دیراک است.



شکل ۲: همگرایی انرژی به ازای U های متفاوت که از روش لنگشوز روی هامیلتونی هابارد بدست آمده است. این نمودار اختلاف انرژی کمینه، بین i امین و $i+1$ امین دور در تکرار چرخه لنگشوز را برحسب تعداد تکرار نشان می‌دهد.

همانطور که در شکل (۲) پیداست، به ازای مقدار U کمتر، زودتر هم به همگرایی مطلوب خواهیم رسید. با داشتن ماتریس سه قطری حاصل از لنگشوز، محاسبه تابع طیفی و مشاهده گذار فاز در U بحرانی قابل دسترس است.

اگر حد $U=0$ را در نظر بگیریم، به همان تقریب تنگ بست خواهیم رسید. در این صورت به راحتی ساختار نواری بدست می‌آید. در این قسمت می‌توانیم اثر تنش یک بعدی را روی ساختار نواری فسفرین را مورد بررسی قرار دهیم و گذار فاز از عایق به رسانا را در شبکه فسفرین مشاهده کنیم. باید توجه داشت تنها دو پرش اول را در نظر می‌گیریم، به این صورت که پرش اول t_1 ثابت و پرش دوم t_2 نسبت به آن (t_1) تغییر خواهد کرد.

گذار فازی از تنش در شبکه فسفرین

هنگامی که هامیلتونی تنگ بست که بصورت

$$H = \sum_{i,j} t_{ij} c_i^\dagger c_j \quad (2)$$

است را در نظر داشته باشیم، هامیلتونی بصورت ماتریس (4×4) خواهد بود، چون فسفرین در هر یاخته خود، چهار اتم پایه که هرکدام دارای یک اوربیتال مؤثر هستند، را داراست بعد ماتریس 4×4 خواهد بود.

$$\rho(\omega_n) = -\frac{1}{N} \sum_K A(k, \omega_n) \quad (5)$$

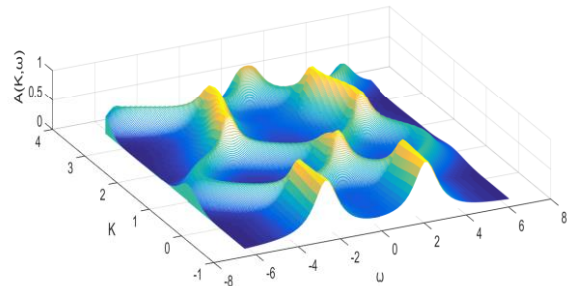
در شکل ۵، تابع طیفی نشان دهنده حدود ۲۵۰ نقطه شبکه است که برای حالت $t_2 = 2|t_1|$ رسم شده است. اگر روی همین نقاط شبکه جمع بزنیم چگالی حالات بدست می‌آید که در شکل ۶، این محاسبه را می‌بینیم. شکل ۶، هم که برای $t_2 = 2|t_1|$ بدست آمده است یک سیستم رسانا را نشان می‌دهد، زیرا که اینجا هم دو قله در $\omega = 0$ بطور کامل از هم جدا نشده‌اند.

نتیجه‌گیری

در شبیه سازی شبکه فسفرین با هامیلتونی هابارد و استفاده از روش لنگشوز برای این هامیلتونی، مشاهده می‌شود که برای U های کوچک‌تر محاسبات سریع‌تر به همگرایی خواهد رسید. همچنین وقتی مدل تنگ بست را برای فسفرین تحت تنش به کار می‌بریم، با داشتن شرط $t_2 = 2|t_1|$ گذار فاز عایق به رسانا در فسفرین دیده می‌شود. در صورتی که فسفرین بطور طبیعی، بعنوان یک عایق (نیمه رسانا) شناخته می‌شود. همچنین در همین شرایط ($t_2 = 2|t_1|$) نمودارهای انرژی یک نقطه دیراک را نشان می‌دهند که مهر تأییدی بر تحرک‌پذیری بالای حامل‌های بار در این ماده است.

منابع

- [۱] X. Peng, Q. Wei, and A. Copple, *Physical Review B* **۹۰** (۲۰۱۴) ۰۸۵۴۰۲.
 [۲] M. Ezawa, *New Journal of Physics* **۱۶** (۲۰۱۴) ۱۱۵۰۰۴.
 [۳] A. Morita, *Appl. Phys. A* **۳۹** (۱۹۸۶) ۲۲۷.
 [۴] W. Lu, et al., *Nano Res.* **۷** (۲۰۱۴) ۸۵۳.
 [۵] A. Morita, *Applied physics A* **۳۹** (۱۹۸۶) ۲۲۷-۲۴۲.
 [۶] H. Liu, A. T. Neal, Z. Zhu, Z. Luo, X. Xu, D. Tománek and P. D. Ye, *ACS Nano* **۸** (۲۰۱۴) ۴۰۳۳.
 [۷] E. Taghizadeh, M. Zare, and F. Fazileh, *Physical Review B* **۹۱** (۲۰۱۵) ۰۸۵۴۰۹.
 [۸] A. N. Rudenko and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B* **۸۹** (۲۰۱۴) ۲۰۱۴۰۸.



شکل ۵: چگالی حالات جزئی برای $t_2 = 2|t_1|$.

در شکل ۳، نوارهای انرژی در مسیرهای پرتقارن رسم شده‌اند. نکته قابل توجه تغییر فاز فسفرین در $t_2 = 2|t_1|$ است که از عایق به رسانا تبدیل شده است و یک نقطه دیراک را نشان می‌دهد. شکل ۴، سطح انرژی در کل ناحیه اول بریلوئن رسم شده است و با آنچه در شکل ۳، بدست آمده در توافق است.

چگالی حالت‌ها

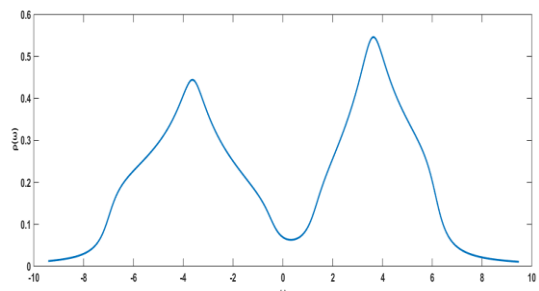
هنگامی که هامیلتونی یک سیستم را داریم می‌توانیم به راحتی برای بدست آوردن چگالی حالات، تابع گرین را از معادله زیر بدست بیاوریم

$$G(K, \omega_n) = (Z - H)^{-1} \quad (3)$$

در این معادله، Z یک تابع مختلط است که شامل فرکانس‌های ماتسوبارا برای فرمیون‌هاست. در این صورت دما نیز وارد مسئله می‌شود. اینجا $T=0.1K$ در نظر گرفته شده است. ابتدا تابع طیفی از

$$A(K, \omega_n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(k, \omega_n) \quad (4)$$

محاسبه شده و در نهایت چگالی حالت‌ها از معادله زیر بدست آمده است.



شکل ۶: نشان چگالی حالت‌های فسفرین در شرایطی که $t_2 = 2|t_1|$ است.