

## تحلیل و شبیه سازی ترابرد در نانوساختارهای تک لایه های $TiS_3$

امیرحسین فیروزخانی<sup>۱</sup>، مهدی واعظ زاده<sup>۱\*</sup>، مسعود برهمن<sup>۲</sup>

۱- دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

۲- گروه مهندسی مخابرات و الکترونیک، دانشکده مهندس برق و کامپیوتر، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان

**چکیده:** با کمک روش تابعی چگالی همراه با روش نامتعادل تابع گرین، ترابرد در نانوساختارهای تک لایه  $TiS_3$  مورد بررسی قرار گرفت. بدین منظور، ۱۳ یاخته ساختار به عنوان کانال در اتصال با الکترودهای طلا، به عنوان اتصالات الکتریکی مورد بررسی قرار گرفت. به منظور شبیه سازی صحیح اربیتال های d در این ساختار، از تقریب هوبارد بهره برداری شد. منحنی جریان ولتاژ این ساختار تا ولتاژ ۲ V مورد بررسی قرار گرفت و نشان داده شد که با افزایش ولتاژ، نسبت به سد پتانسیل ایجاد شده میان الکترودها و کانال، جریان روند صعودی داشته و تا ۱/۶ V این روند ادامه می یابد. در بازه ۱/۶ V تا ۱/۸ V مقاومت منفی در این ساختار مشاهده می شود. به منظور یافتن دلایل این رویداد، چگالی حالات منطقه ای مورد بررسی قرار گرفت. از چگالی حالات، نشان داده شد مقدار سد پتانسیل الکترودها و کانال به چه میزان بوده و همچنین، نشان داده شد که کیفیت مسیرهای انتقال حامل ها در بازه مقاومت منفی کاهش یافته و همین دلیل این رخداد در منحنی جریان ولتاژ است.

**واژگان کلیدی:** ترابرد، PDOS، مقاومت منفی، کانال نیم رسانا، جریان بالیستیک

\*mehdi@kntu.ac.ir

فسفرن پا به عرصه وجود نهادند. تک لایه های  $MoS_2$  گاف انرژی مستقیم در حدود ۱/۸ eV دارند. و نسبت on/off آن در حدود  $10^8$  و تحرک پذیری  $10^4 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$  است. با این وجود ترانزیستور های اثر میدانی (FETs) بر اساس تک لایه های  $MoS_2$  تحرک پایینی را از خود نشان می دهند. قطعات اثر میدانی از فسفرن نسبت on/off بالایی دارند (در حدود  $10^4$ ) اما فسفرن واکنش پذیری زیادی از خود نشان می دهد و ناپایدار است و در کاربردها نیاز به لایه محافظ دارد [۱]. بنابراین، نیاز به موادی که تحرک بالا و گاف انرژی مناسب داشته باشند و در عین حال مقرون به صرفه باشند و به راحتی از حالت حجمی استخراج شوند،

### ۱- مقدمه

با کشف گرافن در سال ۲۰۰۴ پژوهش ها بر مواد دو بعدی با پیوند کووالان آغاز شد [۱]. ویژگی های مکانیکی و الکتریکی جالب توجه مواد دو بعدی موجب شده است تا این مواد در صنعت الکترونیک مورد توجه قرار بگیرند. از جمله این ویژگی ها می توان به قابلیت تبدیل ساختارهای سه بعدی مورد استفاده به لایه های اتمی دو بعدی اشاره کرد [۲]. در این میان گرافن ماده نوید بخشی برای گذار به سرعت های بالاتر است. اما گاف انرژی آن قابل کنترل نیست. به عنوان یک جایگزین برای گرافن، تک لایه های  $MoS_2$  و

b است و منجر به رسانش بیشتر در جهت b و به نوبه خود منجر به ویژگیهای ناهمسانگردی بیشتر می‌شود [۵].

در مورد  $TiS_3$  چن<sup>۶</sup> و همکارانش یک پارامتر d بین الکتروند و ماده دو بعدی تعریف کردند و نشان دادند که برای d برابر با  $\text{\AA}$  ۲/۳ تبدیل شاتکی به اهمی روی می‌دهد. همچنین، نشان دادند که اتصال الکتروند Sc (اسکاندیم)، اهمی بوده در حالیکه Cu (مس)، Al (آلومینیوم)، Au (طلا)، Ag (نقره) به صورت سد شاتکی می‌باشند [۶]. ایکانات<sup>۷</sup> و همکارانش، ویژگیهای ترابردی و الکترونیکی تک لایه‌های  $TiS_3$  را با استفاده از محاسبات DFT و نظریه تابع گرین مطالعه و نشان دادند که آلیش فلور و لیتیم به عنوان بر جذب اتم در ۲ طرف تک لایه  $TiS_3$  می‌تواند پیوندگاه p-n تشکیل دهد. [۷]. لی<sup>۸</sup> و همکارانش، ساختارهای ناهمسان و اندروالسی و الکترونیکی را در ترکیب  $TiS_3$ -G (گرافن- $TiS_3$ ) مطالعه نموده و دریافتند که فصل مشترک  $TiS_3$ -G یک سد شاتکی نوع n است. افزون بر آن، با آلیش اتم های بورون و جایگزینی با اتم های گرافن گذار از نوع n به نوع p روی داده و از طریق آلیش اتم‌های نیتروژن و بورون به داخل گرافن سطح فرمی کوک (تنظیم) می‌شود [۸].

گورلوا<sup>۹</sup> و همکارانش، رفتار مقاومت مغناطیسی تک بلور  $TiS_3$  را برای میدان مغناطیسی در همه جهات مطالعه کردند و دریافتند که برای میدان مغناطیسی در جهت محور c، مقاومت مغناطیسی منفی است و در جهت محور b مثبت است [۹].

$TiS_3$  ساختاری با تحرک بالا مدول کشسانی و تحرک حامل بار غیرهمسانگرد است. نانو ریون‌های  $TiS_3$  کلیدزنی خیلی سریع و پاسخ نوری خیلی بالایی دارند. که در فتوولتایی و در آشکارساز نوری به کار می‌رود [۱۰]. آیلند<sup>۱۰</sup> و همکارانش، با استفاده از  $TiS_3$  فتودیتکتوری ساختند که نسب به فسفید بورون ناهمسانگردتر بود. نو<sup>۱۱</sup> و همکارانش قطعاتی را ساختند که پاسخ پهن باندی نسبت به قطبش نور تابیده شده داشت [۱۱].

احساس می‌شد. تری کالکوژنیدهای فلزات واسطه (TMTCs)<sup>۱</sup> با فرمول شیمیایی  $MX_3$  (که M فلز واسطه و X عبارت از S, Se یا Te) قادر به پاسخ به این نیازها هستند. در این خانواده  $TiS_3$  مطالعات بسیاری را به خود اختصاص داده است. این مواد دو بعدی دارای گاف انرژی در حدود ۱eV هستند. پاسخ اپتیکی بالا در حدود  $3000 \text{ Aw}^{-1}$  و نسبت on/off در حدود ۳۰۰ دارند. و به این ترتیب به عنوان یک جایگزین مناسب برای سیلیکون به حساب می‌آیند [۲].  $TiS_3$  در حالت حجمی دارای ساختار بلورین با گروه فضایی  $p121/m1$  است. این نوع از تک لایه ها از حالت حجمی، لایه برداری<sup>۲</sup> می‌شوند. مقالات نشان می‌دهند که  $TiS_3$  به عنوان نیم‌رسانای نوع n با تحرک  $30 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  در دمای اتاق است و جذب نوری برای  $TiS_3$  نوع حجمی در حدود ۱ eV به عنوان گاف نوری است [۱]. تفاوت جدی میان تری کالکوژنیدهای فلزات واسطه (TMTCs) و دی کالکوژنیدهای فلزات واسطه (TMDCs)<sup>۳</sup>، تقارن بلوری است. در هندسه صفحه هگزاگونال هستند و در همه جهات متقارن هستند. در حالیکه تقارن در صفحه در TMTCs کاهش می‌یابد. این ویژگیها منجر به ناهمسانگردی قوی در ویژگیهای نوری و الکترونیکی شده و به عنوان راهی برای رسیدن به سدهای شاتکی قابل تنظیم، و آشکارساز نوری حساس قطبشی و مبدل های دیجیتال مجتمع و گسیل نور قطبیده تلقی می‌شوند. در این ارتباط، فیروزخانی و همکارانش با استفاده از نظریه DFT نشان دادند که تک لایه‌های  $TiS_3$  به عنوان انتخاب‌گر فرکانس در فرکانس های خاص و قطعات آشکارساز UV در فرکانس های بالا و نیز عنوان قطبشگر کاربرد دارد [۳]. تورن<sup>۴</sup> و همکارانش، اثر ناهمسانگردی را بر تک لایه‌های  $TiS_3$  بر اکسیتون و تریون با استفاده از محاسبات اصول اولیه و مدل واریر موت<sup>۵</sup> بررسی و نشان دادند که پاسخ انرژی پایین مواد دو بعدی بوسیله حالت های اکسایتونیک و تریونیک کنترل می‌شود [۴]. اصولا در تک لایه های  $TiS_3$  طول پیوند برای Ti-S در جهت محور a بزرگتر از طول پیوند در جهت

<sup>6</sup> Y. Chen

<sup>7</sup> F. Iyikanat

<sup>8</sup> J. Liu

<sup>9</sup> I. G. Gorlova

<sup>10</sup> J. O. Island

<sup>11</sup> Y. Niu

<sup>1</sup> Transition Metal Trichalgonides

<sup>2</sup> exfoliate

<sup>3</sup> Transition Metal dichalgonide

<sup>4</sup> E. Torun

<sup>5</sup> warrier-mott

۱ نشان داده شده است، کریستال های تک لایه  $TiS_3$  به صورت چینی از یک اتم  $Ti$  به ۳ اتم  $S$  به صورت مونوکلینیک با طول پیوند  $2/48 \text{ \AA}$  است که در مقایسه با پیوندهای  $Ti-Ti$  بزرگتر است. بهینه‌سازی ساختار با استفاده از بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو که یک بسته از نوع  $DFT$  و موج تخت است و روش  $GGA$  با انرژی  $cut\ off$  به مقدار  $150 \text{ Ry}$  و تعداد نمونه مونخورس-پک  $10 \times 10 \times 10$ ، انجام می‌شود. محاسبات خودسازگار تا زمانی که اختلاف بین انرژی ها کمتر از  $10^{-5} \text{ eV}$  شود ادامه پیدا می‌کند. به جهت اهمیت اربیتال  $d$  در ساختار اتمی  $TiS_3$  و به جهت ضعف شناخته شده تابعی چگالی در این اوربیتال، ممکن است نتایج پیش بینی‌های مناسبی را نشان ندهند. از همین رو روش هوبارد که روشی شناخته شده برای تقلیل این خطا می باشد، مورد بررسی قرار گرفت. در ادامه، برای محاسبه ساختار نواری از روش  $HSE06$  و روش پتانسیل هوبارد یا همان  $GGA+U$  استفاده شد [۱۵-۱۶]. از مقایسه نتایج این دو روش مقدار مناسب برای پارامتر  $U$  برگزیده شد. تا در ادامه، محاسبات از روش  $GGA+U$  انجام شود.

از آنجا که قصد ما از بررسی این ساختار بررسی خاصیت ترابرد می باشد. نیاز به دو الکتروود مناسب در این ساختار است. که  $Au$  به دلیل رسانایی بالا مناسب است. مطابق شکل ۴ یک قطعه با دو الکتروود طلا و تک لایه‌ای از  $TiS_3$  به عنوان کانال نیم‌رسانا شبیه سازی شد. در این جا نیز، محاسبات بهینه سازی قطعه شبیه‌سازی شده با روش  $GGA+U$  و انرژی  $cut\ off$  به مقدار  $150 \text{ Ry}$  و تعداد نمونه مونخورس-پک  $40 \times 40 \times 10$ ، انجام شد. محاسبات تا زمانی که نیروی روی هر اتم کمتر از  $0/01 \text{ eV/\AA}$  شود ادامه می‌یابد. سپس، محاسبات ترابرد با استفاده از روش  $GGA+U$  و روش تابع گرین غیر تعادلی  $NEGF$  انجام شد.

لازم به ذکر است که استفاده از تقریب  $GGA$  در نمونه های  $PBE$  با استفاده از بردارهای پایه  $FHI^2$  به صورت  $DZP^3$  مناسب نیست [۱۷]. به همین دلیل از بردارهای پایه  $HGH^4$  استفاده شد [۱۸]. همچنین، از آنجا که اوربیتال‌های  $d$  در این

برای به کار بردن مواد دو بعدی در قطعات الکترونیک، پیوندگاه مواد دو بعدی بر اساس نوع حامل‌ها در نوارهای رسانش و ظرفیت بسیار مهم است. در مقالات نشان داده شده است که الکتروود طلا را می توان به صورت مناسب در اتصال این ساختار استفاده کرد از همین رو در این پژوهش از الکتروود طلا بهره گرفتیم [۱۲]. فصل مشترک بین الکتروود فلزی و ماده دو بعدی سطح مقطع بیشتر و به نوبه خود منجر به مقاومت بیشتری می شود. بنابراین مطالعه اتصال الکتروود و نیم‌رسانا اهمیت زیادی دارد. پژوهش های پیشین، ترابرد را تنها در فصل مشترک میان الکتروود و تک لایه  $TiS_3$  مورد کنکاش قرار داده است، حال آنکه بررسی ساختار کامل با دو الکتروود نیاز به پژوهش‌های بیشتری دارد. از طرف دیگر، اطلاعات کافی از شیوه ی ترابرد در این ساختار با اتصال های فلزی راهگشای مهندسان برای استفاده بهینه از این ساختار در پژوهش های آینده خواهد بود. از همین رو در این پژوهش، به کنکاش در باب ترابرد و نحوه انتقال جریان در ساختار تک لایه  $TiS_3$  می‌پردازیم.

## ۲- محاسبات

در سالهای اخیر، روش تابع گرین غیر تعادلی ( $NEGF$ )<sup>۱</sup>، نویدبخش یک روش برای محاسبه ترابرد در ناحیه بالیستیک است و این روش، برای محاسبه ویژگیهای ترابردی قطعات با دقت بالا استفاده می‌شود [۱۳]. ترکیب روش مذکور با نظریه تابعی چگالی ( $DFT$ ) که در بسته نرم‌افزاری  $TranSiesta$  در دسترس است، محاسبه ویژگیهای ترابردی قطعات با دقت بالا را امکان پذیر می‌سازد. در روش تابع گرین غیر تعادلی ابتدا ماتریس هامیلتونین قطعه شبیه سازی شده و با استفاده از هامیلتونین الکتروود چپ و راست و کانال، هامیلتونین جفت شدگی کانال و الکتروود نوشته می شود. سپس، با کمک خود انرژی های الکتروود چپ و راست تابع گرین کل قطعه بدست آمده و از آنجا ضریب انتقال محاسبه شده که به نوبه خود تابع برادینینگ و تابع برادینینگ جریان را بر حسب ولتاژ بدست می‌دهد. [۱۴].

ساختار مورد بررسی در شکل ۱ به تصویر آمده است. جدول ۱ طول پیوند و ثابت های شبکه را نشان می‌دهد. همان طور که در شکل

<sup>2</sup> Fritz Haber Institute

<sup>3</sup> Double Zeta Polarized

<sup>4</sup> Hartwigsen-Goedecker-Hutter

<sup>1</sup> non-equilibrium green function

که در آن  $G_{LL}^0(E)$  تابع گرین تاخیری چپ است:

$$G_{LL}^0(E) = [(E + i\eta)S_{LL} - H_{LL}]^{-1}$$

$\eta$  انرژی جزئی بوده و با استفاده از معادله دایسون در رابطه (۵) و عملیات جبری خود انرژی ها محاسبه می‌شوند.

$$(H_L - (E + i\eta)S_L) - \Sigma_L(E + i\eta) \quad (۵)$$

$H_L$  و  $S_L$  با استفاده از DFT با بسته Siesta محاسبه می‌شوند نتایج یکسانی هم برای طرف راست بدست می‌آید. به منظور محاسبه برهمکنش های الکترون- الکترون درون ناحیه قطعه ابتدا  $\Sigma_L(E)$  و  $\Sigma_R(E)$  را محاسبه کرده و سپس، با استفاده از نتیجه معادله ۳ به صورت جفت شده با معادله پواسون محاسبات را به صورت خودسازگار را انجام می‌دهیم، تاجایی که اختلاف بین انرژی جدید و انرژی قدیم کمتر از  $10^{-5}$  eV شود. سرانجام مشخصه I-V با استفاده از معادلات زیر محاسبه می‌شود:

$$I(V) = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E, V) [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)] dE$$

$$T(E, V) = \text{Trace}[\Gamma_L(E)G_{CC}(E)\Gamma_L(E)G_{CC}^\dagger]$$

$$\Gamma_{L,R}(E) = i(\Sigma_{L,R}(E) - \Sigma_{L,R}^\dagger(E))$$

در روابط بالا  $f(E)$  تابع توزیع فرمی دیراک و  $\mu$  پتانسیل شیمیایی است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mu_{L,R}(V) = \mu_{L,R} \pm eV/2$$

که در آن  $V$  ولتاژ بایاس است. و  $\Gamma_{L,R}(E)$  تابع برادینگ الکترون چپ و راست است [۱۴].

### ۳- نتایج و بحث

در قدم نخست، ساختار دو بعدی با یاخته اولیه آن مورد بررسی قرار گرفت. طول پیوند برای Ti-S به ترتیب  $2.48 \text{ \AA}$  و  $2.48 \text{ \AA}$  و  $2.45 \text{ \AA}$  و ثابت شبکه با استفاده از تقریب PBE،  $5.03 \text{ \AA}$  و  $3.45 \text{ \AA}$  و  $3.9/9 \text{ \AA}$  با زاویه  $96/49$  درجه بدست آمد. همچنان که از جدول ۱ دیده می‌شود، این مقادیر با گزارشات پیشین و داده های تجربی موافقت خوبی دارند [۱۹]. یاخته ساختاری تک لایه  $\text{TiS}_3$  در فاز مونوکلینیک در شکل ۱ به تصویر آمده است.

تقریب به خوبی پوشش داده نشده است، از تقریب هوبارد برای رفع این نقص استفاده شده است.

در روش پیش رو، کانال به عنوان یک سیستم باز در نظر گرفته می‌شود که توسط اتصالات فلزی تاثیر می‌شود. قطعه مورد بررسی از سه بخش تشکیل شده است. سعی بر آن است تا هامیلتونین فلز کانال فلز نوشته شود:

$$H = \begin{pmatrix} H_L & H_{LC} & 0 \\ H_{CL} & H_C & H_{CR} \\ 0 & H_{RC} & H_R \end{pmatrix} \quad (۱)$$

در این رابطه  $H_L$  (هامیلتونین اتصال سمت چپ) و  $H_C$  (هامیلتونین کانال) و  $H_R$  (هامیلتونین اتصال سمت راست) و  $H_{LC}$  ( $H_{CL}$ ) هامیلتونین جفت شدگی کانال و اتصال چپ و  $H_{RC}$  ( $H_{CR}$ ) هامیلتونین جفت شدگی کانال و اتصال راست هستند. با به حساب آوردن تابع گرین و استفاده از معادله (۱) تابع گرین کل ساختار به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\begin{pmatrix} ES_{LL} - H_{LL} & ES_{LC} - H_{LC} & 0 \\ ES_{LC}^\dagger - H_{LC}^\dagger & ES_{CC} - H_{CC} & ES_{CR} - H_{CR} \\ 0 & ES_{CR}^\dagger - H_{CR}^\dagger & ES_{RR} - H_{RR} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} G_{LL} & G_{LC} & G_{LR} \\ G_{CL} & G_{CC} & G_{CR} \\ G_{RL} & G_{RC} & G_{RR} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_{LL} & 0 & 0 \\ 0 & I_{CC} & 0 \\ 0 & 0 & I_{RR} \end{pmatrix} \quad (۲)$$

در رابطه (۲)  $S$  رویهم افتادگی اوربیتال ها و  $G$  ماتریس گرین می‌باشد.  $L$  و  $R$  و  $C$  الکترون سمت چپ و الکترون سمت راست و کانال را نشان می‌دهند.  $E$  انرژی و  $I$  ماتریس واحد می‌باشد. مهمترین بخش  $G$  در این مطالعه بخش  $G_{CC}$  می‌باشد که همه اطلاعات لازم را برای محاسبه ترابرد کانال به بدست می‌دهد. با استفاده از جبر ماتریسی  $G_{CC}$  به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$G_{CC}(E) = (ES_{CC} - [H_{CC} + \Sigma_L(E) + \Sigma_R(E)])^{-1} \quad (۳)$$

$\Sigma_L(E)$  و  $\Sigma_R(E)$  به ترتیب خود انرژی های اثر الکترون چپ و راست بر کانال هستند. برای الکترون سمت چپ  $\Sigma_L(E)$  به صورت زیر تعریف می‌شود:

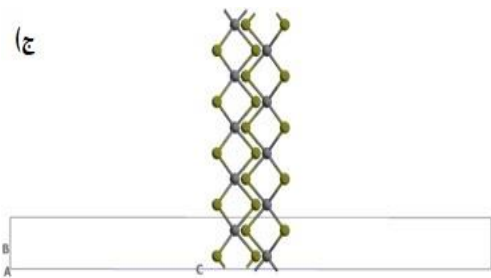
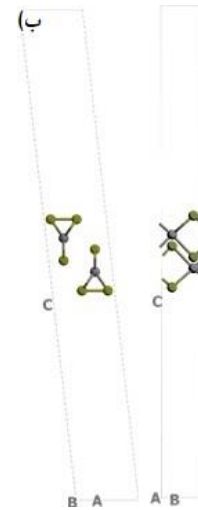
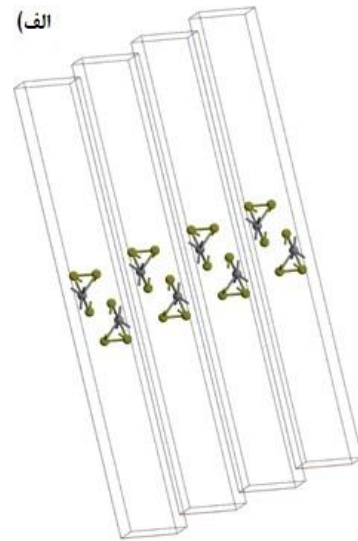
$$\Sigma_L(E) = (ES_{LC} - H_{LC})^\dagger G_{LL}^0(E) (ES_{LC} - H_{LC}) \quad (۴)$$

	a (Å)	b (Å)	$\beta$	Ti-S (Å)
current work	5.03	3.45	96.49 <sup>a</sup>	2.48, 2.48, 2.45
Ref. [20]	5.04	3.43	-	2.46, 2.50, 2.67
Ref. [21]	4.98 <sup>b</sup>	3.39 <sup>b</sup>	97.04 <sup>c</sup>	-
Ref. [22]	4.95(Expt)	3.40 (Expt)	96.56 <sup>c</sup> (Expt)	-

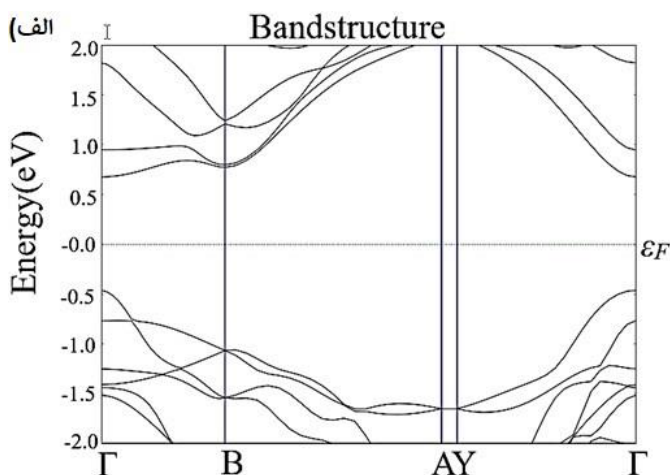
جدول ۲: مقادیر متفاوت گاف انرژی تک لایه های  $\text{TiS}_3$  با استفاده از داده ها

Property	This work GGA+U(eV)	Ref. [23] HSE06(eV)	This work PBE(eV)	Ref. [23] Expt(eV)
$\Gamma$ - $\Gamma$	1.139	1.122	0.19	~0.9

در مقایسه با نتایج شبیه‌سازی‌های موجود، گاف انرژی تجربی  $\text{TiS}_3$  مقدار  $0.9 \text{ eV}$  است که نظریه تابعی چگالی در تقریب‌های بیان شده مقدار  $0.19 \text{ eV}$  را نشان می‌دهد. با افزایش مقدار پتانسیل هوپارد بر اربیتال‌های d در  $\text{TiS}_3$  مقدار  $0.139 \text{ eV}$  بدست آمد. با در نظر گرفتن این عدد مقدار گاف انرژی با اختلاف  $1/51\%$  به گاف انرژی گزارش شده در نتایج HSE06 نزدیک می‌شود. این نکته قابل ذکر است که از آنجا که گاف انرژی بدست آمده در ساختارهای عملی تحت تاثیر برهمکنش محیطی دستگاه اندازه‌گیری قرار گرفته است، مطابق با جدول ۲ با گاف انرژی تجربی متفاوت است.

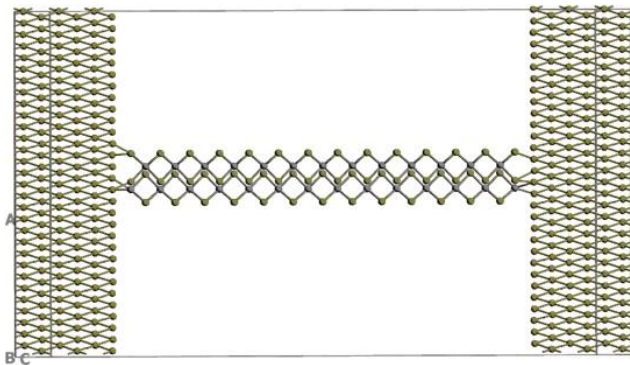


شکل ۱: الف و ب: یاخته بسیط تک لایه های  $\text{TiS}_3$  در فاز مونوکلینیک (ج) تک لایه تشکیل شده در جهت B



جدول ۱: محاسبات بهینه سازی طول پیوند را برای Ti-S به ترتیب ترتیب  $2.48 \text{ \AA}$  و  $2.48 \text{ \AA}$  و  $2.45 \text{ \AA}$  نشان می‌دهند همچنین، ثابت شبکه با استفاده از تقریب PBE عبارتست  $5.03 \text{ \AA}$  و  $3.45 \text{ \AA}$  و  $96.49^\circ$  که زاویه  $96.49^\circ$  درجه است.

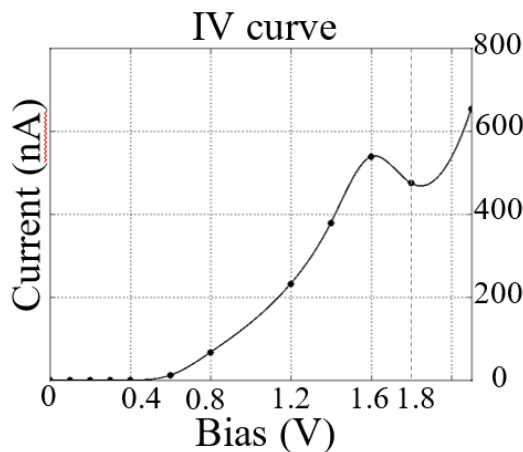
$E_V$  و  $E_C$  مشاهده می‌شود که نتایج مربوط به باند انرژی را تایید می‌کند.



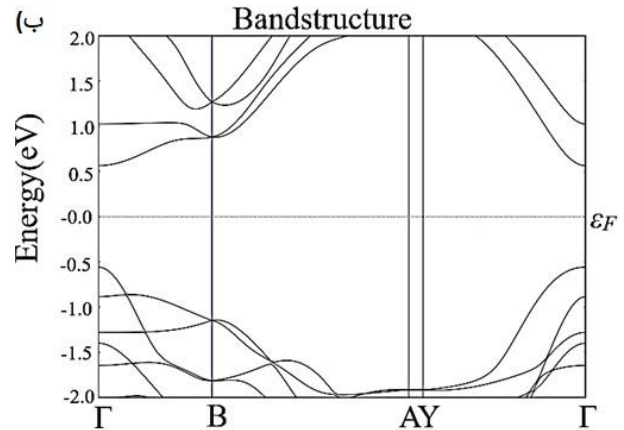
شکل ۴: قطعه ساخته شده در شبیه سازی متشکل از ۱۳ یاخته بسیط  $TiS_3$  در کانال و الکترود های طلا

در پژوهش حاضر، اتصال میان  $Au/TiS_3$  بررسی شده و فاصله بهینه بین این دو  $2/49 \text{ \AA}$  به دست آمده است. که در مقایسه با مقدار تئوری  $2/75 \text{ \AA}$  گزارش شده توسط سان<sup>۱</sup> و همکارانش تفاوت دارد و ناشی از محاسبه تراپرد، تنها در محل اتصال و کاربرد روش بستگی قوی است (شکل ۴) [۲۴].

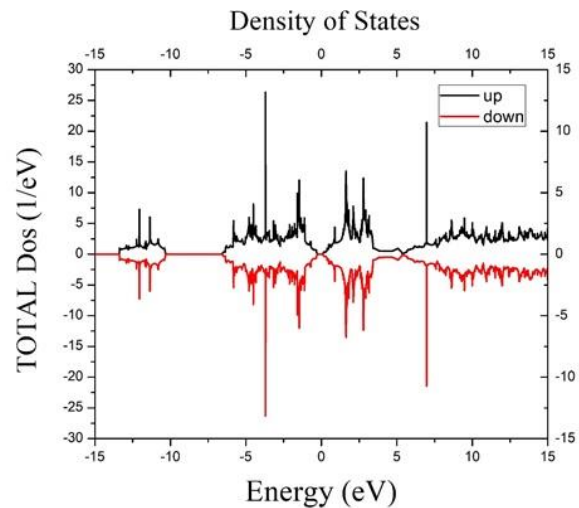
شکل ۴، قطعه ساخته شده را نشان می‌دهد که با توجه به روش ذکر شده در بخش محاسبات، پس از بهینه سازی شامل یک کانال  $TiS_3$  متشکل از ۱۳ یاخته بسیط و ۲ الکترود طلا در دو طرف آن است. هر الکترود طلا از ۲ یاخته بسیط طلا ساخته شده و ناحیه reservoir شامل ۴ یاخته بسیط طلا است.



شکل ۵: همان طور که مشاهده می‌شود تا  $0/4 \text{ eV}$  تراپرد صورت نمی‌پذیرد. اما به محض عبور ولتاژ اعمالی از  $0/4 \text{ eV}$  جریان الکتریکی جاری می‌شود. در بازه  $1/6 \text{ V}$  تا  $1/8 \text{ V}$  افت جریان همراه افزایش ولتاژ رخ می‌دهد و یک مقاومت منفی مشاهده می‌شود.



شکل ۲: الف) رسم ساختار نواری تک لایه  $TiS_3$  با استفاده از روش GGA+U (ب) رسم ساختار نواری تک لایه  $TiS_3$  با استفاده از روش HSE06

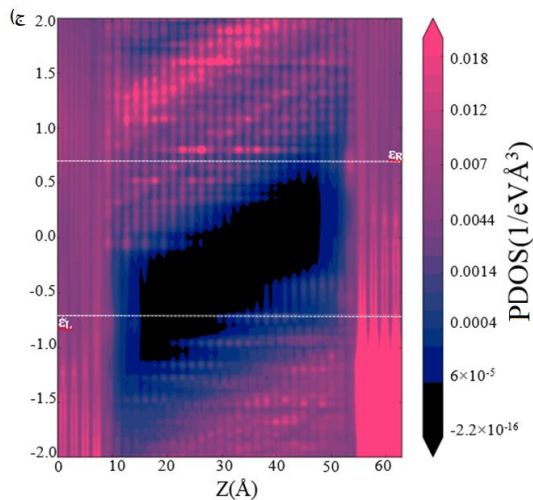


شکل ۳: DOS مربوط به روش GGA+U

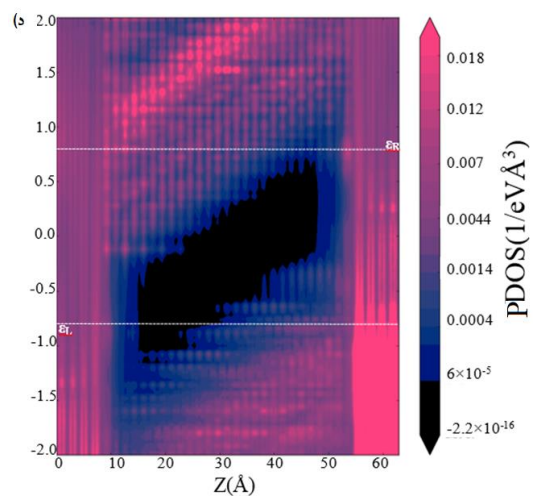
جدول ۲ مقایسه گاف انرژی را در روش های متفاوت نشان می‌دهد.

شکل ۲ الف) ساختار نواری مربوط تک لایه  $TiS_3$  را برای محاسبات، GGA+U و شکل ۲ ب) برای HSE06 نشان می‌دهد. همان طور که دیده می‌شود، مقدار گاف انرژی اندکی تغییر کرده است. شکل ۳، DOS کلی مربوط به ساختار GGA+U را نشان می‌دهد. با توجه به تقریب sGGA و از آنجا که گاف انرژی  $1/13 \text{ eV}$  بدست آمد. می‌توان نتیجه گرفت که ساختار غیر مغناطیسی است. همچنین، گاف انرژی و فشردگی باندها در اطراف

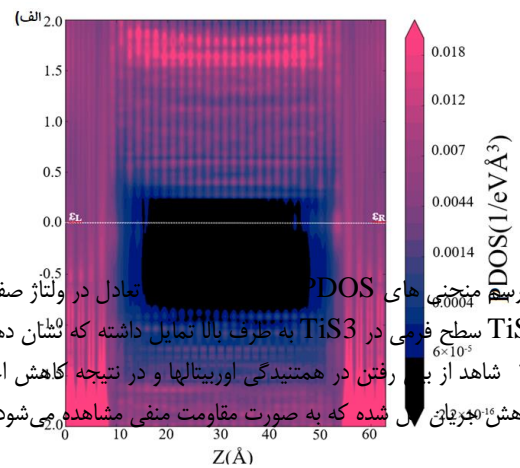
<sup>1</sup> R. Sun



ولتاژ به الکترودهای طلا اعمال می‌شود. و جریان عبوری از  $TiS_3$  محاسبه می‌شود. شکل (۵) نمودار جریان ولتاژ در شکل ۵ نشان داده شده است. همان طور که دیده می‌شود، با افزایش ولتاژ دو سر قطعه و با بالا رفتن از  $0.4\text{ V}$ ، جریان عبوری افزایش می‌یابد که اصولاً با گاف انرژی  $1.39\text{ eV}$  هماهنگی ندارد. با عبور جریان از قطعه و افزایش ولتاژ تا  $0.6\text{ V}$  مقدار جریان با شیب  $10^{-9}$  همراه افزایش ولتاژ رخ می‌دهد و یک مقاومت اختلافی منفی  $494 \times 10^9\text{ M}\Omega$  مشاهده می‌شود. با عبور از  $550\text{ nA}$  در  $0.8\text{ V}$  این مقاومت منفی به اتمام می‌رسد و دوباره وارد مقاومت‌های مثبت می‌شویم.

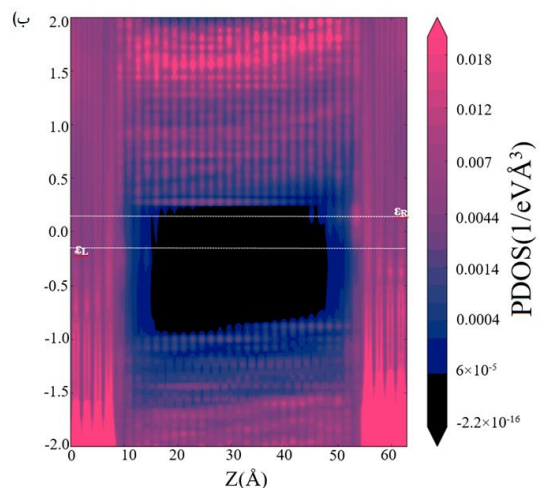


برای بررسی دقیق‌تر نحوه رفتار جریان بالیستیک در  $TiS_3$  منحنی چگالی حالت‌های جزئی (PDOS) کمک فراوانی می‌کند. شکل ۶، ترابرد PDOS را برای ولتاژهای متفاوت را نشان می‌دهد.



شکل ۶: ترابرد منحنی‌های PDOS در  $TiS_3$  به طرف بالا تمایل داشته که نشان دهنده ایجاد سد شاتکی به میزان  $0.4\text{ eV}$  در این اتصال است. با ورود به بازه میان  $0.6\text{ V}$  تا  $0.8\text{ V}$  شاهد از بین رفتن در همتبندی اوربیتالها و در نتیجه کاهش احتمال موفق بودن انتقال الکترون‌ها از الکترودهای چپ به راست هستیم. این کاهش احتمال موجب کاهش جریانی می‌شود که به صورت مقاومت منفی مشاهده می‌شود.

در ولتاژ صفر (حالت تعادل) در اثر اتصال طلا در  $TiS_3$  سطح فرمی در  $TiS_3$  به طرف بالا تمایل داشته که نشان دهنده ایجاد سد شاتکی به مقدار  $0.4\text{ V}$ ، در این اتصال است. با افزایش ولتاژ اختلاف سطح فرمی الکترودهای چپ و راست موجب غیرصفر شدن جریان در صورت وجود کانال انتقال در  $TiS_3$  خواهد شد. همان طور که دیده می‌شود، در پنجره ولتاژ میان دو الکترودهای طلا، تا اعمال ولتاژ  $0.4\text{ V}$ ، هیچگونه سطح انرژی مجاز برای انتقال الکترون از الکترودهای چپ و راست به چپ وجود ندارد با افزایش ولتاژ به مقدار  $0.6\text{ V}$ ، مقداری از سطوح انرژی در الکترودهای چپ وارد پنجره ولتاژ شده که در نتیجه امکان تونل زنی از این ناحیه به الکترودهای



van der Zant, J. V. Álvarez, R. D'Agosta, I. J. Ferrer, A. Castellanos-Gomez "TiS<sub>3</sub> Transistors with Tailored Morphology and Electrical Properties." *Advanced Materials*, 16, 2595-2601, 2015.

[3]. A. H. Firouzkhani, M. Vaez-Zadeh, H. Jamnezhad, M. Berahman, "Electronic and optical properties of monolayer TiS<sub>3</sub>: DFT calculation", *JOURNAL OF OPTOELECTRONICS AND ADVANCED MATERIALS*, 22, 623 – 628, 2020.

[4]. E. Torun, H. Sahin, A. Chaves, L. Wirtz, and F. M. Peeters "Ab initio and semi empirical modeling of excitons and trions in monolayer TiS<sub>3</sub>" *Physical Review B*, 98, 075419-1-7, 2018.

[5]. J. O. Island, R. Biele, M. Barawi, J. M. Clamagirand, J. R. Ares, C. Sánchez, H. S.J. van der Zant, I. J. Ferrer, R. D'Agosta, A. Castellanos-Gomez, "Titanium Trisulfide (TiS<sub>3</sub>): a 2d semiconductor with quasi-1D optical and electronic properties" *scientificreports*, 1-7, 2016.

[6]. Y. Chen, Y. Li, J. Wu, W. Duan, "General criterion to distinguish between Schottky and Ohmic contacts at metal/two-dimensional semiconductor interface" *Nanoscale*, 9, 2068-2073, 2017.

[7]. F. Iyikanat, R.T. Senger, F.M. Peeters, H. Sahin, "Quantum-Transport Characteristics of a p-n Junction on Single-Layer TiS<sub>3</sub>" *Chemphyschem*, 17, 3985-3991, 2016.

[8]. J. Liu, Y. Guo, F. Q. Wang, Q. Wang, "TiS<sub>3</sub> Sheet Based Van der Waals Heterostructures with Tunable Schottky Barrier" *Nanoscale*, 10, 807-815

[9]. I. G. Gorlova, V. Y. Pokrovskii, S. Y. Gavrillkin, A. Y. Tsvetkov, "Change in the Sign of the Magnetoresistance and the Two-Dimensional

راست افزایش می‌یابد. بنابراین، با وجود  $1/13$  eV گاف انرژی در ولتاژهای پایین تر احتمال انتقال جریان از طریق پدیده تونل زنی وجود دارد. همین موضوع دلیل افزایش جریان در این ولتاژ در مقایسه با ولتاژهای کمتر آن است. این خم‌شدگی تا  $1/6$  eV موجب افزایش و انتقال بهتر جریان است. با ورود به بازه ولتاژ میان  $1/6$  V تا  $1/8$  V شاهد از بین رفتن در همتندگی اوربیتالها و در نتیجه کاهش احتمال موفق بودن انتقال الکترون‌ها از الکتروود چپ به راست هستیم. این کاهش احتمال موجب کاهش جریان کل شده که به صورت مقاومت منفی مشاهده می‌شود و جریان به خوبی قابل انتقال نیست. از همین رو، با وجود افزایش ولتاژ شاهد کاهش جریان خواهیم بود. با افزایش ولتاژ از  $1/8$  V کیفیت انتقال افزایش و انتقال به خوبی رخ داده و جریان افزایش می‌یابد.

## ۴- نتیجه گیری

در گام نخست، تقارن چگالی حالت های کل نشان داد که TiS<sub>3</sub> یک ماده غیرمغناطیسی است. با مقایسه ساختار نواری حاصل از روش HSE06 و روش GGA+U، پتانسیل هوبارد بدست آمد سپس، با ایجاد دو الکتروود طلا و یک کانال نیمه رسانا یک قطعه شبیه‌سازی و با استفاده از روش GGA+U تراورد کانال نیمه رسانا محاسبه شد. محاسبات بهینه سازی، ۱۳ یاخته بسیط برای ناحیه کانال نیمه‌رسانا و ۲ یاخته بسیط طلا برای هر الکتروود و ۴ یاخته بسیط برای ناحیه reservoir بدست می‌دهد. فاصله کانال نیمه رسانا تا الکتروود طلا  $2/49$  Å به دست آمد. پس از رسم منحنی ولتاژ و جریان مشاهده شد که برای ولتاژ اعمال شده تا  $1/6$  V، کانال نیمه‌رسانا مقاومت مثبت و از  $1/6$  V تا  $1/8$  V یک مقاومت منفی  $4/86$  MΩ نشان می‌دهد.

## مراجع

[1]. J. Dai, X. C. Zeng, "Titanium Trisulfidied Monolayer: Theoretical Prediction of a New Direct-Gap Semiconductor with High and Anisotropic Carrier Mobility" *Angew.Chem.Int.Ed*, 54, 7572–7576, 2015.

[2]. J. O. Island, M. Barawi, R. Biele, A. Almazán, J. M. Clamagirand, J. R. Ares, C Sánchez, H. S. J.



- [17]. P. Rivero, V. Manuel García-Suárez, D. Pereñíguez, K. Utt, Y. Yang, L. Bellaiche, K. Park, J. Ferrer, S. Barraza-Lopez, "Systematic pseudopotentials from reference eigenvalue sets for DFT calculations" *Computational Materials Science*, 98, 372–389, 2015.
- [18]. A. Willand, Y. O. Kvashnin, L. Genovese, A. Vázquez-Mayagoitia, A. K. Deb, A. Sadeghi, T. Deutsch, S. Goedecker, "Norm-conserving pseudopotentials with chemical accuracy compared to all-electron calculations" *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, 138, , 104109-1- 104109-11, 2013.
- [19]. Sigrud Furuseth, Leif Brattås, Arne Kjekshus, Arne F. Andresen, P. Fischer, "On the Crystal structures of  $TiS_3$ ,  $ZrS_3$ ,  $ZrSe_3$ ,  $ZrTe_3$ ,  $HfS_3$ , and  $HfSe_3$ ," *Acta Chemica Scandinavica*, 29, 623-631, 1975.
- [20]. H. Zheng, M. Zhu, J. Zhang, X. Du, Y. Yan, "A first-principles study on the magnetic properties of Sc, V, Cr and Mn-doped monolayer  $TiS_3$ " *RSC Advances*, 6, 55194–55202, 2016.
- [21] J. Kang, L. W. Wang, "Robust band gap of  $TiS_3$  nanofilms" *Phys. Chem. Chem. Phys.* 18, 14805-14809 2016.
- [22] Y. Saeed, A. Kachmar, M.A. Carignano, "First-Principles Study of the Transport Properties in Bulk and Monolayer  $MX_3$  ( $M = Ti, Zr, Hf$  and  $X = S, Se$ ) Compounds" *The Journal of Physical Chemistry*, 121, 1399-1403, 2017.
- [23] J. A. Silva-Guillén, E. Canadell, P. Ordejón, F. Guinea, R. Roldán, "Anisotropic features in the electronic structure of the two-dimensional transition metal trichalcogenide  $TiS_3$ : electron doping and plasmons" *2D Mater.* 4, 025085(1)-025085(11), 2017.
- Conductivity of the Layered Quasi-One-Dimensional Semiconductor  $TiS_3$ " *Condensed Matter*, 107, 175–181, 2018.
- [10]. J. Kang, H. Sahin, H. Ozaydin, R. Tugrul Senger, F. M. Peeters "TiS3 nanoribbons: Width-independent band gap and strain-tunable electronic properties" *Physical Review B*, 92, 075413, 2015.
- [11]. Y. Niu, R. Frisenda, E. Flores, J. R. Ares, W. Jiao, D. Perez de Lara, C. Sánchez, R. Wang, I. J. Ferrer, A. Castellanos-Gomez, "Polarization-Sensitive and Broadband Photo Detection Based on a Mixed-Dimensionality  $TiS_3/Si$  p–n Junction." *Advanced optical materials*, 6, 1800351(1)-1800351(7), 2018.
- [12]. S. J. Gilbert, A. Lipatov, A. J. Yost, M. J. Loes, A. Sinitskii, P. A. Dowben, "The Electronic Properties of Au and Pt Metal Contacts on Quasi-One-Dimensional Layered  $TiS_3(001)$ " *Applied Physics Letters*, 114, 101604(1)-101604(5), 2019.
- [13]. S. Datta, "The non-equilibrium Green's function (NEGF) formalism: An elementary introduction" *IEDM*, 29.1.1-29.1.4, 2002.
- [14]. M. Berahman, M. Sanaee, R. Ghayour, "A theoretical investigation on the transport properties of overlapped graphene nanoribbons" *Carbon*, 76, 285-291, 2014.
- [15]. J. Heyd, G.E. Scuseria, "Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential" *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, 118, 8207- 8215, 2003.
- [16]. A. Jain, G. Hautier, S. P. Ong, C. Moore, C. Fischer, K. A. Persson, G. Ceder, "Formation enthalpies by mixing GGA and GGA + U calculations" *Physical Review B*, 84, 045115(1)-045115(11) 2011.

[24]. R. Sun, Y. Gu, G. Yang, J. Wang, X. Fang, N. Lu, B. Hua, X. Yan. "Theoretical Study on the Interfacial Properties of Monolayer  $TiS_3$ -Metal Contacts for Electronic Device Applications" The journal of Physical Chemistry C, 123, 7390-7396, 2019.



# Analysis and Simulation of Transport in Monolayers $\text{TiS}_3$

A.H. Firouzkhani<sup>1</sup>, M. Vaez-zadeh<sup>1\*</sup>, M. Berahman<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics., K. N. Toosi University of Technology, Tehran

<sup>2</sup>Department of Electrical and Computer Engineering, Graduate University of Advanced Technology, Kerman

**Abstract:** High optical response and anisotropy in electrical and optical properties, adjustable Schottky barrier, make Monolayers  $\text{TiS}_3$  as a candidate material to fabricate sensitive photo detectors, integrated convertors and polarized light emission devices. To Study of applications, transport is avoidable, This paper, studies transport of Monolayers  $\text{TiS}_3$  channel by the non-equilibrium green function method (NEGF) with DFT in TranSieta package. A device composed of 2 Au electrode and 13-unit cell as channel of  $\text{TiS}_3$  monolayer was simulated. Calculation of I-V curves reveals negative resistant from 1.6 V to 1.8 V as bias voltage in electrodes. To explain this events, study of PDOS, shows quality of charge carriers in negative interval, has been reduced which result in negative resistant.

**Keywords:** Transport, PDOS, Negative Resistant, channel, Ballistic Current