

# Indukovanje stanja sličnih topološkim kod dvoslojnih fosforenskih traka primenom normalnog električnog polja

Vladimir V. Arsoski, Milan Ž. Tadić

**Apstrakt**—Metoda jake veze je korišćena za analizu elektronske strukture nanotraka od dvoslojnog crnog fosfora u prisustvu električnog polja. Kod traka sa foteljastim ivicama nisu prisutna ivična stanja, pa postoji veliki direktan procep u odsustvu spoljašnjeg polja. Primena električnog polja normalno na površinu trake dovodi do smanjenja procepa. Za određenu kritičnu vrednost amplitude električnog polja procep se skoro u potpunosti zatvara i u centru procepa dolazi do pojave oštrog antiukrštanja stanja najniže energije iz provodne zone i stanja najviše energije iz valentne zone. Ovo ponašanje je karakteristično za konvencionalne topološke izolatore kod kojih do inverzije zonske strukture dolazi usled jake spin-orbitne interakcije koja nije uključena u naš model. Ustanovljeno je da kod nanotraka male debljine postoji jako sprezanje stanja u provodnoj i valentnoj zoni usled anizotropije iako su elektroni i šupljine potisnuti na suprotne površine trake električnim poljem. Povećanje normalnog električnog polja iznad kritične vrednosti dovodi do inverzije i viših stanja iz provodne i valentne zone što je praćeno karakterističnim antiukrštanjima.

**Ključne reči**—Metoda jake veze; fosforen; topološki izolatori; normalno električno polje.

## I. UVOD

Proizvodnja tankih slojeva poluprovodničkih materijala pokrenula je novu eru razvoja elektronskih komponenti koja je započela uspešnim izdvajanjem nekoliko monoslojeva tankog filma grafita iz masivnog kristala [1]. Velika popularnost monosloja grafita, koji je poznat pod imenom grafen [2], dovela je do porasta interesovanja za takozvane dvodimenzione (2D) materijale. Prva teorijska istraživanja su ukazala da smanjena dimenzionalnost u jednom pravcu dovodi do manifestacije specifičnih elektronskih osobina kod tankoslojnih materijala u odnosu na masivne materijale od kojih su dobijeni [3], što ih je učinilo atraktivnim za potencijalne primene u elektronici. Za razliku od tankih slojeva grafita kod kojih energetski procep praktično ne postoji, tanki slojevi crnog fosfora se odlikuju velikom vrednošću energetskog procepa koja je nekoliko puta veća od vrednosti u masivnom uzorku što ga, zajedno sa velikom pokretljivošću šupljina, čini odličnim kandidatom za izradu

pMOS tranzistora [4,5]. Istraživanja predviđaju da izražena anizotropija strukture crnog fosfora može dovesti do intenzivne manifestacije interesantnih efekata kod tankih slojeva materijala, takozvanog fosforena, kao rezultat anizotropije optičkih, električnih, mehaničkih i termalnih svojstava [6]. U cilju zaštite od spoljašnjih uticaja slojevi fosforena se umeću između monoslojeva heksagonalnog bor-nitrida, što u određenoj meri modifikuje njegova elektronska, električna, transportna i optička svojstva [7].

U cilju primene u realnim napravama fosforen se obično izrađuje u formi nanotraka [4]. Kao i svi 2D materijali sa heksagonalnom rešetkom, trake fosforena se mogu fabrikovati tako da imaju karakteristične regularne cik-cak ili foteljaste ivice, koje se razlikuju po elektronskoj strukturi i transportnim svojstvima [8]. Kod traka sa cik-cak ivicama postoje ivična stanja čija je energija u blizini centra procepa i ponašaju se kao metalne, dok trake sa regularnim foteljastim ivicama nemaju stanja u procepu i ponašaju se kao izolatorske. Bez obzira na tip ivica traka, njihove elektronske i transportne osobine se mogu podešavati primenom električnog polja gde u okolini kritične vrednosti polja primenjenog normalno na ravan trake dolazi do karakterističnih prelaza izolator-metal [8].

*Ab initio* proračuni elektronske strukture višeslojnog fosforena predviđaju da primena naprežanja može dovesti do formiranja Dirakovih konusa [9], što je inherentna karakteristika elektronske strukture topoloških izolatora. U formi masivnog materijala topološki izolatori poseduju energetski procep, dok u materijalu konačnih dimenzija dolazi do pojave karakterističnih stanja lokalizovanih po ivicama ili površinama strukture koja u inverznom prostoru, u vidu Dirakovog konusa, zatvaraju procep i invarijantna su u odnosu na inverziju u vremenu [10]. U ovom radu biće prikazano da se slična svojstva elektronske strukture mogu indukovati u dvoslojnom fosforenu primenom normalnog električnog polja.

## II. TEORIJSKI MODEL

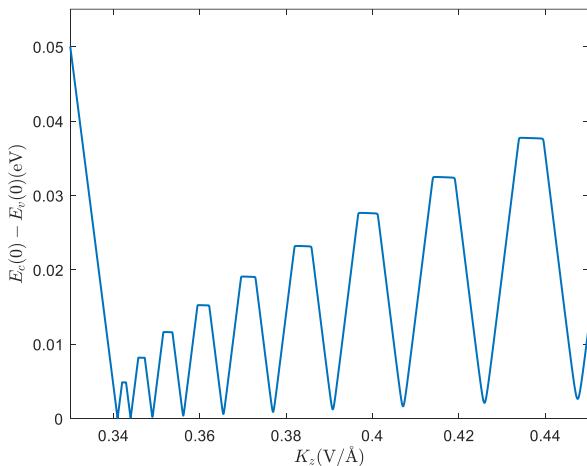
Za analizu elektronske strukture nanotraka korišćen je metod jake veze, gde je hamiltonijan dat sa

$$H = \sum_{i \neq j} t_{i,j} c_i^\dagger c_j + \sum_i e \mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}_i. \quad (1)$$

Vladimir Arsoski – Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Bulevar kralja Aleksandra 73, 11020 Beograd, Srbija (e-mail: [vladimir.arsoski@etf.bg.ac.rs](mailto:vladimir.arsoski@etf.bg.ac.rs)), (<https://orcid.org/0000-0002-9326-7809>)

Milan Tadić – Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Bulevar kralja Aleksandra 73, 11020 Beograd, Srbija (e-mail: [tadic@etf.bg.ac.rs](mailto:tadic@etf.bg.ac.rs)), (<https://orcid.org/0000-0002-9408-7957>)

Ovde je  $t_{i,j}$  energija skoka između  $i$ -tog i  $j$ -tog atoma,  $c_i^\dagger (c_j)$  je operator kreacije (anihilacije) elektrona u  $i(j)$ -tom atomskom stanju,  $\mathbf{K}_i$  je vektor spoljašnjeg električnog polja na mestu  $i$ -tog atoma,  $\mathbf{r}_i$  je vektor položaja  $i$ -tog atoma, a  $e$  je elementarno naelektrisanje. Referentna tačka za izračunavanje dodatnog potencijala u prisustvu električnog polja je postavljena u koordinatni početak i poklapa se sa centrom nanotrake. Korišćeno je 10 parametara za skokove u okviru jednog monosloja, dok su sa 5 parametara opisani skokovi između monoslojeva. Izabrani skup parametara daje verodostojne rezultate za razmatranu višeslojnu strukturu [11]. Rastojanja između atoma, koja figurišu kroz članove zavisne od položaja atoma, su preuzeta iz reference [8]. Širina trake je određena brojem dimera duž poprečnog preseka trake, dok jediničnu ćeliju sačinjava minimalan skup atoma čijim se periodičnim ponavljanjem reprodukuje nanotraka beskonačne dužine. Za implementaciju trake nominalno beskonačne dužine korišćeni su periodični granični uslovi. Dijagonalizacijom matrice hamiltonijana (1) dobija se skup svojstvenih vrednosti i svojstvenih vektora koji opisuje elektronsku strukturu razmatranog sistema.



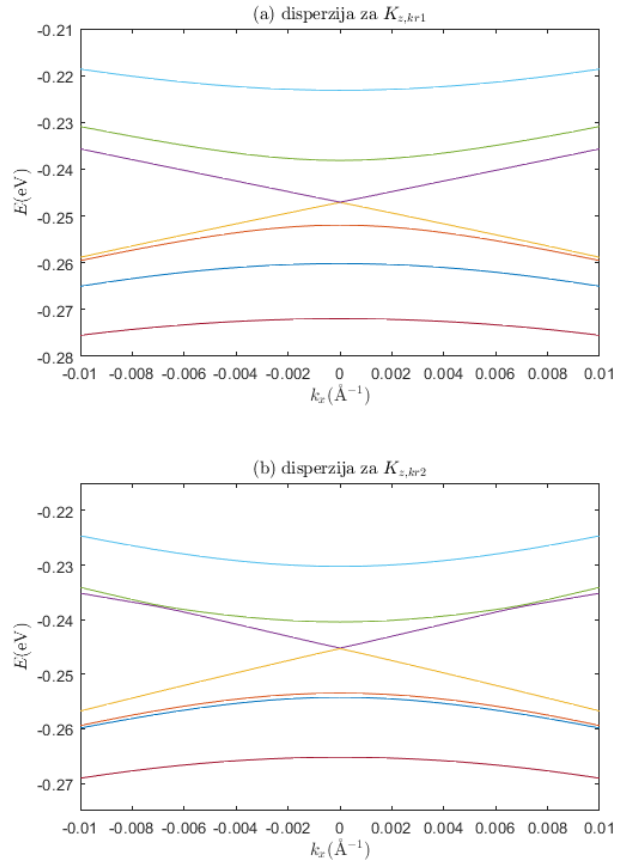
Sl. 1. Razlika svojstvenih vrednosti stanja najniže energije u provodnoj zoni i stanja najviše energije u valentnoj zoni u  $\mathbf{k}=0$  u funkciji amplitude normalnog električnog polja  $K_z$ .

### III. REZULTATI I DISKUSIJA

Analizirane su trake sa regularnim foteljastim ivicama debljine dva monosloja fosforena, pri čemu je broj dimera u jednom monosloju duž poprečnog preseka  $N_d = 61$  što približno odgovara širini trake od 10 nm. Referentna tačka za potencijal je tačka na sredini između slojeva na polovini širine trake. Osa  $x$  je usmerena duž trake, osa  $y$  je paralelna ravni monoslojeva duž poprečnog preseka trake, dok je  $z$  osa normalna na ravan strukture.

Najpre je analiziran uticaj električnog polja primenjenog normalno na površinu trake na razliku energija stanja na dnu provodne zone i stanja na vrhu valentne zone u tački  $k = 0$ . U

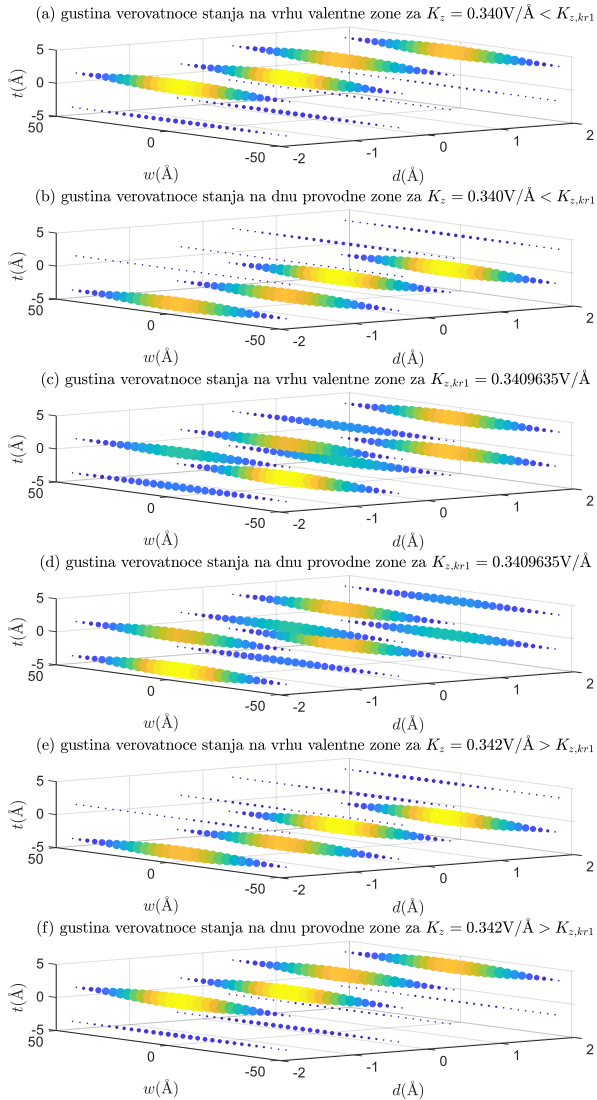
određenom opsegu amplituda električnog polja ova razlika odgovara širini energetskog procepa koji je direktan. Povećanje amplitude električnog polja dovodi do smanjenja procepa i za određene kritične vrednosti se pojavljuju minimumi, što je prikazano na Sl.1. Može se uočiti da lokalni minimumi procepa imaju veću vrednost što je amplituda kritičnog polja veća.



Sl. 2. Prikaz zavisnosti svojstvenih energija u okolini centra zone u funkciji talasnog vektora  $k_x$ , usmerenog duž trake, za kritičnu vrednost amplitude električnog polja za koju energetski procep ima minimalnu vrednost: (a) najniža kritična vrednost polja  $K_{z,kr1} = 0.3409635$  V/Å; (b) prvi sledeći (lokalni) minimum  $K_{z,kr2} = 0.3439790398$  V/Å.

Dispersije u okolini centra zone za najnižu kritičnu vrednost polja  $K_{z,kr1} = 0.3409635$  V/Å kada procep ima minimalnu širinu  $E_{g1,min} = 22.96310$   $\mu$ eV i za prvu sledeću vrednost  $K_{z,kr2} = 0.3439791$  V/Å kada je vrednost procepa  $E_{g2,min} = 92.49116$   $\mu$ eV su prikazane na Sl.2 (a) i (b), redom. U tački  $k = 0$  dolazi do antiukrštanja stanja energija najbližih energetskom procepu, takozvanih najnižih stanja u provodnoj i valentnoj zoni. Ukoliko se kao referentan raspored usvoji raspored stanja na disperziji kada polje nije primenjeno, pri prvoj kritičnoj vrednosti polja dolazi do antiukrštanja najnižih stanja u provodnoj i valentnoj zoni za  $K_{z,kr1}$ . Za vrednost polja  $K_{z,kr2}$  dolazi do antiukrštanja drugog stanja iz provodne i drugog iz valentne zone pri čemu se tačka antiukrštanja prvog stanja iz provodne i valentne zone pomera iz centra zone

većim vrednostima  $|k|$ , što se lako može uočiti sa Sl.2 (b) (tačka antiukrštanja je za  $|k| \cong 0.007 \text{ \AA}^{-1}$ ). Ovaj trend se nastavlja sve do amplitude polja  $K_{z,kr10} = 0.447989 \text{ V/\AA}$ , koja odgovara desetom (krajnjem desnom) lokalnom minimumu na Sl.1, kada procep postaje indirektan. Tada materijal prelazi iz izolatorskog u polumetalno stanje.



Sl. 3. Prikaz gustine verovatnoće stanja: (a) na vrhu valentne zone za polje  $K_z = 0.340 \text{ V/\AA} < K_{z,kr1}$ ; (b) na dnu provodne zone za polje  $K_z = 0.340 \text{ V/\AA} < K_{z,kr1}$ ; (c) na vrhu valentne zone za polje  $K_{z,kr1} = 0.3409635 \text{ V/\AA}$ ; (d) na dnu provodne zone za polje  $K_{z,kr1} = 0.3409635 \text{ V/\AA}$ ; (e) na vrhu valentne zone za polje  $K_z = 0.342 \text{ V/\AA} > K_{z,kr1}$ ; (f) na dnu provodne zone za polje  $K_z = 0.342 \text{ V/\AA} > K_{z,kr1}$ ; Na slici osa  $w$  je postavljena po širini trake,  $d$  po dužini, dok je  $t$  normalno na površinu trake.

Da bi ustanovili koliko je ova struktura slična topološkim izolatorima, izračunate su gustine verovatnoća stanja na dnu provodne i vrhu valentne zone za amplitude električnog polja

u okolini prve kritične vrednosti, što je prikazano na Sl.3. Za vrednosti polja koje su manje od  $K_{z,kr1}$  stanja u valentnoj zoni su pretežno lokalizovana na gornjoj površini trake, dok su stanja u provodnoj na donjoj, što se može uočiti na Sl. 3 (a) i (b), redom. Električno polje je normalno na površinu trake i usmereno vertikalno naviše (u smeru  $t$  ose) tako da potiskuje šupljine na gornju površinu, dok su elektroni potisnuti na donju. Za kritičnu vrednost električnog polja lokalizacija stanja u valentnoj i provodnoj zoni je slična, pri čemu su stanja u različitim zonama lokalizovana na različitim podreškama strukture, što je prikazano na Sl. 3 (c) i (d). Ovo je posledica izrazite anizotropije dvoslojnog fosforena i posebno male debljine strukture zbog čega je sprezanje stanja u valentnoj i provodnoj zoni jako čak i pri velikim amplitudama električnog polja koje teži da razdvoji elektrone i šupljine. U slučaju kada je amplituda polja veća od kritične vrednosti, uočava se da su stanja na vrhu valentne zone lokalizovana na donjoj površi, dok su stanja na dnu provodne zone lokalizovana na gornjoj površi (videti Sl.3 (e) i (f)) što je obrnuto od onoga što smo imali na Sl.3 (a) i (b) kada je amplituda polja bila manja od kritične. Ovo je indikacija da je u oblasti antiukrštanja došlo do inverzije zonske strukture, što je ponašanje slično onome koje se sreće kod topoloških izolatora. Inverzija zonske strukture počinje u centru zone i širi se ka ivicama zone sa porastom amplitude električnog polja. Za stanja kod kojih nije došlo do inverzije lokalizacija je takva da su stanja u valentnoj zoni pretežno na atomima na gornjoj površi strukture, dok su stanja u provodnoj zoni dominantno lokalizovana na donjoj, što odgovara efektu koji električno polje ima na šupljine i elektrone.

#### IV. ZAKLJUČAK

U radu je teorijski razmatrana elektronska struktura dvoslojnih traka od fosforena sa foteljastim ivicama. Utvrđeno je da primenom normalnog električnog polja dolazi do antiukrštanja stanja iz provodne i valentne zone, što je praćeno zonskom inverzijom. Nađene su kritične vrednosti polja za koja je procep između zona minimalan. Za veće kritične vrednosti polja, procep je veći. Za razmatrane kritične vrednosti je nađeno da je u centru zone lokalizacija stanja u različitim zonama energija najbližih ivici procepa bila slična, ali na različitim podreškama. Ovo je posledica anizotropije i male debljine strukture. Indukovani efekti su slični onima koji se sreću kod topoloških izolatora. U daljem istraživanju bi trebalo utvrditi kako magnetsko polje u ravni utiče na disperziju, što bi dalo dodatne rezultate koji bi ukazali na topološke efekte.

#### ZAHVALNICA

Ovaj rad je podržan od strane Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije 451-03-68/2022-14/200103.

## LITERATURA

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, "Electric field effect in atomically thin carbon films," *Science*, vol. 306, pp. 666-669, Oct. 2004.
- [2] A. K. Geim, K. S. Novoselov, "The rise of graphene," *Nat. Mater.*, vol. 6, no. 3, pp. 183-191, Feb. 2007.
- [3] B. Partoens, F. M. Peeters, "From graphene to graphite: Electronic structure around the K point," *Phys. Rev. B*, vol. 74, pp. 075404 1-11, Avg. 2006.
- [4] H. Liu, A. T. Neal, Z. Zhu, Z. Luo, X. Xu, D. Tománek, P. D. Ye, "Phosphorene: An Unexplored 2D Semiconductor with a High Hole Mobility," *ACS Nano*, vol. 8, no. 4, pp. 4033-4041, Mar. 2014.
- [5] W. Lu, H. Nan, J. Hong, Y. Chen, C. Zhu, Z. Liang, X. Ma, Z. Ni, C. Jin, *Nano Res*, Vol. 7, pp. 853-859, May 2014.
- [6] Y. Aierken, D. Çakir, C. Sevik, F. M. Peeters, "Thermal properties of black and blue phosphorenes from a first-principles quasiharmonic approach," *Phys. Rev. B*, vol. 92, no. 8, pp. 081408 1-5, Avg. 2015.
- [7] T. Hu and J. Hong, Anisotropic Effective Mass, "Optical Property, and Enhanced Band Gap in BN/Phosphorene/BN Heterostructures," *ACS Appl. Mater. Interfaces*, vol. 7, no. 42, pp. 23489-23495, Oct. 2015.
- [8] V. V. Arsoski, M. M. Grujić, N. A. Čukarić, M. Ž. Tadić, F. M. Peeters, "Normal and skewed phosphorene nanoribbons in combined magnetic and electric fields," *Phys. Rev. B*, vol. 96, no. 12, pp. 125434 1-11, vol. 25, no. 12, Sep. 2017.
- [9] R. Fei, V. Tran, L. Yang, "Topologically protected Dirac cones in compressed bulk black phosphorus," *Phys. Rev. B*, vol. 91, no. 19, pp. 195319 1-5, May 2015.
- [10] X-L. Qi, S-C. Zhang, "Topological insulators and superconductors", *Rev. Mod. Phys.*, vol. 83, no. 4, pp. 1057-1110, Dec. 2011.
- [11] A. N. Rudenko, S. Yuan, and M. I. Katsnelson, "Toward a realistic description of multilayer black phosphorus: From GW approximation to

large-scale tight-binding simulations," *Phys. Rev. B*, vol. 92, no. 8, pp. 085419 1-9, July 2015; Videti Erratum: A. N. Rudenko, S. Yuan, and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B*, vol. 93, no. 19, pp. 199906, May 2016.

## ABSTRACT

Tight-binding method is employed for electronic structure analysis in bilayer black phosphorous nanoribbons in presence of electric field. Due to the absence of edge states, there is a large gap in arm-chair nanoribbons in absence of an external field. An application of an electric field perpendicular to the ribbon surface decreases the gap width. At the critical value of the electric field, the gap is almost completely closed due to sharp anti-crossing between the lowest energy conduction band state and the highest energy valence band state. This behavior is characteristic in conventional topological insulators where an inversion of the zone structure is due to strong spin-orbit interaction that is not accounted for in our model. It is found that in thin nanoribbons there is a strong coupling between conduction and valence band states due to anisotropy despite the electrons are holes being pushed to the opposite sides of the slab by an external electric field. Increase of the perpendicular electric field above critical value results in an inversion of higher conduction and valence band states that manifests in characteristic anti-crossings.

### Inducing the Topological-like States in Bilayer Phosphorene Nanoribbons by Perpendicular Electric Field

Vladimir V. Arsoski, Milan Ž. Tadić