

Badanie właściwości elektrooptycznych supersieci 3D i materiałów 2D: badanie DFT

Promieniowanie elektromagnetyczne może rozchodzić się w przestrzeni oddziaływując z materiałem na wiele sposobów. Postęp w przemyśle elektronicznym wymaga poszukiwania nowych materiałów o specyficznych właściwościach elektronowych i optycznych. Urządzenia optoelektroniczne, takie jak diody elektroluminescencyjne, lasery półprzewodnikowe, urządzenia fotowoltaiczne, fotodiody i fotodetektory, są szeroko stosowane w przemyśle, medycynie, astronomii, motoryzacji, komunikacji, wojsku itd., mając duży wpływ na nasze życie. Wcześniejsze prace badawcze dotyczyły właściwości optoelektronicznych różnego rodzaju materiałów, takich jak stopy, cienkie warstwy i inne struktury warstwowe 2D. Obecnie supersieci typu II InAs/(InAsSb) wolne od Ga i Hg są bardzo pożądane dla zastosowań w podczerwieni ze względu na ich unikalne właściwości optoelektroniczne. Z drugiej strony właściwości mechaniczne i elektrooptyczne nowo odkrytej rodziny materiałów 2D MA_2Z_4 predestynują je do zastosowań komercyjnych, ale konieczne są dalsze badania dla scharakteryzowania tej klasy materiałów 2D.

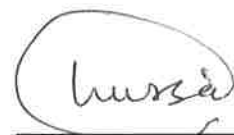
Motywowani nietypowymi właściwościami supersieci typu II bez Ga i Hg InAs / (InAsSb) oraz właściwościami mechanicznymi i elektrooptycznymi rodziny MA_2Z_4 , badamy właściwości elektronowe i optyczne supersieci 3D InAs/InAs_{0,625}Sb_{0,375} (SL), materiałów 2D XSi₂N₄ (X = Mo, W i Ti) oraz ich pionowe/boczne heterostruktury MoSi₂N₄/XSi₂N₄ (W, Ti) oraz struktury typu Janus.

W badaniu supersieci 3D InAs/InAs_{0,625}Sb_{0,375} zastosowano zmodyfikowany funkcjonal korelacji wymiany Becke-Johnsona, aby uzyskać dobry opis właściwości elektronowych i optycznych. Najpierw analizujemy objętościowe układy InAs i InSb, a następnie badamy supersieci InAs/InAs_{0,625}Sb_{0,375} dla trzech różnych stałych sieciowych: InAs, GaSb i AlSb. Obserwujemy silną zależność właściwości elektronowych i optycznych od wielkości stałej sieciowej. Otrzymujemy dwa pasma ciężkich dziur o rosnącej efektywnej masie w płaszczyźnie w miarę oddalania się od poziomu Fermiego. Ponadto zauważalny jest znaczny spadek mas efektywnych dla ciężkich dziur i przerw energetycznych w płaszczyźnie k_x - k_y , w porównaniu z fazami objętościowymi związków macierzystych. Zauważyliśmy, że elektrony są zdelokalizowane w części InAs SL, podczas gdy dziury są zlokalizowane głównie w części InAs_{0,625}Sb_{0,375}. Widma absorpcyjne w dalekiej podczerwieni są silnie wzmacnione w porównaniu do objętościowych InAs i InSb, co sugeruje ich zastosowanie w długofalowych detektorach IR.

W drugim projekcie omawiamy nowo odkryte materiały warstwowe 2D, takie jak XSi₂N₄ (X = Mo, W i Ti) oraz ich pionowo i poprzecznie skonfigurowane heterostruktury 2D MoSi₂N₄/XSi₂N₄ (X=W, Ti). Okazuje się, że wszystkie systemy są strukturalnie stabilne, co potwierdzają obliczenia stanu podstawowego całkowitej energii i widma fononów. Po ustaleniu ich stabilności termodynamicznej badamy odpowiednio struktury pasm elektronowych i gęstość stanów monowarstw XSi₂N₄ (X = Mo, W i Ti) oraz heterostruktur 2D. Zarówno monowarstwy, jak i

heterostrukury wykazują właściwości półprzewodnikowe z pasmami wzbronionymi w zakresie od podczerwieni do obszaru widzialnego. Na podstawie struktur pasma elektronicznego zauważyliśmy, że pasmo wzbronione $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{WSi}_2\text{N}_4$ leży w obszarze widzialnym, co pozwala na zastosowania w fotowoltaice i innych urządzeniach optoelektronicznych. Natomiast w $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{TiSi}_2\text{N}_4$, gdzie wolfram zastąpiono tytanem, pasmo wzbronione przenosi się do zakresu IR, zapewniając w ten sposób możliwość wykorzystania tych heterostruktur jako detektorów IR. W trzecim projekcie rozszerzamy badanie heterostruktur 2D zszytych bocznie, aby zbadać wpływ odkształcenia dwuosiowego na właściwości elektroniczne i optyczne. Obserwujemy znaczące modyfikacje w strukturach pasm elektronowych i widmach optycznych, w tym przejście od pośredniego do bezpośredniego półprzewodnika z pasmem wzbronionym przy naprężeniu ściskającym w $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{WSi}_2\text{N}_4$. Podobnie odkształcenie dwuosiowe powoduje przejście półprzewodnikowe do metalicznego w $\text{MoSi}_2\text{N}_4/\text{TiSi}_2\text{N}_4$. Poza tym widma optyczne, w tym absorbancję, transmitancję i współczynnik odbicia, można skutecznie dostroić za pomocą manipulacji odkształceniem. Nasze badania właściwościach elektrooptycznych i ich kontrolowanej modulacji przez odkształcenie dwuosiowe sugerują, że te nowo odkryte materiały i heterostrukury 2D mogą być przydatne w nano- i optoelektronice.

Badamy również czysty MoSi_2P_4 i oraz fazę typu Janus $\text{XGeSiP}_2\text{As}_2$ (Mo, W). Pojawienie się wysokich energii kohezji i brak urojonych modów fononów potwierdza ich stabilność i sugeruje możliwość przeprowadzenia badań doświadczalnych. Struktury typu Janus wykazują w porównaniu z czystym MoSi_2P_4 małe bezpośrednie przerwy wzbronione i większe rozszczepienie spinowe przy K/K' . Jednowarstwowa struktura materiału Janus posiada złamaną symetrię lustrzaną, co powoduje powstanie gradientu potencjału, który jest normalny do płaszczyzny materiału. Generuje to różnicę w funkcji pracy materiału 2D dla dwóch powierzchni. Ponadto z tekstur spinowych wynika, że złamana symetria lustrzana powoduje w monowarstwach typu Janus rozszczepienie spinowe Rashby, które można zwiększyć stosując wyższe atomowe sprzężenie spinowo-orbitalne. W dodatkowym materiale przedstawiamy i porównujemy widma optyczne dla faz czystej i typu Janus, ujawniając charakterystyczne piki absorpcji w obszarze podczerwieni. Duże rozszczepienia spinowe i typu Rashby w połączeniu z wyjątkowymi widmami optycznymi w strukturach Janus mogą być bardzo przydatne w Valleytronice, Spintronice i zastosowaniach w podczerwieni.



podpis