



قطبش اسپینی و رسانش وابسته به اسپین در نانو نوار تک لایه زیگزاگ فسفرین در حضور میدان الکتریکی خارجی

حامد گرامی زاده | ادریس فیض آبادی *

دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

چکیده: با استفاده از روش تابع گرین ترکیب شده با تکنیک لوپز سانچو، به تحلیل و بررسی ترابرد الکترونی وابسته به اسپین در نانونوار زیگزاگ فسفرین (ZPNR) تک لایه در رژیم بالستیک پرداخته شده است. مطالعات نشان می‌دهد که رسانش اسپینی می‌تواند توسط یک میدان الکتریکی خارجی قابل کنترل که از طریق گیت و عمود بر کانال رسانش اعمال شده، تنظیم شود. به طور ویژه نتایج تحقیقات منجر به یافتن شرایطی شد که این کانال فسفرین میتواند به عنوان یک تبدیل کننده‌ی اسپین ایفای نقش کند. به طوریکه باریکه اسپین بالای ورودی را تحت شرایط خاص به باریکه اسپین خروجی پایین تبدیل کند که از اهمیت بالایی در اسپینترونیک برخوردار است.

واژگان کلیدی: تابع گرین غیر تعادلی، نانو نوار زیگزاگ فسفرین، رسانش اسپینی، برهمکنش راشبا، تکنیک لوپز سانچو.

Edris@iust.ac.ir

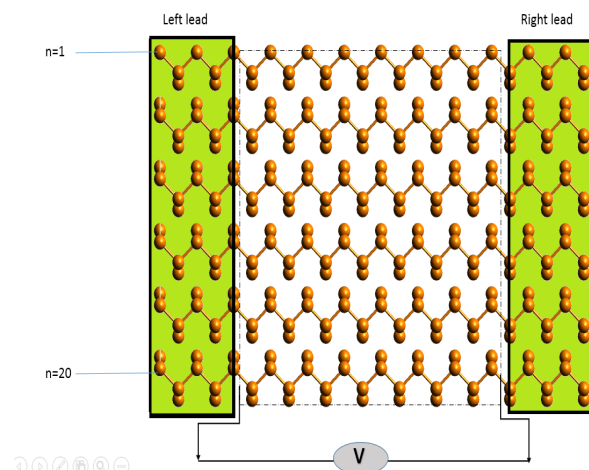
۱- مقدمه

چینش اتمی با سه اتم مجاور خود به حالت کوالانت در ارتباط است و دارای هیبریداسیون sp^3 می‌باشد که در این خصوص مشابه گرافین می‌باشد. همچنین فسفرین دارای گاف نوار eV ۱/۵۱ در نوع تک لایه eV ۰/۵۹ در نوع پنج لایه (می‌باشد [۴ و ۵]). نانو نوار دو بعدی آن به دلیل ساختار نواری و اثرات لبه‌ای دارای رسانش بالاتری نسبت به نوع یک بعدی است که با توجه به مطالعات انجام شده بر روی خواص الکترونی این ماده [۶] مشخص می‌شود که بدون در نظر گرفتن عرض نانو نوار به طور صریح رفتار فلز گونه دارد و این در حالی است که مطالعه نانونوار دسته مبلی فسفرین (APNRs) به دلیل گاف نواری مستقیم یک نیم رسانای ذاتی به شمار می‌رود [۷].

فسفر سیاه پایدارترین آلوتروپ فسفر می‌باشد که نوع دو بعدی آن به پیروی از همتای کربنی خود گرافین [۱]، فسفرین نامیده می‌شود. که دارای شبکه لانه زنبوری و شش گوش به صورت شبه دویعدی با چین خوردگی در صفحه می‌باشد [۲ و ۳]. خصوصیات ذاتی فسفرین از جمله گاف نواری مستقیم توانایی حل مشکلاتی را که ناشی از محدودیت استفاده در ادوات الکترونیکی و اسپینترونیکی گرافین زیگزاگ که به دلیل نداشتن گاف انرژی منجر می‌شود را دارا می‌باشد. در این ماده بر خلاف گرافین، تقارن هندسی پایین و ناهمگنی بالایی مشاهده می‌شود که با اعمال میدان الکتریکی خارجی عمود باعث می‌شود الکترون‌های عبوری از کانال یک میدان مغناطیسی احساس کنند که این میدان باعث برهمکنش راشبا می‌شود. در نانونوار فسفرین هر اتم فسفر در

۲- روش

در این قسمت اثر میدان الکتریکی خارجی عمود را بر روی رسانش اسپینی نانونوتر زیگراگ با استفاده از روش تابع گرین و تقریب بستگی قوی مورد مطالعه قرار می‌دهیم با توجه به شکل ۱، یک نانونوار زیگزاگ فسفرین متصل به دو الکتروود نیمه بینهایت در حضور میدان الکتریکی گیت در راستای Z قرار می‌دهیم.



شکل ۱: ساختار نانو نوار فسفرین زیگزاگ با الکتروودهای راست و چپ با اعمال میدان الکتریکی خارجی بوسیله گیت

با به کار بردن مدل بستگی قوی، هامیلتونی نانونوار فسفرین در کوانتس دوم می‌تواند به صورت زیر نوشته [۱۰-۷] شود

$$H_c = \sum_{i, \alpha, \beta=\uparrow, \downarrow} \varepsilon_i C_{i\alpha}^\dagger C_{i\alpha} - \sum_{i, \alpha, \beta=\uparrow, \downarrow} t_{ij} C_{i\alpha}^\dagger C_{j\alpha} + i \lambda_s \sum_{i, \alpha, \beta=\uparrow, \downarrow} C_{i\alpha}^\dagger (\vec{\sigma}_{\alpha\beta} \times U_{ij})_z C_{j\beta} \quad (1)$$

ترم اول مربوط به انرژی‌های خودجایگاه، ترم دوم مربوط به انتگرال‌های جهش همسایه‌های مجاور یک اتم از ساختار می‌باشد. در اینجا $C_{i\alpha}$ و $C_{j\alpha}^\dagger$ عملگرهای خلق (فنا) الکترون، حالت اسپینی α در جایگاه i ام می‌باشد. جمع بر روی همسایه‌های اتم‌های مجاور می‌باشد که دارای ۵ انتگرال پرش با مقادیر $(t_1, t_2, t_3, t_4, t_5)$ بین همسایه‌های مجاور است. ترم سوم برهمکنش اسپین مدار راشبا با مقادیر موثر λ_s را توصیف می‌کند [۲ و ۳]. $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ ماتریس پائولی است و سپس با استفاده خواص تابع گرین غیرتعدلی، تابع گرین کلی سلول واحد

لویز سانچو [۱۱ و ۱۲]، به همراه هامیلتونی در ناحیه مرکزی به صورت زیر بدست می‌آید.

$$g_{l,l} = [(E + \eta i)I - H_{l,l} - \sum^L - \sum^R]^{-1} \quad (2)$$

که در اینجا مقدار η کوچک موهومی است برای رفع تکینگی در تابع گرین، همچنین $\sum^{L(R)}$ خود انرژی‌های الکتروودهای چپ و راست و I بردار یکه را به شکل زیر محاسبه می‌کنیم.

$$\begin{aligned} \sum^L &= H_{0,1}^\dagger g_{0,0}^L H_{0,1} \\ \sum^R &= H_{1,2} g_{2,2}^R H_{1,2}^\dagger \end{aligned} \quad (3)$$

همچنین ماتریس‌های جفت شدگی،

$$\begin{aligned} \Gamma^L &= i[\sum^L - (\sum^L)^\dagger] \\ \Gamma^R &= i[\sum^R - (\sum^R)^\dagger] \end{aligned} \quad (4)$$

سپس با استفاده از رابطه لاندائر بوتیکر رسانش الکتریکی را محاسبه می‌کنیم [۱۲-۹].

قدرت بر همکنش اسپین مدار راشبا با ضریب ثابت راشبا λ_s در محدوده انرژی مجاز گزارش می‌شود و در دمای $T=0$ ک طول نانونوار زیگزاگ در این سیستم $L=80$ اتم که در آن $A=2/164$ a_1 و $a_2=2/207A$ ثابت‌های شبکه فسفرین می‌باشند.

$$G(E_F) = \frac{2e}{h} Tr[\Gamma^L(E_F)g(E_F)\Gamma^R(E_F)g(E_F)^\dagger]$$

$$G_{Tot} = G_{\uparrow\uparrow} + G_{\downarrow\downarrow} \quad (5)$$

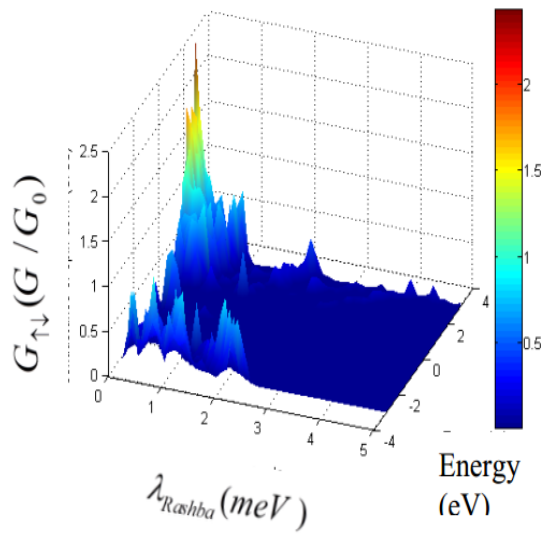
رابطه قطبش اسپینی نیز از رابطه قابل محاسبه می‌باشد

$$P_s = \frac{(G_{\uparrow\uparrow} - G_{\downarrow\downarrow})}{G_{Tot}} \quad (6)$$

۳- نتایج و بحث

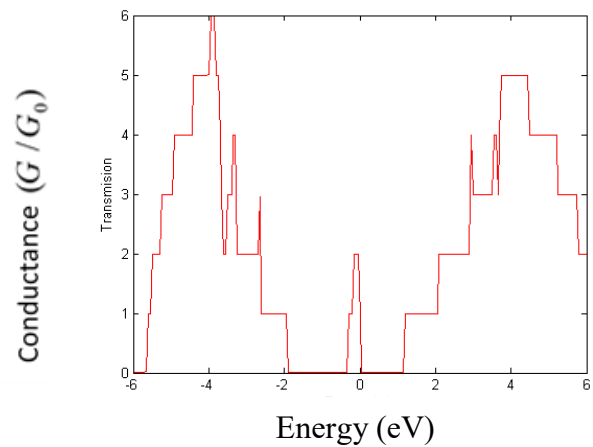
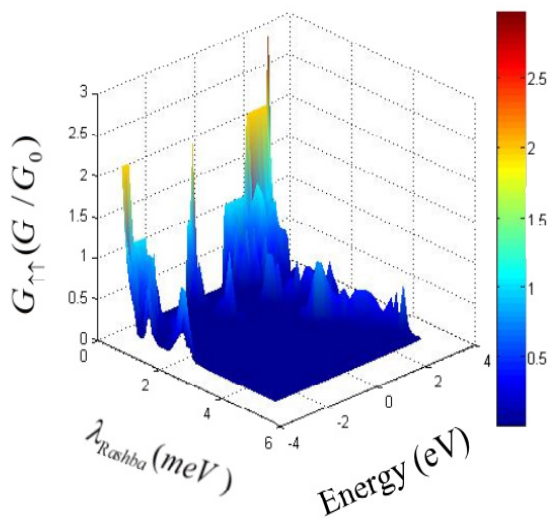
با توجه به روش توصیف شده در قسمت قبل، محاسبه‌ی رسانش‌های وابسته به اسپین و قطبش اسپینی پرداخته شد و نتایج خود را در این قسمت ارائه و بحث می‌کنیم. برای تمام محاسبات انجام شده در این مطالعه عرض نانونوار $N=20$ اتم در نظر گرفته شده است. به دلیل تبهگنی در بعضی از ترازها با توجه به اینکه ضریب

الف.



عبور برای هر رسانش $(G_{\uparrow\uparrow}, G_{\uparrow\downarrow})$ به یک بهنجار شده است. میتواند مقادیر بیشتر از ۱ در هر سایت به خود اختصاص دهد. طبق نمودار شکل ۲، رسانش اسپینی خروجی برای حالت هایی که اسپین بالا و پایین از الکتروود راست بیرون آمده اند و در حالتی که ضریب راشبا صفر باشد (یعنی میدان الکتریکی خارجی از سیستم برداشته شده است)، رسانش الکتریکی به صورت پله ای بوده و به دلیل نبود عامل خارجی، هر دو رسانش بالا و پایین، به روی هم افتاده اند. همچنین با توجه مقدار قابل ملاحظه ی رسانش در محدوده ی نزدیک انرژی فرمی، قطبش اسپینی می تواند اهمیت پیدا کند.

ب.



شکل ۲: رسانش الکتریکی در نانونوار زیگزاگ فسفرین در غیاب میدان الکتریکی خارجی بر حسب انرژی در انرژی فرمی صفر) رسم شده است.

در ابتدا در غیاب میدان الکتریکی خارجی رفتار رسانش سیستم بر حسب انرژی رفتار پله ای دیده می شود که دلیل آن امکان تونل زنی و گذار تنها از انرژی های مجاز در سیستم می باشد که با مقدار مشابه در مقاله [۱۳] قابل قبول است.

همچنین برای مقایسه بهتر می توانیم نمودار های رسانش وابسته به اسپین و قطبش اسپینی را به صورت سه بعدی که در آن یک بعد به ضریب راشبا علاوه بر انرژی و رسانش اختصاص داده شده است، در نظر بگیریم تا به کمک آن تغییرات رسانش وابسته به اسپین و قطبش اسپینی را به صورت همزمان با تغییر در شدت میدان الکتریکی خارجی مشاهده کنیم. با اعمال میدان الکتریکی خارجی در گیت توسط ضریب راشبا $\lambda_p(E_{\pm}) = \alpha e \Delta E_{\pm}$ که در آن ضریب $\alpha = 10^{-3}$ می باشد، آورده شده است [۱۴].

رسانش نانونوار فسفرین، می‌توان یک مبدل اسپینی کامل و قابل کنترل با میدان الکتریکی ناشی از گیت، در طول نانونوار طراحی نمود.

تشکر و قدردانی

این پژوهش با حمایت دانشگاه علم و صنعت ایران، گرنت شماره-ی ۱۶۰/۸۷۵۶ به انجام رسیده است.

مراجع

[1] N. Kostya S, et al. "Electric field effect in atomically thin carbon films." *Science*, 365, 666-669, 2004.

[2] E. Motohiko. "Electrically tunable conductance and edge modes in topological crystalline insulator thin films: minimal tight-binding model analysis." *New Journal of Physics*, 16, 0650151- 06501517, 2014.

[3] E. Motohiko. "Topological origin of quasi-flat edge band in phosphorene." *New Journal of Physics*, 16, 1150041- 11500413, 2014.

[4] K. Vadym V, et al. "Adsorption of metal adatoms on single-layer phosphorene." *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17, 992-1000, 2015.

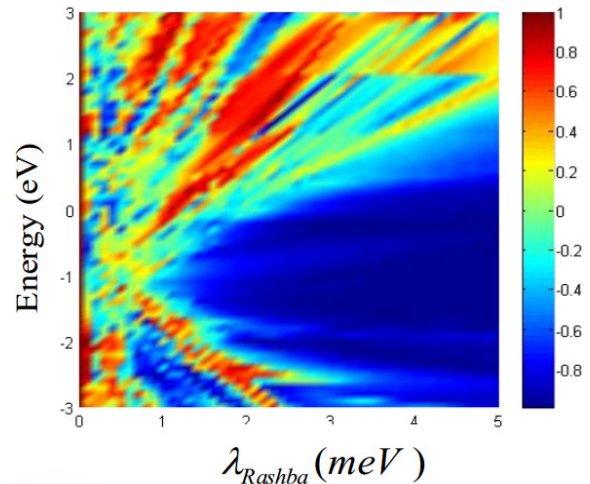
[5] Z. Popović, J Moradi Kurdestany, and S. Satpathy. "Electronic structure and anisotropic Rashba spin-orbit coupling in monolayer black phosphorus." *Physical Review B*, 92, 0351351-03513510, 2015.

[6] G. Hongyan, et al. "Phosphorene nanoribbons, phosphorus nanotubes, and van der Waals multilayers." *The Journal of Physical Chemistry C*, 118, 14051-14059, 2014.

[7] S. Esmail Taghizadeh, M, H. Zare, and Farhad Fazileh. "Scaling laws of band gaps of phosphorene nanoribbons: A tight-binding calculation." *Physical Review B*, 91, 0854091- 0854099, 2015.

[8] C. Azadi, A. Faizabadi, "E. quantum conductance of three-terminal nanoring in the presence of rashba interaction and an impurity", *International Journal of Applied Physics and Mathematics*, 1, 155-160, 2011.

[9] Li. T. C., and Shao-Ping Lu. "Quantum conductance of graphene nanoribbons with edge defects." *Physical Review B*, 77, 0854081- 0854089, 2008.



شکل ۳: الف) رسانش اسپین خروجی پایین در نانونوار زیگزاگ فسفرین در حضور میدان الکتریکی خارجی بر حسب انرژی و ثابت راشبا λ_s (ب) رسانش اسپین خروجی بالا در حضور میدان الکتریکی و ثابت راشبا λ_s (پ) قطبش اسپینی در حضور میدان الکتریکی و ثابت راشبا λ_s در محدوده‌ی بین -1 تا 1 رسم شده است.

در توصیف نمودارهای رسانش اسپینی خروجی در حضور میدان الکتریکی با توجه به وجود گاف نواری مستقیم در $\lambda_s(E_z) \neq 0$ با اعمال میدان الکتریکی خارجی افزایش گاف نواری مستقیم باعث می‌شود کاهش در رسانش اسپین خروجی اتفاق افتد که در هر دو نوع از رسانش اسپین بالا و پایین قابل مشاهده است همچنین افزایش قابل ملاحظه‌ی قدرت میدان خارجی در نمودار قطبش اسپینی باید منجر به عوض شدن اسپین (رنگ آبی یا مقادیر نزدیک به -1) شده باشد که در شکل ۳ مشاهده می‌شود.

۴- نتیجه گیری

در این مطالعه، رسانش الکترونی وابسته به اسپین و قطبش اسپینی را در نانو نوار زیگزاگ فسفرین در حضور میدان الکتریکی خارجی مورد مطالعه قرار دادیم. برای حالتی که شار ورودی از الکتروود چپ (ورودی) به صورت خالص وارد شود، با استفاده از تکنیک لویز سانچو و روش تابع گرین غیر تعادلی به صورت ترکیبی و همچنین با استفاده از میدان عمودی ناشی از گیت در محدوده کامل کانال

- [10] D. Supriyo. Electronic transport in mesoscopic systems. Cambridge university press, 1997.
- [11] E. Eleftherios N. Green's functions in quantum physics. New York: Springer, 1983.
- [12] S. MP Lopez, et al. "Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface Green functions." Journal of Physics F: Metal Physics 15, 851-858, 1985.
- [13] K. M. Ali M., and Mahdi Esmaeilzadeh. "Spin filtering in a magnetized zigzag phosphorene nanoribbon." Journal of Physics D: Applied Physics, 48, 485301, 2015.
- [14] K. Steven P, et al. "Electric field effect in ultrathin black phosphorus." Applied Physics Letters, 104, 1031061- 10310612, 2014.



Spin Polarization and Spin Conductance in a Single Layer Zigzag Black Phosphorene Nanoribbon in the Presence of External Electric Field

H. Gramizadeh, E. Faizabadi*

School of physics, Iran University Science and Technology, Tehran

Abstract: Spin-dependent electronic transport in a single-layer zigzag phosphorene nanoribbon (ZPNR) in a ballistic regime has been investigated by using the non-equilibrium Green's function method combined with the Lopez Sancho technique. Our findings show that spin conduction can be adjusted by an external electric field applied via the gate and perpendicular to the conduction channel. In particular, we have achieved the conditions that this zigzag phosphorene channel can play as a spin converter. So that the input spin up beam, under certain conditions, turns out to be an output spin down beam, which is of great importance in spintronics.

Keywords: Nonequilibrium green's function, Phosphorene nanoribbon, Spin-conductance, Rashba interaction, Lopez sancho technique