



# جریان‌های خالص اسپینی و قطبیده اسپینی در مولکول بنزن متصل شده به سه رابط گرافینی

نسترن فرشچی<sup>۱</sup> | مهدی اسماعیل زاده<sup>۲\*</sup> | لیلا اسلامی<sup>۱</sup> | سید محمد الهی<sup>۱</sup> | الهام دارابی<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup> گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات، تهران، ایران.

<sup>۲</sup> گروه فیزیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

**چکیده:** در این پژوهش، با استفاده از روش نظری تابع گرین جریان‌های وابسته به اسپین در پیوندگاه بنزنی مورد بررسی قرار گرفته است. پیوندگاه مولکولی، به سه نانونوار گرافینی نیم‌نامتناهی، تحت عنوان رابط‌های خروجی متصل شده است. به منظور شکستن تبهگنی الکترون‌ها با حالت‌های اسپینی متفاوت، میدان مغناطیسی تبادلی بر پیوندگاه مولکولی اعمال می‌شود. نتایج نشان می‌دهند که با انتخاب مناسب هندسه‌ی ساختار و همچنین، با تنظیم پتانسیل‌های شیمیایی، جریان اسپینی خالص و همچنین جریان اسپینی به‌طور کامل قطبیده، در یکی از رابط‌های خروجی ایجاد می‌شوند. مزیت بکارگیری مولکول بنزن در مرکز پیوندگاه پیدایش جریان خالص اسپینی در ولتاژهای متفاوت است. در ادامه، جداسازی فضایی جریان‌های قطبیده اسپینی در پیوندگاه بنزنی بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهند با در نظر گرفتن ساختار دیگری از پیوندگاه بنزنی و تنظیم مجدد پتانسیل‌های شیمیایی و همچنین، شدت و موقعیت میدان مغناطیسی تبادلی، جریان غیرقطبیده ورودی به جریان‌های خروجی به‌طور کامل قطبیده‌ی اسپینی تبدیل می‌شود، به طوری‌که جریان‌های قطبیده‌ی عبوری از دو رابط خروجی دارای اسپین‌های متضاد هستند.

**واژگان کلیدی:** پیوندگاه مولکولی، مولکول بنزن، جریان خالص اسپینی، جریان قطبیده اسپینی، نانونوار گرافینی.

mahdi@iust.ac.ir

بنیادین اسپینترونیک هستند [۶]. لازمه‌ی رسیدن به ادوات اسپینترونیک از جمله فیلترهای اسپینی، ترانزیستورهای اسپینی و حافظه‌های تک اسپینی و ...، تولید جریان‌های اسپینی است [۷ و ۸]. در کنار این مسئله، مطالعات زیادی در مورد ادوات مولکولی انجام شده است، زیرا ادوات مولکولی به دلیل اندازه کوچک می‌توانند به‌عنوان عناصر بنیادی در الکترونیک و نانوالکترونیک استفاده شوند [۹ و ۱۰]. آویرام و راتیر در سال

## ۱- مقدمه

طراحی و ساخت ادوات اسپینی شامل فیلتر اسپینی، جداسازی و وارون کردن اسپین از موضوعات جذاب اسپینترونیک هستند [۵-۱]. از طرفی راهی برای بدست آوردن جریان‌های اسپینی انتخابی و تولید جریان اسپینی خالص از طریق پیوندگاه از مباحث

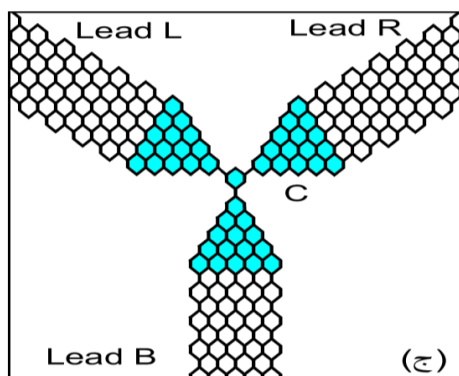
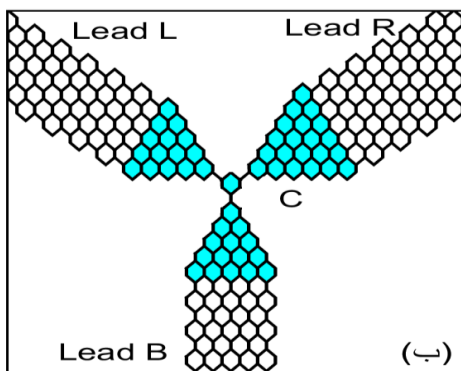
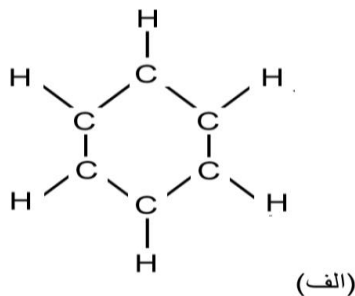
۱۹۷۴ با در نظر گرفتن تک مولکول به عنوان بلوک پایه، برای نخستین بار قطعه مولکولی پیشنهاد دادند [۱۱]. در کاری تجربی که در سال ۱۹۹۷ توسط رید و همکارانش ارائه شد، به بررسی ترابرد بار با مولکول ارگانیک پرداختند، به طوریکه مولکول بنزن با گروه‌های تیول به دو رابط از جنس طلا متصل بود [۱۲]. در ادامه پژوهشگران، چندین روش محاسباتی برای مطالعه‌ی نظری ترابرد مولکولی ارائه دادند [۱۵-۱۳]. از طرف دیگر، در حوزه نانوالکترونیک، تولید ساختار گرافین توجه پژوهشگران زیادی را به خود جلب کرده است [۱۶ و ۱۷]. دلیل این امر، تحرک پذیری باری بالا و طول زمان واهلش اسپینی زیاد الکترون‌ها در گرافین است [۱۸]. برای ساخت نانونوارهای گرافینی، می‌توان از روش لیتوگرافی گرافین استفاده کرد [۱۹]. بر پایه‌ی نانو نوارهای گرافینی، قطعات چندپایانه‌ای گرافینی، نقشی اساسی در مدارهای الکترونیک ایفا می‌کنند [۲۰]. برای مثال، اندریوتیس و همکارانش در سال ۲۰۰۸، ویژگی ترابرد الکترونی نانو نوار گرافینی سه پایانه‌ای را مورد بررسی قرار دادند [۲۱]. در این کار آن‌ها نشان دادند که ویژگی ترابرد به ویژگی هندسه‌ی ساختار بستگی دارد. در سال ۲۰۱۱، هنگ لی و همکارانش پیوندگاه گرافینی سه پایانه‌ای را مطالعه کردند [۲۲]. آن‌ها بدین نتیجه رسیدند که ترابرد قطبیده‌ی اسپینی در نزدیکی و یا دور از نقطه‌ی دیراک ایجاد می‌شود. از سوی دیگر، مطالعات زیادی برای ایجاد ترابرد وابسته به اسپین، جریان‌های قطبیده‌ی اسپینی و فیلترهای اسپینی در پیوندگاه‌های چندپایانه‌ای با بکارگیری اثر تماس مغناطیسی و میدان تبدالی انجام شده است [۲۵-۲۳]. به عنوان مثال، در پژوهشی که توسط اسلامی و همکارانش در سال ۲۰۱۴ انجام شد، اثر تماس مغناطیسی بر ترابرد وابسته به اسپین و همچنین، تجمع اسپین در سامانه‌ی متصل به سه رابط، مورد مطالعه قرار گرفت [۲۶]. آن‌ها نشان دادند، در شرایطی که گشتاورهای مغناطیسی موازی هستند، این قطعه می‌تواند به عنوان فیلتر اسپین عمل کند. علاوه بر این، در جدیدترین پژوهشی که توسط گنگلی و همکارانش انجام شده است، در نانو نوار گرافینی سه پایانه‌ای، فیلتر اسپینی مورد مطالعه قرار گرفته است [۲۷]. آن‌ها پیشنهاد دادند که با استفاده از چنین ساختار سه پایانه‌ای می‌توان از منبع غیرقطبیده، به صورت همزمان در دو رابط خروجی فیلتر اسپینی انجام داد و نسبت به قطعاتی که دو

پایانه دارند، این ساختار می‌تواند با بازدهی بالاتری فیلتر اسپینی را انجام دهد.

پیشرفت‌های اخیر در دستکاری مولکول‌های منفرد، این امکان را فراهم می‌سازد تا بتوان مولکول‌ها را به رابط‌ها متصل کرد [۱۲ و ۲۸]. در میان انواع مولکول‌ها، مولکول‌هایی جهت اتصال به رابط‌ها مناسب‌تر هستند که پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال شده‌ی آن‌ها در مقایسه با سایر مولکول‌ها در انرژی‌های پایین‌تری قرار گرفته باشند [۲۹]. در مورد پیوندگاه‌های گرافینی چندپایانه‌ای که در آن مولکول به سه پایانه متصل می‌شود، مطالعاتی توسط چندین پژوهشگر انجام شده است [۳۰-۳۲]. هرچند که بخش عمده پژوهش‌هایی که بر پل‌های مولکولی چند پایانه انجام گرفته، به موضوع جریان چرخشی اختصاص یافته، افزون‌بر این، رابط‌ها به صورت دوبعدی در نظر گرفته نشده‌اند [۳۳-۳۶]. برای مثال، در پژوهشی، پترا و همکارانش در حلقه مولکولی که بین رابط‌های سه‌بعدی قرار گرفته بود، جریان چرخشی تولید کردند [۳۷]. آن‌ها نشان دادند که در چنین سامانه‌ای مقادیر ترابرد، جریان پیوندگاه و همچنین، میدان مغناطیسی که در مرکز حلقه ایجاد می‌شود را می‌توان با تنظیم جهت و موقعیت رابط‌ها، تغییر داد.

در مقایسه با رابط‌های فلزی، رابط‌هایی از جنس گرافین، در پیوندگاه‌های مولکولی مفیدتر هستند، علت این امر تحرک پذیری الکترونی و زمان واهلش اسپینی بالا در گرافین است [۳۸ و ۳۹]. در این مقاله نانونوارهای گرافینی به عنوان رابط در نظر گرفته می‌شود و جریان‌های باری و اسپینی در پیوندگاه مولکولی بررسی می‌شود، به طوری که در مرکز این پیوندگاه، مولکول بنزن قرار دارد. برای اتصال مولکول بنزن به رابط گرافین مانند رابط طلا نیاز به عناصر واسط مانند گوگرد نیست که از مزایای این پیوندگاه است. در این پژوهش، برای به دست آوردن ترابرد و جریان‌های وابسته به اسپین در حضور میدان تبدالی از روش تابع گرین بر پایه‌ی تقریب تنگ بست استفاده می‌شود. این سامانه به صورت همزمان دارای چندین ویژگی اسپینترونیک است. نتایج نشان می‌دهند که در رابط‌های خروجی جریان خالص اسپینی و جداسازی فضایی جریان‌های قطبیده اسپینی، بدست می‌آید. بدین صورت که در ولتاژهای خاصی، الکترون‌ها با حالت‌های اسپینی متفاوت در جهت متضاد هم شارش می‌یابند تا جریان اسپینی

[۴۱]. در این روش لایه‌ای از عایق مغناطیسی EuO بالای صفحه گرافین، قرار داده می‌شود. بر بالای این عایق نیز یک گیت فلزی قرار می‌گیرد. در نتیجه، برهمکنش تبدالی بین  $\text{Eu}^{+2}$  و حامل‌های بار در صفحه‌ی گرافینی، شکافتگی اسپینی ایجاد می‌شود. در اینجا به منظور القای میدان مغناطیسی تبدالی در راستای عمود بر صفحه‌ی سامانه، از لایه‌های عایق فرومغناطیس، در کانال رسانش یا رابط‌ها استفاده می‌شود. در حضور میدان تبدالی، جریان‌های وابسته به اسپین تولید می‌شوند.



شکل ۱: (الف) مولکول بنزن. (ب) و (ج) به ترتیب شماتیکی از پیوندگاه بنزی Y- شکل نامتقارن و متقارن متصل به سه رابط گرافینی است.

ویژگی‌های ترابرد الکترون در چنین ساختاری با استفاده از تقریب تنگ بست، با در نظر گرفتن یک الکترون  $\pi$  برای هر اتم بدست

خالص تولید شود و یا اینکه شارش الکترون‌ها در یکی از حالت-های اسپینی به‌طور کامل مسدود می‌شود تا جریان اسپینی به‌طور کامل قطبیده به‌دست آید. این کار با انتخاب صحیح شدت، موقعیت و جهت اعمال میدان تبدالی امکان پذیر است.

این پژوهش، به صورت زیر سازماندهی شده است. در بخش ۲ پیوندگاه بنزی را نشان داده و مدل نظری بر پایه‌ی روش تابع گرین ارائه شده است. در بخش ۳ نتایج عددی حاصل از حضور میدان تبدالی بر پیوندگاه مولکولی بررسی می‌شود. در نهایت، در بخش ۴ جمع‌بندی یافته‌ها ارائه می‌شود.

## ۲- محاسبات

در این مقاله، با استفاده از روش نظری جریان خالص اسپینی و همچنین، جداسازی فضایی جریان‌های اسپینی در حضور میدان مغناطیسی تبدالی بررسی می‌شود. ساختار ارائه شده، پیوندگاه Y- شکلی است که شامل مولکول آلی و قطعه‌ای گرافین (به عنوان کانال رسانش) است که بین سه نانونوار گرافینی نیم‌نامتناهی (به عنوان رابط) ساندویچ شده‌اند. همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده است، مولکول بنزن ( $\text{C}_6\text{H}_6$ ) در مرکز کانال رسانش قرار گرفته است (کانال رسانش (c) با رنگ آبی در شکل ۱ مشخص شده است).

گرافین تک‌لایه‌ای از اتم‌های کربن است که در ساختار شبکه شش‌گوشی مشهور به شبکه لانه زنبوری مرتب شده‌اند. هر اتم کربن دارای چهار الکترون ظرفیتی است که از این تعداد سه الکترون در پیوندهای  $sp^2$  و الکترون چهارم در پیوند پی شرکت می‌کنند. پیوند پی، در نتیجه‌ی همپوشانی ضعیف اوربیتال‌ها، پیوند سستی است و بدین جهت الکترون‌هایی که در این پیوند شرکت می‌کنند، نامتمرکز هستند و می‌توانند در صفحات گرافینی حرکت کنند. علت استفاده از مولکول بنزن در پیوندگاه Y- شکل، به دلیل حضور شش الکترون نامتمرکز در نتیجه وجود شش اتم کربن در این مولکول است. در اثر اتصال بین اتم‌های کربن مولکول بنزن و ساختار گرافین، این الکترون‌ها می‌توانند در فرآیند رسانش شرکت کنند [۴۰].

به طور طبیعی گرافین، ماده‌ای فرومغناطیس نیست. برای تبدیل گرافین به ماده‌ای فرومغناطیس، اثر مجاورت پیشنهاد می‌شود

می‌آید. بنابراین، هامیلتونی سامانه به صورت زیر بیان می‌شود [۲۳ و ۴۲]:

می‌آید. بنابراین، هامیلتونی سامانه به صورت زیر بیان می‌شود [۲۳ و ۴۲]:

$$H = H_c + \sum_{q=L,R,B} H_q + H_M \quad (۱)$$

به دلیل آنکه سه رابط چپ (L)، راست (R) و پایین (B)، از جنس گرافین هستند و فقط هندسه‌ی ساختارشان با قطعه گرافین متفاوت است، بنابراین، هامیلتونی آن‌ها مشابه رابطه قطعه گرافین است (رابطه ۳).

در این رابطه،  $H_c$  هامیلتونی کانال رسانش، که شامل قطعات گرافین و مولکول در مرکز پیوندگاه  $Y$ - شکل است، به صورت زیر نوشته می‌شود:

همچنین، هامیلتونی میدان مغناطیسی تبدالی به صورت زیر بیان می‌شود:

$$H_c = H_{gr} + H_{mol} + H_{int} \quad (۲)$$

$$H_M = M \sum_{i\alpha} a_{i\alpha}^\dagger \sigma_z a_{i\alpha} \quad (۶)$$

در اینجا نیز  $a_{i\alpha}^\dagger$  و  $a_{i\alpha}$  به ترتیب عملگرهای خلق و فنا هستند.  $\sigma_z$  ماتریس اسپینی پائولی است و  $M$  شدت میدان تبدالی را نشان می‌دهد. در این مقاله از برهم‌کنش الکترون-الکترون صرف نظر شده است.

در این رابطه هامیلتونی قطعه گرافین،  $H_{gr}$ ، عبارتست از:

$$H_{gr} = \sum_{i\alpha} \varepsilon_i c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha} + \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} t_{ij} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} \quad (۳)$$

از آنجاییکه محاسبه ترابرد وابسته به اسپین وابسته به تابع گرین است، ابتدا باید تابع گرین تاخیری را به صورت زیر محاسبه می‌شود [۴۲].

در اینجا  $(c_{i\alpha}) c_{i\alpha}^\dagger$  عملگر خلق (فنا) الکترون با اسپین  $\alpha$  در جایگاه  $i$  ام گرافین است،  $\varepsilon_i$  و  $t_{ij}$  به ترتیب انرژی هر جایگاه و انرژی جهش بین نزدیکترین همسایه‌ها هستند. برای گرافین در صورت نبود عیوب و نواقص، مقدار انرژی هر جایگاه را صفر در نظر گرفته می‌شود و مقدار انرژی جهش، برابر با  $2/66 \text{ eV}$  است.

$$G^{r\alpha}(E) = ((E + i\eta)I - H_c - \sum_L^\alpha - \sum_R^\alpha - \sum_B^\alpha)^{-1} \quad (۷)$$

در این رابطه،  $\alpha$  اسپین بالا و پایین را نشان می‌دهد.  $\eta$  مقدار دلخواه بسیار کوچک است.  $H_c$  هامیلتونی کانال رسانش است و  $\sum_q^\alpha$  ماتریس‌های خود-انرژی هستند که در واقع بیانگر برهمکنش رابط‌ها با ناحیه‌ی مرکزی سامانه است. خود-انرژی‌ها را می‌توان با استفاده از رابطه  $\sum_q^\alpha = H_{cq}^\dagger g_q^r H_{cq}$  بدست آورد. که در این رابطه،  $H_{cq}$  ماتریس هامیلتونی برهمکنش بین کانال رسانش با رابط  $q$  ام است. توابع گرین تاخیری  $(g_q^r)$  برای رابط-های چپ، راست و پایین با استفاده از روش تکرار به صورت عددی محاسبه می‌شوند [۴۳]. ضریب ترابرد وابسته به اسپین،  $T_{p,q}^\alpha$ ، برای الکترون‌هایی که از رابط  $p$  به رابط  $q$  انتقال می‌یابند، با رابطه زیر بدست می‌آید:

همچنین، در رابطه (۲)،  $H_{mol}$ ، هامیلتونی مولکول در مرکز پیوندگاه است که با عبارت زیر بیان می‌شود:

$$H_{mol} = \sum_{nl,\alpha} \varepsilon_{nl} d_{nl\alpha}^\dagger d_{nl\alpha} + \sum_{\langle nl,ml \rangle, \alpha} t_{nlml} d_{nl\alpha}^\dagger d_{ml\alpha} \quad (۴)$$

در این رابطه  $d_{nl\alpha}^\dagger$  و  $d_{nl\alpha}$  به ترتیب عملگرهای خلق و فنا برای الکترون با اسپین  $\alpha$  در اوربیتال اتمی  $n$  مولکول  $l$  هستند.  $\varepsilon_{nl}$  و  $t_{nlml}$  انرژی هر جایگاه و انرژی جهش بین اتم‌های مولکول می‌باشند. که در مورد مولکول بنزن این مقادیر  $\varepsilon_{nl} = 5 \text{ eV}$  و  $t_{nlml} = 2/5 \text{ eV}$  هستند.

سرانجام سومین عبارت در رابطه (۲)،  $H_{int}$ ، برهمکنش بین اتم‌های کربن قطعه گرافین و مولکول عبارتست از:

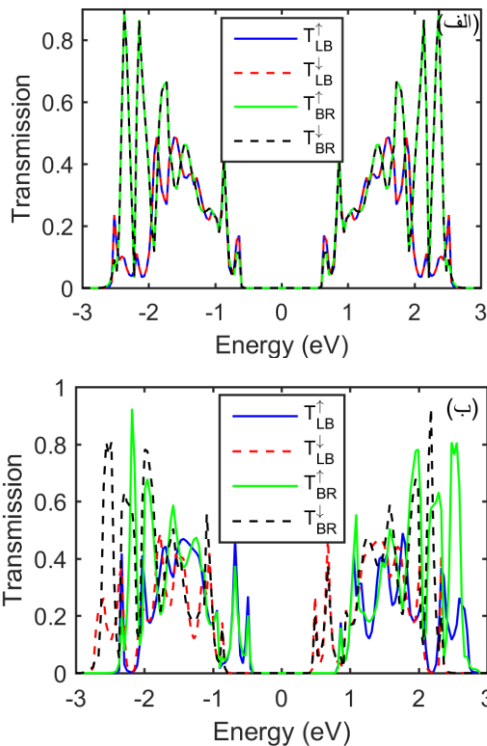
$$H_{int} = \sum_i \sum_n t_{in} (c_{i\alpha}^\dagger d_{n\alpha} + d_{n\alpha}^\dagger c_{i\alpha}) \delta_{i,il} \delta_{n,nl} \quad (۵)$$

که در این معادله اندیس  $nl$  برچسب جایگاه اتمی  $n$  مولکول است که به جایگاه  $il = i$  قطعه گرافین متصل شده است، و

$$T_{p,q}^\alpha(\varepsilon) = Tr[\Gamma_p G_c \Gamma_q G_c^\dagger]^\alpha \quad (۸)$$

در این رابطه،  $\Gamma_p^\alpha$  ماتریس جفت شدگی وابسته به اسپین است که از رابطه  $\Gamma_p^\alpha = -2Im[\sum_p(\varepsilon)]$  بدست می‌آید. جریان

نامتقارن در نظر گرفت [شکل ۱ (ب)] [۴۶]. چنانچه رابطها با پهنای یکسان در نظر گرفته شوند، جریانهای اسپینی که از رابط چپ به رابط پایین و همچنین، از رابط پایین به رابط راست شارش می‌یابند، با یکدیگر برابر بوده و بنابراین، جریان برداری حاصل در رابط پایین صفر می‌شود.



شکل ۲: نمودارهای ضرایب ترابرد وابسته به اسپین بر حسب انرژی الکترون‌های ورودی. (الف) در غیاب میدان تبادلی و (ب) در حضور میدان تبادلی با شدت  $|t_{ij}|/2 = 0.1$ .

بدین منظور، ردیفی از اتم‌های کربن به رابط راست و همچنین، به سمت راست قطعه گرافین افزوده می‌شود. تحت این شرایط کانال رسانش شامل ۱۵۹ اتم کربن است. سلول واحد رابط سمت راست شامل ۲۶ اتم کربن است. در حالیکه این تعداد برای رابط چپ و پایین برابر با ۲۲ اتم کربن است (این پیوندگاه، پیکربندی ۱ نامگذاری می‌شود).

نمودارهای ۲ (الف) و ۲ (ب) ضرایب ترابرد را برحسب انرژی الکترون‌های ورودی در شرایط غیاب و حضور میدان تبادلی نشان می‌دهند. ضرایب ترابرد اسپین بالا و پایین بین رابط L و رابط B (بین رابط B و رابط R) به ترتیب با  $T_{LB}^{\uparrow}$  و  $T_{LB}^{\downarrow}$  (بین رابط B و رابط R) به ترتیب با  $T_{BR}^{\uparrow}$  و  $T_{BR}^{\downarrow}$  نشان داده می‌شوند. در غیاب میدان تبادلی، ترابرد الکترون‌ها با اسپین بالا و پایین دارای مقادیر یکسانی هستند [شکل ۲ (الف)].

الکترونی با اسپین خاص  $\alpha$  در رابط  $p$  از معادله زیر حاصل می‌شود [۴۴]:

$$I_p^\alpha = \frac{e}{h} \sum_{q \neq p} \int_{\mu_p}^{\mu_q} d\varepsilon T_{p,q}^\alpha(\varepsilon) \quad (9)$$

در اینجا  $\mu_p$  و  $\mu_q$  پتانسیل‌های شیمیایی رابط‌های  $p$  و  $q$  هستند،  $e$  بار الکترون و  $h$  ثابت پلانک است. جریان‌های باری و اسپینی که در رابط  $p$  شارش می‌یابند، با رابطه زیر تعریف می‌شوند [۴۵]:

$$I_c = I_p^\uparrow + I_p^\downarrow \quad (10)$$

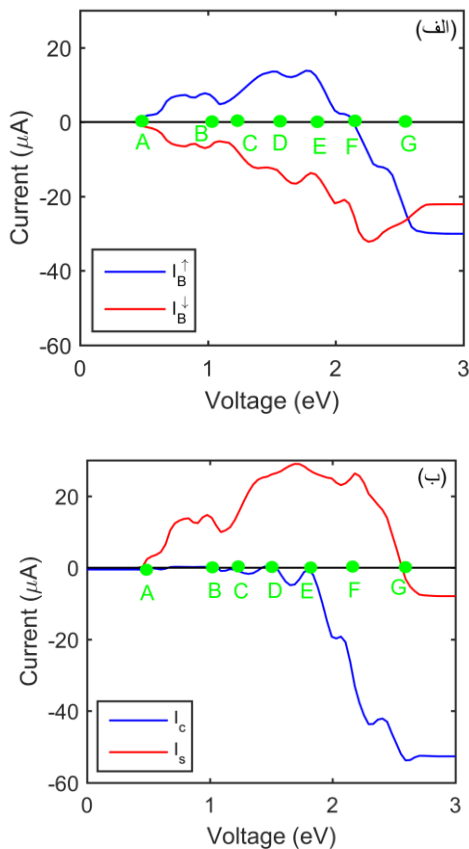
$$I_s = I_p^\uparrow - I_p^\downarrow$$

شرط لازم برای آنکه جریان اسپینی خالص در رابط  $p$  ایجاد شود اینست که جریان باری در آن رابط صفر شود. جداسازی فضایی جریان اسپینی قطبیده در رابط‌های راست و چپ پیوندگاه مولکولی Y- شکل در حضور میدان تبادلی امکانپذیر است، این پدیده با تنظیم شدت و همچنین موقعیت اعمال میدان تبادلی به‌دست می‌آید.

### ۳- نتایج و بحث

در این بخش، نتایج حاصل از محاسبه احتمالات ترابرد وابسته به اسپین و همچنین، جریان‌های اسپینی در مولکول بنزن که به سه نانو نوار گرافینی به عنوان رابط متصل است، آورده شده است. همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده است، مولکول بنزن در مرکز کانال رسانش (C) قرار دارد. برای اینکه جریان اسپینی خالص، در خروجی پیوندگاه Y- شکل به‌دست آید، پتانسیل شیمیایی رابط پایین (B) برابر صفر در نظر گرفته می‌شود. علاوه بر این، پتانسیل‌های شیمیایی رابط‌های چپ (L) و راست (R) با مقدار متضاد با رابط  $\mu_L = -\mu_R = eV/2$  تعریف می‌شوند. که در این رابطه  $V$  ولتاژ بایاس است. همچنین، مقدار بیشینه پتانسیل شیمیایی برابر با  $|t_{ij}|/2$  است. با در نظر گرفتن پتانسیل شیمیایی با روش بالا، الکترون‌ها از رابط L به رابط B و همچنین، از رابط B به رابط R شارش می‌یابند. بنابراین، رابط‌های L و R به ترتیب به‌عنوان چشمه و چاه الکترون در نظر گرفته می‌شوند. توجه کنید، در اینجا برای آنکه جریان خالص اسپینی به‌دست آید، می‌بایست پیوندگاه مولکولی را با هندسه

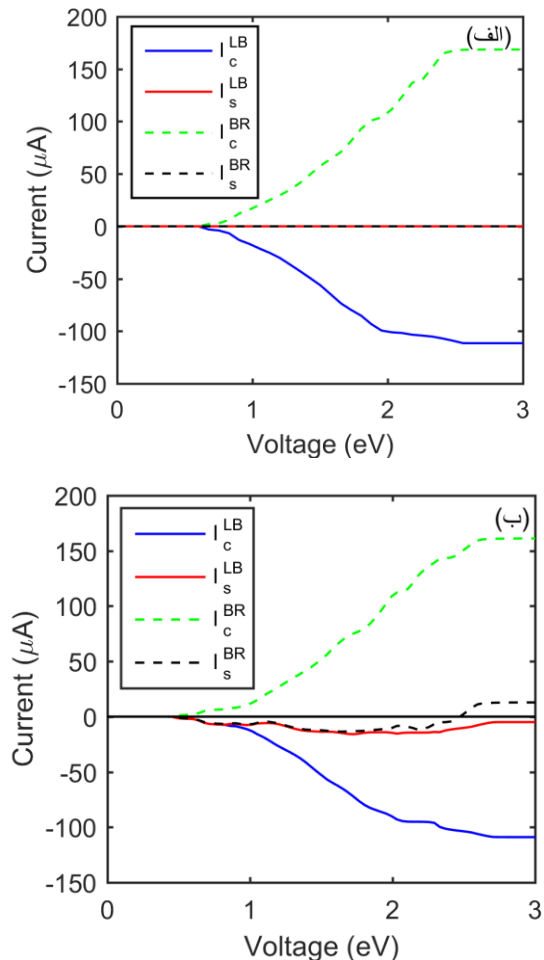
بنابراین، می‌توان انتظار داشت که در این گستره‌ی انرژی، فقط جریان اسپینی بالا (پایین) شارش یابد.



شکل ۴: مشخصه I-V وابسته به اسپین در حضور میدان تبدالی با شدت  $0.2 |t_{ij}|$  در رابط B. (الف) جریان‌های اسپینی بالا و پایین و (ب) جریان‌های باری و اسپینی.

جریان‌های باری و اسپینی به صورت تابعی از ولتاژ بایاس در غیاب و همچنین، در حضور میدان تبدالی به ترتیب در شکل‌های ۳ (الف) و (ب) نشان داده شده است. جریان‌های وابسته به اسپین،  $I_{LB}^{\alpha}$  (جریان اسپینی  $\alpha$  از رابط L به B) و همچنین  $I_{BR}^{\alpha}$  (جریان اسپینی  $\alpha$  از رابط B به R با معادله (۹) بدست می‌آیند. در ادامه، با استفاده از رابطه (۱۰) جریان‌های باری و اسپینی محاسبه می‌شود. شکل ۳ (الف) به وضوح نشان می‌دهد که در غیاب میدان تبدالی به دلیل اینکه جریان‌های اسپینی بالا و پایین یکسان هستند، در نتیجه برآیند برداری جریان‌های اسپینی صفر می‌شوند. بنابراین، فقط جریان‌های باری در پیوندگاه می‌توانند شارش یابند. در حضور میدان مغناطیسی تبدالی با شدت  $0.2 |t_{ij}|$ ، افزون بر جریان‌های باری، جریان‌های اسپینی نیز

الته به دلیل اینکه پیوندگاه مولکولی نامتقارن در نظر گرفته می‌شود، ترابرد اسپینی  $T_{LB}$  و  $T_{BR}$  با یکدیگر متفاوت هستند.



شکل ۳: مشخصه I-V وابسته به اسپین و بار برای پیوندگاه بنزنی (الف) در غیاب میدان تبدالی و (ب) در حضور میدان تبدالی  $0.2 |t_{ij}|$ .

در حضور میدان مغناطیسی تبدالی با شدت  $0.2 |t_{ij}|$  که بر کانال رسانش اعمال شده است، ترابرد الکترون‌های با اسپین بالا و پایین متفاوت می‌شوند [شکل ۲ (ب)]. در حقیقت، میدان مغناطیسی تبدالی می‌تواند با تغییر انرژی الکترون‌ها با حالات اسپینی متفاوت، تا همگنی حالات اسپینی بالا و پایین را بشکند. بنابراین، گزینه مناسبی برای ایجاد ترابرد وابسته به اسپین در پیوندگاه Y- شکل مولکولی است. همانطور که در شکل ۲ (ب) نشان داده شده است، در گستره‌های خاصی از انرژی، فقط الکترون‌ها با اسپین بالا (یا پایین) در سامانه ترابرد می‌یابند و ترابرد الکترون‌ها با اسپین عکس به‌طور کامل مسدود می‌شوند.

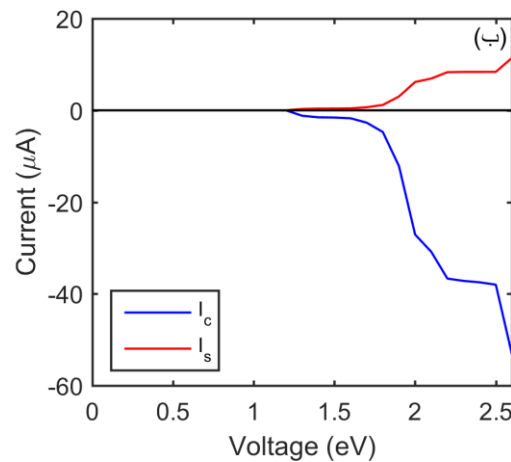
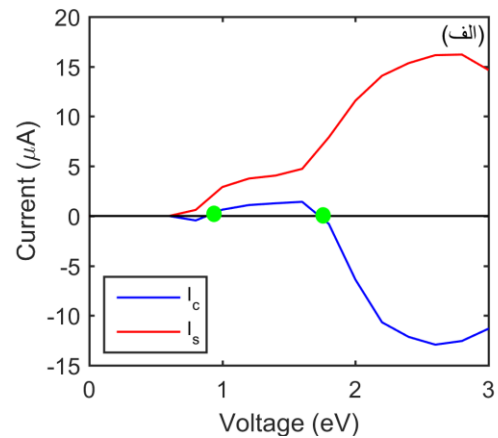
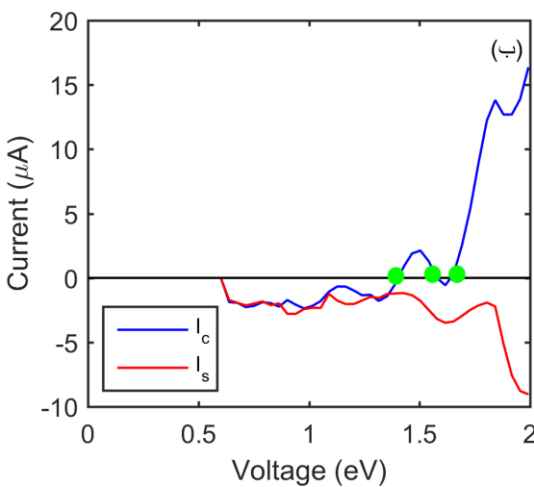
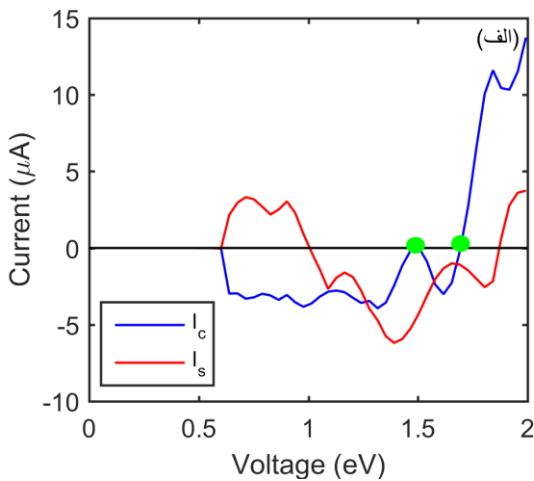
جریان  $I_B^{\downarrow}$  وجود دارد. نقطه G ولتاژی را نشان می‌دهد که در آن جریان‌های اسپین  $I_B^{\downarrow}$  و  $I_B^{\uparrow}$  باهم برابر هستند، این امر شرایط صفر شدن جریان اسپینی را فراهم می‌کند. در شکل ۴ (ب) نمودار I-V وابسته به اسپین و بار در پیوندگاه بنزنی نمایش داده شده است. در این نمودار در فاصله بین نقاط A تا B، گستره ولتاژ بایاسی است که در آن جریان باری صفر می‌باشد، اما جریان اسپینی غیرصفر است. همچنین، در تک نقاط C و D و E نیز همین اتفاق رخ داده است. در چنین شرایطی جریان خالص اسپینی داریم. بنابراین، در پیوندگاه مولکولی بنزن در ولتاژهای متعددی پدیده جریان خالص اسپینی مشاهده می‌شود که در واقع مزیت استفاده از مولکول بنزن در مرکز این پیوندگاه را نشان می‌دهد. افزون بر این، در این نمودار، نقطه G، برابر با ولتاژی است که در آن جریان اسپینی صفر است و فقط جریان باری وجود دارد. همچنین، نقطه F ولتاژی است که در آن  $I_C = -I_S$  در این شرایط جریان اسپینی به‌طور کامل قطبیده در پیوندگاه مولکولی رخ می‌دهد. نتایجی که در نمودارهای جریان‌های باری و اسپینی بدست آمده است به‌طور کامل منطبق با نتایج نمودارهای شکل ۴ (الف) است. این پیوندگاه مولکولی می‌تواند در طراحی سامانه‌هایی مفید واقع شود که بر مبنای فیلتر اسپین و یا ترابرد اسپین الکترونی خالص کار می‌کنند.

حال بررسی تاثیر عوامل متفاوت در ایجاد جریان خالص اسپینی در پیوندگاه بنزنی ارائه می‌شود. شرایطی در نظر گرفته می‌شود که عدم تقارن در پیوندگاه مولکولی افزایش یافته و اثر آن بر جریان‌های باری و اسپینی بررسی می‌شود. در اینجا دو حالت دیگر در نظر گرفته می‌شود و به منظور مقایسه با حالت حداقل عدم تقارن، در شرایط مشابه میدان تبدالی با شدت  $|t_{ij}| \approx 0.2$  بر کانال رسانش اعمال می‌شود. پیکربندی که در آن، کانال رسانش شامل ۱۷۳ اتم کربن و سلول واحد رابط سمت راست شامل ۳۰ اتم کربن است در حالیکه این تعداد برای رابط چپ و پایین مانند قبل برابر با ۲۲ اتم کربن است (پیکربندی ۲). در پیکربندی بعدی دوباره عدم تقارن افزایش یافته، در این حالت کانال رسانش شامل ۱۹۵ اتم کربن است. سلول واحد رابط سمت راست شامل ۳۴ اتم کربن در حالیکه این تعداد برای رابط چپ و پایین مانند پیش بدون تغییر و برابر با ۲۲ اتم کربن هستند (پیکربندی ۳).

وجود دارند [شکل ۳ (ب)]. در اینجا مثبت یا منفی بودن جریان‌های اسپینی و باری بسته به جهتی است که الکترون‌ها در سامانه شارش یافته‌اند. همانطور که در شکل ۳ (ب) نشان داده شده است، در ولتاژ  $0.5 \text{ eV}$  تا  $0.9 \text{ eV}$  رابطه بین جریان‌های باری و اسپینی به صورت  $I_C^{LB} = I_S^{LB}$  و  $I_C^{BR} = -I_S^{BR}$  هستند. در این حالت به ترتیب جریان‌های اسپینی  $I_{BR}^{\downarrow}$  و  $I_{LB}^{\downarrow}$  صفر می‌شوند، تحت این شرایط، جریان به‌طور کامل قطبیده، می‌تواند وجود داشته باشد. همچنین، در ولتاژی که  $I_S^{BR}$  صفر می‌شود، جریان‌های اسپینی  $I_{BR}^{\uparrow}$  و  $I_{BR}^{\downarrow}$  دقیقاً برابر هستند.

از آنجایی که رابط پایین نقش چشمه (چاه) الکترون را برای رابط راست (چپ) ایفا می‌کند، جریان وابسته به اسپین در رابط پایین می‌تواند به صورت  $I_B^{\alpha} = I_{LB}^{\alpha} + I_{BR}^{\alpha}$  بازنویسی شود. بنابراین جریان‌های باری و اسپینی در رابط پایین می‌توانند به ترتیب به صورت  $I_S = I_B^{\uparrow} - I_B^{\downarrow}$  و  $I_C = I_B^{\uparrow} + I_B^{\downarrow}$  بیان شوند. تحت این شرایط، جریانی که در رابط B شارش می‌یابد، ویژگی‌های جالبی را در ولتاژهای متفاوت نشان می‌دهد. در ولتاژی جریان خالص اسپینی مشاهده می‌شود، که جریان باری برابر با صفر شود. این امر در شرایطی حاصل می‌شود که  $I_B^{\uparrow} = -I_B^{\downarrow}$  باشد. همچنین، جریان اسپینی در ولتاژهای بایاسی صفر می‌شود که جریان‌های اسپینی بالا و پایین در رابط B مقادیر و جهت یکسانی داشته باشند. افزون بر این، چنانچه یکی از کانال‌های جریان اسپینی به‌طور کامل مسدود شود، جریان اسپینی به‌طور کامل قطبیده بدست می‌آید. درحقیقت، اگر رابطه‌ی بین جریان باری و اسپینی به صورت  $I_C = I_S$  ( $I_C = -I_S$ ) باشد، در این شرایط جریان اسپینی  $I_B^{\uparrow}$  ( $I_B^{\downarrow}$ ) را خواهیم داشت و جریان اسپینی  $I_B^{\downarrow}$  ( $I_B^{\uparrow}$ ) صفر می‌شود.

در شکل ۴ (الف) جریان‌های وابسته به اسپین بالا و پایین در رابط B ( $I_B^{\downarrow}$  و  $I_B^{\uparrow}$ ) به صورت تابعی از ولتاژ بایاس نشان داده شده است. به نقاط سبز رنگی که در این شکل مشخص شده‌اند، توجه نمایید. همانطور که در این نمودار نشان داده شده است، در فاصله بین نقاط A تا B، گستره‌ای است که در آن  $I_B^{\downarrow}$  و  $I_B^{\uparrow}$  اندازه یکسان و جهت مخالف هم دارند. همچنین، این اتفاق در نقاط C و D و E نیز رخ داده است. می‌توان انتظار داشت، در این مقادیر ولتاژ، جریان باری برابر صفر شود. همچنین، جریان اسپینی به‌طور کامل قطبیده در نقطه F ظاهر می‌شود، زیرا در این ولتاژ فقط



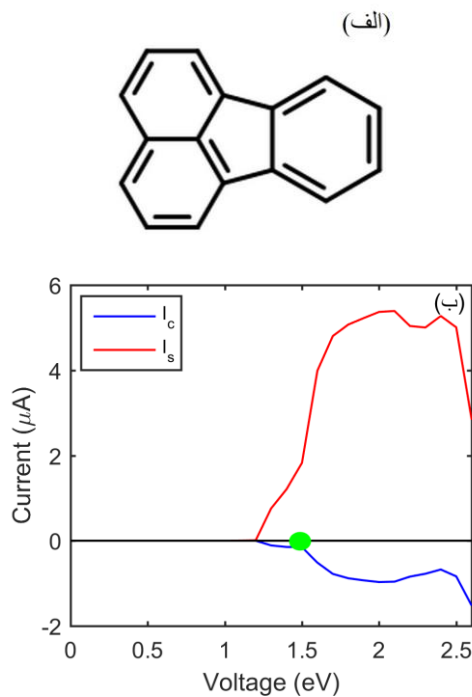
شکل ۵: جریان‌های باری و اسپینی در رابط B پیوندگاه Y-شکل در حضور میدان تبدالی با شدت  $0.2 |t_{ij}|$  بر روی کانال رسانش. (الف) در پیکربندی ۲، (ب) در پیکربندی ۳.

شکل ۶: مشخصه I-V برای جریان‌های باری و اسپینی در حضور میدان تبدالی با شدت  $0.2 |t_{ij}|$  در رابط پایین پیوندگاه، در شرایطی که میدان تبدالی بر رابط‌های راست و چپ به صورت (الف) موازی و (ب) پاد موازی اعمال شده است.

در این پژوهش، برای مشاهده اثر میدان تبدالی بر جریان‌های اسپینی، میدان تبدالی در مواضع مختلفی بر پیوندگاه Y-شکل اعمال شده است. افزون بر اعمال میدان بر کانال رسانش، شرایطی که میدان در جهت موازی یا پاد موازی فقط بر رابط‌های L و R اعمال شود، نیز بررسی شده است. اما بهترین نتیجه برای تولید جریان اسپینی خالص، در حالتی مشاهده می‌شود که میدان تبدالی بر کانال رسانش اعمال شده است. نمودارهای جریان‌های باری و اسپینی در رابط پایین پیوندگاه بنزنی (مطابق با پیکربندی ۱) در شکل‌های ۶ (الف) و ۶ (ب) بر حسب ولتاژ بایاس در حضور میدان تبدالی با شدت  $0.2 |t_{ij}|$  رسم شده است. میدان تبدالی در شکل ۶ (الف) به صورت موازی و در شکل ۶ (ب) به صورت پادموازی بر رابط‌های راست و چپ اعمال

نمودارهای جریان باری و اسپینی بر حسب ولتاژ در حضور میدان تبدالی با شدت  $0.2 |t_{ij}|$  مطابق با پیکربندی ۲ و ۳ به ترتیب در شکل‌های ۵ (الف) و ۵ (ب) نشان داده شده‌اند. با توجه به شکل ۴ (ب) در پیکربندی با کمترین مقدار عدم تقارن (پیکربندی ۱) در گستره ولتاژ بایاس مشخص شده بین نقاط A تا B، همچنین در نقاط C و D و E جریان باری صفر می‌باشد، اما جریان اسپینی غیر صفر است، در حالیکه با افزایش عدم تقارن در حالت متناظر با پیکربندی ۲، فقط در دو ولتاژ معین جریان خالص اسپینی رخ می‌دهد [نقاط سبز رنگ در شکل ۵ (الف)] و در پیکربندی ۳ که عدم تقارن نسبت به دو حالت پیش افزایش یافته، جریان خالص اسپینی بدست نمی‌آید. بنابراین، افزایش عدم تقارن در پیوندگاه بنزن باعث کاهش تعداد دفعات رخداد جریان خالص اسپینی در رابط پایین می‌شود.





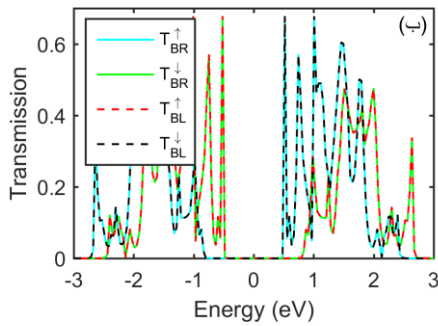
شکل ۷: (الف) مولکول فلورانتین. (ب) جریان‌های باری و اسپینی در رابط پایین پیوندگاه سه تایی فلورانتین، در حضور میدان تبدلی با شدت  $|t_{ij}| \cdot 0.2$  اعمالی بر ناحیه کانال رسانش.

در اینجا، فقط در ولتاژ  $1/5 \text{ eV}$  جریان خالص اسپینی وجود دارد [در شکل ۷ (ب) ولتاژی که جریان خالص اسپینی داریم با نقطه سبز رنگ مشخص شده است]. می‌توان نتیجه گرفت که انتخاب مولکول بنزن در بین رابط‌های نامتقارن شرایط بهینه‌تری برای جریان‌های اسپینی در پیوندگاه Y- شکل فراهم می‌کند.

با مشاهده نمودارهای شکل ۴ مشاهده می‌شود که در بعضی از گستره‌های ولتاژ به جای اینکه با افزایش ولتاژ، بزرگی جریان افزایش یابد، جریان کاهش می‌یابد. این پدیده با عنوان مقاومت تفاضلی منفی (NDR) شناخته می‌شود. پدیده NDR در گستره-های متعددی از ولتاژ در نمودارهای جریان  $I_B^{\uparrow}$ ،  $I_B^{\downarrow}$ ،  $I_C$  و  $I_S$  مشاهده می‌شود. علت مشاهده NDR در پیوندگاه بنزنی Y- شکل، به نحوه انتخاب پتانسیل‌های شیمیایی در رابط‌ها و ایجاد جریان‌های اسپینی در جهات مخالف در رابط پایین باز می‌شود. پتانسیل شیمیایی از طریق ولتاژ بایاس قابل تنظیم است، از طرفی با اعمال پتانسیل شیمیایی می‌توان رسانش الکتریکی پیوندگاه Y- شکل مولکولی را کنترل کرد. اثر مقاومت تفاضلی منفی می‌تواند ناشی از تطبیق و عدم تطبیق ترازهای انرژی فرمی

شده است. اگرچه اعمال موازی و پاد موازی میدان تبدلی بر رابط‌های راست و چپ منجر به ایجاد جریان خالص اسپینی می‌شود [نقاط سبز رنگ مشخص شده در شکل‌های ۶ (الف) و ۶ (ب)]، اما اندازه‌ی جریان خالص اسپینی در این دو حالت کمتر از حالتی است که میدان تبدلی بر ناحیه‌ی کانال رسانش اعمال می‌شود [شکل ۴ (ب)]. بنابراین، موقعیت بهینه اعمال میدان برای داشتن جریان خالص اسپینی (از نظر بزرگی جریان و دفعات رخداد پدیده) در حالتی است که میدان بر ناحیه کانال رسانش اعمال شود.

همانطور که پیش از این توضیح داده شد، در پیوندگاه مولکولی به‌طور کامل متقارن (متشکل از مولکول متقارن بنزن و رابط‌های متقارن) برآیند برداری جریان‌های اسپینی در رابط پایین صفر می‌شود. بنابراین، به منظور ایجاد جریان اسپینی در رابط پایین، رابط‌ها نامتقارن در نظر گرفته شد. برای بررسی بیشتر، پیوندگاه مولکولی متفاوتی مطرح می‌شود، که شامل مولکولی با ساختار نامتقارن در مرکز کانال رسانش و رابط‌هایی با ساختار کاملاً متقارن است. می‌توان انتظار داشت در این شرایط، جریان اسپینی در رابط پایین به وجود آید. بدین منظور مولکول نامتقارن فلورانتین ( $C_{16}H_{10}$ ) در نظر گرفته می‌شود (ساختار مولکول فلورانتین در شکل ۷ (الف) به نمایش گذاشته شده است). مشابه پیوندگاه بنزنی، برای ایجاد جریان‌های اسپینی در سامانه، میدان تبدلی با شدت  $|t_{ij}| \cdot 0.2$  بر ناحیه‌ی کانال رسانش اعمال می‌شود. در شکل ۷ (ب)، نمودار جریان باری و اسپینی برای پیوندگاه فلورانتین با رابط‌های متقارن نشان داده شده است. مطابق آنچه انتظار می‌رفت، در این شرایط جریان اسپینی در رابط پایین به وجود می‌آید. با مقایسه بین جریان‌های اسپینی و جریان باری در پیوندگاه Y- شکل بنزنی (مولکول متقارن) و فلورانتین (مولکول نامتقارن) می‌توان دریافت که، انتخاب مولکول فلورانتین سبب پیدایش جریان‌های اسپینی در رابط پایین سامانه می‌شود، اما شدت جریان‌های خروجی اسپینی و باری در این سامانه نسبت به پیوندگاه بنزنی کاهش یافته، افزون بر این، بر خلاف پیوندگاه بنزنی که در چندین ولتاژ، پدیده جریان خالص اسپینی حاصل شده است [شکل ۴ (ب)].

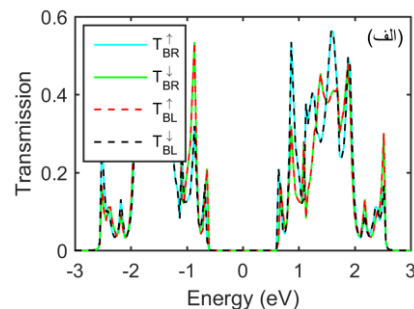


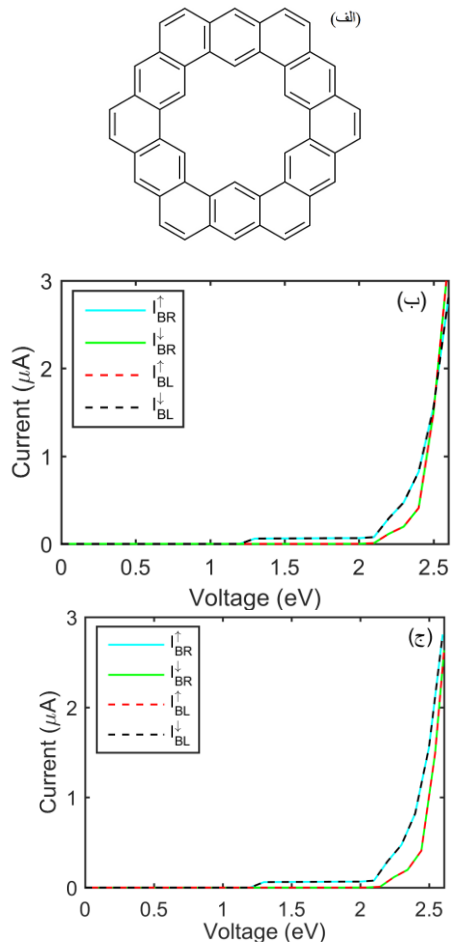
شکل ۸: ترابرد اسپینی به صورت تابعی از انرژی الکترون ورودی در پیوندگاه بنزنی Y- شکل در حضور میدان تبدالی با شدت (الف)  $0.1 |t_{ij}|$  و (ب)  $0.2 |t_{ij}|$ .

می‌شوند. برخلاف بخش پیش که پیوندگاه نامتقارن بود، در اینجا ساختار پیوندگاه به‌طور کامل متقارن و کانال رسانش شامل ۱۴۴ اتم کربن در نظر می‌شوند. [شکل ۱ (ج) را ببینید]. نمودارهای شکل‌های ۸ (الف) و ۸ (ب) ضرایب ترابرد پیوندگاه بنزنی را به عنوان تابعی از انرژی الکترون ورودی در حضور میدان تبدالی به ترتیب با شدت  $0.1 |t_{ij}|$  و  $0.2 |t_{ij}|$  نشان می‌دهند. الکترون‌ها از رابط B به رابط‌های L و R منتقل می‌شوند، که ضرایب ترابرد آن‌ها را به ترتیب با  $T_{BL}^{\alpha}$  و  $T_{BR}^{\alpha}$  نشان داده می‌شوند. در این نمودارها  $T_{BL}^{\downarrow} = T_{BR}^{\downarrow}$  و  $T_{BL}^{\uparrow} = T_{BR}^{\uparrow}$  هستند، علت این امر به نحوه انتخاب پتانسیل‌های شیمیایی سه رابط و همچنین تقارن پیوندگاه باز می‌گردد. همانطور که شکل ۸ (الف) نشان می‌دهد، زمانی که شدت میدان تبدالی  $0.1 |t_{ij}|$  است، بدون اولویت معنی‌داری الکترون‌های با اسپین بالا و پایین از رابط‌های خروجی ترابرد می‌یابند. اما هنگامی که شدت میدان تبدالی به مقدار  $0.2 |t_{ij}|$  افزایش یابد، در گستره انرژی  $0.48 \text{ eV}$  تا  $0.95 \text{ eV}$  اختلاف بین  $T_{BL}^{\downarrow}$  و  $T_{BR}^{\downarrow}$  و متقابلاً بین  $T_{BR}^{\uparrow}$  و  $T_{BL}^{\uparrow}$  قابل توجه می‌شود.

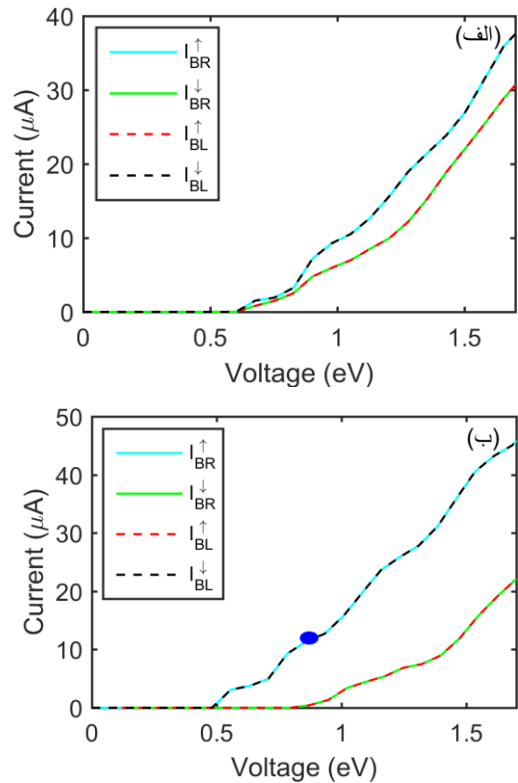
رابط‌ها با ترازهای انرژی مولکولی باشد. زیرا با اعمال ولتاژ بایاس، انرژی فرمی در رابط چپ (پایین) نسبت به انرژی فرمی در رابط پایین (راست) افزایش می‌یابد و بنابراین الکترون‌هایی که در ترازهای زیر تراز انرژی فرمی در رابط چپ (پایین) هستند، در مقابل ترازهای خالی بالای تراز فرمی رابط پایین (راست) قرار می‌گیرند، پس، شرایط تونل‌زنی الکترون‌ها فراهم و جریان در پیوندگاه برقرار می‌شود. هنگامیکه ولتاژ بایاس افزایش یابد، موقعیت نسبی ترازهای انرژی رابط‌ها و مولکول تغییر می‌یابد، تا به نقطه‌ای می‌رسند که تعداد حالت‌های پر در مقابل حالت‌های خالی کاهش یافته و بنابراین، احتمال عبور الکترون‌ها نیز کاهش می‌یابد. در این شرایط با افزایش ولتاژ بایاس، جریان تونل‌زنی کاهش می‌یابد، که همان پدیده مقاومت تفاضلی منفی است. کاهش جریان تا زمانی ادامه می‌یابد که جابه‌جایی تراز فرمی در رابط‌ها و مولکول باعث شود که کانال‌های دیگری برای رسانش شرکت کنند. بنابراین، جریان دوباره افزایش می‌یابد و پدیده NDR از بین می‌رود. این پدیده در سوییچ‌های مولکولی و ذخیره‌سازی داده‌ها کاربرد دارد [۴۷].

در ادامه مقاله، اثر حضور میدان تبدالی به‌عنوان جدا کننده جریان‌های اسپینی در پیوندگاه Y- شکل بنزنی با یک رابط ورودی و دو رابط خروجی مطالعه می‌شود. در اینجا قطبش اسپینی متضاد در دو رابط خروجی می‌تواند از حالت اسپینی به‌طور کامل غیرقطبیده ورودی حاصل شود. بنابراین، پیوندگاه می‌تواند از نظر فضایی جداسازی جریان‌های قطبیده اسپینی را انجام دهد [۳۰]. برای رسیدن به این هدف، پتانسیل‌های شیمیایی سه رابط را به صورت  $\mu_B = 0$  و همچنین،  $\mu_L = \mu_R = -eV/2$  تنظیم می‌شوند. با این انتخاب، رابط پایین به‌عنوان رابط چشمه و دیگر رابط‌ها به‌عنوان رابط‌های چاه الکترون محسوب





شکل ۱۰: (الف) مولکول ککولین. منحنی‌های مشخصه I-V در پیوندگاه Y- شکل ککولینی در حضور میدان تبدالی به ترتیب با شدت (ب)  $0.1 |t_{ij}|$  و (ج)  $0.2 |t_{ij}|$ .



شکل ۹: منحنی‌های مشخصه I-V در پیوندگاه بنزنی Y- شکل در حضور میدان تبدالی به ترتیب با شدت (الف)  $0.1 |t_{ij}|$  و (ب)  $0.2 |t_{ij}|$ .

در این گستره در حالیکه  $T_{BL}^{\downarrow} = T_{BR}^{\uparrow} \neq 0$  هستند، به طور همزمان  $T_{BL}^{\uparrow} = T_{BR}^{\downarrow} = 0$  می‌شود [شکل ۸ (ب)]. بنابراین، با محاسبه جریان‌های اسپینی در گستره انرژی  $0.48 \text{ eV}$  تا  $0.95 \text{ eV}$  می‌توان انتظار داشت که جریان خروجی از رابط راست (چپ)، فقط دارای اسپین بالا (پایین) باشد.

نمودارهای ۹ (الف) و ۹ (ب) مشخصه I-V وابسته به اسپین را در حضور میدان تبدالی به ترتیب با شدت  $0.1 |t_{ij}|$  و  $0.2 |t_{ij}|$  نشان می‌دهند. در اینجا  $I_{BL}^{\uparrow} = I_{BR}^{\downarrow}$  و  $I_{BL}^{\downarrow} = I_{BR}^{\uparrow}$  در توافق با نتایجی است که پیش از این برای ترابردهای اسپینی بدست آمده بود. در شکل ۹ (الف) زمانی که شدت میدان تبدالی برابر با  $0.1 |t_{ij}|$  است. مطابق انتظار، در رابط‌های خروجی به صورت همزمان جریان‌های قطبیده‌ی اسپینی با حالات اسپینی متضاد به وجود نمی‌آید. اگر شدت میدان تبدالی به مقدار  $0.2 |t_{ij}|$  افزایش یابد، این سامانه می‌تواند در گستره ولتاژ بین  $0.48 \text{ eV}$  تا  $0.95 \text{ eV}$  همزمان جریان‌های خروجی قطبیده را با حالت‌های متفاوت اسپینی جدا کند.

مقدار بیشینه جریان‌های اسپینی که در این پدیده مشاهده می‌شود، با نقطه آبی رنگ در نمودار مشخص شده است. در اینجا میدان مغناطیسی تبدالی فقط بر رابط‌های راست و چپ در جهت پاد موازی اعمال شده است. زیرا در حالتی که میدان بر رابط‌های خروجی در جهت موازی و یا در موقعیتی که میدان تنها بر روی کانال رسانش اعمال شود، محاسبات این پدیده را نشان نمی‌دهد. لازم به ذکر است، چنانچه جهت میدان اعمالی بر رابط R و L عکس حالت پیش در نظر گرفته شود، قطبش جریان‌های اسپینی عکس خواهند شد، و در این حالت تنها جریان‌های  $I_{BL}^{\uparrow}$  و  $I_{BR}^{\downarrow}$  شارش می‌یابند.

برای نشان دادن اهمیت نوع مولکول در مرکز پیوندگاه Y- شکل در بررسی جداسازی فضایی اسپین‌ها، مشابه با پیوندگاه بنزنی جریان‌های اسپینی در پیوندگاه Y- شکلی بررسی می‌شود که به

حالت در یکی از رابط‌های خروجی یکی از جریان‌های اسپینی مسدود می‌شود. افزون بر این، در پیوندگاه مولکولی جریان ورودی غیرقطبیده می‌تواند به جریان‌های قطبیده با اسپین‌های متضاد تبدیل شود. این جداسازی فضایی اسپینی با در نظر گرفتن شکل دیگری از پیوندگاه بنزنی و تنظیم مجدد پتانسیل‌های شیمیایی رابط‌های خروجی امکانپذیر است. همچنین، محاسبات نشان می‌دهند که جداسازی جریان‌های اسپینی به شدت و موقعیت اعمال میدان تبادلی بستگی دارد. نتایج نظری ما برای پیوندگاه بنزنی، چندین ویژگی اسپینی را به صورت همزمان نشان می‌دهد که می‌توان از آن برای طراحی ادوات اسپینترونیک به صورت عملی بهره برد.

## مراجع

- [1] A. Vernes, B. L. Györfy, P. Weinberger, "Spin currents, spin-transfer torque, and spin-Hall effects in relativistic quantum mechanics," *Journal of Physical Review B*, 76, 012408-1-012408-4, 2007.
- [2] J. E. Birkholz, V. Meden, "Spin-orbit coupling effects in one-dimensional ballistic quantum wires," *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20, 085226-1-085226-6, 2008.
- [3] S. Ahmadi, M. Esmailzadeh, E. Namvar, G. Pan, "Spin-inversion in nanoscale graphene sheets with a Rashba spin-orbit barrier," *AIP Advances* 2, 1, 012130-1- 012130-9, 2012.
- [4] A. S. Naeimi, L. Eslami, M. Esmailzadeh, "A wide range of energy spin-filtering in a Rashba quantum ring using S-matrix method," *Journal of Applied Physics*, 113, 044316-1- 044316-6, 2013.
- [5] R. Citro, F. Romeo, M. Marinaro, "Zero-conductance resonances and spin filtering effects in ring conductors subject to Rashba coupling," *Journal of Physical Review B*, 74, 115329-1-115329-8, 2006.

جای مولکول بنزن در مرکز آن مولکول ککولین ( $C_{48}H_{24}$ ) قرار گرفته است [شکل ۱۰ (الف)]. نمودارهای شکل‌های ۱۰ (ب) و ۱۰ (ج) جریان‌های اسپینی را در پیوندگاه Y- شکل ککولینی نشان می‌دهند، در شرایطی که میدان تبادلی با شدت  $|t_{ij}|/1$  و  $|t_{ij}|/2$  بر رابط‌های راست و چپ پیوندگاه اعمال شده است. این نمودارها به وضوح نشان می‌دهند که نه فقط در شدت میدان  $|t_{ij}|/1$  بلکه در شرایطی که شدت میدان تبادلی به مقدار  $|t_{ij}|/2$  افزایش یافته، گستره‌ی ولتاژی مشاهده نمی‌شود که در آن تنها جریان خروجی اسپینی بالا از رابط راست و همزمان جریان خروجی اسپینی پایین از رابط چپ وجود داشته باشد. علت مشاهده نشدن این پدیده در پیوندگاه Y- شکل ککولینی ناشی از افزایش طول مولکول ککولین نسبت به مولکول بنزن است که سبب کاهش رسانش الکتریکی نیز می‌شود. بنابراین شدت و موقعیت میدان تبادلی، انتخاب پیکربندی متقارن برای پیوندگاه و همچنین، انتخاب صحیح مولکول متصل شده به سه رابط گرافینی در جداسازی فضایی جریان‌های اسپینی قطبیده در رابط‌های خروجی موثر هستند.

## ۴- نتیجه‌گیری

با استفاده از روش تابع گرین، جریان‌های اسپینی در پیوندگاه مولکولی Y- شکل بررسی شده است. مولکول بنزن در مرکز پیوندگاه و کانال رسانش در بین سه نانونوار گرافینی نیمه نامتناهی به‌عنوان رابط‌های خروجی در نظر گرفته شده است. در اینجا برای از بین بردن تبهگنی حالت‌های اسپینی مختلف، میدان مغناطیسی تبادلی بر پیوندگاه اعمال می‌شود. بنابراین، تراورد الکترون با اسپین بالا و پایین از یکدیگر جدا و متقابلاً جریان‌ها وابسته به اسپین می‌شوند. نتایج نشان می‌دهند که با انتخاب پیکربندی مناسب پیوندگاه و همچنین انتخاب صحیح پتانسیل‌های شیمیایی می‌توان در ولتاژهای خاصی جریان باری را در یکی از رابط‌های خروجی صفر کرد و فقط جریان اسپینی در این رابط بدست آید. در این شرایط، در سامانه جریان خالص اسپینی به وجود می‌آید. در پیوندگاه بنزنی، جریان خالص اسپینی در ولتاژهای متعددی رخ می‌دهد که این امر مزیت بکارگیری مولکول بنزن را ارائه می‌دهد. همچنین، این قطعه اسپینی، قابلیت ایجاد جریان‌های اسپینی به‌طور کامل قطبیده را دارد، که در این

plot and its origin,” *Journal of Physical Review B*, 81, 235114-1- 235114-7, 2010.

[16] I. Diez-Perez, Z. Li, J. Hihath, J. Li, C. Zhang, X. Yang, L. Zang, Y. Dai, X. Feng, K. Mullen, N. Tao, “Gate-Controlled electron transport in coronenes as a bottom-up approach towards graphene transistors,” *Nature communication*, 1, 31-35, 2010.

[17] X. Jia, M. Hofmann, V. Meunier, B. G. Sumpter, J. Campos-Delgado, J. M. Romo-Herrera, H. Son, Y. Hsieh, A. Reina, J. Kong, M. Terrones, M. S. Dresselhaus, “Controlled formation of sharp zigzag and armchair edges in graphitic nanoribbons,” *Science*, 323, 1701-1705, 2009.

[18] W. Youn Kim, K. S. Kim, “Prediction of very large values of magnetoresistance in a graphene nanoribbon device,” *Nature Nanotechnology*, 3, 408-412, 2008.

[19] M. Y. Han, B. Ozyilmaz, Y. Zhang, P. Kim, “Energy band-gap engineering of graphene nanoribbons,” *Physical Review Letters*, 98, 206805-1- 206805-4, 2007.

[20] D. Brown, Y. B. Band, Y. Avishai, “Magnetoresistance of two dimensional mesoscopic structures: A variational approach,” *Physical Review B*, 53, 4855-4869, 1996.

[21] A.N. Andriotis, M. Menon, “Transport properties of branched graphene nanoribbons,” *Applied Physics Letters*, 92, 042115-1-042115-3, 2008.

[22] H.Li, Y. Ping Chen, Y.E. Xie, J. Zhong, “Spin transistor based on T-shaped graphene junctions,” *Journal of Applied Physics*, 110, 033701-1-033701-5, 2011.

[6] M. Lee, C. Bruder, “Spin filter using a semiconductor quantum ring side coupled to a quantum wire,” *Journal of Physical Review B*, 73, 085315-1- 085315-5, 2006.

[7] I. Zutíć, J. Fabian, S. Das Sarma, “Spintronics: fundamentals and applications,” *Reviews of Modern Physics*, 76, 323-410, 2004.

[8] S. Datta, B. Das, “Electronic analog of the electro-optic modulator,” *Applied Physics Letters*, 56, 665-667, 1990.

[9] H.B. Akkerman, B. de Boer, “Electrical conduction through single molecules and self-assembled monolayers,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20, 013001-1-013001-20, 2008.

[10] M. Ratner, “A brief history of molecular electronics,” *Nature Nanotechnology*, 8, 378-381, 2013.

[11] A. Aviram, M. Ratner, “Molecular rectifiers,” *Chemical Physics Letters*, 29, 277-283 (1974).

[12] M.A. Reed, C. Zhou, C.J. Muller, T.P. Burgin, J. M. Tour, “Conductance of a molecular junction,” *Science*, 278, 252-254, 1997.

[13] D.M. Cardamone, C. A. Stafford, S. Mazumdar, “Controlling quantum transport through a single molecule,” *Nano Letters*, 6, 2422-2426, 2006.

[14] J.H. Ojeda, R. P. A. Lima, F. Domínguez-Adame, P. A. Orellana, “Trapping and motion of polarons in weakly disordered DNA molecules,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21, 285105-1- 285105-5, 2009.

[15] M. Araidai, M. Tsukada, “Theoretical calculations of electron transport in molecular junctions: Inflection behavior in Fowler-Nordheim

- [32] I.A. Shelykh, N.G. Galkin, N.T. Bagraev, "Quantum splitter controlled by Rasha spin-orbit coupling," *Physical Review B*, 72, 235316-1-235316-7, 2005.
- [33] D. Rai, O. Hod, A. Nitzan, "Magnetic field control of the current through molecular ring junctions," *Journal of Physical Chemistry Letters*, 2, 2118–2124, 2011.
- [34] D. Rai, O. Hod, A. Nitzan "Magnetic fields effects on the electronic conduction properties of molecular ring structures," *Physical Review B*, 85, 155440-1-155440-21, 2012.
- [35] N. Tsuji, S. Takajo, H. Aoki, "Large orbital magnetic moments in carbon nanotubes generated by resonant transport," *Physical Review B*, 75, 153406-1-153406-4, 2007.
- [36] A. Ahmadi Fouladi, S.A. Ketabi, S. M. Elahi, S. A. Sebt, "Tunnel magnetoresistance of the heterocyclic molecular junctions: A Green's function approach," *Journal of superconductivity and novel magnetism*, 25, 1965-1970, 2012.
- [37] M. Patra, S.K. Maiti, "Modulation of circular current and associated magnetic field in a molecular junction: A new approach," *Scientific Reports*, 7, 43343-1-43343-9, 2017.
- [38] K. Ullmann, P. B. Coto, S. Leitherer, A. Molina-Ontoria, N. Martín, M. Thoss, H. B. Weber, "Single-Molecule junctions with epitaxial graphene nanoelectrodes," *Nano Letters*, 15, 3512-3518, 2015.
- [39] J.A. Mol, C.S. Lau, W.J.M. Lewis, H. Sadeghi, C. Roche, A. Cnossen, J. H. Warner, C. J. Lambert, H.L. Anderson, G.A.D. Briggs, "Graphene-porphyrin single-molecule transistors," *Nanoscale*, 7, 13181-13185, 2015.
- [23] J. Guo, and Y. Ouyang, "spin-polarized edge and transport in graphene nanoscale junctions," *Applied physics letters*, 94, 243104-1-243104-3, 2009.
- [24] M.G. Zeng, L. Shen, Y.Q. Cai, Z. D. Sha, Y. P. Feng, "Perfect spin-filter and spin-valve in carbon atomic chains," *Applied physics letters*, 96, 042104-1-042104-3, 2010.
- [25] T. Ozaki, K. Nishio, H. Weng, H. Kino, "Dual spin filter effect in a zigzag graphene nanoribbon," *Physical Review B*, 81, 075422-1-075422-5, 2010.
- [26] L. Eslami, E. Faizabadi, "Induced spin-accumulation and spin-polarization in a quantum-dot ring by using magnetic quantum dots and Rashba spin-orbit effect," *Journal of Applied Physics*, 115, 204305-1-204305-5, 2014.
- [27] S. Ganguly, S. Basu "Interface sensitivity on spin transport through a three-terminal graphene nanoribbon," *Superlattices and Microstructures*, 120, 650-666, 2018.
- [28] C. Kergueris, J.P. Bourgoin, S. Palacin, "Electron transport through a metal-molecule-metal junctionr," *Physical Review B*, 59, 12505-12513, 1999.
- [29] S. Nakanishi, M. Tsukada, "Quantum loop current in a C60 molecular bridge," *Physical Review Letters*, 87, 126801-1 126801-4, 2001.
- [30] A.A. Kiselev, K.W. Kim, "T-shaped spin filter with a ring resonator," *Journal of Applied Physics*, 94, 4001-4005, 2003.
- [31] P. Földi, O. Kálmán, M.G. Benedict, F. M. Peeters, "Quantum rings as electron spin beam splitters," *Physical Review B*, 73, 155325-1-155325-5, 2006.

- [40] N. M.R. Peres, F. Guinea, A.H. Castro Neto, “Electronic properties of disordered two-dimensional carbon,” *Physical Review B*, 73, 125411-1- 125411-23, 2006.
- [41] H. Haugen, D. Huertas-Hernando, A. Brataas, “Spin transport in proximity-induced ferromagnetic graphene,” *Physical Review B*, 77, 115406-1-115406-8, 2008.
- [42] T. Jayasekera, J.W. Mintmire, “Transport in multiterminal graphene nanodevices,” *Nanotechnology*, 18, 424033-1-424033-5, 2007.
- [43] M.P. Lopez Sancho, J.M. Lopez Sancho, J. Rubio, “Quick iterative scheme for the calculation of transfer matrices: application to Mo(100),” *Journal of Physics F: Metal Physics*, 14, 1205-1215, 1984.
- [44] W. Gong, Y. Zheng, T. Lü, “Tunable pure spin currents in a triple-quantum-dot ring,” *Applied Physics Letters*, 92, 042104-1- 042104-3, 2008.
- [45] H. Khani, M. Esmaeilzadeh, F. Kanjouri, “Controllable quantum valley pumping with high current in a silicene junction,” *Nanotechnology*, 27, 495202-1-495202-9, 2016.
- [46] R. Farghadan, A. Saffarzadeh, “Generation of fully spin-polarized currents in three-terminal graphene-based transistors,” *RSC Advances* 5, 106, 87411-87415, 2015.
- [47] X. Jing Liu, K. Liang Dong, Z. An, “Influence of heterogeneous sulfur atoms on the negative differential resistance effect in polythiophene,” *Journal of Applied Physics*, 116, 093706-1-093706-4, 2014.

# Pure spin and spin polarized currents in the benzene molecule connected to three graphene leads

N. Farshchi<sup>1</sup>, M. Esmailzadeh<sup>2\*</sup>, L. Eslami<sup>1</sup>, S. M. Elahi<sup>1</sup>, E. Darabi<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Plasma Physics Research Center, Science and Research Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran.

<sup>2</sup> Department of Physics, Iran University of Science and Technology, Tehran.

**Abstract:** In this work, we present a theoretical study of a molecular junction based on benzene molecule at the center of the junction with three semi infinite graphene nanoribbons as external terminals to explore spin dependent current properties by using Green's function method. The exchange magnetic field is exerted on the molecular junction in order to break the degeneracy of electrons with spin up and spin down states. It is shown that by changing chemical potential and choosing a proper geometry of the structure we can control the direction of spin dependent electron current such that in one of the external terminals electrons with different spin states flow in opposite directions; therefore, in that terminal the pure spin current can be attainable. In addition, we show that by considering another form of benzene Y-shape junction and by readjusting chemical potentials of the external terminals, we can set the system in a way that a totally unpolarized incoming spin current split into spin up and spin down currents which transmit through different output terminals. In this case, the proposed system can be considered as a Stern-Gerlach device.

**Keywords:** Molecular junction, Benzene molecule, Pure spin current, Spin polarized current, Graphene nanoribbon.