Document Type: Full length research Paper
Pages: 81-92

Investigating the Unique Properties of Twisted Trilayer Graphene for Advanced Electronic Applications

Fatemeh Nemati[1*], Reza Habibpourbisafar[2]

[1] Department of Physics, Faculty of science and new technologies, Urmia University of Technology, Urmia, Iran

[2] Departments of Physics, Condensed Matter Group, Faculty of physics, Tabriz university, Tabriz, Iran

Received: 12.02.2025 Final revised: 13.10.2025 Accepted: 30.11.2025 Published on-Line: 31.12.2025

Doi:10.22055/jrmbs.2025.20480

Abstract

This research paper investigates the properties and applications of twisted trilayer graphene, characterized by its unique electronic properties. By employing advanced theoretical frameworks and computational methods, we explore the effects of the twisting angle value, rotation direction, and displacement field on the electronic band structure of twisted trilayer graphene. The density of states was also used to confirm the results. The study reveals significant insights into the emergence of flat bands and correlated electron phenomena, which are pivotal for understanding the behavior in these systems. Furthermore, we discuss the implications of our findings for future experimental and theoretical investigations, highlighting the potential of twisted trilayer graphene in next-generation electronic devices and quantum materials.

Keywords: Twisted trilayer graphene, Moire pattern, Band structure, Density of states

This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

بررسی خواص منحصر به‌فرد گرافن سه لایه پیچ‌خورده برای کاربردهای الکترونیکی پیشرفته

فاطمه نعمتی*[۱،]، رضا حبیب‌پور بی‌صفر[۲]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم و فناوری‌های نوین، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه

[۲] گروه فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز

دریافت: ۱٤۰۳/۱۱/۲٤ ویرایش نهائی: ۱٤۰٤/۰۷/۲۱ پذیرش: ۱٤۰٤/۰۹/۰۹ انتشار بر خط: ۱٤۰٤/۱۰/۱۰

Doi:10.22055/jrmbs.2025.20480

چکیده

این مقاله تحقیقاتی به‌بررسی خواص و کاربردهای گرافن سه لایهٔ پیچ‌خورده، یک ماده دو بعدی جدید می‌پردازد که با خواص الکترونیکی و ساختاری منحصر به‌فرد آن مشخص می‌شود. با استفاده از چارچوب‌های نظری پیشرفته و روش‌های محاسباتی، ما اثرات زوایای پیچش، جهت دوران و میدان جابه‌جائی را بر ساختار نوار الکترونیکی بررسی می‌کنیم. همچنین از چگالی حالت‌ها نیز جهت تأیید نتایج استفاده می‌گردد. این مطالعه بینش‌های قابل توجهی را در مورد ظهور نوارهای تخت و پدیده‌های الکترونی همبسته نشان می‌دهد که برای درک رفتار گرافن سه لایهٔ پیچ‌خورده در این سامانه‌ها بسیار مهم هستند. علاوه‌بر این، پیامدهای یافته‌های خود را برای تحقیقات تجربی و نظری آینده مورد بحث قرار می‌دهیم و پتانسیل ساختار گرافن سه لایهٔ پیچ‌خورده را در دستگاه‌های الکترونیکی نسل بعدی و مواد کوآنتومی برجسته می‌کنیم.

کلیدواژگان: گرافن سه لایه پیچ‌خورده، الگوی مایر، ساختار نواری، چگالی حالت‌ها

مقدمه

گرافن سه‌لایهٔ پیچ‌خورده[۱] که اخیراً توجه زیادی را در زمینهٔ فیزیک مادهٔ چگال و علم مواد به‌خود جلب کرده است، به‌عنوان یک پیشرفت شگرف در مطالعه مواد دوبعدی مطرح می‌شود. این ساختار نوین شامل سه‌لایه گرافن است، ماده‌ای که به‌خاطر خواص الکتریکی، حرارتی و مکانیکی برجسته‌اش شناخته شده است. مفهوم پیچش در گرافن چندلایه با کشف زاویه‌های جادویی [1] در گرافن دولایه رواج یافت. زوایای پیچش مختلف در گرافن سه‌لایه پیچ‌خورده منجر به‌ظهور نوارهای الکترونیکی تخت[۲] و اثرات همبستگی قوی الکترون می‌شود که امکان تحقق حالت‌های ابررسانایی [2]، فرومغناطیس [3] و پدیده‌های کوآنتومی گوناگون را فراهم می‌کند. تنظیم زاویهٔ پیچش در گرافن سه‌لایه می‌تواند به‌ویژگی‌های الکترونیکی قابل‌تنظیم منجر شود که نه تنها آن را به یک کاندیدای اصلی برای مطالعات بنیادی تبدیل می‌کند، بلکه راه را برای کاربردهای بالقوه در نسل بعدی دستگاه‌های الکترونیکی و اسپینترونیک نیز هموار می‌کند [4]. تحقیقات اولیه در مورد گرافن دولایه پیچ‌خورده[۳] در حدود سال ۲۰۱۸ آغاز شد و نشان داد که زاویهٔ پیچش تقریباً ۱/۱ درجه بین لایه‌ها منجر به نوارهای تخت در طیف الکترونیکی می‌شود [5]. محققان وجود این نوارهای تخت را به‌همراه کشف فاز

1 Twisted trlayer Graphene (tTLG)
2 Flat band
3 Twisted bilayer Graphene (TBLG)

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

این مقاله تحت مجوز کریتیو کامنز تخصیص ٤.۰ بین‌المللی می‌باشد

ابررسانا در TBLG در سطوح خاصی از ناخالصی اعمالی الکترون که با دمای انتقال نسبتاً بالا مشخص می‌شود، تأیید کرده‌اند [6]. علاوه بر این، حالت‌های عایق [7] همبستهٔ نزدیک به نقطهٔ خنثی بار برهم‌کنش‌های قوی الکترون–الکترون را نشان می‌دهد که پتانسیل TBLG برای مطالعهٔ انتقال فاز کوآنتومی و سایر پدیده‌های مرتبط را برجسته می‌کند. مدل‌های نظری، عمدتاً بر اساس تقریب‌های اتصال محکم [8] و نظریهٔ تابعی چگالی [9]، نشان داده‌اند که برهم‌کنش‌های بین‌لایه‌ای به‌طور قابل‌توجهی بر خواص الکترونیکی گرافن سه‌لایه تأثیر می‌گذارند. محققان پیامدهای میدان‌های الکتریکی خارجی بر گاف نواری را بررسی کرده‌اند و نشان داده‌اند که می‌توان آن را از صفر تا چند صد میلی‌الکترون‌ولت تنظیم کرد [10] و راه‌هایی برای کاربرد در ترانزیستورهای اثر میدانی و دستگاه‌های اپتوالکترونیکی باز کرد. مطالعات تجربی این پیش‌بینی‌های نظری را تأیید کرده‌اند و وجود نوارهای تخت در tTLG در نزدیکی تکینگی وان–هوف را نشان می‌دهند [11]. به‌طور کلی، هنگامی که زوایای پیچش متفاوت است، سامانه به‌عنوان غیر متقارن عمومی[1] طبقه‌بندی می‌شود و اساس مطالعه پدیده‌های نوظهور را تشکیل می‌دهد. این طبقه‌بندی به دو دسته تقسیم می‌شود: پیچش کایرال [1]، که در آن هر دو لایه بیرونی در یک جهت در زوایای مختلف می‌چرخند و پیچش متناوب [12]، جایی که در جهات مختلف می‌پیچند. این پیکربندی‌ها منجر به برهم‌کنش‌های بین لایه‌ای متمایز و ویژگی‌های الکترونیکی، مانند رسانایی افزایش‌یافته، پاسخ‌های نوری منحصربه‌فرد، و تشکیل الگوهای مایر می‌شوند که بر ساختار نوار الکترونیکی تأثیر می‌گذارند. گرافن سه لایه پیچ خورده، به‌دلیل تداخل بین دو الگوی مایر[2] دولایه، الگوهای مایر [13] درجه بالاتری را نشان می‌دهد.

در این پژوهش، بر اساس مدل تنگ‌بست مؤثر در فضای مومنتوم، ما به‌طور سیستماتیک ساختارهای نوار الکترونیکی و چگالی حالت‌های tTLG را در نزدیکی زاویهٔ جادویی برای پیکربندی پیچش متناوب مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

مدل و روش

در این بخش، ما مدل پیوسته هامیلتونین انرژی–پایین[3] را برای سیستم سه لایه گرافن چرخشی در حضور میدان جابه‌جایی[4] در فضای مومنتوم به‌کار خواهیم گرفت. بدین منظور، باید در ابتدا پیکربندی سه لایهٔ گرافن چرخشی را مشخص کرده و هندسه سیستم را در نظر بگیریم. همان‌طور که از طرح‌واره نشان داده شده در شکل۱ نیز مشخص است، سیستم ما متشکل از سه لایهٔ گرافن می‌باشد. در این پیکربندی، لایهٔ وسط (l=2) ثابت مانده اما لایه‌های بالا (l=1) و پایین (l=3) نسبت به لایهٔ دوم در حال پیچش با دو زاویهٔ متفاوت θ_{23} و θ_{12} می‌باشند. برای فرمول بندی مدل هامیلتونین تنگ بست مؤثر باید در ابتدا اثر پیچش را روی تک لایهٔ گرافن در نظر بگیریم. همان‌طور که می‌دانید، تک‌لایهٔ گرافن دارای ساختار شبکهٔ لانه زنبوری[5] دو بعدی بوده که از دو اتم در سلول یکه تشکیل شده است و به دو زیرشبکهٔ A و B تقسیم می‌شود. بردارهای پایه شبکه و بردارهای شبکهٔ معکوس تک‌لایهٔ گرافن

[1] General non-symmetric
[2] Moire
[3] Low-energy Continuum Hamiltonian model
[4] Displacement-field
[5] Honeycomb Lattice

به‌ترتیب به‌صورت بردارهای ستونی ماتریس‌های زیر تعریف می‌شود [14]:

$$A_0 = a_G \begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 0 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \end{bmatrix}$$
$$G_0 = 2\pi A_0^{-T} = \frac{2\pi}{a_G} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{2}{\sqrt{3}} \end{bmatrix} \quad (۱)$$

که در آن، $a_G = 2.4768\,\mathring{A}$ ثابت شبکه گرافن است. با اعمال زاویهٔ پیچش θ بر روی تک‌لایهٔ گرافن، هر لایه حول نقطهٔ کربن از زیرشبکه A چرخانده می‌شود، بردارهای پایه و معکوس به‌صورت $A_\theta = R(\theta) A_0$ و $G_\theta = R(\theta) G_0$، مشخص می‌شوند. در این دو معادلهٔ جدید، $R(\theta)$ ماتریس دوران بوده و به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$R(\theta) = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \quad (۲)$$

با توجه به‌اینکه لایهٔ دوم ثابت مانده اما لایهٔ اول با زاویه θ_{12} نسبت به لایهٔ دوم و لایهٔ سوم با زاویهٔ θ_{23} نسبت به لایهٔ دوم پیچش داده می‌شوند، به‌این ترتیب بردارهای پایهٔ شبکهٔ هر سه لایه $A_l (l = 1,2,3)$ به‌صورت $A_1 = R(-\theta_{12}) A_0$ ، $A_2 = A_0$ و $A_3 = R(\theta_{23}) A_0$، خواهدبود. بردارهای شبکهٔ معکوس هر لایه نیز از طریق عبارت $G_l = 2\pi A_l^{-T}$ محاسبه می‌گردند. علاوه بر این، با اعمال دوران لایه‌های اول و سوم روی لایه دوم، دو ابرشبکهٔ جدید M_{12} و M_{23} با الگوی جدید و تناوب متفاوت تر از تک‌لایه‌ها تشکیل می‌شود که به ابر شبکه مایر[1] معروف می‌باشد. ناحیهٔ بریلوئن ابرشبکه مایر M_{ij} بین دو لایه i و j لایهٔ i,j به‌صورت بردارهای ستونی ماتریس زیر مشخص می‌شود:

$$G_{ij} = 2\pi \left(A_j^{-T} - A_i^{-T} \right) \quad (۳)$$

و ناحیهٔ ابرشبکهٔ واقعی ناشی از دو لایه i,j نیز توسط بردارهای ستونی این ماتریس مشخص می‌شوند:

$$A_{ij} = 2\pi \left(G_{ij}^{-T} \right) \quad (٤)$$

با توجه به‌بردارهای واقعی و وارون ابرشبکه M_{ij} می‌توان به‌این نتیجه رسید که اندازهٔ طول سلول یکه مایر بین دو لایهٔ i و j به‌زوایای پیچشی مستقل θ_{23} و θ_{12} از هم وابسته بوده و از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید:

$$L_M = \frac{a_G}{\sin\theta_{ij}} \quad (۵)$$

رابطهٔ بالا نشان می‌دهد با کاهش زاویهٔ پیچش بین لایهٔ i با لایهٔ j اندازهٔ سلول ابرشبکه مایر M_{ij} افزایش یافته و در نتیجه ناحیهٔ بریلوئن مایر[2] کوچک‌تر می‌شود برای توصیف برهم‌کنش بین لایه‌ای در این ساختار، از مدل پیوستهٔ Bistritzer–MacDonald (B–M) [15] در فضای مومنتوم استفاده گردیده است. این مدل بر پایهٔ تقریب تنگ بست مؤثر برای هر لایه و با در نظر گرفتن پرش‌های بین‌لایه‌ای مؤثر بین نزدیک‌ترین همسایگی‌ها بنا شده است. در این مطالعه، برهم‌کنش‌های همبستهٔ الکترونی به‌صورت صریح در هامیلتونین وارد نشده‌اند. با این حال، مدل B–M به‌طور مؤثر توانایی بازتولید ویژگی‌های همبستگی قوی را دارد، زیرا تخت شدن باندهای انرژی در نزدیکی سطح فرمی باعث افزایش

[1] Moire Superlattice

[2] Moire Brillouin Zone(MBz)

چشمگیر چگالی حالت‌ها و در نتیجه تقویت اثرات برهم‌کنش کولنی می‌شود. بنابراین، پدیده‌های همبسته مانند حالت‌های عایق یا ابررسانایی در گرافن پیچ‌خورده از همین تخت شدن باندها ناشی می‌شوند، بدون آن‌که نیاز به واردکردن صریح هامیلتونین‌های برهم‌کنشی در فضای واقعی مانند مدل Hubbard باشد. لذا هامیلتونی سه لایه گرافن به‌صورت زیر بیان می‌شود:

$$H=\sum_{l=1}^{3}H^{l}+\sum_{l=1,2}\left(V^{l,l+1}+V^{l+1,l}\right) \qquad ۶$$

که در آن، H^{l} هامیلتونی برای لایهٔ lام و V^{ij} توصیف کننده پرش بین لایه‌ای (صرفاً بین لایه‌های مجاور) است. در این صورت [15]:

$$H^{l}=-t\sum_{R^{(l)}}c_{l,A}^{\dagger}\left(R^{(l)}\right)\Big[c_{l,B}\left(R^{(l)}\right)+ c_{l,B}\left(R^{(l)}-a_{1}^{(l)}\right)+c_{l,B}\left(R^{(l)}-a_{2}^{(l)}\right)\Big]+h.c. \qquad ۷$$

که در آن، $c_{l,\alpha}^{\dagger}$ و $c_{l,\alpha}$، عملگر خلق و نابودی فرمیونی اوربیتال α در لایهٔ l، $a_{1,2}^{(l)}$ بردارهای شبکهٔ لایهٔ lام و t پارمتر پرش بین نزدیکترین همسایگی‌ها می‌باشد. به عبارتی در این چارچوب، تنها برهم‌کنش بین نزدیک‌ترین همسایگی‌ها لحاظ شده و ضرایب پرش برای درون‌لایه و بین‌لایه بر اساس داده‌های محاسباتی و تجربی انتخاب شده‌اند. این رویکرد امکان بررسی دقیق نوارهای تخت و نقش برهم‌کنش‌های قوی الکترونی را فراهم می‌سازد. از طرفی هامیلتونی بین لایه‌ای در کوآنتش ثانی[1] به‌فرم زیر نوشته می‌شود:

$$V^{ij}=\sum_{R^{(i)},\alpha,R^{(j)},\beta}c_{i,\alpha}^{\dagger}\left(R^{(i)}\right)t_{\alpha\beta}^{ij}\left(R^{(i)},R^{(j)}\right)c_{j,\beta}^{\dagger}\left(R^{(j)}\right)$$

در حد انرژی‌های پایین [15]:

$$H=\begin{bmatrix}H^{1}(k) & T^{12} & 0\\ T^{12\dagger} & H^{2}(k) & T^{23}\\ 0 & T^{23\dagger} & H^{3}(k)\end{bmatrix} \qquad ۸$$

که در آن، بلوک‌های قطری، گرافن تک‌لایه‌ای هستند که تحت هامیلتونی بستگی قوی در پایهٔ پیچ‌خورده معرفی می‌شوند که نشان دهندهٔ پرش درون لایه‌ای می‌باشند. بلوک‌های غیرقطری نشان دهنده پرش بین لایه‌ای هستند که با فرض حد پایین انرژی، هامیلتونی بسط یافته حول نقطهٔ دیراک به‌صورت مجموعه معادلات زیر به‌دست می‌آیند:

$$\begin{aligned}\mathrm{H}^{1}(\mathrm{k})\approx \mathrm{H}_{D}^{1}(q)&=\nu_{F}\begin{bmatrix}0 & e^{i\theta_{12}}q_{+}\\ e^{-i\theta_{12}}q_{-} & 0\end{bmatrix}\\ \mathrm{H}^{2}(\mathrm{k})\approx \mathrm{H}_{D}^{2}(q)&=\nu_{F}\begin{bmatrix}0 & q_{+}\\ q_{-} & 0\end{bmatrix}\\ \mathrm{H}^{3}(\mathrm{k})\approx \mathrm{H}_{D}^{3}(q)&=\nu_{F}\begin{bmatrix}0 & e^{-i\theta_{23}}q_{+}\\ e^{i\theta_{23}}q_{-} & 0\end{bmatrix}\end{aligned} \qquad ۹$$

که در آن، $q_{\pm}=q_{x}\pm iq_{y}$ است. برای جفت‌شدگی درون لایه‌ای خواهیم داشت [15]:

$$T_{\alpha\beta}^{ij}(q^{(i)},q^{(j)})=\frac{1}{|\Gamma|}\sum_{G^{(i)},G^{(j)}}e^{iG^{(i)}\cdot r_{\alpha}^{(i)}}\tilde{t}_{\alpha\beta}^{ij}\left(k+K_{Li}+q^{(i)}+G^{(i)}\right)e^{-iG^{(i)}\cdot r_{\alpha}^{(i)}}\delta_{q^{(i)}+K_{Li}-G^{(i)},q^{(j)}+K_{Lj}-G^{(j)}} \qquad ۱۰$$

که در آن Γ، سطح سلول واحد تک‌لایه است. برای ممنتوم نزدیک نقطهٔ دیراک، از آنجایی که رابطهٔ $|q^{(i)}|,|k|\ll|K_{Li}|,|G^{i}|$ برقرار است، تقریب $\tilde{t}_{\alpha\beta}^{ij}\left(k+K_{Li}+q^{(i)}+G^{(i)}\right)\approx\tilde{t}_{\alpha\beta}^{ij}\left(K_{Li}+G^{(i)}\right)$ بهره می‌گیریم. این تقریب منجر به سرکوب تقارن حفره–ذره در مدل بستگی قوی می‌شود. با توجه به کاهش سریع پارامتر انرژی پرش($\tilde{t}(p)$) با افزایش

[1] Second-quantization

p، صرفاً به‌اولین جمع در معادلهٔ۵ اکتفا کرده که منجر به خلق معادلهٔ٦ می‌شود :

$$T_{\alpha\beta}^{ij}\left(q_i,q_j\right)=\sum_{i=1}^{3}T_{n,\alpha\beta}^{ij}\delta_{q^{(i)}-q^{(j)},-q_n^{ij}} \qquad ۱۱$$

به‌همین ترتیب خواهیم داشت:

$$T_1^{ij}=\begin{bmatrix}\omega_0 & \omega_1\\ \omega_1 & \omega_0\end{bmatrix},T_2^{ij}=\begin{bmatrix}\omega_0 & \omega_1\phi\\ \omega_1\phi & \omega_0\end{bmatrix},T_2^{ij}=\begin{bmatrix}\omega_0 & \omega_1\phi\\ \omega_1\bar{\phi} & \omega_0\end{bmatrix} \qquad ۱۲$$

که در آن، $t_{AA}^{ij}=t_{BB}^{ij}=\omega_0=0.07(eV)$، $t_{AB}^{ij}=t_{BA}^{ij}=\omega_{ab}$، $\phi=e^{\left(i\frac{2\pi}{3}\right)}$ و $\bar{\phi}=e^{\left(-i\frac{2\pi}{3}\right)}$ می‌باشند. از آنجا که مدل B–M در فضای مومنتوم بر پایهٔ بسط توابع موج حول نقاط دیراک در قالب بردارهای معکوس G_i بنا شده است، تعداد و چگالی زیرنقاط شبکهٔ براوه در هر زاویه متفاوت خواهد بود. برای زاویه‌های کوچک‌تر، فاصلهٔ بین بردارهای G_i کاهش یافته و در نتیجه، شبکهٔ مومنتوم فشرده‌تر می‌شود. این ویژگی مستقیماً بر اندازهٔ ماتریس هامیلتونی و تراکم حالت‌ها در محاسبات عددی تأثیر می‌گذارد.

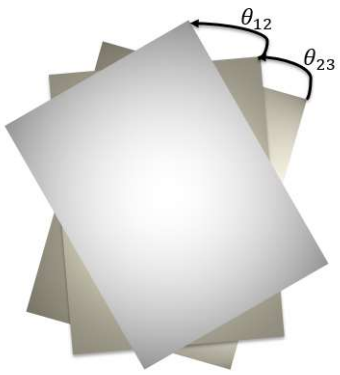
جهت بررسی بیشتر نتایج، از چگالی حالت‌های[1] انرژی استفاده می‌شود. برای مدل بستگی قوی نامتناسب[2]، به‌ازای انرژی ε صورت زیر معرفی می‌شود:

$$D(\varepsilon)=\sum_r\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\delta(\varepsilon-\varepsilon_n)\left|\psi_n(r)\right|^2 \qquad ۱۳$$

که جمع r روی تمام موقعیت‌های فضای واقعی انجام می‌پذیرد. همچنین، n معرف اندیس باند و $\psi_n(r)$ ویژه‌تابع متناظر است. به‌منظور به‌دست آوردن عددی DOS، از تابع گاؤسی برای تقریب زدن تابع δ استفاده می‌کنیم:

$$\phi_{\varepsilon,\kappa}=\frac{2\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi}\kappa}\exp\left(-4\ln 2\frac{(x-\varepsilon)^2}{\kappa^2}\right) \qquad ۱٤$$

که در آن، κ، بیشینه نصف عرض کلی[3] می‌باشد.



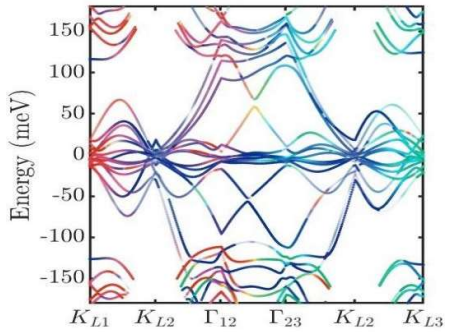
شکل۱. نمای طرح‌واره سه لایهٔ گرافن پیچ خورده تحت دو زاویه پیچش θ_{12} (زاویهٔ پیچش لایهٔ اول نسبت به لایه دوم) و θ_{23} (زاویهٔ پیچش لایهٔ سوم نسبت به لایهٔ دوم)، لایهٔ دوم بدون دوران و ثابت در نظر گرفته شده است.

بحث و نتیجه‌گیری

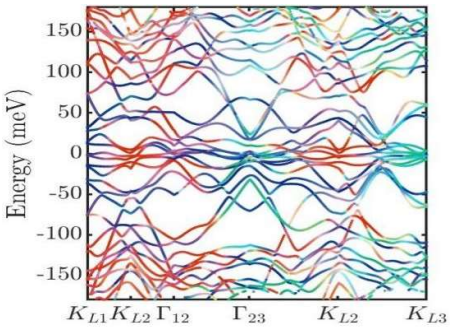
در این بخش به‌بررسی نتایج می‌پردازیم که به چند بخش تقسیم می‌شود. در مقیاس اتمی، گرافن یک پیکربندی شبکهٔ لانه زنبوری دو بعدی را نشان می‌دهد که با ویژگی‌های الکترونیکی قابل توجه مشخص می‌شود. با این حال، هنگامی که چندین لایهٔ گرافن با یک ناهماهنگی پیچشی خفیف روی هم قرار می‌گیرند، یک الگوی مایر ظاهر می‌شود که یک ابرشبکه مؤثر ایجاد می‌کند. این الگوی مایر به‌طور قابل توجهی بر عملکرد امواج الکترونیکی و باندهای انرژی ماده تأثیر می‌گذارد. لذا عوامل مؤثر بر شکل‌گیری شبکهٔ مایر، مورد بررسی قرار خواهند گرفت.

[1] Density of state (DOS)
[2] Incommensurate
[3] Full-width-half-maximum

الف



ب



شکل۲. ساختار نواری سه لایه گرافن پیچ‌خورده، $\omega_{ab} = 0.11(eV)$، $E = 0(V/nm)$ و الف: $\theta_{12} = -2^\circ$ و $\theta_{23} = 2.1^\circ$، ب: $\theta_{12} = -1.02^\circ$ و $\theta_{23} = 2.1^\circ$

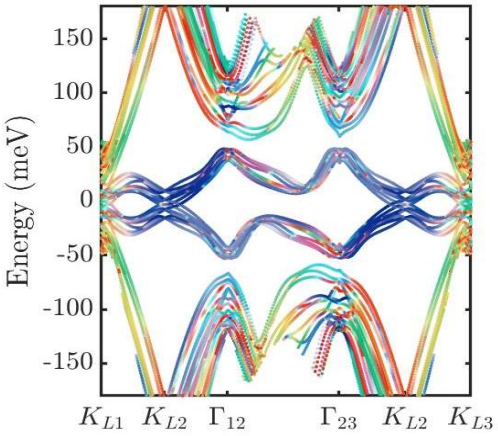
تأثیر زاویهٔ پیچش

تأثیر زاویهٔ پیچش در شکل۲ نشان داده شده است. این نمودار ساختار نواری tTLG را نشان می‌دهد و نشان می‌دهد که چگونه سطوح انرژی الکترونیکی (محور y، برحسب meV) با تکانه (محور x، برچسب‌گذاری شده با نقاط تقارن بالا در ناحیه بریلوین) تغییر می‌کند. زاویهٔ پیچش در tTLG، نقش مهمی در تعیین ساختار نوار الکترونیکی آن و خواص کوآنتومی حاصل دارد. همان‌طور که از شکل۲ مشاهده می‌شود، کاهش زاویهٔ پیچش موجب تغییر قابل توجه در ساختار نوار الکترونیکی tTLGمی‌شود. این تغییر در واقع بازتاب مستقیم کوچک شدن MBZ با کاهش زاویه است. در زاویه‌های کوچک‌تر، طول بردارهای شبکهٔ معکوس کاهش یافته و زیرنقطه‌های شبکهٔ براوه به‌صورت متراکم‌تر در فضای مومنتوم توزیع می‌شوند. این فشردگی در فضای k سبب افزایش چگالی حالت‌ها در انرژی‌های پایین و ظهور نوارهای تخت در نزدیکی سطح فرمی می‌گردد. در نتیجه، رفتار سیستم از حالت پراکندگی آزاد به ناحیهٔ همبستهٔ قوی منتقل می‌شود. این روند در مقایسهٔ شکل۲الف و ب به‌وضوح دیده می‌شود: در زاویهٔ بزرگ‌تر، باندها پراکنده‌تر و MBZوسیع‌تر است، در حالی‌که برای زاویهٔ کوچک‌تر، باندها به‌هم نزدیک و MBZفشرده‌تر است که نشان‌دهندهٔ افزایش چگالی زیرنقاط شبکهٔ براوه است. در tTLG هایی با شرط $\theta_{12} \neq -\theta_{23}$، سامانه دارای دو الگوی مایر متفاوت است که از تداخل لایهٔ اول و دوم و لایه دوم و سوم سرچشمه می‌گیرد [16]. این دو تناوب عموماً نامتناسب هستند و ماهیت شبه‌بلوری را در سامانه ایجاد می‌کنند [17]. در شکل۲الف، ظهور نوارهای تخت نزدیک به انرژی صفر (آبی تیره در صفر میلی ولت) به‌وضوح مشخص است که نشان دهنده حالت‌های الکترونیکی با انرژی جنبشی بسیار پایین می‌باشد [18]. در tTLG، چنین نوارهای تختی به Tهمبستگی‌های الکترونی قوی [19] مرتبط هستند که به‌طور بالقوه منجر به‌ابررسانایی یا حالت‌های عایق همبسته می‌شوند. باندهای با انرژی بالاتر پراکندگی بیشتری دارند (منحنی‌های دور از انرژی صفر)، به‌این معنی که الکترون‌ها در این حالت‌ها بیشتر شبیه ذرات آزاد رفتار می‌کنند [20]. این نوارها به رفتار عادی فلزی در محدودهٔ انرژی خاصی کمک می‌کنند. همچنین، برخی از باندها متقاطع یا تقریباً لمس می‌شوند، که نشان دهندهٔ نقاط دیراک است یا از عبور اجتناب می‌شود [21]. این نشان‌دهندهٔ شبه‌ذرات بدون جرم یا تقریباً بدون جرم است که مشخصه سامانه‌های مبتنی بر گرافن است. وجود نوارهای بسیار نزدیک به‌هم از برهم‌کنش بین سه لایهٔ گرافن ناشی می‌شود.

زوایای پیچش کوچکتر(شکل۲ب) ابرسلول‌های مایر بزرگتر را ایجاد می‌کند [22] که منجر به همبستگی‌های الکترونیکی قوی‌تر و باندهای تخت‌تر می‌شود و زوایای پیچش بزرگتر (شکل۲الف) جلوه‌های مایر را کاهش می‌دهند، به‌نوارهای پراکنده‌تر اجازه می‌دهند. به‌عبارتی، با مقایسه شکل۲الف و ب مشخص می‌شود که درحالی‌که در شکل۲الف، نوارهای انرژی دارای فاصلهٔ نسبتاً خوبی هستند (در نوارهای انرژی همپوشانی کمتری وجود دارد، یعنی هیبریداسیون بین لایه‌ای ضعیف‌تر)، در شکل۲ب، باندهای بیشتری در سراسر طیف انرژی ظاهر می‌شوند که نشان‌دهندهٔ برهم‌کنش‌های بین لایه‌ای قوی‌تر است (افزایش چگالی حالت‌ها نشان‌دهندهٔ ساختار الکترونیکی پیچیده‌تری است). لذا با کاهش زاویهٔ پیچش، اثرات مایر برجسته‌تر می‌شوند، که منجر به یک سامانهٔ الکترونیکی قوی با پتانسیل ابررسانایی پیشرفته می‌شود. این توضیح می‌دهد که چرا «زاویهٔ جادویی» در گرافن (~ ۱/۱ درجه [18]) خاص است. این ویژگی اثرات همبستگی را به حداکثر می‌رساند و پدیده‌های کوآنتومی عجیب و غریب را فعال می‌کند. شکل۲ب به‌ناحیهٔ زاویهٔ جادویی نزدیک‌تر است و آن را به یک نامزد امیدوارکننده‌تر برای ابررسانایی تبدیل می‌کند. لازم به‌ذکر است که در این مطالعه، تمرکز اصلی بر روی بررسی ساختار نواری و چگالی حالت‌های انرژی در گرافن سه‌لایه پیچ‌خورده است. هرچند مشاهدهٔ نوارهای تخت در نزدیکی سطح فرمی نشانه‌ای از حضور برهم‌کنش‌های الکترونی قوی و پیش‌زمینه‌ای برای بروز فازهای ابررسانا به‌شمار می‌رود، اما خود به‌تنهایی معرف فاز ابررسانایی نیست. شکل‌گیری نوارهای تخت موجب افزایش قابل توجه چگالی حالت‌ها در انرژی فرمی می‌شود که یکی از پیش‌شرط‌های اساسی برای ظهور جفت‌شدگی‌های الکترونی نوع BCSیا پدیده‌های همبستهٔ قوی در این سیستم‌ها است. برای اثبات قطعی خاصیت ابررسانایی، لازم است کمیت‌هایی نظیر تابع همبستگی جفتی، پارامتر شکاف انرژی و پاسخ برهم‌کنش الکترون–فونون محاسبه شوند، که خارج از محدودهٔ مدل تک‌ذره‌ای حاضر است و به مطالعات آینده واگذار می‌شود. نتایج این پژوهش با وجود این محدودیت، به‌روشنی شرایط الکترونی لازم برای وقوع فاز ابررسانا را از دیدگاه باند تخت و همبستگی تقویت‌شده فراهم می‌کند.

تأثیر جهت دوران

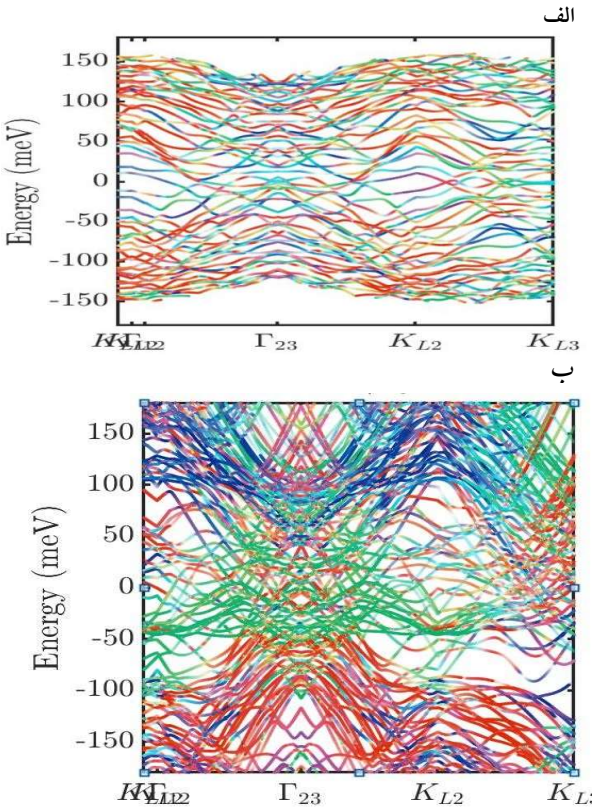
به‌منظور مطالعهٔ تأثیر جهت دوران بر روی شکل‌گیری فضای مایر در tTLG، با ثابت نگه داشتن شرایط شکل۲الف و صرفاً تغییر جهت دوران لایهٔ اول نسبت به لایهٔ دوم ($\theta_{12} = -2^\circ$)، شکل۳ رسم گردید. همان‌طور که از شکل۳ مشخص است، تغییر جهت دوارن از حالت پادساعتگرد (شکل۲الف) به ساعتگرد (شکل۳) منجر به تغییر قابل توجهی در ساختار باند انرژی tTLG می‌شود به‌گونه‌ای که حول انرژی صفر، نوارهای تخت ناپدید شده‌اند و شکاف انرژی پدیدار شده است. در نتیجه، پدیدهٔ ناپدید شدن ساختار نوار تخت در tTLG، به‌دلیل تغییر در جهت زاویه چرخش، وابستگی عمیق رفتارهای الکترونیکی به پیچیدگی‌های هندسی را در بر می‌گیرد. درک این رابطه نه‌تنها چارچوب نظری پیرامون مواد گرافن را غنی می‌کند، بلکه تلاش‌های آزمایشی آینده را با هدف دستکاری و بهینه‌سازی خواص الکترونیکی مواد دو بعدی راهنمایی می‌کند.



شکل۳. ساختار نواری سه لایه گرافن پیچ‌خورده، $\omega_{ab} = 0.11(eV)$ ، $E = 0(V/nm)$ و $\theta_{12} = 2^\circ$ و $\theta_{23} = 2.1^\circ$

تأثیر میدان جابجائی

در این راستا، شکل٤(الف و ب) رسم گردید. اخیراً با اعمال میدان‌های الکتریکی عمودی، یک عایق همبسته و ابررسانایی در گرافن سه‌لایه ABC روی نیترید بور شش ضلعی مشاهده شده است [23]. مطالعات نشان می‌دهد که، گرافن تک‌لایه دارای نوارهای انرژی پراکندهٔ خطی است که هیچ وابستگی به‌میدان جابه‌جایی نشان نمی‌دهد. در مقابل، گرافن دو لایه با چیدمان برنال[1] پراکندگی نوار سهموی را نشان می‌دهد و باز شدن شکاف در نقطهٔ خنثی بار می‌تواند تحت میدان‌های جابه‌جایی القا شود [12,24]، لذا شکاف به‌حداقل مقدار خود نزدیک می‌شود، و یک ساختار نواری به‌شکل سومبررو[2] را نشان می‌دهد، که تشکیل و تنظیم باند تخت را تسهیل می‌کند که برای برای دو تا گرافن دولایه پیچ خورده[3] نشان داده شده است [24]. به‌عبارتی با مقایسه شکل٤ (الف و ب) مشخص می‌شود که اعمال میدان جابه‌جایی سبب خلق فازهای همبسته در tTLG می‌شود که قبلاً در TDBG اثبات شده است [7].



شکل٤. ساختار نواری سه لایه گرافن پیچ‌خورده، $\theta_{12} = -0.2^\circ$، $\theta_{23} = 2.1^\circ$، $\omega_{ab} = 0.2(eV)$، الف: $E = 0(V/nm)$، ب: $E = 0.1(V/nm)$

چگالی حالت‌ها

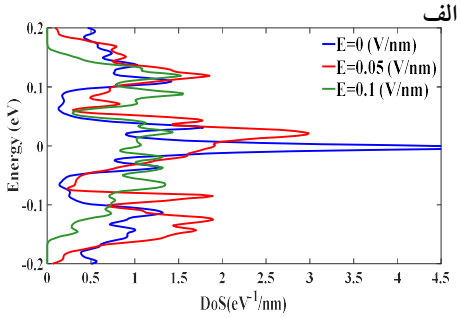
چگالی حالت‌ها به‌ازای تغییرات میدان جابه‌جائی و تغییرات ω_{ab} رسم شده است. شکل۵الف، نشان دهنده چگالی حالت‌های انرژی به‌ازای سه میدان جابه‌جایی متفاوت است. منحنی آبی ($E = 0\left(\frac{V}{nm}\right)$)، این منحنی نشان‌دهنده DOS بدون میدان الکتریکی است که

[1] Bernal-stacked bilayer graphene
[2] Sombrero-shaped band structure
[3] Twisted double-bilayer graphene (TDBG)

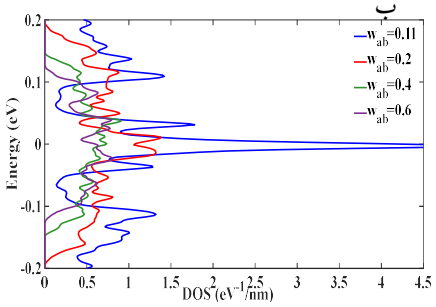
شکل‌گیری آن در مرجع [25] به‌ازای $\omega_{ab}=0.11(eV)$ در دولایهٔ گرافن نشان داده شده است. مقدار ماکزیمم DOS، نشان‌دهندهٔ چگالی بالای حالت‌های موجود در سطح فرمی (مرجع انرژی صفر) است. منحنی قرمز ($E=0.05\left(\frac{V}{nm}\right)$)، این منحنی یک جابه‌جایی کوچک در DOS را نشان می‌دهد، با اوج کمی کاهش یافته در مقایسه با منحنی آبی. این نشان می‌دهد که میدان الکتریکی بر توزیع حالت‌ها تأثیر می‌گذارد. منحنی سبز ($E=0.1\left(\frac{V}{nm}\right)$)، منحنی با بزرگترین میدان الکتریکی، جابه‌جایی بارزتری را در DOS نشان می‌دهد. نقطهٔ اوج بیان‌شده در $E=0$ بیشتر کاهش می‌یابد و جابه‌جا می‌شود، و شکل کلی منحنی تغییر می‌کند، که منعکس کنندهٔ تأثیر قوی‌تر میدان جابه‌جائی بر ساختار الکترونیکی است.

شکل ۵ب، نشان می‌دهد که چگونه چگالی حالت‌ها با افزایش ω_{ab} تحول می‌یابد. روند اولیه نشان می‌دهد که برای مقادیر کوچک ω_{ab}، DOS بیشتر در نزدیکی سطح فرمی متمرکز است، در حالی‌که برای ω_{ab} بزرگ، گسترده‌تر می‌شود. این می‌تواند نشان‌دهندهٔ گذار از یک حالت الکترونیکی موضعی‌تر به یک سامانه غیرموضعی باشد.

الف



ب



شکل ۵. چگالی حالت‌های انرژی، $\theta_{12}=-1.02^{\circ}$ ، $\theta_{23}=2.1^{\circ}$ الف: برای میدان‌های جابجائی متغیر، $\omega_{ab}=0.11(eV)$ ب: برای مقادیر متغیر ω_{ab} در غیاب میدان جابجائی.

جمع‌بندی

در این تحقیق، ما به‌طور کامل خواص منحصر به‌فرد گرافن سه لایهٔ پیچ خورده و کاربردهای بالقوه آن در دستگاه‌های الکترونیکی پیشرفته را بررسی کرده‌ایم. یافته‌های ما چندین جنبه کلیدی را برجسته می‌کند. زوایای پیچش به‌طور قابل توجهی بر ساختار باند الکترونیکی tTLG تأثیر می‌گذارد و منجر به‌ظهور نوارهای تخت می‌شود. این پدیده برای درک رفتار ابررسانایی مشاهده شده در این مواد بسیار مهم است. مطالعهٔ ما نشان می‌دهد که پدیده‌های الکترونی مرتبط در tTLG برای توسعه ابررسانایی حیاتی هستند. برهم‌کنش بین باندهای تخت و همبستگی‌های الکترونی زمینه‌ای غنی را برای تحقیقات آینده در مورد مواد ابررسانا نشان می‌دهد. لذا در کارهای آینده،

می‌توان به‌بررسی مؤثر ابررسانایی پرداخت. به‌طور خلاصه، بررسی گرافن سه لایهٔ پیچ‌خورده نه تنها درک ما از خواص اساسی آن را افزایش می‌دهد، بلکه راه‌هایی را برای کاربردهای نوآورانه در علم الکترونیک و مواد باز می‌کند. یافته‌های ارائه شده در اینجا به‌عنوان پایه‌ای برای مطالعات آینده با هدف مهار ویژگی‌های منحصر به‌فرد tTLG برای کاربردهای عملی عمل می‌کند.

مرجع‌ها

[1] J.M. Park, Y. Cao, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Jarillo-Herrero, Tunable strongly coupled superconductivity in magic-angle twisted trilayer graphene, Nature 590 (2021). https://doi.org/10.1038/s41586-021-03192-0.

[2] H. Kim, Y. Choi, C. Lewandowski, A. Thomson, Y. Zhang, R. Polski, K. Watanabe, T. Taniguchi, J. Alicea, S. Nadj-Perge,Evidence for unconventional superconductivity in twisted trilayer graphene, Nature 606 (2022). https://doi.org/10.1038/s41586-022-04715-z.

[3] C. Repellin, Z. Dong, Y.H. Zhang, T. Senthil, Ferromagnetism in Narrow Bands of Moiré Superlattices, Phys. Rev. Lett. 124 (2020).https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.124.187601.

[4] Y. Liu, J. Wang, S. Kim, H. Sun, F. Yang, Z. Fang, N. Tamura, R. Zhang, X. Song, J. Wen, B.Z. Xu, M. Wang, S. Lin, Q. Yu, K.B. Tom, Y. Deng, J. Turner, E. Chan, D. Jin, R.O. Ritchie, A.M. Minor, D.C. Chrzan, M.C. Scott, J. Yao, Helical van der Waals crystals with discretized Eshelby twist, Nature 570 (2019). https://doi.org/10.1038/s41586-019-1308-y.

[5] L. Zou, H.C. Po, A. Vishwanath, T. Senthil, Band structure of twisted bilayer graphene: Emergent symmetries, commensurate approximants, and Wannier obstructions, Phys. Rev. B 98 (2018). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.085435.

[6] D. V. Chichinadze, L. Classen, A. V. Chubukov, Nematic superconductivity in twisted bilayer graphene, Phys. Rev. B 101 (2020). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.224513.

[7] G.W. Burg, J. Zhu, T. Taniguchi, K. Watanabe, A.H. MacDonald, E. Tutuc, Correlated Insulating States in Twisted Double Bilayer Graphene, Phys. Rev. Lett. 123 (2019). https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.197702.

[8] J. Cao, M. Wang, S.F. Qian, C.C. Liu, Y. Yao, Ab initio four-band Wannier tight-binding model for generic twisted graphene systems, Phys. Rev. B 104 (2021).https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.L081403.

[9] A. Vela, M.V.O. Moutinho, F.J. Culchac, P. Venezuela, R.B. Capaz, Electronic structure and optical properties of twisted multilayer graphene, Phys. Rev. B 94 (2018). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.155135.

[10] S. Talkington, E.J. Mele, Electric-field-tunable band gap in commensurate twisted bilayer graphene, Phys. Rev. B 107 (2023). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.L041408.

[11] X. Chen, L. Wang, J. Ishizuka, R. Zhang, K. Nogaki, Y. Cheng, F. Yang, Z. Chen, F. Zhu, Z. Liu, J. Mei, Y. Yanase, B. Lv, Y. Huang, Coexistence of near- EF Flat Band and Van Hove Singularity in a Two-Phase Superconductor, Phys. Rev. X 14 (2024). https://doi.org/10.1103/PhysRevX.14.021048.

[12] E. Khalaf, A.J. Kruchkov, G. Tarnopolsky, A. Vishwanath, Magic angle hierarchy in twisted graphene multilayers, Phys. Rev. B 100 (2019). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.085109.

[13] A. Dunbrack, J. Cano, Intrinsically multilayer moiré heterostructures, Phys. Rev. B 107 (2023). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.235425.

[14] J. Attig, J. Park, M.M. Scherer, S. Trebst, A. Altland, A. Rosch, Universal principles of moiré band structures, 2D Mater. 8 (2021).https://doi.org/10.1088/2053-1583/ac1cf0.

[15] Z. Zhu, S. Carr, D. Massatt, M. Luskin, E. Kaxiras, Twisted Trilayer Graphene: A Precisely Tunable Platform for Correlated Electrons, Phys. Rev. Lett. 125 (2020). https://doi.org/10.1103/PHYSREVLETT.125.11

6404.

[16] Z. Zhu, P. Cazeaux, M. Luskin, E. Kaxiras, Modeling mechanical relaxation in incommensurate trilayer van der Waals heterostructures, Phys. Rev. B 101 (2020).https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.224107.

[17] A. Uri, S.C. de la Barrera, M.T. Randeria, D. Rodan-Legrain, T. Devakul, P.J.D. Crowley, N. Paul, K. Watanabe, T. Taniguchi, R. Lifshitz, L. Fu, R.C. Ashoori, P. Jarillo-Herrero, Superconductivity and strong interactions in a tunable moiré quasicrystal, Nature 620 (2023). https://doi.org/10.1038/s41586-023-06294-z.

[18] Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, P. Jarillo-Herrero, Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices, Nature 556 (2018).https://doi.org/10.1038/nature26160.

[19] N. Maksimovic, R. Day, A. Liebman-Peláez, F. Wan, N.H. Jo, C. Jozwiak, A. Bostwick, E. Rotenberg, S. Griffin, J. Singleton, J.G. Analytis, Strongly correlated itinerant magnetism near superconductivity in NiTa4Se8, Phys. Rev. B 106 (2022). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.224429.

[20] V.M. Silkin, J. Zhao, F. Guinea, E. V. Chulkov, P.M. Echenique, H. Petek, Image potential states in graphene, Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys. 80 (2009). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.121408.

[21] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, The electronic properties of graphene, Rev. Mod. Phys. 81 (2009). https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109.

[22] T. Necio, M. Birowska, Supercell-core software: A useful tool to generate an optimal supercell for vertically stacked nanomaterials, AIP Adv. 10 (2020). https://doi.org/10.1063/5.0023984.

[23] G. Chen, L. Jiang, S. Wu, B. Lyu, H. Li, B.L. Chittari, K. Watanabe, T. Taniguchi, Z. Shi, J. Jung, Y. Zhang, F. Wang, Evidence of a gate-tunable Mott insulator in a trilayer graphene moiré superlattice, Nat. Phys. 15 (2019). https://doi.org/10.1038/s41567-018-0387-2.

[24] E. V. Castro, K.S. Novoselov, S. V. Morozov, N.M.R. Peres, J.M.B.L. Dos Santos, J. Nilsson, F. Guinea, A.K. Geim, A.H.C. Neto, Biased bilayer graphene: Semiconductor with a gap tunable by the electric field effect, Phys. Rev. Lett. 99 (2007). https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.216802.

[25] J.H. Wilson, Y. Fu, S. Das Sarma, J.H. Pixley, Disorder in twisted bilayer graphene, Phys. Rev. Res. 2 (2020). https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.023325.