

جریان‌های نوری وابسته به اسپین در نانونوارهای آرمچیری TMD

ریحانه عبدی و روح‌اله فرقدان

گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان

پست الکترونیکی: rfarghadan@kashanu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۸/۰۲/۰۷؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۹/۰۳/۳۱)

چکیده

در این مقاله به بررسی امکان تولید جریان الکتریکی وابسته به اسپین، با استفاده از تابش نور بر نانونوارهای آرمچیری دی‌کالکوژنید فلزات واسطه می‌پردازیم. به منظور شبیه‌سازی جریان‌های اسپینی القا شده توسط نور، از برهم‌کنش نور با ماده در مدل تابع گرین غیر عادلانه استفاده می‌شود. با توجه به جفت‌شدگی اسپین-مدار ذاتی در ساختار $MoSe_2$ ، WS_2 ، MoS_2 و WSe_2 به عنوان معروف‌ترین ترکیبات دی‌کالکوژنید فلزات واسطه، جریان الکتریکی نوری وابسته به اسپین بدون نیاز به هیچ یک از عوامل مغناطیسی خارجی ایجاد می‌شود. با اعمال میدان الکتریکی عرضی مناسب می‌توان مقدار و محل وقوع قله‌های نمودار بازده کوانتومی را تنظیم و جریان الکتریکی نوری وابسته به اسپین را بهینه‌سازی کرد. جریان الکتریکی نوری با قطبش کامل اسپینی، بازده کوانتومی بالا (تقریباً تا ۵۰ درصد)، جذب نور در محدوده وسیعی از طول موج‌ها از فرابنفش تا فروسرخ، تفاوت در نتایج اپتیکی با توجه به نوع اسپین حامل‌های بار به صورتی که تمام موارد فوق با اعمال میدان الکتریکی عرضی مناسب قابل تنظیم خواهند بود، بیانگر کارایی بالای آشکارسازهای نوری-اسپینی مبتنی بر نانونوارهای دی‌کالکوژنید فلزات واسطه و اهمیت تلاش برای بهبود بخشیدن به طراحی و عملکرد این نوع از آشکارسازها در زمینه اسپین-اپتوالکترونیک هستند.

واژه‌های کلیدی: اسپین- اپتوالکترونیک، نانونوارهای دی‌کالکوژنید فلزات واسطه، بازده کوانتومی، قطبش کامل اسپینی

۱. مقدمه

این مواد که منجر به برتری آنها نسبت به گرافن در زمینه اپتوالکترونیک می‌شود وجود گاف انرژی در ساختار نواری آنهاست که مقدار و نوع (مستقیم/ غیرمستقیم) این گاف با تغییر تعداد لایه‌های نانونوار قابل تغییر و تنظیم است [۱ و ۲]. از جمله خواص اپتیکی منحصربه‌فرد TMD، می‌توان به تحرک بالای حامل‌های بار [۳]، امکان آشکارسازی طیف وسیعی از طول موج‌ها [۲ و ۴]، کوتاه بودن زمان پاسخگویی نوری [۵]، قابل توجه بودن جریان الکتریکی ناشی از تابش نور

اپتوالکترونیک، تبدیل نور به سیگنال‌های الکتریکی، از مهم‌ترین موضوعات مورد بررسی در پژوهش‌های نظری و آزمایشگاهی است. یکی از کارآمدترین ساختارها در زمینه فیزیک ماده چگال به ویژه اپتوالکترونیک، ترکیبات دی‌کالکوژنید فلزات واسطه^۱ هستند که نوشتار عمومی آنها به صورت MX_2 (M= Mo, W, X= S, Se) است. مهم‌ترین خاصیت الکترونی

۱. Transition Metal Dichalcogenide ;TMD

۲. روش انجام محاسبات نظری

در این نوشتار یک آشکارساز نوری- اسپینی مبتنی بر نانونوارهای آرمچیری TMD (WSe_2 , $MoSe_2$, WS_2 , MoS_2) مطابق با شکل ۱. الف شبیه‌سازی شده است. این آشکارساز شامل یک کانال از نانونوار آرمچیری TMD است که بین دو نانونوار آرمچیری TMD نیمه بی‌نهایت به عنوان اتصالات راست و چپ قرار دارد. هامیلتونی $k.p$ دونواری مؤثر به صورت زیر بیان می‌شود [۱۷]:

$$H_{C,\sigma} = \begin{pmatrix} \Delta & \\ & -\Delta + t\lambda\tau\sigma \end{pmatrix}, \quad (1)$$

که در آن $\sigma = +1, -1$ نمایه اسپین ($+1$ برای اسپین α و -1 برای اسپین β) و $\tau = +1, -1$ نمایه دره، Δ گاف انرژی، λ ثابت جفت‌شدگی اسپین- مدار ذاتی و t پارامتر جهش در تقریب تنگ‌بست است که مقادیر آنها برای ساختارهای مختلف TMD در جدول ۱ بیان شده است. همچنین تابع گرین تأخیری سیستم در حضور اتصالات و برهم‌کنش نور با ماده (شکل ۱) برای نانونوار TMD عبارت است از [۱۴]:

$$G_{\sigma}(E) = \left[(E + i\eta)I - H_{C,\sigma} - \Sigma_{L,\sigma} - \Sigma_{R,\sigma} - \Sigma_{ph,\sigma} \right]^{-1}, \quad (2)$$

که در آن منظور از η یک مقدار بسیار کوچک، I ماتریس واحد و $H_{C,\sigma}$ هامیلتونی کانال است. $\Sigma_{ph,\sigma}$ خودانرژی برهم‌کنش الکترون- فوتون و $\Sigma_{L,R,\sigma}$ خودانرژی اتصالات راست و چپ هستند که از روش تکرار سنجو به دست می‌آیند [۱۸] و به علت حضور برهم‌کنش اسپین- مدار ذاتی (λ)، نتایج محاسبات برای اسپین α و β متفاوت خواهد بود. جریان نوری- اسپینی نیز از رابطه زیر قابل محاسبه است [۱۹]:

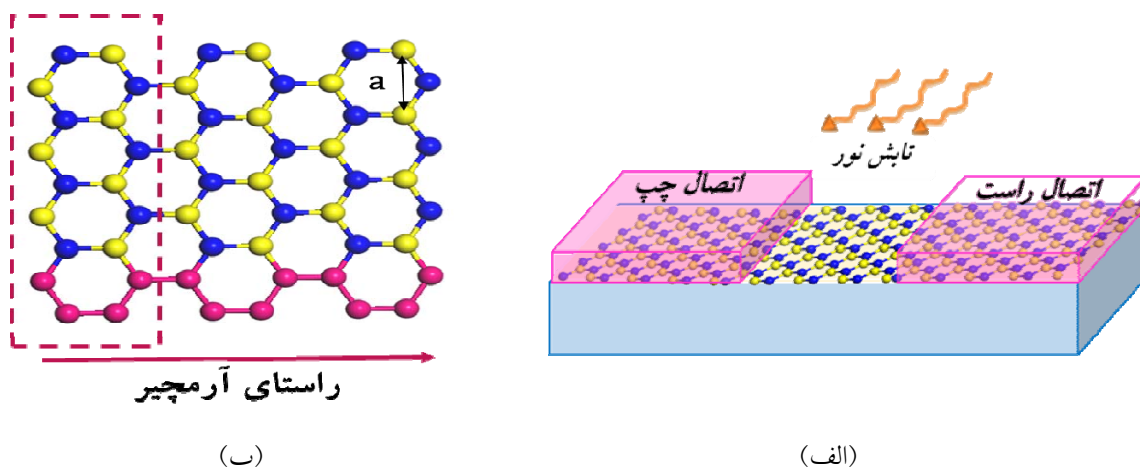
$$I_{ph,\sigma} = \frac{re}{h} \int dE Tr \left\{ \begin{matrix} G_{(1,1),\sigma}^P(E) \Gamma_{L,\sigma}(E) f_L(E) \\ -G_{(1,1),\sigma}^N(E) \Gamma_{L,\sigma}(E) [1 - f_L(E)] \end{matrix} \right\}, \quad (3)$$

در این رابطه h ثابت پلانک، $f_{L,R}$ توابع فرمی- دیراک، $\Gamma_{L,R}$ توابع گسترده‌گی اتصالات راست و چپ هستند و $G_{\sigma}^{n,P}(E)$ توابع همبستگی الکترون‌ها و حفره‌ها را نشان می‌دهند که از روش حل خودسازگار به دست می‌آیند. $G_{(1,1),\sigma}^{n,P}(E)$ مربوط به اولین ستون از ماتریس

[۳] و بازده کوانتومی بالا [۶] اشاره کرد. برای مثال استفاده از MoS_2 تک‌لایه در آشکارسازهای نوری فلز / TMD / فلز، که مشابه با ساختار ترانزیستورهای اثر میدان هستند موجب ارتقای عملکرد دستگاه می‌شود، به این ترتیب زمان پاسخ‌گویی تا 50 ms کاهش و مقدار پاسخ‌گویی نوری تا $7/5 \text{ mA/W}$ افزایش می‌یابد که قابل مقایسه با مقدار پاسخ‌گویی نوری برای ترانزیستورهای مبتنی بر گرافن است ($6/1$ میلی آمپر بر وات) [۷]. همچنین آشکارسازهای نوری گرافن / TMD / گرافن [۵]، سلول‌های فوتولتاییک، دیوهای دو قطبی نوری [۸] نمونه‌های دیگری از توسعه کاربرد این مواد در حوزه اپتوالکترونیک هستند [۹].

افزون بر این موارد، بزرگ بودن مقدار برهم‌کنش اسپین- مدار ذاتی TMD [۶ و ۱۰]، ویژگی دیگری است که این ترکیبات را در زمینه اسپینترونیک مورد توجه قرار می‌دهد [۱۱] و [۱۲]. در حال حاضر ادغام اپتوالکترونیک و اسپینترونیک از موضوعات مهم مورد بررسی در پژوهش‌های نظری و آزمایشگاهی در زمینه اسپین- اپتوالکترونیک است [۱۳ و ۱۴]. برای ایجاد جریان الکتریکی قطبیده اسپینی، می‌توان از اتصالات و یا کانال فرومغناطیس در یک ترانزیستور نوری استفاده کرد [۱۵ و ۱۶].

در این نوشتار، یک آشکارساز نوری- اسپینی را مبتنی بر نانونوارهای آرمچیری TMD (Armchair TMD Nanoribbons; $AMoS_2NR$, AWS_2NR , $AMoSe_2NR$, $AWSe_2NR$) طراحی کرده و با استفاده از فرمول‌بندی حل خودسازگار تابع گرین غیر تعادلی و تقریب مدل تنگ‌بست به محاسبه خواص اپتوالکترونیکی وابسته به اسپین در این آشکارساز می‌پردازیم. پس از آن با اعمال میدان الکتریکی عرضی مناسب بر نانونوارهای آرمچیری TMD، خواص اپتوالکترونیکی را برای اسپین مثبت (α) و منفی (β) مورد تحلیل و بررسی قرار می‌دهیم. نتایج محاسبات با توجه به خواص مغناطیسی و گاف انرژی مناسب در نانونوارهای آرمچیری TMD، امکان استفاده از این ترکیبات را در سیستم‌های اپتوالکترونیکی وابسته به اسپین فراهم می‌کند.



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) (الف) آشکارساز نوری- اسپینی شامل کانال و اتصالات راست و چپ تحت تابش نور و (ب) نانونوار TMD با لبه‌های آرمچیری. رنگ آبی اتم‌های M و رنگ زرد اتم‌های X را نشان می‌دهد. سلول واحد نانونوار آرمچیری با ۱۸ اتم با خط چین قرمز رنگ مشخص شده است. a ثابت شبکه و برابر با فاصله اتم‌های X است.

۳. نتایج و بحث

در این قسمت خواص اسپین- ایتوالکترونیکی نانونوارهای آرمچیری MoS_2 ، WS_2 ، $MoSe_2$ و WSe_2 را با استفاده از فرمول‌بندی تابع گرین غیر تعادلی و مدل تنگ‌بست بررسی خواهیم کرد. به علت وجود خاصیت مغناطیسی ذاتی در ساختار TMD، تابش نور بر این مواد منجر به ایجاد یک جریان اسپینی می‌شود. در این راستا یک آشکارساز نوری- اسپینی مطابق شکل ۱. الف شبیه‌سازی کردیم که متشکل از یک نانونوار آرمچیری TMD با طول محدود به عنوان کانال است که بین دو نانونوار آرمچیری TMD نیمه بی‌نهایت به عنوان الکترود قرار دارد. کانال شامل یک سلول واحد است و لبه‌های بالایی و پایینی نانونوار آرمچیری به صورت متقارن در نظر گرفته شده است. شکل ۱. ب طرحی از نانونوار آرمچیری TMD را با ۱۸ اتم در هر سلول واحد نشان می‌دهد.

به منظور بررسی خواص الکترونی، شکل ۲ ساختار نواری وابسته به اسپین نانونوار آرمچیری MoS_2 (الف)، WS_2 (ب)، $MoSe_2$ (ج) و WSe_2 (د) را با ۱۸ اتم در هر سلول واحد برای اسپین α و β نشان می‌دهد. مقدار انرژی نمایش داده شده در بازه $1/5 \text{ eV} \leq E \leq -1/5 \text{ eV}$ و انرژی فرمی (E_f) معادل با صفر تنظیم شده است. خاصیت مغناطیسی این ترکیبات منجر به

جدول ۱. پارامترهای لازم در هامیلتونی دی‌کالکوژنید فلزات واسطه [۲۰].

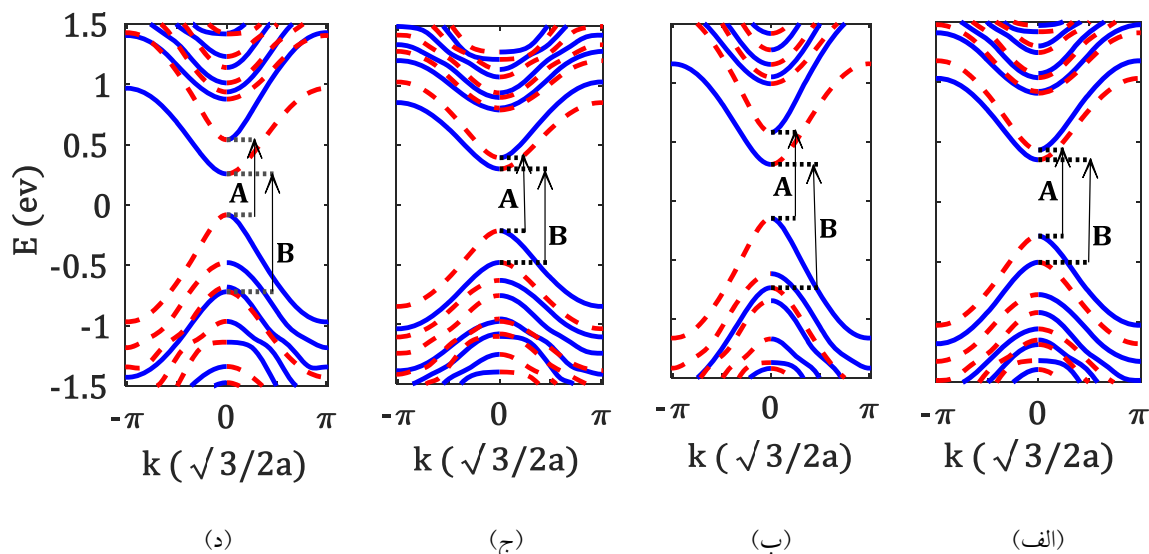
پارامتر ساختار	Δ (eV)	λ (eV)	t (eV)	a (Å)
MoS_2	۱/۶۶	۰/۰۷۵	۱/۱۰	۳/۱۹۳
$MoSe_2$	۱/۴۷	۰/۰۹	۰/۹۴	۳/۳۱۳
WS_2	۱/۷۹	۰/۲۱۵	۱/۳۷	۳/۱۹۷
WSe_2	۱/۶۰	۰/۲۳	۱/۱۹	۳/۳۱۰

$G_{\sigma}^{n,p}(E)$ است که نشان دهنده اولین سلول واحد کانال است. پارامتر کلیدی دیگر برای آشکارساز نوری، بازده کوانتومی وابسته به اسپین است که به صورت رابطه ۴ تعریف می‌شود:

$$QE_{\sigma}(\%) = \left[\left(\frac{I_{ph}}{e} \right) / \left(\frac{P_{in}}{E_{ph}} \right) \right] \times 100\% \quad (\sigma = \alpha, \beta), \quad (4)$$

که در این رابطه، P_{in} توان نور تابش شده را نشان می‌دهد. علاوه بر این در آشکارسازهای نوری- اسپینی برای بیان کارایی اسپینی سیستم، مفهوم قطبش اسپینی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$SP(\%) = \left[\left(I_{ph, \sigma} - I_{ph, -\sigma} \right) / \left(I_{ph, \sigma} + I_{ph, -\sigma} \right) \right] \times 100\% \quad (5)$$

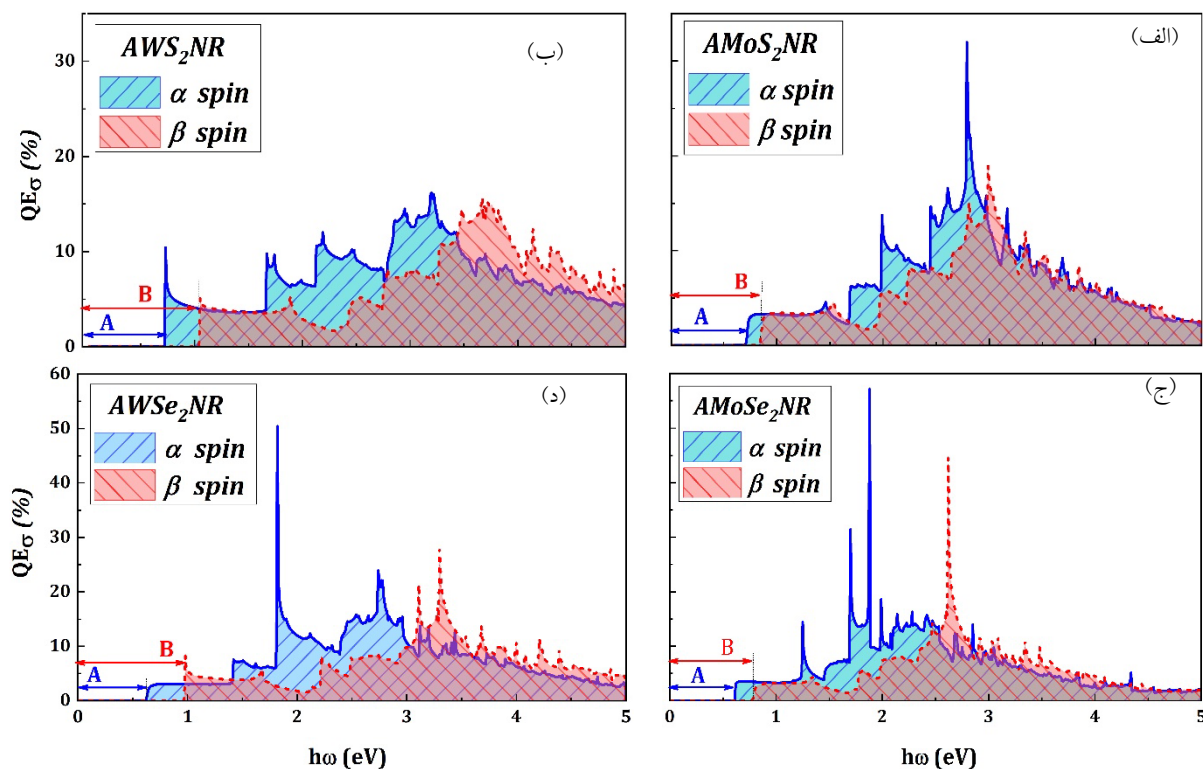


شکل ۲. ساختار نواری نانونوار آرمچیری (الف) MoS_2 ، (ب) WS_2 ، (ج) MoSe_2 و (د) WSe_2 با ۱۸ اتم در هر سلول واحد. خطوط آبی رنگ (خط چین های قرمز رنگ) نوارهای انرژی اسپین α (اسپین β) را نشان می‌دهند. بردار A (بردار B) نشان دهنده گاف انرژی اسپین α (اسپین β) و مقدار ثابت شبکه است (جدول ۱).

α ، کمترین و بیشترین مقدار گاف انرژی به ترتیب مربوط به MoSe_2 و WS_2 است. در ادامه بحث، ضمن توجه به مغناطیسی بودن این ساختارها، اثر برهم‌کنش نور و ماده را مورد تحلیل و بررسی قرار می‌دهیم.

برای بررسی خواص اسپین-ابتوالکترونیکی TMD به محاسبه بازده کوانتومی وابسته به اسپین با استفاده از جریان اسپینی تولید شده پرداختیم. نور تابش شده به صورت نور قطبیده خطی با شدت $I_0 = 100 \text{ kW/cm}^2$ مفروض است که به صورت عمودی از بالا بر سطح کانال تابش می‌شود. تمام محاسبات در دمای اتاق صورت گرفته است. شکل ۳ بازده کوانتومی وابسته به اسپین را بر حسب انرژی فوتون فرودی برای آشکارساز نوری مبتنی بر نانونوار آرمچیری MoS_2 (الف)، WS_2 (ب)، MoSe_2 (ج) و WSe_2 (د) با در نظر گرفتن اسپین α و β نمایش می‌دهد. در این شکل نتایج برای اسپین α (اسپین β) با نواحی آبی رنگ (قرمز رنگ) و خطوط پر (خط چین) معرفی شده است. خاصیت مغناطیسی این ترکیبات منجر می‌شود که جریان نوری ایجاد شده در این آشکارساز (شکل ۱. الف) به صورت دو حالت جریان اسپین α و جریان اسپین β در نظر گرفته شود، در نتیجه نمودارهای بازده کوانتومی نیز که با استفاده

جداشدگی نوارهای انرژی برای اسپین α و β می‌شود؛ در حالی که هیچ یک از نوارهای انرژی با تراز فرمی تماس ندارند. همچنین به علت حضور جمله $\lambda\tau_2s$ در هامیلتونی که پیش از این معرفی شد، جفت‌شدگی اسپین-دره به صورت قابل توجهی به ویژه در نوار ظرفیت قابل مشاهده است. این موضوع به این معناست که نوارهای انرژی برای $s=+1, \tau=+1$ مشابه با نوارهای انرژی برای $s=-1, \tau=-1$ هستند. همچنین می‌توان گفت نوارهای انرژی با $s=-1, \tau=+1$ مشابه با نوارهای انرژی با $s=+1, \tau=-1$ هستند که این امر ناشی از وجود تقارن بازتابی در ساختار TMD است. مطابق شکل ۲ جداشدگی نوارهای انرژی مربوط به اسپین α و β برای WS_2 و WSe_2 (شکل ۲. ب و د) به ترتیب بیشتر از مقدار جداشدگی برای MoS_2 و MoSe_2 است و این موضوع از بزرگ‌تر بودن مقدار پارامتر برهم‌کنش اسپین-مدار (λ) در این ساختارها ناشی می‌شود. در شکل ۲ گاف انرژی برای اسپین α با بردار A و برای اسپین β با بردار B نمایش داده شده است. مطابق این شکل برای اسپین α کمترین مقدار گاف انرژی در ساختار نواری MoSe_2 و بیشترین مقدار آن در ساختار نواری WS_2 قابل مشاهده است. بررسی مقادیر گاف انرژی نشان می‌دهد که برای اسپین β نیز مشابه با اسپین



شکل ۳. بازده کوانتومی وابسته به اسپین برای نانونوار آرمچیری (الف) MoS_2 ، (ب) WS_2 ، (ج) MoSe_2 و (د) WSe_2 برای اسپین α و β .

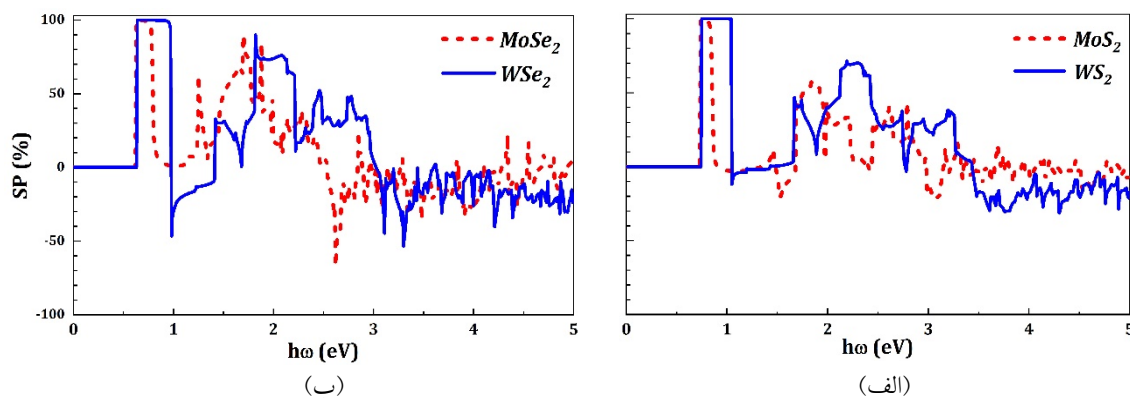
داده شده در شکل ۳ الف-د متناظر با یک گذار نوری بین نوارهای اسپین قطبیده لایه ظرفیت و رسانش است. در این شکل اولین قله که برای اسپین α با بردار A و برای اسپین β با بردار B نمایش داده شده است، متناظر با کوتاه‌ترین گذار ممکن بین بالاترین نوار ظرفیت و پایین‌ترین نوار رسانش در شکل ۲ برای اسپین α و β است.

مطابق شکل ۳ الف-د برای هر یک از نانونوارهای آرمچیری MoS_2 ، WS_2 ، MoSe_2 و WSe_2 بیشترین مقدار بازده کوانتومی در یک انرژی مشخص رخ می‌دهد و به صورت بلندترین قله نمودار بازده کوانتومی قابل مشاهده است. این انرژی مشخص، متناظر با یک گذار انرژی از ساختار نواری (شکل ۲) است، به طوری که در این انرژی چگالی حضور الکترون‌ها نسبت به مقدار آن در سایر انرژی‌ها بیشتر بوده و الکترون‌ها در تولید جریان نوری مشارکت بیشتری داشته‌اند؛ در نتیجه در این انرژی شدت بازده کوانتومی به وضوح افزایش می‌یابد. لازم به ذکر است که متفاوت بودن اسپین الکترون‌های

از جریان نوری-اسپینی محاسبه شده‌اند، این جداشدگی اسپینی را نمایش می‌دهند. از نظر فیزیکی با تابش نور بر سطح نانونوار، فوتون‌هایی که انرژی کافی داشته باشند الکترون‌های واقع در نوار ظرفیت را برانگیخته کرده و به نوار رسانش منتقل می‌کنند؛ ضمن این که وجود خاصیت مغناطیسی در TMD ما را ملزم به در نظر گرفتن حالت-های متفاوت برای اسپین α و β می‌سازد. به عبارت دیگر از آنجا که الکترون‌های برانگیخته شده اسپین‌های متفاوتی دارند و مطابق ساختار نواری TMD (شکل ۲) گذارهای انرژی ممکن از نوار ظرفیت به نوار رسانش برای اسپین α و β متفاوت است، در نتیجه رفتار اپتوالکترونیکی برای الکترون‌هایی با اسپین مخالف، نیز می‌تواند متفاوت باشد (بدون در نظر گرفتن برهم‌کنش‌های ناشی از وارونگی اسپینی). برای دستیابی به جزئیات خواص اپتیکی الکترون‌های دارای اسپین α و β ، شکل ۳ الف-د را توصیف می‌کنیم. نتایج کمی لازم برای توصیف دقیق‌تر در جدول ۲ گزارش شده‌است. هر یک از قله‌های نشان

جدول ۲. نتایج مربوط به مقادیر گاف انرژی در ساختار نواری شکل ۲، بیشترین مقدار بازده کوانتومی و مقدار انرژی متناظر با آن در شکل ۳ به ازای اسپین α و β برای نانونوار آرمچیری MoS_2 ، WS_2 ، $MoSe_2$ و WSe_2 .

ساختار	گاف انرژی در ساختار نواری		بیشترین مقدار نمودار QE_{σ}			
	پارامتر		اسپین α		اسپین β	
	Δ (eV)	Δ (eV)	ωh (eV)	QE_{σ} (%)	ωh (eV)	QE_{σ} (%)
MoS_2	۰/۷۲	۰/۸۵	۲/۷۹	۳۲	۲/۹۹	۱۹
WS_2	۰/۷۳	۱/۰۴	۳/۲	۱۶	۳/۶۷	۱۶
$MoSe_2$	۰/۶۱	۰/۷۸	۱/۸۸	۵۷	۲/۶۲	۴۵
WSe_2	۰/۶۲	۰/۹۸	۱/۸۲	۵۰	۳/۳	۲۸



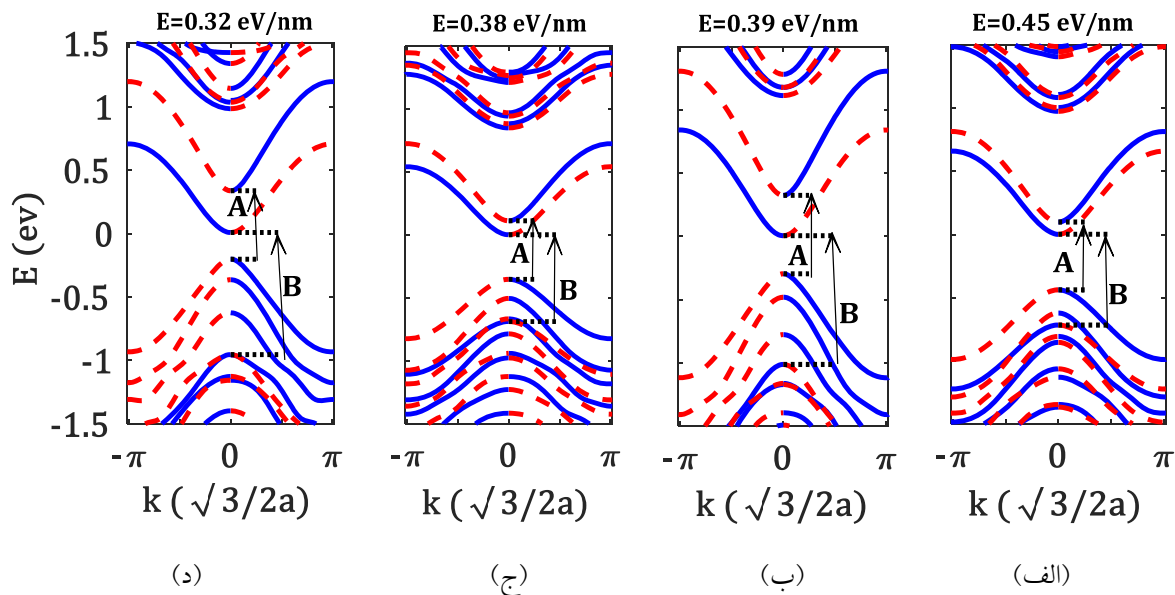
شکل ۴. قطبش نوری اسپین بر حسب انرژی فوتون فرودی برای نانونوار آرمچیری (الف) MoS_2 و WS_2 و (ب) $MoSe_2$ و WSe_2 .

الکترون‌ها با اسپین β متفاوت است. در نتیجه با تابش نور بر سطح نانونوار آرمچیری TMD و در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین-مدار می‌توان به تولید جریان اسپین قطبیده با بازده کوانتومی بالا دست یافت.

لازم به ذکر است که در شکل ۳، نمودارهای الف-د برای مقدار مثبت شاخص دره ($\tau=+1$) رسم شده‌اند، زیرا به دلیل وجود جفت‌شدگی اسپین-مدار و تقارن بازتابی که در توضیح ساختار نواری‌های شکل ۲ بیان شد، نتایج اپتیکی حاصل برای $\tau=+1, s=+1$ کاملاً منطبق با نتایج مربوط به $\tau=-1, s=-1$ خواهند بود. همچنین به صورت مشابه نتایج اپتیکی برای $\tau=-1, s=+1$ کاملاً مطابق نتایج حاصل در حالت $\tau=+1, s=-1$ است.

به منظور بررسی اثرات قطبیدگی اسپینی، شکل ۴ با به کارگیری ویژگی جدادشدگی اسپینی و متفاوت بودن جریان

برانگیخته منجر می‌شود بیشترین مقدار بازده کوانتومی برای اسپین α و β متفاوت باشد و به ازای گذارهای متفاوتی از ساختار نواری پدیدار شود. همان‌طور که مطابق شکل ۳ الف-د بیشترین مقدار بازده کوانتومی برای اسپین α و β به ازای تابش فوتون‌هایی با انرژی مختلف ایجاد می‌شود. همچنین با توجه به شکل ۳ الف-د بیشترین مقدار بازده کوانتومی برای حامل‌های بار با اسپین α ، در مقایسه با اسپین β بزرگ‌تر است. این بدان معناست که در جریان نوری ایجاد شده تعداد الکترون‌های با اسپین α بیشتر از تعداد الکترون‌های با اسپین β است و الکترون‌ها با اسپین α مشارکت بیشتری در جریان نوری و در نتیجه بازده کوانتومی داشته‌اند. بررسی بلندترین قله نمودار در شکل ۳ الف-د نشان می‌دهد که برای اسپین α ، بیشترین جذب نور در ناحیه فروسرخ و برای اسپین β در ناحیه مرئی خواهد بود و رفتار نوری الکترون‌ها با اسپین α با رفتار نوری



شکل ۵. ساختار نواری (الف) MoS_2 ، (ب) WS_2 ، (ج) MoSe_2 و (د) WSe_2 . خطوط آبی رنگ (خط چین قرمز رنگ) اسپین (اسپین β) را در حضور میدان الکتریکی عرضی نشان می‌دهند. بردار A (بردار B) نشان دهنده گاف انرژی اسپین α (اسپین β) است.

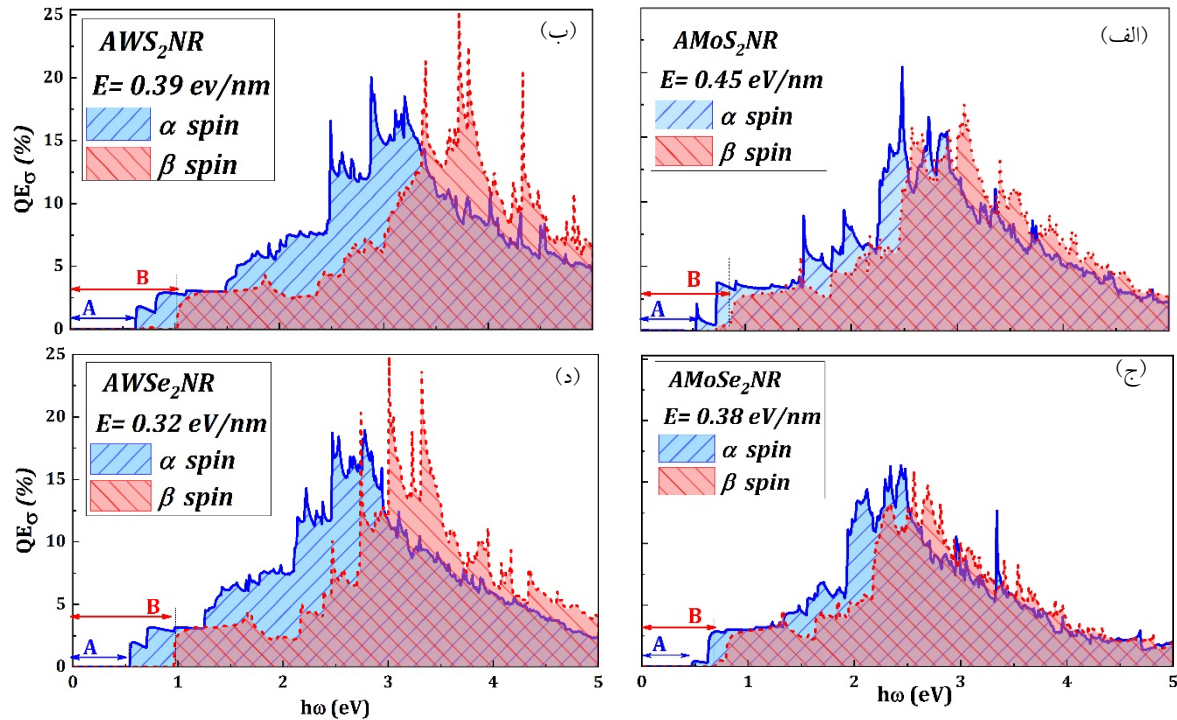
نمایش می‌دهد. مقدار این میدان برای هر ساختار برابر با بیشترین مقداری در نظر گرفته شده که به ازای آن نوارهای انرژی برای اسپین α و اسپین β تا حد امکان به یکدیگر نزدیک شده ولی با سطح انرژی فرمی (معادل با صفر) برخورد نکنند. مقایسه میان ساختار نواری‌ها در شکل ۵ و ۲ نشان می‌دهد که اعمال میدان الکتریکی عرضی منجر به جابه‌جایی و تغییر شکل نوارهای انرژی می‌شود، در حالی که گاف انرژی به صورت محسوسی تغییر نمی‌کند (بیشترین تغییر برابر با ۰/۱ eV است). در شکل ۵، گاف انرژی برای اسپین α با بردار A و برای اسپین β با بردار B نمایش داده شده است. مطابق این شکل، برای اسپین α کمترین مقدار گاف انرژی در ساختار نواری MoSe_2 و بیشترین مقدار آن در ساختار نواری MoS_2 قابل مشاهده است. بررسی مقادیر گاف انرژی نشان می‌دهد که برای اسپین β کمترین (بیشترین) مقدار گاف انرژی مربوط به MoSe_2 (WS_2) است.

برای بررسی خواص اپتیکی الکترون‌های دارای اسپین α و β ، شکل ۶ الف-د بازده کوانتومی را برای چهار ساختار MoS_2 (الف)، WS_2 (ب)، MoSe_2 (ج) و WSe_2 (د) در حضور

نوری تولید شده به ازای اسپین α و β ، قطبش نوری اسپین را بر حسب انرژی فوتون فرودی نمایش می‌دهد. خطوط آبی رنگ و خط چین‌های قرمز رنگ در شکل ۴ الف (ب) قطبش نوری اسپین را به ترتیب برای WS_2 و MoS_2 و WSe_2 (MoSe_2) نمایش می‌دهند.

مطابق با این شکل، محدوده انرژی که قطبش کامل اسپینی از طریق تابش نور ایجاد می‌شود برای هر چهار ساختار مورد بررسی در محدوده تابش فروسرخ ایجاد می‌شود. در ادامه به منظور بهینه سازی خواص اسپین-اپتوالکترونیکی به بررسی اثر میدان الکتریکی عرضی بر آشکارساز نوری-اسپینی TMD می‌پردازیم.

برای مطالعه اثر میدان بر عملکرد آشکارساز نوری-اسپینی مبتنی بر نانونوار آرمچیری TMD ساختار الکترونی و بازده کوانتومی را در حضور میدان الکتریکی عرضی مورد بررسی قرار داده‌ایم. میدان الکتریکی عرضی از طریق قرار دادن کانال بین دو الکتروود فلزی با پتانسیل الکتریکی متفاوت ایجاد می‌شود. شکل ۵ ساختار نواری MoS_2 (الف)، WS_2 (ب)، MoSe_2 (ج) و WSe_2 (د) را در حضور میدان الکتریکی عرضی



شکل ۶. بازده کوانتومی خارجی نوری وابسته به اسپین برای نانونوار آرمچیری (الف) MoS_2 ، (ب) WS_2 ، (ج) MoSe_2 و (د) WSe_2 با اعمال میدان الکتریکی عرضی.

شکل، محل وقوع بلندترین قله نمودار و بیشترین جذب نور برای اسپین α در ناحیه نور مرئی و برای اسپین β در ناحیه فرابنفش خواهد بود، بنابراین نسبت به حالت قبل در حضور میدان الکتریکی عرضی، بیشترین جذب نور برای اسپین α و β به ازای تابش فوتون‌هایی با بسامد بالاتر ایجاد می‌شود. شکل ۷ قطبش اسپینی را بر حسب انرژی فوتون فرودی در حضور میدان الکتریکی عرضی مناسب نمایش می‌دهد. در محدوده تابش فروسرخ قطبش کامل اسپینی قابل مشاهده است.

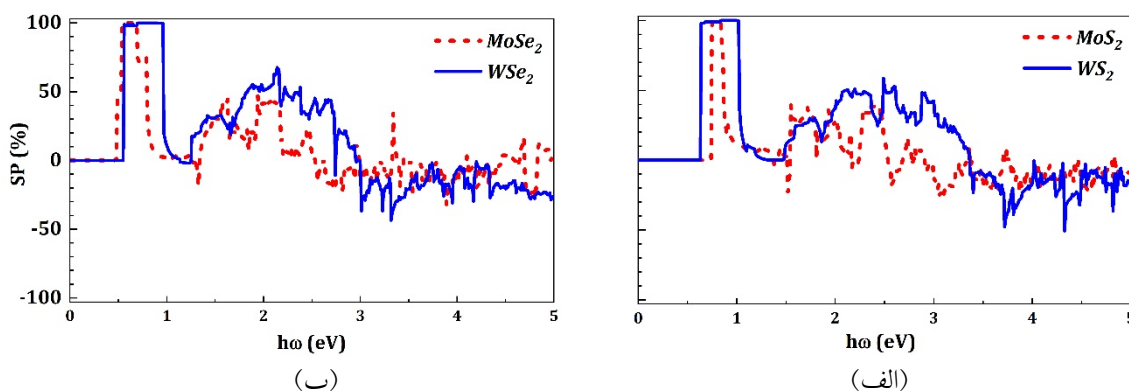
۴. نتیجه‌گیری

به طور خلاصه در این نوشتار به بررسی خواص اپتیکی وابسته به اسپین نانونوار آرمچیری دی‌کالکوژنید فلزات واسطه در غیاب و حضور میدان الکتریکی عرضی با استفاده از فرمول‌بندی تابع گرین غیر تعادلی و تقریب تنگ‌بست پرداختیم. بنابراین آنچه بیان شد، استفاده از نانونوار آرمچیری MoS_2 ، WS_2 ، MoSe_2 و WSe_2 در آشکارساز نوری-اسپینی امکان

اثر میدان الکتریکی عرضی مناسب نمایش می‌دهد که در این شکل نخستین قله برای اسپین α با بردار A و برای اسپین β با بردار B نمایش داده شده است. بردارهای A و B متناظر با کوتاه‌ترین گذار ممکن بین بالاترین نوار ظرفیت و پایین‌ترین نوار رسانش در شکل ۵ برای اسپین α و β هستند و کمترین انرژی لازم برای دستیابی به مقادیر قابل توجه بازده کوانتومی را نشان می‌دهند. به همین ترتیب مطابق شکل ۶، با اعمال میدان الکتریکی عرضی محل قرار گرفتن اولین قله نمودار بازده کوانتومی به صورت محسوسی تغییر نمی‌کند (بیشترین تغییر برابر با ۰/۱ eV است)، اما به علت تغییر شکل در نوارهای انرژی، شدت نمودار بازده کوانتومی می‌تواند دستخوش تغییر شود. جفت شدگی اسپین-دره در این حالت نیز به وضوح قابل مشاهده است. نتایج کمی لازم برای درک بیشتر در جدول ۳ گزارش شده است. بیشترین مقدار بازده کوانتومی در هر یک از قسمت‌های شکل ۶ الف-د در یک انرژی مشخص به صورت بلندترین قله نمودار بازده کوانتومی قابل مشاهده است. طبق این

جدول ۳. نتایج مربوط به مقادیر گاف انرژی در ساختار نواری شکل ۵، بیشترین مقدار بازده کوانتومی و مقدار انرژی متناظر با آن در شکل ۶ به ازای اسپین α و β برای MoS_2 ، WS_2 ، $MoSe_2$ و WSe_2 در حضور میدان الکتریکی عرضی مناسب.

پارامتر	گاف انرژی در ساختار نواری		بیشترین مقدار نمودار QE_{σ}			
	اسپین α	اسپین β	اسپین α		اسپین β	
	Δ (eV)	Δ (eV)	ωh (eV)	QE_{σ} (%)	ωh (eV)	QE_{σ} (%)
ساختار MoS_2 $E=0.45$ eV/nm	0.73	0.84	2.79	32	2.99	19
ساختار WS_2 $E=0.39$ eV/nm	0.62	1.02	2.88	20	3.72	26
ساختار $MoSe_2$ $E=0.38$ eV/nm	0.46	0.69	2.48	16	2.56	16
ساختار WSe_2 $E=0.32$ eV/nm	0.54	0.96	2.47	18	3.01	25



شکل ۷. قطبش نوری اسپین بر حسب انرژی فوتون فرودی برای نانونوار آرمچیری (الف) MoS_2 و WS_2 و (ب) $MoSe_2$ و WSe_2 با اعمال میدان الکتریکی عرضی مناسب.

نواری نانونوارها نشان می‌دهد که اعمال میدان الکتریکی عرضی بر نانونوار آرمچیر منجر به تغییر شکل در نوارهای انرژی شده و می‌توان با تابش فوتون‌هایی که حامل انرژی‌های پایین‌تر هستند به بیشترین مقدار از نمودار بازده کوانتومی دست یافت. همچنین مقدار قله‌های نمودار بازده کوانتومی در حضور میدان، در مقایسه با مقادیر مربوط به غیاب میدان الکتریکی عرضی از شدت کمتری برخوردار است. نتایج نشان می‌دهد که این آشکارساز علاوه بر تولید جریان از طریق تابش نور، می‌تواند برای تولید یک جریان قابل کنترل و وابسته به اسپین به کار

ایجاد جریان الکتریکی را از طریق تابش نور فراهم می‌کند. بزرگ بودن مقدار جفت‌شدگی اسپین-مدار در این ساختارها باعث می‌شود 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. تفاوت در نتایج اپتیکی حاصل برای اسپین α و β به صورت واضحی قابل مشاهده است. مقادیر بازده کوانتومی و قطبش اسپین نشان دهنده عملکرد مناسب این ساختارها در اسپین-اپتوالکترونیک است. بررسی ساختار

انتخاب مناسبی برای استفاده در زمینه اسپین-اپتوالکترونیک از قبیل سلول‌های خورشیدی و دیودهای نوری معرفی می‌کند.

گرفته شود. به طور کلی مقادیر حاصل برای بازده کوانتومی و قطبش اسپینی در حضور و غیاب میدان الکتریکی عرضی، نانونوار آرمچیری MoS_2 ، WS_2 ، $MoSe_2$ و WSe_2 را به عنوان

مراجع

1. S. Manzeli, D. Ovchinnikov, D. Pasquire, O.V. Yazyev, A. Kis, *Nature Reviews Materials* **2**, 8 (2017) 17033.
2. A. Pospischil, and T. Mueller, *Applied Sciences* **6**, 3 (2016) 78.
3. QH Wang, K. Kalantar-Zade, A. Kis, JN Coleman, and MS Strano, *Nature nanotechnology* **7**, 11 (2012) 699.
4. M Koperski, M R Molas, A Arora, K Nogajewski, A O Slobodeniuk, C Faugeras, and M Potemski, *Nanophotonics* **6**, 6 (2017) 1289.
5. H Tian, M L Chin, S Najmaei, Q Guo, F Xia, H Wang, and M Dubey, *Nano Research* **9**, 6 (2016) 1543.
6. K F Mak and J Shan, *Nature Photonics* **10**, 4 (2016) 216.
7. Z Yin, H Li, H Li, L Jiang, Y Shi, Y Sun, G Lu, Q Zhang, X Chen, and H Zhang, *ACS Nano* **6** (2012) 74.
8. B W Baugher, H O Britton, Y Yang, and P Jarillo-Herrero, *Nature nanotechnology* **9**, 4 (2014) 262.
9. W Choi, N Choudhary, G H Han, J Park, D Akinwande, and Y H Lee, *Materials Today* **20**, 3 (2017) 116.
10. J A Reyes-Retana and F Cervantes-Sodi, *Scientific reports* **6** (2016) 24093.
11. N Zibouche, A Kuc, J Musfeldt, and T Heine, *Annalen der Physik* **526**, 9-10 (2014) 395.
12. F. Khoeini, Kh Shakouri, F. M. Peeters, *Physical Review B* **94**, 12 (2016) 125412.
13. X Xu, W Yao, D Xiao, and T F Heinz, *Nature Physics* **10**, 5 (2014) 343.
14. S Zamani and R Farghadan, *Journal of Physics D: Applied Physics* **51**, 30 (2018) 305103.
15. L Liu, E J Lenferink, G Wei, T K Stanev, N Speiser, and N P Stern, *ACS applied materials & interfaces* **11**, 3 (2018) 3334.
16. X Chen, T Yan, B Zhu, S Yang, and X Cui. *ACS nano* **11**, 2 (2017) 1581.
17. A Heshmati-Moulai, H Simchi, and M Esmailzadeh, *The European Physical Journal B* **90**, 7 (2017) 128.
18. M L Sancho, J L Sancho, J L Sancho, and J J Rubio, *Phys. F: Met. Phys.* **15** (1985) 851.
19. S Zamani and R Farghadan, *Physical Review Applied* **10**, 3 (2018) 03405.
20. D Xiao, GB Liu, W Feng, X Xu, and W Yao, *Physical review letters* **108** (2012) 196802.