بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و چهاردهمین
کنفرانس مهندسی و فناوری
فوتونیک ایران،

دانشگاه شهید چمران اهواز،

خوزستان، ایران.

۱۴-۱۲ بهمن ۱۴۰۰

مشخصه‌یابی دو لایه‌ی دی سولفید مولیبدن با استفاده از الگوهای ماره

معصومه منصوری[۱]، عبدالمحمد قلمبر دزفولی [۱و۲]

[۱]گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

[۲]مرکز تحقیقات لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

masoomemansouri۴۷۳@gmail.com

a.ghalambor@scu.ac.ir

چکیده – در این مقاله ساختار دو لایه‌ی چرخیده دی سولفید مولیبدن شبیه‌سازی شده است. نتایج نشان می‌دهد تغییرات الگوهای ماره بر حسب زاویه چرخش را می‌توان به عنوان شاخص برای مطالعه ویژگی‌های ساختاری از جمله نظم انباشتگی و پهنای انرژی در نظر گرفت.

کلید واژه- الگوهای ماره، ساختار ناهمگون، واندروالس.

Characterization of Bilayer MoS_2, Using Moire Patterns

Masoome Mansouri[۱], Abdol-Mohammad Ghalambor Dezfuli[۱،۲]

[۱]*Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz,* Iran

[۲]*Center for Research on Laser and Plasma, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz,* Iran

masoomemansouri۴۷۳@gmail.com

a.ghalambor@scu.ac.ir

Abstract- In this article, the structure of the bilayer MoS_2 has been simulated .The results showed that the changes in moire patterns in terms of rotation angle can be considered as an indicator for determining the structural properties such as stacking factor ae well as band gap.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-01-31]

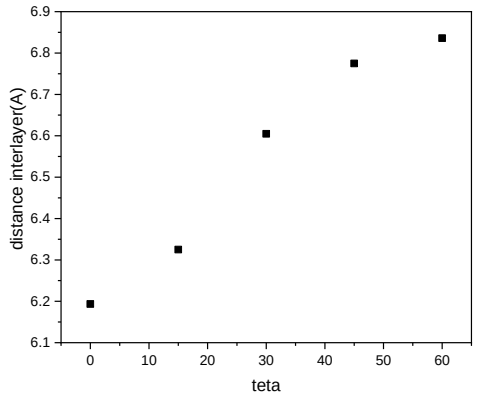
Keywords: Moire Patterns, Heterostructure, Vanderwaals.

مقدمه

نسبت زیاد سطح به حجم در مواد دو بعدی امکان تنظیم خواص از طریق تغییر در محیط آنها را فراهم می‌آورد. ساختارهای ناهمگون از لایه‌های دو بعدی تشکیل شده است که به صورت عمودی انباشته شده و توسط نیروی واندروالس کنار هم نگه داشته می‌شوند[۱]. اتصال بین لایه‌ای ضعیف واندروالس محدودیت‌های تطبیق شبکه را برطرف می-نماید[۲]. در این راستا گرافن و ساختارهای شبه گرافنی مورد توجه قرار گرفته‌اند. گرافن به دلیل ابعاد بسیار کوچک و داشتن ویژگی‌هایی مانند رسانندگی و تحرک‌پذیری بالای حامل‌های بار، در صنعت الکترونیک و نور کاربردهای زیادی دارد. نتایج پژوهش‌های مختلف نشان می‌دهد که قرارگیری این ساختارهای دو بعدی و چرخش نسبی لایه‌های مجاور ضمن ایجاد الگوهای ماره با دوره تناوبی که با زاویه چرخش رابطه عکس دارد، ویژگی‌های منحصر به فرد اپتیکی و الکترونیکی را بوجود آورده است[۳]. این مطالعات نشان داده است که در زاویه چرخش خاصی تحت عنوان زاویه جادویی θ، تشکیل الگوهای ماره، نوارهای انرژی مسطح شده و این مسطح شدن منجر به همبستگی الکترونی قوی سیستم می‌شود، که خود می‌تواند در خواص نوری و اپتیکی سیستم تاثیر بگذارد[۴]. از طرفی مهم‌ترین نقص گرافن عدم وجود گاف نواری و بالتبع غیر قابل تنظیم بودن آن است. بنابراین به دلیل گاف انرژی تنظیم‌پذیری که فلزات واسطه دی کالکوژنی دو بعدی دارند، بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند[۵]. مطالب ذکر شده را می‌توان به این شکل بیان کرد، زمانی که دو تک لایه از کریستال‌های دو بعدی به صورت دو لایه روی هم قرار داده می‌شوند، با چرخش یکی از لایه‌ها تحت زاویه‌ی θ الگوهای ماره تشکیل می‌شود[۶]. در این مطالعه دی سولفید مولیبدن به دلیل اهمیت رفتار اپتیکی و نوری، پایداری در معرض هوا و در دمای اتاق همچنین نقطه ذوب بالا مورد بررسی قرار گرفته است. از طرفی با توجه به اینکه فاز $2H$ دی سولفید مولیبدن نسبت به دو فاز دیگر پایدارتر و در طبیعت دارای فراوانی بیشتری است، بنابراین برای تشکیل الگوهای ماره از این فاز استفاده شده است.

روش محاسبات

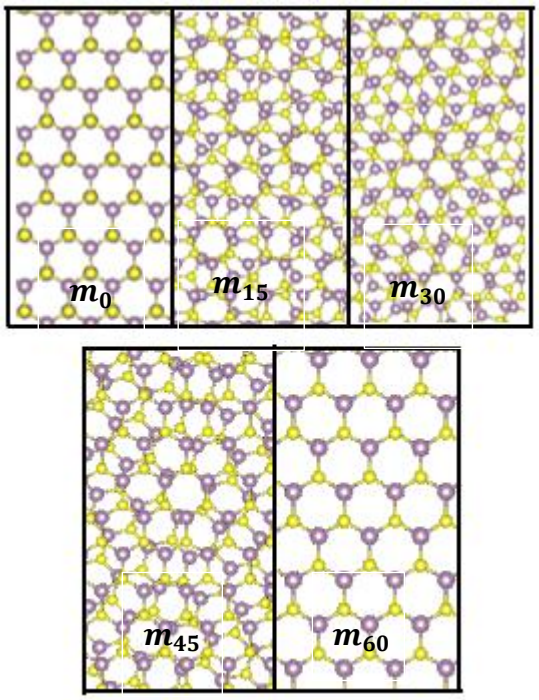
تک لایه‌ی دی سولفید مولیبدن با ثابت شبکه ۳/۱۹ آنگستروم شبیه سازی شده است. اکنون با توجه به اینکه نیروی واندروالس به عنوان نیروی ضعیفی بین لایه‌ها عمل می‌کند بنابراین باید دو تک لایه دی سولفید مولیبدن با تغییر فاصله بین لایه‌ها روی هم قرار بگیرند. با در نظر گرفتن انباشتگی AA' و محاسبه انرژی بستگی بر حسب فاصله بین دو لایه برای زوایای مختلف می‌توان فاصله بهینه برای هر زاویه را بدست آورد که نتایج محاسبات در نمودار زیر رسم شده است.



شکل۱: منحنی تغییرات فاصله بین دولایه بر حست زاویه اعمال شده.

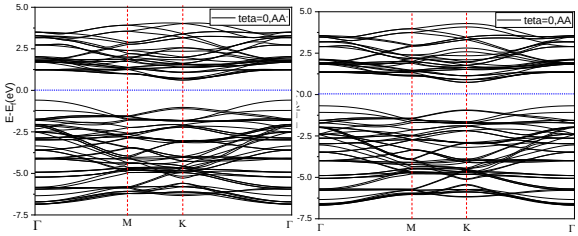
[Downloaded from opsi.ir on 2025-01-31]

همانطور که در شکل مشاهده می‌شود با افزایش زاویه فاصله بین دولایه نیز افزایش می‌یابد. با بررسی الگوی ماره در زاویای مذکور تغییرات الگوی ماره کاملا مشخص است. همچنین در زاویه ۶۰ درجه تغییر انباشتگی از AA′ به AA را خواهیم داشت.



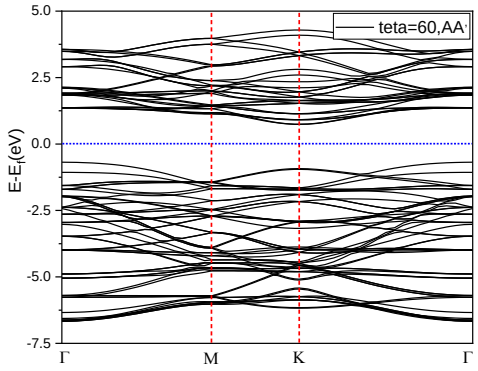
شکل۲: الگوهای ماره برای انباشتگی AA′ .

ساختاری نواری مربوط به دو انباشتگی AA و AA′ در زاویه صفر در شکل زیر نمایش داده شده است.



شکل۳: ساختار نواری انباشتگی AA و AA′ دو لایه دی سولفید مولیبدن.

اگر ساختار نواری در زاویه ۶۰ را برای انباشتگی AA′ رسم کنیم دیده می‌شود که منطبق بر ساختار نواری انباشتگی AA می‌باشد.



شکل۴ : ساختار نواری انباشتگی AA′ با اعمال زاویه ۶۰ .

در جدول زیر اطلاعات مربوط به انباشتگی ها و زاویه مذکور ثبت شده است.

انباشتگی	band gap(ev)	Distance interlayer()	m_θ
AA′ teta=۰	۱/۲۱	۶/۲	m_0
AA′ teta=٦۰	۱/۴۳	۶/۸۳	m_{60}
AA teta=۰	۱/۴۳	۶/۸	m_{60}

جدول۱ : فاصله بین دو لایه برای انباشتگی‌های مذکور تحت زوایای خاص.

بنابراین کاملا مشخص است که با تغییر زاویه در کنار تشکیل الگوهای ماره می‌توان تغییر انباشتگی را بررسی کرد. نتایج ذکر شده در جدول موید این مطلب است که با اعمال زاویه ۶۰ تغییر انباشتگی از AA′ به AA را خواهیم داشت. بنابراین با تغییر زاویه و تشکیل الگوهای ماره انتظار تغییر

[Downloaded from opsi.ir on 2025-01-31]

در خصوصیات فیزیکی و ویژگی‌های اپتیکی ساختار وجود دارد. در واقع هم‌پوشانی توابع موج برای دو تک لایه دی سولفید مولیبدن با ثابت شبکه یکسان، که با ایجاد زاویه چرخش الگوهای ماره را ایجاد کرده‌اند، این الگوها منجر به تولید یک پتانسیل دوره‌ای بواسطه برهمکنش‌های بین لایه-ای می‌شوند، که این پتانسیل دوره‌ای به طور موثری برهمکنش الکترون-الکترون را تغییر و بر ساختار الکترونیکی، مدولاسیونی را تحمیل کرده است. به عنوان مثال در ساختار دو لایه گرافن چرخیده منجر به نوارهای ماره شده است[۴]. بنابراین با استفاده از الگوی ماره تشکیل شده در قرارگیری لایه‌ها و چرخش آنها می‌توان خواص اپتیکی و الکترونیکی مواد را کنترل و تنظیم نمود.

نتیجه گیری

در این مطالعه با روی هم قرار دادن دو تک لایه‌ی دی سولفید مولیبدن، ساختار دو لایه با برهمکنش ضعیف واندروالس شبیه سازی شده است. با چرخش یکی از لایه‌ها الگوهای ماره تشکیل شده و تغییرات الگوهای ماره بر حسب زاویه چرخش به عنوان شاخصی برای مطالعه ویژگی‌های ساختاری از جمله نظم انباشتگی بررسی شد.

قدردانی و تشکر

بدین وسیله از دانشگاه شهید چمران اهواز به خاطر حمایت از تمامی مراحل تحقیق انجام شده، تشکر و قدردانی می-شود.

مرجع‌ها

[۱] Ming Xie and A. H. MacDonald , "Nature of the Correlated Insulator States in Twisted Bilayer Graphene", PHYSICAL REVIEW LETTERS Vol.۱۲٤, pp. ۸۰۷-۸۱۲, ۲۰۲۰.

[۲] S. Brem, K.Q. Lin, R. Gillen, J. M. Bauer, J. Maultzsch, J. M. Lupton, E. Malic , "Hybridized intervalley moiré excitons and flat bands in twisted WSe۲ bilayers", nano letters, ۲۰۲۰.

[۳] Y. Cao, D. R. Legrain, O. R. Bigorda, J. M. Park, K. Watanabe۲, T.Taniguchi, P. J. Herrero, "Tunable correlated states and spin polarized phases in twisted bilayer bilayer graphene", nature, ۲۰۱۹.

[٤] A. Uri, S. Grover, Y. Cao, J. A. Crosse, K. Bagani, D. Rodan-Legrain, Y. Myasoedov, K. Watanabe, T Taniguchi, P. Moon, M. Koshino, P. Jarillo-Herrero, E. Zeldov, "Mapping the twist angle disorder and Landau levels in magic-angle graphene", nature, ۲۰۲۰.

[۵] A.Weston,Y. Zou, V. Enaldiev, A. Summerfield, N. Clark, V. Z´olyomi, A. Graham, C. Yelgel, S. Magorrian, M. Zhou, J. Zultak, D. Hopkinson, A. Barinov, T. Bointon, A. Kretinin, N. R. Wilson, P. H. Beton, V. I. Fal'ko,_ S. J. Haigh, R. Gorbachev, "Atomic reconstruction in twisted bilayers of transition metal dichalcogenides", nature, ۲۰۲۰.

[٦] M. Liao, Zh Wei, L. Du, Q. Wang, J. Tang, H. Yu, F. Wu, J. Zhao, X. Xu, B. Han, K. Liu , P. Gao, T. Polcar, Zh. Sun, D. Shi, R. Yang, G. Zhang, "Precise control of the interlayer twist angle in large scale MoS۲ homostructures", nature communication, ۲۰۲۰.

[۷] Q. H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J. N. Coleman, and M. S. Strano, "Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides," Nat. Nanotechnol, Vol: ۷, □□. ۶۹۹-۷۱۲, ۲۰۱۲.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-01-31]