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

محترم رشوند | سید ادریس فیض آبادی *

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

► Edris@iust.ac.ir

چکیدہ:

نانومقياس

در این پژوهش با استفاده از روش تابع گرین غیرتعادلی، در مدل بستگی قوی، قطبش اسپینی جریان خروجی در نانو حلقه ی کوانتومی شش گوش فسفرین متصل شده به دو رابط خطی نیمه بینهایت ایده آل، به صورت عددی موردبررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می دهند که با کنترل شار عبوری از مرکز حلقه و همچنین کنترل میدان الکتریکی اعمال شده به کل ساختار توسط ولتاژ گیت می توان جریان خروجی با قطبش اسپینی دلخواه داشت و از سیستم به عنوان یک فیلتر اسپینی برای الکترونهای ورودی غیر قطبی می این می دانت و از سیستم میدون یک فیلتر اسپینی برای عداد راید می از مرکز حلقه و همچنین کنترل میدان الکتریکی اعمال شده به کل ساختار توسط ولتاژ گیت می توان جریان خروجی با قطبش اسپینی دلخواه داشت و از سیستم به عنوان یک فیلتر اسپینی برای الکترونهای ورودی قطبیده و همچنین به عنوان یک وارونگر اسپینی برای الکترونهای ورودی قطبیده، بهره جست. علاوه بر این، ضریب عبور کل الکترونها از سیستم نیز به منظور افزایش بهرهوری دستگاه، موردبررسی قرار گرفته است. قطبش اسپینی و عبور کل بالای %900، گزارش شده است که کاربردهای فراوان در اسپینترونیک، حافظه های اسپینی و کاره می با توطبش اسپینی و کوری می با قطبش می به می واری فروی دستگاه، موردبرسی قرار گرفته است. کلوه بر این، ضریب عبور کل الکترون ها از سیستم نیز به منظور افزایش بهرهوری دستگاه، موردبررسی قرار گرفته است. کلوبش اسپینی و عبور کل بالای %900، گزارش شده است که کاربردهای فراوان در اسپینترونیک، حافظه های 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 مزوسکوپیک ازجمله 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 چندلایه از فسفر سیاه، فسفرین گفته می شود. فسفرین دارای ساختار لانهزنبوری شامل صفحات چین خورده

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

فسفرین حاصل هیبریداسیون 8 اوربیتالهای p لایه آخر اتمهای فسفر تشکیل دهندهاش میباشد. در حقیقت، درهر لایه هر اتم با سه پیوند کووالانسی به سهاتم مجاورش متصل است و لایهها توسط پیوند واندروالسی روی هم قرار گرفتهاند و درنهایت شبکهای اورتورومبیک را به وجود آوردهاند [2,3]. در سال ۲۰۱۴ محققان توانستند ساختار تک لایه ای از این ماده را سنتز کنند [4]. فسفرین مادهای نیمهرسانا از نوع p با گاف مستقیم بهاندازه 2*ev* است، که این مقدار با افزایش تعداد لایههای

نانومقياس

فسفرین کاهش مییابد و به حدود 0/3ev میرسد [8 – 5]. با توجه به قابلیتهای ممتاز فسفرین نسبت به نیمههادیهای دیگر ازجمله: انعطاف پذیری 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 ورودی بدون قطبش یا قطبیده باشند، خواهیم پرداخت و با استفاده از برهمکنشهای قابل کنترل راشبا که قدرت آن از طریق آستفاده از برهمکنش می هردازیم.

۲ مدلسازی

برای بررسی قطبش اسپینی در نانو حلقههای فسفرین، بر مبنای هامیلتونی در مدل بستگی قوی، از روش تابع گرین غیرتعادلی استفاده می کنیم. سیستم موردبرر سی، 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 می شود، به کل ساختار اعمال می شود. همان طور که در شکل ۱ نشان داده شده است، رابطها یکسان و ایده آل هستند. جفت شدگی بین رابطها و نانو حلقهی کوانتومی ف سفرین، فقط به اتم ابتدایی رابطهای سمت چپ و را ست محدود می شود. هامیلتونی سیستم ذکر شده در شکل کوانتش دوم به صورت زیر نوشته می شود:

$$H_{c} = \sum_{1}^{N} \varepsilon_{i} c_{i} c_{i}^{+} + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_{i}^{+} c_{j}$$
(1)
+ $i\lambda \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ \alpha\beta=\uparrow,\downarrow}} c_{i\alpha}^{+} (\vec{\sigma}_{\alpha\beta} \times \hat{u}_{ij}) c_{j\beta}$

که در جمله ی اول آن ε_i انرژی الکترون در جایگاه i ام، t_{ii} ها در جملهی دوم پارامترهای پرش و همچنین⁺C_i و_iC به ترتیب عملگرهای خلق و نابودی الکترون در جایگاههای i ام و j ام میباشند. t₁، انتگرال همپوشانی بین اتمها در هر زنجیرهی زیگزاگی در لایه یا بالایی یا پایینی، t₂، انتگرال همپوشانی بین یک جفت از زنجیرههای زیگزاگ بالایی و پایینی، t₃، انتگرال همپوشانی بین نزدیکترین همسایه از زنجیرههای زیگزاگی در لايەي بالايى يا پايىنى، 1₄، انتگرال ھمپوشانى بين دومين همسایه ینزدیک از زنجیره های زیگزاگی بالایی و پایینی و t_5 ، انتگرال همپوشانی بین دورترین اتمها در زنجیرهی زیگزاگی بالایی و پایینی، میباشد [12] . جمله ی آخر در رابطه (۱) نشان دهندهی برهم کنش اسپین مدار راشبا است، که در آن منظور u_{ii} ام از بردار ماتریس های یائولی است و $\sigma_{\alpha\beta}$ از $\sigma_{\alpha\beta}$ بردار واحد وصل کنندهی نقطه ی j به نقطهی i در نظر گرفته شده است. λ ثابت راشبا می باشد و تمام بردارها در فضای λ حقيقي هستند.



شکل 1: شمای کلی از حلقه ی۲۴ اتمی فسفرین متصل به دو رابط خطی نیمه بینهایت، اتمهای قرمز (پررنگ) 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 می شود.

نانومقياس



شکل۲: (الف) نمایی از تک لایهی فسفرین با مشخص کردن پنج انتگرال همپوشانی در آن، (ب) نمای جانبی از تک لایهی فسفرین با مشخص کردن پنج انتگرال همپوشانی و همچنین زوایا در آن، (ج) نمای بالا از تک لایهی فسفرین با مشخص کردن پنج انتگرال همپوشانی، ثابتهای شبکه و زوایا در آن.

ſ

مى توان ھاميلتونى سيستم را بەصورت زير بازنويسى كرد:

$$H_c = H + H_R \tag{(1)}$$

که در آن هامیلتونی H معادل با دو جمله ی اول معادله ی (۱) می باشد و به شکل زیر تعریف می شود:

$$H = \begin{pmatrix} H_0 & 0\\ 0 & H_0 \end{pmatrix} \tag{7}$$

و دارای عناصر ماتریسی زیر است:

$$(H_0)_{ij} = \begin{cases} \varepsilon_0 & i = j \\ t_{ij} & i \neq j \end{cases}$$
(r)

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

$$\begin{aligned} H_{0} & (\mathbf{f}) \\ = \begin{pmatrix} \varepsilon_{0} & t_{1,2} & \dots & t_{1,N-1} & t_{1,N} \\ t_{2,1} & \varepsilon_{0} & \dots & t_{2,N-1} & t_{2,N} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ t_{N-1,1} & t_{N-1,2} & \dots & \varepsilon_{0} & t_{N-1,N} \\ t_{N,1} & t_{N,2} & \dots & t_{N,N-1} & \varepsilon_{0} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

که در آن $\boldsymbol{e_0} = \boldsymbol{0}$ بوده و t_{ij} با توجه به ساختار، یکی از مقادیر t_1 تا t_5 که در شکل (2) به نمایش گذاشته شده است، را می گیرد. علاوه بر t_5 آن، شکل ماتریس هامیلتونی راشبا، H_R ، را می توان به صورت زیر نوشت:

$$H_R = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{H}_R^{\uparrow\downarrow} \\ \mathbf{H}_R^{\downarrow\uparrow} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \tag{(a)}$$

که در آن ماتریسهای $H_R^{\downarrow\downarrow}$ و $H_R^{\downarrow\downarrow}$ ، بهصورت زیر ارائه می شوند:

$$\begin{split} \mathbf{H}_{R}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow)} & (\varsigma) \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{R_{11}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} & \mathbf{H}_{R_{12}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} & \cdots & \mathbf{H}_{R_{1N-1}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} & \mathbf{H}_{R_{1N}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} \\ \mathbf{H}_{R_{21}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} & \mathbf{H}_{R_{22}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} & \ddots & \mathbf{H}_{R_{1N-1}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} & \mathbf{H}_{R_{2N}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{H}_{R_{N-11}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} & \mathbf{H}_{R_{N-12}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} & \cdots & \mathbf{H}_{R_{N-1N-1}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} & \mathbf{H}_{R_{N-1N}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} \\ \mathbf{H}_{R_{N,1}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} & \mathbf{H}_{R_{N,2}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} & \cdots & \mathbf{H}_{R_{NN-1}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} & \mathbf{H}_{R_{NN}}^{(\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow)} \end{pmatrix} \\ \end{split}$$

$$\left(\mathbf{H}_{R}^{\uparrow\downarrow}\right)_{i,j} = \mathbf{i}\lambda\left(\left(\mathbf{H}_{\mathbf{y}}\right)_{i,j} + \mathbf{i}(\mathbf{H}_{\mathbf{x}})_{i,j}\right) \tag{V}$$

که
$$\left(\mathsf{H}_{\mathbf{y}}
ight) _{i,j}$$
و $\left(\mathsf{H}_{\mathbf{x}}
ight) _{i,j}$ بهقرار زیرهستند:

www.SID.ir

$$(\mathbf{H}_{y})_{i,j} = \frac{\vec{u}_{ijy}}{\sqrt{u_{ijx}^{2} + u_{ijy}^{2} + u_{ijz}^{2}}}$$
(9)
$$(\mathbf{H}_{x})_{i,j} = \frac{\vec{u}_{ijx}}{\sqrt{u_{ijx}^{2} + u_{ijy}^{2} + u_{ijz}^{2}}}$$
(10)

 $\vec{u}_{ijx} \in \vec{u}_{ijx}$ به ترتیب بردار واحد وصل کننده ی اتمها از جایگاه i ام به \vec{u}_{ijx} و \vec{u}_{ijx} ام در راستاهای y و x هستند. حال با استفاده از روش تابع گرین تاخیری به شکل تأخیری می توان ضرایب عبور را محاسبه کرد. تابع گرین تاخیری به شکل زیر است: [13]:

$$_{C}^{R}(E) = [(E + i\eta)I - H_{c} - \Sigma_{L} - \Sigma_{R}]^{-1} \qquad (11)$$

که H_c ماتریس هامیلتونی حلقه ی کوانتومی بدون حضور رابطها است و H_c ماتریس هامیلتونی حلقه ی کوانتومی بدون حضور رابطها است و می و Σ_R و Σ_L ماتریس های خود انرژی رابطهای چپ و راست می اشند. در ماتریس خود انرژی، تمام درایهها صفر هستند به دز درایههایی که مربوط به اتمهای متصل به حلقه است و به صورت زیر تعریف می شوند:

$$\Sigma_L = t_c^2 g^L \tag{17}$$

$$\Sigma_R = t_c^2 g^R \tag{17}$$

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

$$g^{L} = \frac{-1}{t_{lead}} exp\left(-i\cos^{-1}\left(\frac{E-E_{0}}{2t_{lead}}\right)\right) \qquad (1\%)$$

$$g^{R} = \frac{-1}{t_{lead}} exp\left(-i\cos^{-1}\left(\frac{L+L_{0}}{2t_{lead}}\right)\right) \qquad (1\delta)$$

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]:

$$T(E) = Tr\left[\Gamma^{L}G_{C}^{R}\Gamma^{R}G_{C}^{R^{+}}\right]$$
(19)

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

$$\Gamma^{L} = i [\Sigma_{L} - \Sigma_{L}^{+}]$$
(\Y)
$$\Gamma^{R} = i [\Sigma_{R} - \Sigma_{R}^{+}]$$
(\A)

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

$$\begin{split} G^R_C(E) &= [(E+i\eta)I - H_c - \Sigma_L - \Sigma_R]^{-1} \quad (12) \\ &= [(E+i\eta)I - H_c - (\Sigma_{L\uparrow} + \Sigma_{L\downarrow}) \\ &- (\Sigma_{R\uparrow} + \Sigma_{R\downarrow})]^{-1} \end{split}$$

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 درنهایت رابطهی ضریب عبور (۱۶)، بهصورت زیر تعمیم داده می شود:

$T_{\uparrow\uparrow}(E) = Tr\left[\Gamma^{L\uparrow}G_C^R\Gamma^{R\uparrow}G_C^{R^+}\right]$	(7.)
$T_{\uparrow\downarrow}(E) = Tr\left[\Gamma^{L\uparrow}G^R_C\Gamma^{R\downarrow}G^{R\downarrow}_C\right]$	(17)
$T_{\downarrow\uparrow}(E) = Tr\left[\Gamma^{L\downarrow}G^R_C\Gamma^{R\uparrow}G^{R\uparrow}_C\right]$	(77)
$T_{\downarrow\downarrow}(E) = Tr\left[\Gamma^{L\downarrow}G_C^R\Gamma^{R\downarrow}G_C^{R^+}\right]$	(77)

نانومقياس

و درنهایت قطبش اسپینی برای الکترونهای ورودی غیر قطبیده برابر است با [16]:

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

این فرمول برای الکترونهای ورودی قطبیده با اسپین بالا بهصورت زیر بازنویسی میشود :



۳ نتایج و بحث

با توجه به روش ذکرشده در بخش قبل، در اینجا به بررسی قطبش اسپینی و ضرایب عبور وابسته به اسپین برای یک حلقهی کوانتومی فسفرین ۲۴ اتمی که دربر گیرندهی یک شار مغناطیسی مرکزی به همراه اثر راشبا میباشد، 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 اتمهای فسفر برابر صفر در نظر گرفتهشده است و انتگرالهای همپوشانی در مدل پنج پارامتری برای فسفرین ، $t_2 = 3/665 \, (eV)$ ، $t_1 = -1/220 \, (eV)$ مقادير مقادير $t_4 = -0/105 (eV)$, $t_3 = -0/205 (eV)$ انتگرال . [12] ، گزارش شدهاند $t_5 = -0/055 \ (eV)$ همپوشانی در رابط خطی ایده آل برابر با : و جفتشدگی بین اتم $_{lead}=-10~(eV)$ حلقه برابر $t_{
m c}=1~(eV)$ در نظر گرفته شده است. محاسبات با بیبعد سازی همراه بوده و شار مغناطیسی در واحد شار گذرنده از داخل یک حلقهی فسفرین ۶ اتمی میباشد. الکترون های

ورودي يکبار بدون قطبش اوليه و بار ديگر بهصورت قطبيده با جهت گیری رو به بالا، وارد سیستم شدهاند. با ایجاد تغییراتی در پارامترهای مؤثر بر قطبش اسپینی سیستم، شامل شار مغناطیسی، میدان الکتریکی و انرژی الکترونهای ورودی، میتوان بهطور همزمان به ماکزیمم چرخش، عبور و قطبش اسپینی دستیافت. درشکلهای(۳) – (۵) فرض شده است باریکهی الکترونهای ورودی بدون قطبش اولیه است. ضرایب عبور اسپینهای پایین و بالا به ترتيب بهصورت $T_{\downarrow} = T_{\uparrow\downarrow} + T_{\downarrow\downarrow}$ و تعریف می شوند، بدین معنی که بخشی از $T_{\uparrow} = T_{\downarrow\uparrow} + T_{\uparrow\uparrow}$ اسپین های پایین (بالا) در جریان خروجی، ناشی از جریان غیر قطبیدهی ورودی و بخشی ناشی از چرخش اسپینها میباشند. علت این چرخش اسپینی، برهمکنش اسپین مدار راشبا یا همان برهمكنش ميدان مغناطيسي ناشى از حركت الكترونهاي سيستم در میدان الکتریکی، با اسپین الکترون های ورودی است که بر طبق أن سیستم می تواند به عنوان یک فیلتر یا چرخاننده اسپینی عمل کند. بهمنظور بهینهسازی، محاسبات زیادی صورت گرفته که بهترین آنها در زیر ذکرشده است. مطابق شکل (۳)، در یک انرژی ثابت و دلخواه E = 0/68(eV) میتوان به حالتی دستيافت كه باوجود غير قطبيده بودن اسپين الكترونهاي 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 $(T_{\downarrow} - T_{\uparrow})$ برحسب تغییرات شار مغناطیسی ، (λ) مرکزی $\left(rac{arphi}{arphi_0}
ight)$ و همچنین تغییرات قدرت راشبا می پردازیم. نقاط نشان داده شده در شکل، همگی دارای نزدیک به 1 یا 1- هستند. نزدیک شدن اختلاف $T_{\downarrow}-T_{\uparrow}$ بین ضرایب عبور با اسپین پایین و بالا به 1 به معنی سدکردن -1 اسپین های بالا یا وارونه کردن آن ها و نزدیک شدن آن به به معنی سدکردن اسپینهای پایین یا وارونه کردن آنها خواهد بود. نقاط نشان دادهشده در شکل همگی قابل تأمل هستند در حقیقت، سیستم در این نقاط میتواند به عنوان یک فیلتر اسپینی قوی معرفی شود. در قسمت (۳–ب)، به بررسی مجموع ضرایب عبور $(T_{\downarrow} + T_{\uparrow})$ برحسب تغییرات شار مغناطیسی مرکزی و تغییرات قدرت راشبا (λ) پرداختهایم که نشان دهنده $\left(\frac{\varphi}{a_{\alpha}}\right)$

ی عبور کل از سیستم است. همان طور که در شکل دیده می شود،

9898 و قطبش اسپینی برابر 0/9639 است که سیستم در این نقطه بهعنوان یک فیلتر اسپینی برای الکترونهای باحالت اسپینی بالا محسوب می شود همچنین نقطهای با شار عبوری از مرکز 17 = $\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right)$ و ثابت راشبا 9/0 = λ ، دارای چرخش مرکز 17 = $\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right)$ و ثابت راشبا 9/0 = λ ، دارای چرخش اسپینی کل 70–30 مرکز 17 = $(-T_{\phi})$ و ثابت راشبا 9/0 = λ ، دارای چرخش کل 178 می مرکز 17 = $(-T_{\phi})$ و ثابت راشبا 9/0 = λ ، دارای چرخش برایر /0 = T_{ϕ} مرکز 17 = $(-T_{\phi})$ و ثابت راشبا 9/0 = λ ، دارای چرخش برایر /0 = T_{ϕ} مرکز 17 = $(-T_{\phi})$ و ثابت راشبا 9/0 = $(-T_{\phi})$ می مرکز 17 = $(-T_{\phi})$ و ثابت راشبا 9/0 = $(-T_{\phi})$ می مرکز 17 = $(-T_{\phi})$ و ثابت راشبا 10 = $(-T_{\phi})$ می مرکز 10 = $(-T_{\phi})$ می مرز 10 = $(-T_{\phi})$ می مرون 10 = $(-T_{\phi})$ می مرم



شکل f: نتایج مربوط به ترابری وابسته به اسپین،برای الکترونهای ورودی غیرقطبیده در قدرت راشبای ثابت ومشخص $\lambda = 3/4$. (الف) نمودار $T_1 - T_1$ (چرخش اسپینی) بر حسب تغییرات انرژی الکترون ورودی (محور افقی) و تغییرات شار مغناطیسی مرکزی (محور عمودی) ، (ب) نمودار $T_1 + T_1$ (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. همان طور که مشاهده می کنید نقاط ایده آل در شکل مشخص شده است.

نانومقياس

برای همان نقاط مشخص شده در شکل (۳-الف)، عبور کل نزدیک به 1 داریم همچنان که مشاهده می کنیم مقدار ماکزیمم این نمودار نزدیک 2 می باشد، این بدین معنی است که سیستم یکی از انواع اسپینهای بالا یا پایین را از خود عبور می دهد. بهطور هم زمان وقتی، عبور کل سیستم نزدیک به 1 و بهطور هم زمان وقتی، عبور کل سیستم نزدیک به 1 و $\uparrow T - \downarrow T$ نزدیک به 1 یا 1- هستند، باعث افزایش کاربرد و بهرهوری سیستم به عنوان یک فیلتر اسپینی می شوند. قسمت و بهرهوری سیستم به عنوان یک فیلتر اسپینی می شوند. قسمت و تغییرات قدرت راشبا (Λ)، را نمایش می دهد. قطبش اسپینی نیز همانند چرخش دارای مقادیری نزدیک به 1 برای الکترون های با اسپین بالا یا 1- برای الکترون های با اسپین پایین است.

 $igg(rac{arphi}{arphi_0}igg)=18/5$ در شکل (۳)، نقطه ای با شار عبوری از مرکز 18/5=18/5 و قدرت راشبا $\lambda=3/4$ دارای چرخش اسپینی $T_{\downarrow}+T_{\uparrow}=0/954$ ، عبور کل $T_{\downarrow}+T_{\uparrow}=-0/954$



شکل ۳: نتایج مربوط به ترابری وابسته به اسپین از حلقه یکوانتومی فسفرین ۲۴ اتمی، برای الکترون های ورودی غیرقطبیده در انرژی ثابت E = T (چرخش اسپینی) بر حسب تغییرات شار مغناطیسی مرکزی (محور افقی) وتغییرات ثابت راشبا (محور عمودی)، (ب) نمودار $\uparrow T + \downarrow T$ (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 مار مغناطیسی مرکزی (محور افقی) و تغییرات ثابت راشبا (محور عمودی) را نشان

نانومقياس

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

همان طور که در قسمتهای (الف) تا (ج) شکل (۴) مشاهده میشود، الکترونهایی باانرژی (eV) = 2(eV) در میدان مغناطیسی $15/8 = \left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right)$ ، دارای چرخش اسپینی $T_{\downarrow} + T_{\uparrow} = -0/9827$ معناطیسی $T_{\downarrow} - T_{\uparrow} - T_{\uparrow} = -0/9827$ هستند پس نانو 9902 و قطبش اسپینی معادل با 20/9926 هستند پس نانو حلقه در این نقطه علاوه بر سایر نقاط مشخص شده می تواند به عنوان فیلتر اسپینی قوی برای الکترونهای با حالت اسپینی بالا و همچنین الکترونهایی باانرژی (V) (eV) = 3/3(eV)مغناطیسی $1/4 = \left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right)$ ، دارای چرخش اسپینی مغناطیسی $T_{\downarrow} + T_{\uparrow} = 0/9802$ مستند که در 9849 و قطبش اسپینی معادل با 20/9952 هستند که در



شکل۵: نتایج مربوط به ترابری وابسته به اسپین برای الکترونهای ورودی غیر قطبیده. الکترونهای ورودی جهت گیری خاصی ندارند ، میدان مغناطیسی 17 = $\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right)$ در نظر گرفته شده است. (الف) نمودار T - T (چرخش اسپینی) بر حسب تغییرات انرژی الکترون ورودی (محور افقی) و تغییر در ثابت راشبا (محور عمودی)، (ب) نمودار T + T (عبور کل از حلقه) بر حسب تغییرات انرژی الکترون ورودی (محور افقی) و تغییر در ثابت راشبا (محور معودی) و (ج) قطبش اسپینی بر حسب تغییرات انرژی الکترون ورودی (محور افقی) و تغییر در ثابت راشبا (محور عمودی) را نشان میدهند. همان طور که مشاهده می کنید نقاط ایده آل در شکل مشخص شده است.

اسپین پایین عمل می کند. به منظور بهینه سازی فیلتر اسپینی، با جاروب کردن تمام شارهای مغناطیسی اشاره شده در اشکال قبل، بهترین شار مغناطیسی را برابر ۱۷ انتخاب کردیم.

در شکل (۵)، قسمتهای (الف) تا (ج)، در شار مغناطیسی ثابت با اعمال تغییر در ثابت راشبا با استفاده از یک $\left(\frac{\varphi}{w_0}
ight)=17$ ولتاژ خارجی و همچنین تغییر در انرژی الکترونهای بدون قطبش ورودى، مجدداً مى توان به مناطق قابل تأملى با اختلاف بین جریان خروجی با اسپین پایین و بالا $(T_{\downarrow} - T_{\uparrow})$ ، جریان (T↓ + T↑) و قطبش ایده آل دستیافت. خروجی کل با توجه به شکل (۵)، بهترین نقاطی که در آنها سیستم میتواند بهعنوان فيلتر اسييني مورداستفاده قرار گيرد مشخص الكترون- $\lambda = 0/24 (eV)$ هايى باانرژى E = 0/24 (eV) $T_{\downarrow} - T_{\uparrow} = -0/9725$ ، دارای چرخش اسپینی $T_{\downarrow} - T_{\uparrow} = -0/9725$ ، دارای چرخش ا و قطبش T_{\downarrow} + T_{\uparrow} = 0/9746 عبور کل اسييني معادل با 0/9979 را ميتوان بهعنوان فيلتر اسييني براي الكترونهايي باحالت اسييني بالا و الكترونهايي باانرژي و ثابت راشبا $\lambda = 0/5$ دارای چرخش E = 3/62(eV) $T_{\perp} - T_{\uparrow} = 0/9532$ عبور کل $T_{\downarrow} + T_{\uparrow} = 0/9622$ و قطبش اسپینی معادل با 9907/- را بهعنوان فيلتر اسپيني براي الكترونهايي باحالت اسپینی پایین دانست.

شکلهای (۶)–(۸)، نمودارهای مربوط به الکترونهای ورودی قطبیده با جهت گیری اسپینی کاملاً بالا را نشان میدهند. در شکل (۶)، میتوان دید در یک انرژی ثابت و دلخواه وجود دارد که در آن علاوه بر اینکه تمامی اسپینهای ورودی با وجود دارد که در آن علاوه بر اینکه تمامی اسپینهای ورودی با جهت گیری 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 جهت گیری بالا، به ترتیب معنی است که جریان خروجی با اسپین پایین فقط ناشی از چرخش اسپینی خواهد بود. درصورتیکه اختلاف بین جریان







شکل ۶: نتایج مربوط به ترابری وابسته به اسپین از حلقه ی کوانتومی فسفرین ۲۴ اتمی. اسپینهای ورودی قطبیده هستند. محور افقی نمایش دهنده ی تغییرات شار مغناطیسی مرکزی، محور عمودی نمایش دهنده ی تغییرات ثابت راشبا و محور رنگی در شکلهای (الف) تا (ج) به ترتیب نمایش دهنده ی (الف) $\uparrow_{\uparrow} T = \downarrow_{\uparrow} T$ ، نشان دهنده ی چرخش اسپینی (ب) $\uparrow_{\uparrow} T + \downarrow_{\uparrow} T$ ، نشان دهنده عبور کل از حلقه (ج) قطبش اسپینی می باشد. همان طور که مشاهده می کنید 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 ($\uparrow T - \downarrow - T$) با اعمال تغییر در شار گذرنده از مرکز حلقه و همچنین تغییر در ثابت راشبا نمایش دادهشده است، که نقطهای با شار مغناطیسی مرکزی $2/6 = \left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right)$ و ثابت راشبا $\lambda = 7/43$ دارای چرخش اسپینی راشبا 100 = 100 م دارای چرخش اسپینی اعمال تغییر در شار گذرنده از مرکز حلقه و همچنین تغییر در ثابت راشبا است، که همان نقطه عبور قابل قبولی 1 = 1 + 1

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

همان طور که مشاهده می شود، همان نقطه با قطبش اسپینی جریان خروجی برابر با 0/9812 - نشان داده شده است که منفی بودن آن نشانه ی وارونه شدن اسپین است درنتیجه سیستم توانسته در آن نقطه به عنوان وارونگر اسپینی عمل کند. علت این چرخش اسپینی، برهمکنش اسپین مدار راشبا یا همان برهمکنش میدان مناطیسی ناشی از حرکت الکترون در میدان الکتریکی، با اسپین الکترون است که بر طبق آن دستگاه می تواند به عنوان یک چرخاننده اسپینی عمل کند.



شکل ۲: ترابری وابسته به اسپین، 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، محورعمودی همان شار مغناطیسی عبوری از مرکز حلقه و رنگها به راشبا ترتیب نشان دهنده ی (الف) $\uparrow T - I_{+}$ ، نشان دهنده ی چرخش اسپینی (ب) ممان طور که مشاهده می کنید نقاط دیگری با چرخش، عبور و قطبش اسپینی می باشد. همان طور که مشاهده می کنید نقاط دیگری با چرخش، عبور و قطبش اسپینی بالا وجود دارد که بهترین آن در شکل مشخص شده است.

شکل (۲) در قسمتهای (الف) تا (ج) به ترتیب، نمودارهای اختلاف بین جریان خروجی با اسپین پایین و بالا ($\uparrow T - I_{\uparrow}$)، جریان خروجی کل ($\uparrow T_{\uparrow} + T_{\uparrow}$) و قطبش اسپینی جریان خروجی را این بار برحسب تغییرات میدان مغناطیسی و همچنین

نانومقياس

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

همان طور که مشاهده می شود، نمودار نسبت به تغییرات شار مغناطیسی متقارن است و در اینجا نیز می توان برای الکترون هایی باانرژی (eV) = 1/579 = 2 در میدان های مغناطیسی $13/8 \pm = \left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right)$ ، در قسمت (الف) دارای مغناطیسی $13/8 \pm 13/8$, در قسمت (الف) دارای چرخش اسپینی 10/9619 = 1, در قسمت (ب) عبور کل ایده آلی 10/9627 = 1, در قسمت (ب) عبور کل ایده آلی 10/9627 = 1, در قسمت (ب) داراست پس سیستم می تواند به عنوان یک وارونگر اسپینی، برای این الکترون ها عمل کند.



شکل۸: نتایج مربوط به ترابری 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) الکترونهای ورودی، محور عمودی تغییرات ثابت راشبا، محور رنگی در شکلهای (الف) تا (ج) به ترتیب نمایش دهنده ی(الف) $\uparrow_1 T - \downarrow_1$ ، نشاندهنده چرخش اسپینی (ب) مثاطع ازج) به ترتیب نمایش دهنده عبور کل از حلقه (چ) قطبش اسپینی می باشد. میدان منانده می ان از ج) به ترتیب نمایش دهنده عبور کل از حلقه (چ) قطبش اسپینی می باشد. میدان مناناطیسی $13/5 = \left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right)$ در نظر گرفته ده است. همان طور که مشاهده می کنید 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

٤ نتيجه گيري

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

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.

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 spinorbit 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, Esmaeil Taghizadeh, Mohammad H. Zare, and Farhad Fazileh.
 "Scaling laws of band gaps of phosphorene nanoribbons: a tightbinding 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 Esmaeilzadeh. "Spin transport properties in an organic molecule in the presence of Rashba spinorbit interaction." AIP Advances 1, no. 3: 032113 2011.
- [16] Naeimi, Azadeh S., Leila Eslami, and Mahdi Esmaeilzadeh. "A wide range of energy spin-filtering in a Rashba quantum ring using S-matrix method."

نانومقياس

- [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 fieldeffect 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 fewlayer 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 Esmaeilzadeh. "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 fewlayer 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



Journal of Applied Physics 113, no. 4 : 044316, 2013.