

کنترل قطبش اسپینی جریان خروجی با استفاده از نانو حلقه‌ی کوانتومی شش گوش‌ی زیگزاگی فسفرین

محترم رشوند | سید ادريس فيض آبادی *

دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، تهران

► Edris@iust.ac.ir

چکیده:

در این پژوهش با استفاده از روش تابع گرین غیرتعادلی، در مدل بستگی قوی، قطبش اسپینی جریان خروجی در نانو حلقه‌ی کوانتومی شش گوش فسفرین متصل شده به دو رابط خطی نیمه بینهایت ایده آل، به صورت عددی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهند که با کنترل شار عبوری از مرکز حلقه و هم‌چنین کنترل میدان الکتریکی اعمال شده به کل ساختار توسط ولتاژ گیت می‌توان جریان خروجی با قطبش اسپینی دلخواه داشت و از سیستم به‌عنوان یک فیلتر اسپینی برای الکترون‌های ورودی غیر قطبیده و هم‌چنین به‌عنوان یک وارونگر اسپینی برای الکترون‌های ورودی قطبیده، بهره جست. علاوه بر این، ضریب عبور کل الکترون‌ها از سیستم نیز به‌منظور افزایش بهره‌وری دستگاه، مورد بررسی قرار گرفته است. قطبش اسپینی و عبور کل بالای 90٪، گزارش شده است که کاربردهای فراوان در اسپینترونیک، حافظه‌های اسپینی و کامپیوترهای کوانتومی دارد.

واژگان کلیدی: نانو حلقه‌ی کوانتومی شش گوش زیگزاگی فسفرین، قطبش اسپینی، روش تابع گرین غیرتعادلی

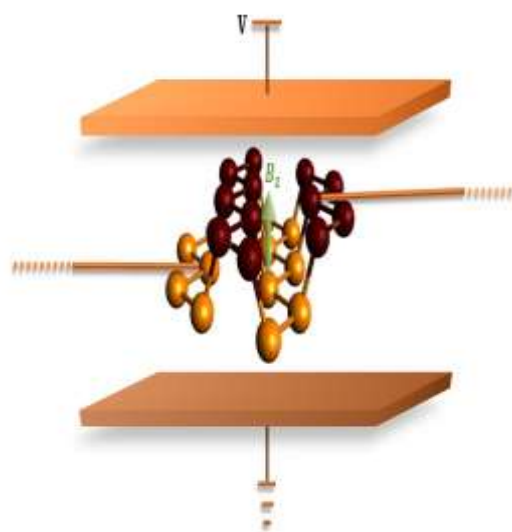
۱ مقدمه

با پیشرفت فناوری ساخت قطعات در ابعاد مزوسکوپی، پدیده‌های جالبی بر مبنای تداخل کوانتومی مشاهده شده است. در سال‌های اخیر فعالیت‌های زیادی برای بررسی سیستم‌های مزوسکوپی از جمله حلقه‌های کوانتومی صورت گرفته است. فسفر ماده‌ای است با دگرشکل‌های مختلف، که در بین آن‌ها فسفر سیاه در دمای اتاق و فشار معمولی از پایداری بیشتری برخوردار است [1]. به یک یا چند لایه از فسفر سیاه، فسفرین گفته می‌شود. فسفرین دارای ساختار لانه‌زنبوری شامل صفحات چین‌خورده

است که در آن اتم‌ها دوتا در میان، در دو صفحه‌ی متفاوت قرار گرفته‌اند.

فسفرین حاصل هیبریداسیون Sp^3 اوربیتال‌های p لایه‌ی آخر اتم‌های فسفر تشکیل‌دهنده‌اش می‌باشد. در حقیقت، در هر لایه هر اتم با سه پیوند کووالانسی به سه‌اتم مجاورش متصل است و لایه‌ها توسط پیوند واندروالسی روی هم قرار گرفته‌اند و در نهایت شبکه‌ای اورتورومبیک را به وجود آورده‌اند [2,3]. در سال ۲۰۱۴ محققان توانستند ساختار تک لایه‌ی این ماده را سنتز کنند [4]. فسفرین ماده‌ای نیمه‌رسانا از نوع p با گاف مستقیم به‌اندازه 2eV است، که این مقدار با افزایش تعداد لایه‌های

که در جمله‌ی اول آن ϵ_i انرژی الکترون در جایگاه i ام، t_{ij} ها در جمله‌ی دوم پارامترهای پرش و همچنین C_i^+ و C_j به ترتیب عملگرهای خلق و نابودی الکترون در جایگاه‌های i ام و j ام می‌باشند. t_1 ، انتگرال همپوشانی بین اتم‌ها در هر زنجیره‌ی زیگزاگی در لایه‌ی بالایی یا پایینی، t_2 ، انتگرال همپوشانی بین یک جفت از زنجیره‌های زیگزاگ بالایی و پایینی، t_3 ، انتگرال همپوشانی بین نزدیک‌ترین همسایه از زنجیره‌های زیگزاگی در لایه‌ی بالایی یا پایینی، t_4 ، انتگرال همپوشانی بین دومین همسایه‌ی نزدیک از زنجیره‌های زیگزاگی بالایی و پایینی و t_5 ، انتگرال همپوشانی بین دورترین اتم‌ها در زنجیره‌ی زیگزاگی بالایی و پایینی، می‌باشد [12]. جمله‌ی آخر در رابطه (۱) نشان‌دهنده‌ی برهم‌کنش اسپین مدار راشبا است، که در آن منظور از $\sigma_{\alpha\beta}$ درایه‌ی $\alpha\beta$ ام از بردار ماتریس‌های پائولی است و u_{ij} بردار واحد وصل‌کننده‌ی نقطه‌ی j به نقطه‌ی i در نظر گرفته شده است. λ ثابت راشبا می‌باشد و تمام بردارها در فضای حقیقی هستند.



شکل 1: شمای کلی از حلقه‌ی ۲۴ اتمی فسفرین متصل به دو رابط خطی نیمه بینهایت، اتم‌های قرمز (پرننگ) در لایه‌ی بالایی و اتم‌های نارنجی (کم‌رنگ) در لایه‌ی پایینی قرار دارند، میدان مغناطیسی از مرکز حلقه عبور می‌کند و میدان الکتریکی به کل حلقه اعمال می‌شود.

فسفرین کاهش می‌یابد و به حدود $0/3ev$ می‌رسد [8 – 5]. با توجه به قابلیت‌های ممتاز فسفرین نسبت به نیمه‌هادی‌های دیگر از جمله: انعطاف‌پذیری بالا، تحرک پذیری حامل‌های بار نسبتاً بالا [9,10]، شکاف انرژی مناسب و قابل تنظیم، ناهمسانگردی بسیار شدید در خواص الکتریکی و مکانیکی [11] و امکان تولید صنعتی با روش فراصوتی، این ماده برای استفاده در صنایع الکترونیک در آینده پتانسیل بسیار بالایی خواهد داشت [12]. در این تحقیق با استفاده از روش تابع گرین غیر تعادلی به تحلیل و بررسی قطبش و ترابرد وابسته به اسپین در نانو حلقه‌های کوانتومی فسفرین باز، در حالتی که اسپین الکترون‌های ورودی بدون قطبش یا قطبیده باشند، خواهیم پرداخت و با استفاده از برهمکنش‌های قابل کنترل راشبا که قدرت آن از طریق گیت خارجی کنترل می‌شود به تولید جریان‌های قطبیده‌ی اسپینی با قطبش دلخواه می‌پردازیم.

۲ مدل‌سازی

برای بررسی قطبش اسپینی در نانو حلقه‌های فسفرین، بر مبنای هامیلتونی در مدل بستگی قوی، از روش تابع گرین غیرتعادلی استفاده می‌کنیم. سیستم موردبررسی، یک نانو حلقه فسفرین ۲۴ اتمی است که به دو رابط خطی نیمه بی‌نهایت متصل است. میدان مغناطیسی به مرکز حلقه و میدان الکتریکی که از خارج توسط ولتاژ گیت کنترل می‌شود، به کل ساختار اعمال می‌شود. همان‌طور که در شکل ۱ نشان داده شده است، رابط‌ها یکسان و ایده آل هستند. جفت شدگی بین رابط‌ها و نانو حلقه‌ی کوانتومی فسفرین، فقط به اتم ابتدایی رابط‌های سمت چپ و راست محدود می‌شود. هامیلتونی سیستم ذکر شده در شکل کوانتاش دوم به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H_c = \sum_1^N \epsilon_i c_i c_i^+ + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_i^+ c_j + i\lambda \sum_{(i,j)} c_{i\alpha}^+ (\vec{\sigma}_{\alpha\beta} \times \hat{u}_{ij}) c_{j\beta} \quad (1)$$

که شکل ماتریسی هامیلتونی فوق برای یک حلقه‌ی N اتمی فسفرین این گونه نوشته می‌شود:

$$H_0 = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & t_{1,2} & \dots & t_{1,N-1} & t_{1,N} \\ t_{2,1} & \epsilon_0 & \dots & t_{2,N-1} & t_{2,N} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ t_{N-1,1} & t_{N-1,2} & \dots & \epsilon_0 & t_{N-1,N} \\ t_{N,1} & t_{N,2} & \dots & t_{N,N-1} & \epsilon_0 \end{pmatrix} \quad (۴)$$

که در آن $\epsilon_0 = 0$ بوده و t_{ij} با توجه به ساختار، یکی از مقادیر t_1 تا t_5 که در شکل (۲) به نمایش گذاشته شده است، را می‌گیرد. علاوه بر آن، شکل ماتریس هامیلتونی راشبا، H_R را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$H_R = \begin{pmatrix} 0 & H_R^{\uparrow\downarrow} \\ H_R^{\downarrow\uparrow} & 0 \end{pmatrix} \quad (۵)$$

که در آن ماتریس‌های $H_R^{\uparrow\downarrow}$ و $H_R^{\downarrow\uparrow}$ به صورت زیر ارائه می‌شوند:

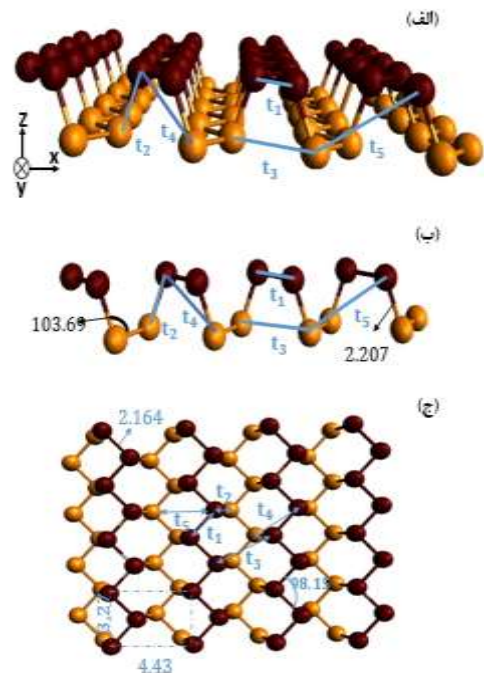
$$H_R^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} = \begin{pmatrix} H_{R1,1}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} & H_{R1,2}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} & \dots & H_{R1,N-1}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} & H_{R1,N}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} \\ H_{R2,1}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} & H_{R2,2}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} & \ddots & H_{R2,N-1}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} & H_{R2,N}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ H_{RN-1,1}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} & H_{RN-1,2}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} & \dots & H_{RN-1,N-1}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} & H_{RN-1,N}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} \\ H_{RN,1}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} & H_{RN,2}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} & \dots & H_{RN,N-1}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} & H_{RN,N}^{(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow)} \end{pmatrix} \quad (۶)$$

در اینجا مؤلفه‌های عمومی ماتریس به شکل زیر هستند:

$$(H_R^{\uparrow\downarrow})_{ij} = i\lambda \left((H_y)_{ij} + i(H_x)_{ij} \right) \quad (۷)$$

$$\begin{aligned} (H_R^{\downarrow\uparrow})_{ij} &= (H_R^{\uparrow\downarrow})_{ij}^+ \\ &= i\lambda \left((H_y)_{ij} - i(H_x)_{ij} \right) \end{aligned} \quad (۸)$$

که $(H_x)_{ij}$ و $(H_y)_{ij}$ به‌قرار زیر هستند:



شکل ۲: (الف) نمایی از تک لایه‌ی فسفرین با مشخص کردن پنج انتگرال همپوشانی در آن، (ب) نمایی جانبی از تک لایه‌ی فسفرین با مشخص کردن پنج انتگرال همپوشانی و همچنین زوایا در آن، (ج) نمایی بالا از تک لایه‌ی فسفرین با مشخص کردن پنج انتگرال همپوشانی، ثابت‌های شبکه و زوایا در آن.

می‌توان هامیلتونی سیستم را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$H_c = H + H_R \quad (۱)$$

که در آن هامیلتونی H معادل با دو جمله‌ی اول معادله‌ی (۱) می‌باشد و به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$H = \begin{pmatrix} H_0 & 0 \\ 0 & H_0 \end{pmatrix} \quad (۲)$$

و دارای عناصر ماتریسی زیر است:

$$(H_0)_{ij} = \begin{cases} \epsilon_0 & i = j \\ t_{ij} & i \neq j \end{cases} \quad (۳)$$

که t_{lead} انتگرال همپوشانی بین اتمها در رابط چپ یا راست است. همچنین $T(E)$ ضریب عبور الکترون از یک اتصال به اتصال دیگر، طبق رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود [15]:

$$T(E) = Tr [\Gamma^L G_C^R \Gamma^R G_C^{R+}] \quad (۱۶)$$

که Γ^R و Γ^L ماتریس‌های پهن‌شدگی حلقه با رابطها، به کمک روابط زیر قابل محاسبه هستند:

$$\Gamma^L = i[\Sigma_L - \Sigma_L^+] \quad (۱۷)$$

$$\Gamma^R = i[\Sigma_R - \Sigma_R^+] \quad (۱۸)$$

تابع گرین با در نظر گرفتن ماتریس‌های خود انرژی رابط‌های راست و چپ، برای انواع اسپین بالا و پایین، به صورت زیر بازنویسی می‌شود [15]:

$$G_C^R(E) = [(E + i\eta)I - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R]^{-1} \quad (۱۹)$$

$$= [(E + i\eta)I - H_C - (\Sigma_{L\uparrow} + \Sigma_{L\downarrow}) - (\Sigma_{R\uparrow} + \Sigma_{R\downarrow})]^{-1}$$

همچنین برای بررسی ضرایب عبور وابسته به اسپین می‌توان ماتریس‌های پهن‌شدگی حلقه با رابطها را برای انواع اسپین بالا و پایین، از طریق رابطه‌های (۱۷، ۱۸) محاسبه کرد که در نهایت رابطه‌ی ضریب عبور (۱۶)، به صورت زیر تعمیم داده می‌شود:

$$T_{\uparrow\uparrow}(E) = Tr [\Gamma^{L\uparrow} G_C^R \Gamma^{R\uparrow} G_C^{R+}] \quad (۲۰)$$

$$T_{\uparrow\downarrow}(E) = Tr [\Gamma^{L\uparrow} G_C^R \Gamma^{R\downarrow} G_C^{R+}] \quad (۲۱)$$

$$T_{\downarrow\uparrow}(E) = Tr [\Gamma^{L\downarrow} G_C^R \Gamma^{R\uparrow} G_C^{R+}] \quad (۲۲)$$

$$T_{\downarrow\downarrow}(E) = Tr [\Gamma^{L\downarrow} G_C^R \Gamma^{R\downarrow} G_C^{R+}] \quad (۲۳)$$

$$(H_y)_{ij} = \frac{\vec{u}_{ijy}}{\sqrt{u_{ijx}^2 + u_{ijy}^2 + u_{ijz}^2}} \quad (۹)$$

$$(H_x)_{ij} = \frac{\vec{u}_{ijx}}{\sqrt{u_{ijx}^2 + u_{ijy}^2 + u_{ijz}^2}} \quad (۱۰)$$

\vec{u}_{ijx} و \vec{u}_{ijy} به ترتیب بردار واحد وصل‌کننده‌ی اتمها از جایگاه i ام به j ام در راستاهای x و y هستند. حال با استفاده از روش تابع گرین تأخیری می‌توان ضرایب عبور را محاسبه کرد. تابع گرین تأخیری به شکل زیر است: [13]:

$$G_C^R(E) = [(E + i\eta)I - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R]^{-1} \quad (۱۱)$$

که H_C ماتریس هامیلتونی حلقه‌ی کوانتومی بدون حضور رابطها است و Σ_R و Σ_L ماتریس‌های خود انرژی رابط‌های چپ و راست، ناشی از اتصال سیستم به رابط‌های نیمه بینهایت چپ و راست می‌باشند. در ماتریس خود انرژی، تمام درایه‌ها صفر هستند به جز درایه‌هایی که مربوط به اتم‌های متصل به حلقه است و به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\Sigma_L = t_c^2 g^L \quad (۱۲)$$

$$\Sigma_R = t_c^2 g^R \quad (۱۳)$$

در این رابطه t_c انرژی جهش بین اتم‌های رابط چپ یا راست با اتم‌های حلقه است و توابع گرین سطحی در حلقه‌ی کوانتومی متصل به رابط‌های نیمه بینهایت به شکل زیر نوشته می‌شوند [14]:

$$g^L = \frac{-1}{t_{lead}} \exp\left(-i \cos^{-1}\left(\frac{E - E_0}{2t_{lead}}\right)\right) \quad (۱۴)$$

$$g^R = \frac{-1}{t_{lead}} \exp\left(-i \cos^{-1}\left(\frac{E + E_0}{2t_{lead}}\right)\right) \quad (۱۵)$$

ورودی یک بار بدون قطبش اولیه و بار دیگر به صورت قطبیده با جهت گیری رو به بالا، وارد سیستم شده اند. با ایجاد تغییراتی در پارامترهای مؤثر بر قطبش اسپینی سیستم، شامل شار مغناطیسی، میدان الکتریکی و انرژی الکترون های ورودی، می توان به طور هم زمان به ماکزیمم چرخش، عبور و قطبش اسپینی دست یافت. در شکل های (۳) - (۵) فرض شده است باریکه ی الکترون های ورودی بدون قطبش اولیه است. ضرایب عبور اسپین های پایین و بالا به ترتیب به صورت $T_{\downarrow} = T_{\uparrow\downarrow} + T_{\downarrow\downarrow}$ و $T_{\uparrow} = T_{\downarrow\uparrow} + T_{\uparrow\uparrow}$ تعریف می شوند، بدین معنی که بخشی از اسپین های پایین (بالا) در جریان خروجی، ناشی از جریان غیر قطبیده ی ورودی و بخشی ناشی از چرخش اسپین ها می باشند. علت این چرخش اسپینی، برهمکنش اسپین مدار راشبا یا همان برهمکنش میدان مغناطیسی ناشی از حرکت الکترون های سیستم در میدان الکتریکی، با اسپین الکترون های ورودی است که بر طبق آن سیستم می تواند به عنوان یک فیلتر یا چرخاننده اسپینی عمل کند. به منظور بهینه سازی، محاسبات زیادی صورت گرفته که بهترین آن ها در زیر ذکر شده است. مطابق شکل (۳)، در یک انرژی ثابت و دلخواه $E = 0/68(eV)$ می توان به حالتی دست یافت که با وجود غیر قطبیده بودن اسپین الکترون های ورودی، جریان خروجی قطبیده و دارای اسپین بالا یا پایین باشد. در شکل (۳-الف)، به بررسی نمودار اختلاف بین ضرایب عبور با اسپین پایین و بالا $(T_{\downarrow} - T_{\uparrow})$ بر حسب تغییرات شار مغناطیسی مرکزی $(\frac{\varphi}{\varphi_0})$ و همچنین تغییرات قدرت راشبا (λ) ، می پردازیم. نقاط نشان داده شده در شکل، همگی دارای $T_{\downarrow} - T_{\uparrow}$ نزدیک به 1 یا -1 هستند. نزدیک شدن اختلاف بین ضرایب عبور با اسپین پایین و بالا به 1 به معنی سد کردن اسپین های بالا یا وارونه کردن آن ها و نزدیک شدن آن به -1 به معنی سد کردن اسپین های پایین یا وارونه کردن آن ها خواهد بود. نقاط نشان داده شده در شکل همگی قابل تأمل هستند در حقیقت، سیستم در این نقاط می تواند به عنوان یک فیلتر اسپینی قوی معرفی شود. در قسمت (۳-ب)، به بررسی مجموع ضرایب عبور $(T_{\downarrow} + T_{\uparrow})$ بر حسب تغییرات شار مغناطیسی مرکزی $(\frac{\varphi}{\varphi_0})$ و تغییرات قدرت راشبا (λ) پرداخته ایم که نشان دهنده ی عبور کل از سیستم است. همان طور که در شکل دیده می شود،

و در نهایت قطبش اسپینی برای الکترون های ورودی غیر قطبیده برابر است با [16]:

$$P = \frac{(T_{\uparrow\uparrow} + T_{\downarrow\uparrow}) - (T_{\downarrow\downarrow} + T_{\uparrow\downarrow})}{(T_{\uparrow\uparrow} + T_{\downarrow\uparrow}) + (T_{\downarrow\downarrow} + T_{\uparrow\downarrow})} \quad (24)$$

$$= \frac{T_{\uparrow} - T_{\downarrow}}{T_{\uparrow} + T_{\downarrow}}$$

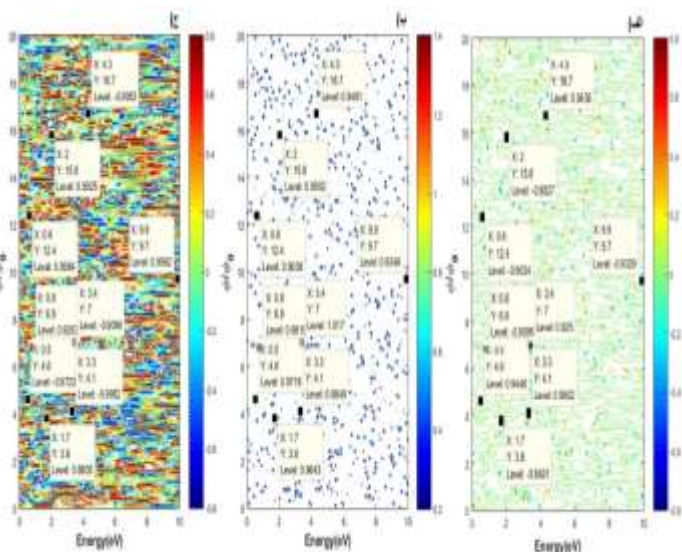
این فرمول برای الکترون های ورودی قطبیده با اسپین بالا به صورت زیر بازنویسی می شود:

$$P = \frac{(T_{\uparrow\uparrow}) - (T_{\uparrow\downarrow})}{(T_{\uparrow\uparrow}) + (T_{\uparrow\downarrow})} \quad (25)$$

۳ نتایج و بحث

با توجه به روش ذکر شده در بخش قبل، در اینجا به بررسی قطبش اسپینی و ضرایب عبور وابسته به اسپین برای یک حلقه ی کوانتومی فسفرین ۲۴ اتمی که دربرگیرنده ی یک شار مغناطیسی مرکزی به همراه اثر راشبا می باشد، می پردازیم. میدان مغناطیسی و میدان الکتریکی هر دو به صورت عمود بر صفحه ی حلقه اعمال می شوند با این تفاوت که میدان مغناطیسی از وسط حلقه عبور می کند و میدان الکتریکی کل ساختار را در برمی گیرد. انرژی جایگاهی اتم های فسفر برابر صفر در نظر گرفته شده است و انتگرال های همپوشانی در مدل پنج پارامتری برای فسفرین مقادیر $t_1 = -1/220 (eV)$ ، $t_2 = 3/665 (eV)$ ، $t_3 = -0/205 (eV)$ ، $t_4 = -0/105 (eV)$ ، $t_5 = -0/055 (eV)$ ، گزارش شده اند [12]. انتگرال همپوشانی در رابط خطی ایده آل برابر با: $t_{lead} = -10 (eV)$ و جفت شدگی بین اتم های رابط و حلقه برابر $t_c = 1 (eV)$ در نظر گرفته شده است. محاسبات با بی بعد سازی همراه بوده و شار مغناطیسی در واحد شار گذرنده از داخل یک حلقه ی فسفرین ۶ اتمی می باشد. الکترون های

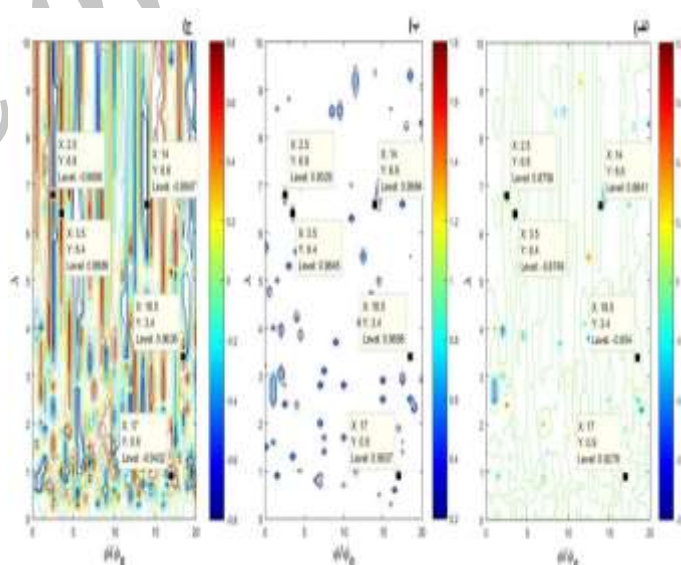
9898 و قطبش اسپینی برابر 0/9639 است که سیستم در این نقطه به عنوان یک فیلتر اسپینی برای الکترون‌های با حالت اسپینی بالا محسوب می‌شود همچنین نقطه‌ای با شار عبوری از مرکز $\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right) = 17$ و ثابت راشبا $\lambda = 0/9$ ، دارای چرخش اسپینی $T_{\downarrow} - T_{\uparrow} = 0/9278$ عبور کل $T_{\downarrow} + T_{\uparrow} = 0/9837$ و قطبش اسپینی برابر 0/9432 است که در این نقطه، سیستم به عنوان یک فیلتر اسپینی برای الکترون‌هایی با اسپین پایین عمل می‌کند. با توجه به شکل (۳)، نقاط ایده آل دیگری راه، در قسمت‌های (الف) تا (ج) می‌توان یافت. قسمت‌های (الف) تا (ج) شکل (۴)، به ترتیب، نمودار اختلاف بین ضریب عبور با اسپین‌های پایین و بالا $(T_{\downarrow} - T_{\uparrow})$ ، جریان خروجی کل $(T_{\downarrow} + T_{\uparrow})$ و قطبش را این بار بر حسب تغییرات شار مغناطیسی مرکزی و همچنین تغییر در انرژی الکترون‌های بدون قطبش ورودی نشان می‌دهد که در آن به منظور بهینه‌سازی،



شکل ۴: نتایج مربوط به ترابری وابسته به اسپین، برای الکترون‌های ورودی غیرقطبیده در قدرت راشبای ثابت و مشخص $\lambda = 3/4$. (الف) نمودار $T_{\downarrow} - T_{\uparrow}$ (چرخش اسپینی) بر حسب تغییرات انرژی الکترون ورودی (محور افقی) و تغییرات شار مغناطیسی مرکزی (محور عمودی)، (ب) نمودار $T_{\downarrow} + T_{\uparrow}$ (عبور کل از حلقه) بر حسب تغییرات انرژی الکترون ورودی (محور افقی) و تغییرات شار مغناطیسی مرکزی (محور عمودی) و (ج) قطبش اسپینی بر حسب تغییرات انرژی الکترون ورودی (محور افقی) و تغییرات شار مغناطیسی مرکزی (محور عمودی) را نشان می‌دهند. همان‌طور که مشاهده می‌کنید نقاط ایده‌آل در شکل مشخص شده است.

برای همان نقاط مشخص شده در شکل (۳-الف)، عبور کل نزدیک به 1 داریم همچنان که مشاهده می‌کنیم مقدار ماکزیمم این نمودار نزدیک 2 می‌باشد، این بدین معنی است که سیستم یکی از انواع اسپین‌های بالا یا پایین را از خود عبور می‌دهد. به طور هم‌زمان وقتی، عبور کل سیستم نزدیک به 1 و $T_{\downarrow} - T_{\uparrow}$ نزدیک به 1 یا -1 هستند، باعث افزایش کاربرد و بهره‌وری سیستم به عنوان یک فیلتر اسپینی می‌شوند. قسمت (۳-ج)، قطبش بر حسب تغییرات شار مغناطیسی مرکزی $\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right)$ و تغییرات قدرت راشبا (λ) ، را نمایش می‌دهد. قطبش اسپینی نیز همانند چرخش دارای مقادیری نزدیک به 1 برای الکترون‌های با اسپین بالا یا -1 برای الکترون‌های با اسپین پایین است.

در شکل (۳)، نقطه‌ای با شار عبوری از مرکز $\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right) = 18/5$ و قدرت راشبا $\lambda = 3/4$ دارای چرخش اسپینی $T_{\downarrow} - T_{\uparrow} = -0/954$ ، عبور کل $T_{\downarrow} + T_{\uparrow} = 0/$



شکل ۳: نتایج مربوط به ترابری وابسته به اسپین از حلقه‌ی کوانتومی فسفرین ۲۴ اتمی، برای الکترون‌های ورودی غیرقطبیده در انرژی ثابت $E = 0/68$ (eV). (الف) نمودار $T_{\downarrow} - T_{\uparrow}$ (چرخش اسپینی) بر حسب تغییرات شار مغناطیسی مرکزی (محور افقی) و تغییرات ثابت راشبا (محور عمودی)، (ب) نمودار $T_{\downarrow} + T_{\uparrow}$ (عبور کل از حلقه) بر حسب تغییرات شار مغناطیسی مرکزی (محور افقی) و تغییرات ثابت راشبا (محور عمودی) و (ج) قطبش اسپینی بر حسب تغییرات شار مغناطیسی مرکزی (محور افقی) و تغییرات ثابت راشبا (محور عمودی) را نشان می‌دهند. نقاط ایده‌آل در شکل مشخص شده است.

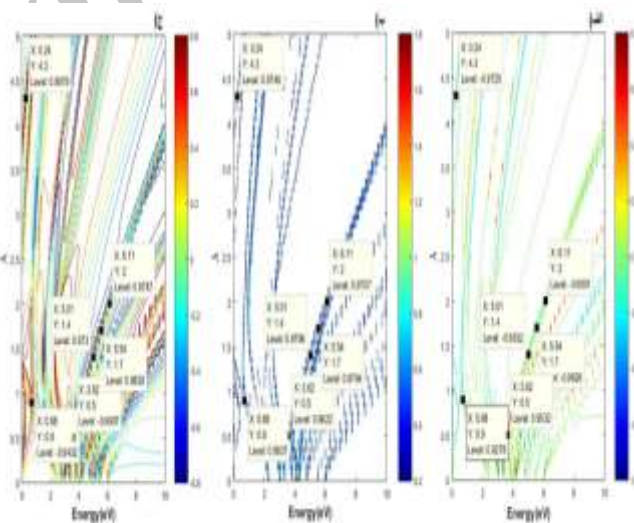
اسپین پایین عمل می‌کند. به منظور بهینه‌سازی فیلتر اسپینی، با جاروب کردن تمام شارهای مغناطیسی اشاره‌شده در اشکال قبل، بهترین شارمغناطیسی را برابر ۱۷ انتخاب کردیم.

در شکل (۵)، قسمت‌های (الف) تا (ج)، در شار مغناطیسی ثابت در شکل (۵)، با اعمال تغییر در ثابت راشبا با استفاده از یک $\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right) = 17$ ولتاژ خارجی و همچنین تغییر در انرژی الکترون‌های بدون قطبش ورودی، مجدداً می‌توان به مناطق قابل تأملی با اختلاف بین جریان خروجی با اسپین پایین و بالا $(T_{\downarrow} - T_{\uparrow})$ ، جریان خروجی کل $(T_{\downarrow} + T_{\uparrow})$ و قطبش ایده آل دست یافت. با توجه به شکل (۵)، بهترین نقطه‌ای که در آن‌ها سیستم می‌تواند به عنوان فیلتر اسپینی مورد استفاده قرار گیرد مشخص الکترون-هایی با انرژی $E = 0/24(eV)$ و ثابت راشبا $\lambda = 4/3$ ، دارای چرخش اسپینی $T_{\downarrow} - T_{\uparrow} = -0/9725$ عبور کل $T_{\downarrow} + T_{\uparrow} = 0/9746$ و قطبش اسپینی معادل با $0/9979$ را می‌توان به عنوان فیلتر اسپینی برای الکترون‌هایی با حالت اسپینی بالا و الکترون‌هایی با انرژی $E = 3/62(eV)$ و ثابت راشبا $\lambda = 0/5$ دارای چرخش اسپینی $T_{\downarrow} - T_{\uparrow} = 0/9532$ عبور کل $T_{\downarrow} + T_{\uparrow} = 0/9622$ و قطبش اسپینی معادل با $-0/9907$ را به عنوان فیلتر اسپینی برای الکترون‌هایی با حالت اسپینی پایین دانست.

شکل‌های (۶) - (۸)، نمودارهای مربوط به الکترون‌های ورودی قطبیده با جهت‌گیری اسپینی کاملاً بالا را نشان می‌دهند. در شکل (۶)، می‌توان دید در یک انرژی ثابت و دلخواه $E = 0/1(eV)$ ، برای الکترون‌های ورودی قطبیده، حالتی وجود دارد که در آن علاوه بر اینکه تمامی اسپین‌های ورودی با جهت‌گیری بالا، بعد از عبور از داخل سیستم تغییر جهت داده و به اسپین پایین تبدیل می‌شوند، ترابرد بار نیز مقداری قابل توجه داشته باشد. جریان خروجی با اسپین‌های پایین و بالا به دلیل قطبیده بودن جریان ورودی با جهت‌گیری بالا، به ترتیب به صورت $T_{\downarrow} = T_{\uparrow\downarrow}$ و $T_{\uparrow} = T_{\uparrow\uparrow}$ تعریف می‌شوند. این بدین معنی است که جریان خروجی با اسپین پایین فقط ناشی از چرخش اسپینی خواهد بود. در صورتی که اختلاف بین جریان

ثابت راشبا با توجه به شکل (۳)، $\lambda = 3/4$ در نظر گرفته شده است.

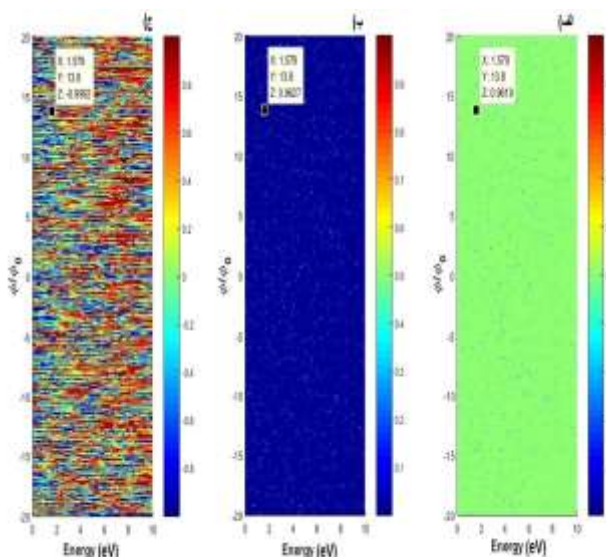
همان‌طور که در قسمت‌های (الف) تا (ج) شکل (۴) مشاهده می‌شود، الکترون‌هایی با انرژی $E = 2(eV)$ در میدان مغناطیسی $\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right) = 15/8$ ، دارای چرخش اسپینی $T_{\downarrow} - T_{\uparrow} = -0/9827$ عبور کل $T_{\downarrow} + T_{\uparrow} = 0/9925$ و قطبش اسپینی معادل با $0/9925$ هستند پس نانو حلقه در این نقطه علاوه بر سایر نقاط مشخص شده می‌تواند به عنوان فیلتر اسپینی قوی برای الکترون‌های با حالت اسپینی بالا و همچنین الکترون‌هایی با انرژی $E = 3/3(eV)$ در میدان مغناطیسی $\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right) = 4/1$ ، دارای چرخش اسپینی $T_{\downarrow} - T_{\uparrow} = 0/9802$ ، عبور کل $T_{\downarrow} + T_{\uparrow} = 0/9952$ و قطبش اسپینی معادل با $-0/9952$ هستند که در این نقطه، سیستم به عنوان یک فیلتر اسپینی برای الکترون‌هایی با



شکل ۵: نتایج مربوط به ترابری وابسته به اسپین برای الکترون‌های ورودی غیر قطبیده. الکترون‌های ورودی جهت‌گیری خاصی ندارند، میدان مغناطیسی $\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right) = 17$ در نظر گرفته شده است. (الف) نمودار $T_{\downarrow} - T_{\uparrow}$ (چرخش اسپینی) بر حسب تغییرات انرژی الکترون ورودی (محور افقی) و تغییر در ثابت راشبا (محور عمودی)، (ب) نمودار $T_{\downarrow} + T_{\uparrow}$ (عبور کل از حلقه) بر حسب تغییرات انرژی الکترون ورودی (محور افقی) و تغییر در ثابت راشبا (محور عمودی) و (ج) قطبش اسپینی بر حسب تغییرات انرژی الکترون ورودی (محور افقی) و تغییر در ثابت راشبا (محور عمودی) را نشان می‌دهند. همان‌طور که مشاهده می‌کنید نقاط ایده‌آل در شکل مشخص شده است.

اسپینی خروجی را برحسب تغییرات شار مغناطیسی گذرنده از مرکز و همچنین تغییر در بزرگی قدرت راشبا، مشاهده کرد.

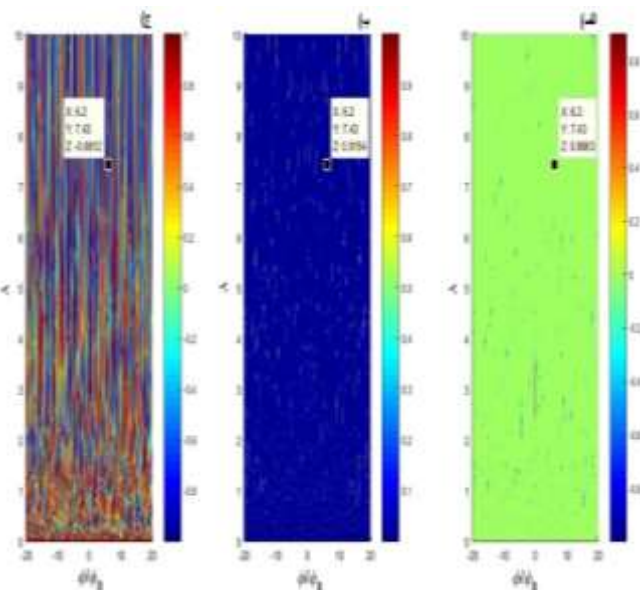
همان طور که مشاهده می‌شود، همان نقطه با قطبش اسپینی جریان خروجی برابر با $0/9812$ - نشان داده شده است که منفی بودن آن نشانه‌ی وارونه شدن اسپین است در نتیجه سیستم توانسته در آن نقطه به‌عنوان وارونگر اسپینی عمل کند. علت این چرخش اسپینی، برهمکنش اسپین مدار راشبا یا همان برهمکنش میدان مغناطیسی ناشی از حرکت الکترون در میدان الکتریکی، با اسپین الکترون است که بر طبق آن دستگاه می‌تواند به‌عنوان یک چرخاننده اسپینی عمل کند.



شکل ۷: ترابری وابسته به اسپین، با اعمال تغییر در پارامترهای مؤثر در قطبش شامل تغییر شار مغناطیسی عبوری از مرکز و انرژی الکترون‌های ورودی، الکترون‌های ورودی، قطبیده با جهت گیری رو به بالا هستند. ثابت راشبا $\lambda = 7/43$ در نظر گرفته شده است. محور افقی همان مقادیر انرژی الکترون، محور عمودی همان شار مغناطیسی عبوری از مرکز حلقه و رنگ‌ها به ترتیب نشان‌دهنده‌ی (الف) $T_{\uparrow\downarrow} - T_{\uparrow\uparrow}$ ، نشان‌دهنده‌ی چرخش اسپینی (ب) $T_{\uparrow\downarrow} + T_{\uparrow\uparrow}$ ، نشان‌دهنده عبور کل از حلقه (ج) قطبش اسپینی می‌باشد. همان طور که مشاهده می‌کنید نقاط دیگری با چرخش، عبور و قطبش اسپینی بالا وجود دارد که بهترین آن در شکل مشخص شده است.

شکل (۷) در قسمت‌های (الف) تا (ج) به ترتیب، نمودارهای اختلاف بین جریان خروجی با اسپین پایین و بالا ($T_{\uparrow\downarrow} - T_{\uparrow\uparrow}$)، جریان خروجی کل ($T_{\uparrow\downarrow} + T_{\uparrow\uparrow}$) و قطبش اسپینی جریان خروجی را این بار برحسب تغییرات میدان مغناطیسی و همچنین

خروجی با اسپین پایین و بالا ($T_{\uparrow\downarrow} - T_{\uparrow\uparrow}$) نزدیک به 1 باشد



شکل ۶: نتایج مربوط به ترابری وابسته به اسپین از حلقه‌ی کوانتومی فسفرین ۲۴ اتمی. اسپین‌های ورودی قطبیده هستند. محور افقی نمایش‌دهنده‌ی تغییرات شار مغناطیسی مرکزی، محور عمودی نمایش‌دهنده‌ی تغییرات ثابت راشبا و محور رنگی در شکل‌های (الف) تا (ج) به ترتیب نمایش‌دهنده‌ی (الف) $T_{\uparrow\downarrow} - T_{\uparrow\uparrow}$ ، نشان‌دهنده‌ی چرخش اسپینی (ب) $T_{\uparrow\downarrow} + T_{\uparrow\uparrow}$ ، نشان‌دهنده عبور کل از حلقه (ج) قطبش اسپینی می‌باشد. همان طور که مشاهده می‌کنید نقاط دیگری با چرخش، عبور و قطبش اسپینی بالا وجود دارد که بهترین آن در شکل مشخص شده است.

سیستم می‌تواند به‌عنوان وارونگر اسپینی عمل کند همچنین با نزدیک بودن مقدار ترابرد بار به 1، شاهد افزایش بازدهی و بهره‌ی سیستم خواهیم بود.

در شکل (۶-الف)، نمودار اختلاف بین جریان خروجی با اسپین پایین و بالا ($T_{\uparrow\downarrow} - T_{\uparrow\uparrow}$) با اعمال تغییر در شار گذرنده از مرکز حلقه و همچنین تغییر در ثابت راشبا نمایش داده شده است، که نقطه‌ای با شار مغناطیسی مرکزی $6/2 = \left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right)$ و ثابت راشبا $\lambda = 7/43$ دارای چرخش اسپینی $T_{\uparrow\downarrow} - T_{\uparrow\uparrow} = 0/8983$ ، در آن مشخص شده است. قسمت (۶-ب) بیانگر جریان خروجی کل ($T_{\uparrow\downarrow} + T_{\uparrow\uparrow}$) با اعمال تغییر در شار گذرنده از مرکز حلقه و همچنین تغییر در ثابت راشبا است، که همان نقطه عبور قابل قبولی $T_{\uparrow\downarrow} + T_{\uparrow\uparrow} = 0/9154$ را داراست. در قسمت (۶-ج)، می‌توان قطبش جریان

قطبیده‌ی ورودی، مجدداً می‌توان به مناطقی با همان ویژگی‌ها دست‌یافت. مقدار شار گذرنده از مرکز را برای الکترون‌های ورودی قطبیده $\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right) = 13/8$ ، در نظر می‌گیریم. همان‌طور که نشان داده‌شده است، در شار مغناطیسی ثابت، با اعمال تغییر در ثابت راشبا با استفاده از یک ولتاژ خارجی و تغییر در انرژی الکترون ورودی، نقطه‌ای با وارونگری اسپینی بالا یافت می‌شود.

با توجه به شکل (۸)، محدوده‌ی انرژی بین $E = 1 - 3(eV)$ محدوده‌ای ایده آل، دارای چرخش، عبور و قطبش اسپینی بالا می‌باشد که مقدار بهینه‌ی آن برای الکترون‌های با انرژی $E = 1/562(eV)$ در ثابت جفت‌شدگی اسپین مدار راشبا $\lambda = 7/39$ اتفاق می‌افتد. در این نقطه شاهد چرخش اسپینی $T_{\uparrow\downarrow} + T_{\uparrow\uparrow} = 0/9753$ ، عبور کل $T_{\uparrow\downarrow} - T_{\uparrow\uparrow} = 0/9951$ و همچنین قطبش اسپینی برابر $-0/9951$ هستیم.

۴ نتیجه‌گیری

در این مقاله به مطالعه‌ی عددی، قطبش و ترابرد وابسته به اسپین در نانو حلقه‌های فسیلین متصل شده به دو رابط خطی نیمه بینهایت ایده آل با استفاده از روش تابع گرین غیرتعادلی، در مدل بستگی قوی پرداخته‌ایم. دیده می‌شود.

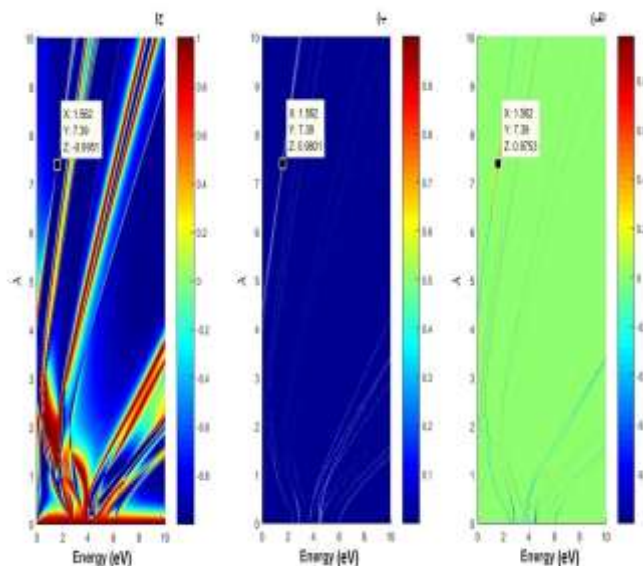
با تغییر اندازه‌ی شار مغناطیسی عبوری از مرکز حلقه، تغییر ثابت جفت‌شدگی اسپین مدار راشبا همچنین تغییر انرژی الکترون‌های ورودی، می‌توان ضریب عبور وابسته به اسپین را کنترل کرد. توانستیم پارامترهای موردنظر را به‌گونه‌ای بهینه کنیم که برای باریکه ورودی غیر قطبیده سیستم مانند یک فیلتر اسپینی و برای باریکه ورودی قطبیده مانند یک وارونگر اسپینی با ترابرد بالا عمل کند.

تشکر و قدردانی

با تشکر از دانشگاه علم و صنعت ایران که از این کاردر قالب طرح پژوهشی شماره‌ی (۱۶۰/۵۰۲) حمایت کرده است.

تغییرات انرژی الکترون‌های ورودی، برای الکترون‌های قطبیده نشان می‌دهد. در اینجا، ثابت راشبا با توجه به شکل (۴)، $\lambda = 7/43$ در نظر گرفته شده است.

همان‌طور که مشاهده می‌شود، نمودار نسبت به تغییرات شار مغناطیسی متقارن است و در اینجا نیز می‌توان برای الکترون‌هایی با انرژی $E = 1/579(eV)$ در میدان‌های مغناطیسی $\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right) = \pm 13/8$ ، در قسمت (الف) دارای چرخش اسپینی $T_{\uparrow\downarrow} - T_{\uparrow\uparrow} = 0/9619$ ، در قسمت (ب) عبور کل ایده آلی $T_{\uparrow\downarrow} + T_{\uparrow\uparrow} = 0/9627$ و در قسمت (ج)، قطبش اسپینی جریان خروجی برابر $-0/9992$ را داراست پس سیستم می‌تواند به‌عنوان یک وارونگر اسپینی، برای این الکترون‌ها عمل کند.



شکل ۸: نتایج مربوط به ترابرد وابسته به اسپین با اعمال تغییر در پارامترهای مؤثر در قطبش شامل تغییر در انرژی الکترون‌های ورودی و همچنین تغییر در ثابت راشبا. الکترون‌های ورودی، قطبیده با جهت گیری رو به بالا هستند. محور افقی تغییر در انرژی الکترون‌های ورودی، محور عمودی تغییرات ثابت راشبا، محور رنگی در شکل‌های (الف) تا (ج) به ترتیب نمایش‌دهنده‌ی (الف) $T_{\uparrow\downarrow} - T_{\uparrow\uparrow}$ ، نشان‌دهنده‌ی چرخش اسپینی (ب) $T_{\uparrow\downarrow} + T_{\uparrow\uparrow}$ ، نشان‌دهنده عبور کل از حلقه (ج) قطبش اسپینی می‌باشد. میدان مغناطیسی $\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right) = 13/8$ در نظر گرفته شده است. همان‌طور که مشاهده می‌کنید نقاط دیگری با چرخش، عبور و قطبش اسپینی بالا وجود دارد که بهترین آن در شکل مشخص شده است.

در شکل (۸) نیز، در شار مغناطیسی ثابت، با اعمال تغییر در ثابت راشبا با استفاده از یک ولتاژ خارجی و تغییر در انرژی الکترون‌های

- black phosphorus." *Physical Review B* 89, no. 23 : 235319, 2014.
- [9] Popović, Z. S., Jamshid Moradi Kurdestany, and S. Satpathy. "Electronic structure and anisotropic Rashba spin-orbit coupling in monolayer black phosphorus." *Physical Review B* 92, no. 3 : 035135, 2015.
- [10] Falkovsky, L. A. "Structure and electron bands of phosphorus allotropes." arXiv preprint arXiv:1406.7616, 2014.
- [11] Liang, Liangbo, Jun Wang, Wenzhi Lin, Bobby G. Sumpter, Vincent Meunier, and Minghu Pan. "Electronic bandgap and edge reconstruction in phosphorene materials." *Nano letters* 14, no. 11 : 6400-6406, 2014.
- [12] Sisakht, Esmail Taghizadeh, Mohammad H. Zare, and Farhad Fazileh. "Scaling laws of band gaps of phosphorene nanoribbons: a tight-binding calculation." *Physical Review B* 91, no. 8 : 085409, 2015.
- [13] Datta, Supriyo. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge university press, 1997.
- [14] Ryndyk, D.A. "Theory of Quantum Transport at Nanoscale: An Introduction". Springer International Publishing, 2015.
- [15] Fallah Farhang, Mahdi Esmailzadeh. "Spin transport properties in an organic molecule in the presence of Rashba spin-orbit interaction." *AIP Advances* 1, no. 3: 032113 2011.
- [16] Naeimi, Azadeh S., Leila Eslami, and Mahdi Esmailzadeh. "A wide range of energy spin-filtering in a Rashba quantum ring using S-matrix method."
- [1] Brown, Allan, and Stig Rundqvist. "Refinement of the crystal structure of black phosphorus." *Acta Crystallographica* 19, no. 4 : 684-685, 1965.
- [2] Liu, Han, Adam T. Neal, Zhen Zhu, Zhe Luo, Xianfan Xu, David Tománek, and Peide D. Ye. "Phosphorene: an unexplored 2D semiconductor with a high hole mobility." *ACS nano* 8, no. 4 : 4033-4041, 2014.
- [3] Li, Likai, Yijun Yu, Guo Jun Ye, Qingqin Ge, Xuedong Ou, Hua Wu, Donglai Feng, Xian Hui Chen, and Yuanbo Zhang. "Black phosphorus field-effect transistors." *Nature nanotechnology* 9, no. 5 : 372-377, 2014.
- [4] Brent, Jack R., Nicky Savjani, Edward A. Lewis, Sarah J. Haigh, David J. Lewis, and Paul O'Brien. "Production of few-layer phosphorene by liquid exfoliation of black phosphorus." *Chemical Communications* 50, no. 87 : 13338-13341, 2014.
- [5] Wang, V., Y. Kawazoe, and W. T. Geng. "Native point defects in few-layer phosphorene." *Physical Review B* 91, no. 4 : 045433, 2015.
- [6] Keshtan, M. Ali M., and Mahdi Esmailzadeh. "Spin filtering in a magnetized zigzag phosphorene nanoribbon." *Journal of Physics D: Applied Physics* 48, no. 48 : 485301, 2015.
- [7] Cai, Yongqing, Gang Zhang, and Yong-Wei Zhang. "Layer-dependent band alignment and work function of few-layer phosphorene." arXiv preprint arXiv:1409.8418 2014.
- [8] Tran, Vy, Ryan Soklaski, Yufeng Liang, and Li Yang. "Layer-controlled band gap and anisotropic excitons in few-layer

Archive of SID