

جریان الکتریکی نوری اسپین قطبیده در نانونوار MoS2

ریحانه عبدی، روح اله فرقدان

گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان، کاشان

چکیدہ

در این نوشتار به معرفی روشی برای ایجاد جریان الکتریکی قطبیا می اسپینی با استفاده از تابش نور بر نانونوارهای زیگزاگی و آرمچیری MoS2 پرداخته ایم. برای بررسی جریان های وابسته به اسپین القا شا م توسط نور در نانونوارهای MoS2 از برهمکنش نور با ماده در مال تابع گرین غیرتعادلی و تقریب مال تنگبست استفاده نموده ایم. جفت شا گی اسپین-مارار ذاتی در MoS2 موجب شا مه تا جریان الکتریکی نوری وابسته به اسپین با ون نیاز به عوامل مغناطیسی خارجی ایجاد می شود. قابل توجه بودن مقادیر بازده کوانتومی و قطبش نوری اسپین، نشان

امروزه تبدیل نور به سیگنالهای الکتریکی، اپتوالکترونیک، از مهمترین موضوعات مورد بررسی در پژوهشهای نظری و آزمایشگاهی است. 2MoS، معروفترین ترکیب از گروه دیکالکوژنید فلزات واسطه است. مهمترین خاصیت الکترونی MoS2 وجود گاف انرژی در ساختار نواری آن است که مقدار و نوع (مستقیم/ غیرمستقیم) این گاف با تغییر تعداد لایه های نانونوار قابل تغییر و تنظیم میباشد [۱]. خواص اپتیکی منحصر به فرد MoS2 از جمله سرعت بالای حاملهای بار، امکان آشکارسازی طیف وسیعی از طول موجها، پاسخگویی نوری سریع، قابل توجه بودن جریان الکتریکی ناشی از تابش نور، وابستگی خواص اپتیکی به تعداد لایهها و بازده کوانتومی بالا آن را به ساختاری کارآمد در زمینه اپتوالکترونیک تبدیل کردهاست [۲،۳]. افزون بر این موارد، بزرگ بودن مقدار برهمکنش اسپین-مدار برای MoS2 ویژگی دیگری است که آن را در زمینه اسپیترونیک مانند کنترل الکتریکی اسپین مورد توجه قرار میدهد [٤]. مشاهدات حاکی

از آن است که با ادغام اپتوالکترونیک و اسپینترونیک میتوان در بهبود نتایج نظری و آزمایشگاهی مؤثر بود [۵]. در این نوشتار یک آشکارساز نوری–اسپینی مطابق با شکل ۱ الف مدلسازی شده که در آن یک نانونوار زیگزاگ (آرمچیر) MoS2 به عنوان کانال مابین دو نانونوار زیگزاگ (آرمچیر) MoS2 نیمه بینهایت به عنوان اتصالات راست و چپ، قرار دارد. هامیلتونی k.p دونواری موثر به صورت زیر بیان میشود [٦]:

(1)

$$H_{C,\sigma} = \begin{pmatrix} \Delta & t \\ t & -\Delta + 2\lambda\tau\sigma \end{pmatrix}$$

که در آن Δ=۰/۸۳ eV گاف انرژی، λ=۰/۰۳۷۵ eV ثابت جفتشدگی اسپین-مدار ذاتی، t=۱/۲۷ eV پارامتر جهش در تقریب تنگبست، ۱-۹۰+=σ نمایهی اسپین (۱+ برای اسپین α و ۱- برای اسپین β) و ۱-۹۰+=τ نمایهی دره، می باشد. همچنین تابع گرین تأخیری سیستم برای نانونوار MoS2 عبارت است از:

$$G_{\sigma}(E) = \left[(E + i\eta)I - H_{C,\sigma} - \Sigma_{L,\sigma} - \Sigma_{R,\sigma} - \Sigma_{ph,\sigma} \right]^{-1}$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

$$(7)$$

 $I_{ph,\sigma} = \frac{2e}{h} \int dETr \left\{ G_{(1,1),\sigma}^{p}(E) \Gamma_{L,\sigma}(E) f_{L}(E) - G_{(1,1),\sigma}^{n}(E) \Gamma_{L,\sigma}(E) \left\lfloor 1 - f_{L}(E) \right\rfloor \right\}$ ($^{(n)}$) c, $I_{L,\sigma}(E) f_{L,\sigma}(E) \left\lfloor 1 - f_{L}(E) \right\rfloor$ ($^{(n)}$) c, $I_{L,\sigma}(E) f_{L,\sigma}(E) \left\lfloor 1 - f_{L}(E) \right\rfloor$ ($^{(n)}$) c, $I_{L,\sigma}(E) f_{L,\sigma}(E) \left\lfloor 1 - f_{L}(E) \right\rfloor$ ($^{(n)}$) c, $I_{L,\sigma}(E) f_{L,\sigma}(E) \left\lfloor 1 - f_{L}(E) \right\rfloor$ ($^{(n)}$) c, $I_{L,\sigma}(E) f_{L,\sigma}(E) \left\lfloor 1 - f_{L}(E) \right\rfloor$ ($^{(n)}$)



شکل ۱: (الف) آشکارساز نوری-اسپینی شامل کانال و اتصالات راست و چپ تحت تابش نور. (ب) نانونوار MoS2 با لبههای زیگزاگ و آرمچیر. رنگ آبی اتم های Mo و رنگ زرد اتمهای S را نشان میدهد. سلول واحد نانونوار زیگزاگ (آرمچیر) با خط سبز رنگ (خط چین قرمز رنگ) مشخص شده است. a ثابت شبکه و برابر با فاصلهی اتمهای S میباشد.

(E) توابع همبستگی الکترونها و حفرهها را نشان میدهند که از روش حلخودسازگار بدست میآیند. $G^{n,p}_{\sigma}(E)$ مربوط به اولین ستون از ماتریس (E) $G^{n,p}_{\sigma}(E)$ است که نشاندهندهی اولین سلول واحد کانال می است که نشاندهندهی اولین سلول واحد کانال می است که بناندهنده والین سلول واحد کانال می است که به این صورت تعریف می شود:

$$QE_{\sigma}(\%) = \left\lfloor \left(\frac{I_{ph}}{e}\right) / \left(\frac{P_{in}}{E_{ph}}\right) \right\rfloor \times 100\% \ (\sigma = \alpha, \beta)$$
^(§)

که P_{in} توان نور تابش شده را نشان میدهد. علاوه بر این مفهوم قطبش نوری اسپین به صورت زیر تعریف می شود:
(۵)
$$SP(\%) = \left[\left(I_{ph,\sigma} - I_{ph,-\sigma} \right) / \left(I_{ph,\sigma} + I_{ph,-\sigma} \right) \right] \times 100\%$$



شکل ۲. ساختار نواری نانونوار زیگزاگ (الف) و آرمچیر (ب) MoS2. خطوط آبی رنگ (خطچین های قرمزرنگ) نوار انرژی اسپین α (اسپین β) را نشان میدهند. A و B به ترتیب گاف انرژی اسپین α (اسپین β)را نشان میدهد. (ج) قطبش اسپینی بر حسب انرژی فوتون.



شکل۳. بازده کوانتومی نانونوار زیگزاگ (الف) و آرمچیر (ب) MoS₂ برای اسپین α و β بر حسب انرژی فوتون. اسپین α در hom=۱/0۹ eV و برای اسپین β در eV eV است برای اسپین α و β می باشد (بردارهای A و B). بیشترین مقدار بازده کوانتومی در نانونوار زیگزاگ برای اسپین α در eV برای اسپین α اسپین α و β می باشد (بردارهای A و B). بیشترین مقدار بازده کوانتومی در نانونوار زیگزاگ برای اسپین α در V برای اسپین α و β می باشد (بردارهای A و B). بیشترین مقدار بازده کوانتومی در نانونوار زیگزاگ برای اسپین α در V برای اسپین α اسپین α و برای اسپین β در eV ۳۰/۲۹ می باشد. مطابق شکل ۳ ب برای نانونوار آرمچیر MoS₂ اولین و بلندترین قلهی نمودار بازده کوانتومی برای اسپین α در V eV اسپین α و برای اسپین β در MoS₂ eV. و برای اسپین A و MoS₂.

نتيجه گيرى

مراجع

نتایج حاصل از بررسیهای فوق نشان میدهد که بیشترین مقدار مشارکت حاملهای بار در تولید جریان نوری مربوط به الکترونهای با اسپین α در نانونوار زیگزاگ MoS2 است. همچنین در نانونوار زیگزاگ (آرمچیر) برای اسپین α و β بیشترین جذب نور در ناحیهی فروسرخ (مرئی) خواهد بود. بنابراین استفاده از نانونوار زیگزاگ و آرمچیر MoS2 در آشکارساز نوری–اسپینی امکان ایجاد جریان الکتریکی را از طریق تابش نور فراهم میکند. بزرگ بودن مقدار جفت شدگی اسپین–مدار در MoS2 باعث می شود که این جریان الکتریکی نوری بدون نیاز به هیچ یک از عوامل مغناطیسی خارجی از جمله ناخالصیهای مغناطیسی، میدان مغناطیسی خارجی و... وابستگی قابل توجهی به اسپین داشته باشد. مقادیر حاصل برای بازده کوانتومی و قطبش نوری اسپین، نانونوار زیگزاگ و آرمچیر MoS2را به عنوان انتخاب مناسبی برای استفاده در زمینهی اسپین–ایتوالکترونیک معرفی میکند.

1. S Manzeli, D Ovchinnikov, D Pasquire, O.V Yazyev, A Kis,"2D transition metal dichalcogenides." *Nature Reviews Materials* **2.8** (2017) 17033.

 Radisavljevic, Branimir, et al. "Single-layer MoS2 transistors." *Nature nanotechnology* 6.3 (2011): 147.
 QH Wang, K Kalantar-Zade, A Kis, JN Coleman, MS Strano, "Electronics and optoelectronics of twodimensional transition metal dichalcogenides."*Nature nanotechnology* 7.11 (2012) 699.

4. Khoeini, F., Kh Shakouri, and F. M. Peeters. "Peculiar half-metallic state in zigzag nanoribbons of MoS2: Spin filtering." Physical Review B 94.12 (2016): 125412.

5. Zamani, Sara, and Rouhollah Farghadan. "Spin photocurrents in chevron-type graphene nanoribbons under terahertz to visible light irradiation." Journal of Physics D: Applied Physics **51.30** (2018): 305103.

6. Heshmati-Moulai, Amin, Hamidreza Simchi, and Mahdi Esmaeilzadeh. "Perfect valley polarization in MoS2." The European Physical Journal B 90.7 (2017): 128.

7. M. L. Sancho, J. L. Sancho, J. L. Sancho, and J. Rubio, *Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface green functions, J. Phys.* F: Met. Phys. **15**, **851** (1985).

8. Zamani, Sara, and Rouhollah Farghadan. "Graphene Nanoribbon Spin-Photodetector." Physical Review Applied **10.3** (2018): 034059.