



پمپ جریان های باری و اسپینی در نانونوارهای سیلیسینی زیگزاگ و بررسی اثر پهنا بر جریان های پمپ شده

فاطمه بوربور^۱ | مهدی اسماعیل زاده^{۲*} | سید محمد الهی^۱ | لیلا اسلامی^۱ | الهام دارابی^۱

^۱ گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات، تهران، ایران

^۲ دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، نارمک تهران، ایران

چکیده: در این پژوهش، با استفاده از روش تابع گرین کلدیش، جریان های پمپ شده اسپینی در نانونوارهای سیلیسینی زیگزاگ در رژیم آرام تغییر (آدیاباتیک) بررسی شده است. برای پمپ جریان اسپینی از دو میدان وابسته به زمان در دو طرف سامانه در حضور میدان مغناطیسی تبدلی استفاده شده است. در این شرایط با اعمال میدان الکتریکی می توان جریان پمپ شده ۱۰۰٪ قطبیده القا کرد. همچنین، اثر پهنا بر شدت جریانهای پمپ شده باری بررسی کرده و نشان داده ایم که در نانونوارهای سیلیسینی با تعداد زنجیره های زوج و فرد شدت جریان پمپ شده تقریباً یکسان است. برخلاف نانونوارهای گرافینی که شدت جریان پمپ شده باری در پهناهای با تعداد زنجیره های زوج بیشتر از فرد است.

واژگان کلیدی: پمپ کوانتومی، نانونوار سیلیسینی، نانو نوار گرافینی، تابع گرین کلدیش، جریان قطبیده اسپینی.

mahdi@iust.ac.ir

۱- مقدمه

این اختلاف پتانسیل سبب باز شدن گاف نواری قابل کنترل در ساختار نواری سیلیسین می شود [۹-۱۰]. همچنین، با توجه به اینکه بیشتر ادوات الکترونیکی بر پایه سیلیکون طراحی شده اند، سیلیسین و مشتقاتش مانند نانونوارهای سیلیسینی برای استفاده در آنها نسبت به گرافین ارجحیت دارند. در سال های اخیر، اسپینترونیک، یعنی بکارگیری درجات آزادی اسپینی الکترون در ادوات، به دلیل سرعت تراپرد بالا به طور وسیع مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است [۱۱-۱۳].

پمپ کوانتومی که تولید جریان به وسیله اعمال میدانهای وابسته به زمان در غیاب اعمال یک پتانسیل ثابت است، در اینگونه مواد مورد توجه قرار گرفته است [۱۴-۱۸]. به طور مثال، از زمان

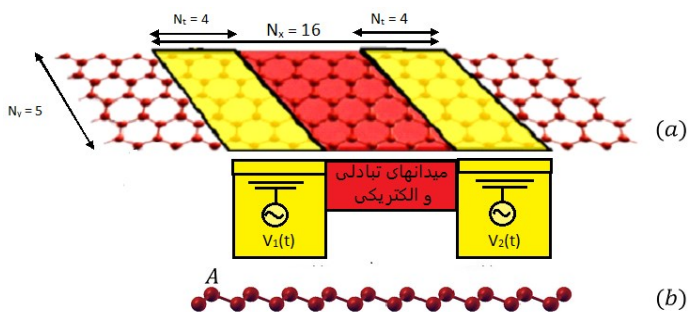
امروزه بررسی ویژگی مواد دوبعدی و استفاده از آنها در ابزارهای کوانتومی بسیار مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است. سیلیسین به عنوان یک ماده دو بعدی به دلیل ساختار شبه گرافینی آن [۱-۳] بسیاری از ویژگی گرافین را در بردارد، اما برخلاف گرافین به دلیل ساختار خمیده و اثر اسپین - مداری ذاتی (SOI) آن، ویژگی های الکتریکی این نوع ساختارها می تواند به وسیله اعمال میدان الکتریکی عمودی تنظیم شود [۱۰-۱۴]. با اعمال میدان الکتریکی عمودی E_z ، بین زیر شبکه های A و B (شکل ۱) اختلاف پتانسیل $2lE_z$ ایجاد می شود که در آن $2l = 0.46A$ فاصله بین زیر شبکه های A و B است.

همچنین، اثر پهنا بر اندازه شدت جریانهای پمپ شده بررسی و نشان داده شده است که شدت این جریانها به ازای تعداد زنجیره های زوج و فرد در عرض یک نانونوار سیلیسینی زیگزاگ فرق چندانی ندارد و مقدار هر دو بزرگ است. حال آنکه، در نانونوار گرافینی زیگزاگ (ZGNR) جریان در نوارهای با تعداد زنجیره های زوج بسیار بیشتر (تا پنج برابر) از تعداد فرد است.

در ادامه مقاله به این ترتیب سازماندهی شده است، در بخش دوم مدل نظری بر پایه روش تابع گرین کلدیش برای تولید جریان پمپ شده ارائه و در بخش سوم نتایج عددی این پژوهش مورد بررسی دقیق قرار گرفته است. در نهایت، در بخش چهارم خلاصه ای از کارهای انجام شده و نتایج بدست آمده ارائه شده است.

۲- محاسبات

طرح پیشنهادی مطابق شکل ۱ بر پایه نوارسیلیسینی زیگزاگ در امتداد محور x و دو پتانسیل غیر هم فاز متناوب زمانی با دامنه پتانسیل یکسان که بر تعداد N_t اتم از دو طرف سامانه اعمال شده و سامانه را از حالت تعادل خارج می کند در نظر گرفته شده است. ابعاد نوار با پهنا $W = N_y$ تعداد زنجیره های اتمی است. و به طول $L = N_x$ تعداد اتمها در یک زنجیره است. که از روابط $L_y = [(3/2)N_y - 1]a_0$ و $L_x = (N_x - 1)(\sqrt{3}/2)a_0$ به دست می آیند. در این روابط فاصله بین اتمی $a_0 = 0.386 \text{ nm}$ است.



شکل ۱: (a) طرح کلی پمپ جریان باری و اسپینی بر پایه نوار

سیلیسینی زیگزاگ با استفاده از دو پتانسیل وابسته به زمان $V_1(t)$,

$V_2(t)$ در دو طرف سامانه. میدان تبدالی و میدان الکتریکی عمودی

برای القا و کنترل جریانهای اسپینی در ناحیه میانی اعمال گردیده است

(b) نما از پهلوی شبکه سیلیسین با دو زیر شبکه خمیده A و B

کشف گرافین؛ بسیاری از مطالعات بر این دسته از مواد برای استفاده در پمپ کوانتومی باری و اسپینی انجام شده است [۲۱-۱۹]. با توجه به اطلاعات نویسندگان، پمپ کوانتومی در حوزه نظری بر ماده سیلیسین بسیار اندک مورد بررسی قرار گرفته است. به طور مثال، لو^۱ و همکارانش پمپ اسپینی و ذره ای بر پایه سیلیسین را به وسیله اعمال یک میدان ثابت در صفحه و یک میدان الکتریکی وابسته به زمان عمود بر صفحه بررسی کرده اند [۲۲]. همچنین، خانی^۲ و همکارانش نیز پمپ کوانتومی بر پایه اتصال سیلیسینی را بررسی کرده و طرحی برای تولید جریان پمپ شده دره ای و اسپینی پیشنهاد داده اند [۲۳]. ژنگ^۳ و همکارانش نیز پمپ جریان اسپینی بر پایه اتصالات فرومغناطیسی نانونوار سیلیسینی زیگزاگ که به وسیله اعمال میدان الکتریکی عمودی قابل کنترل است را، بررسی کرده اند [۱۸]. آنها ثابت کردند که الکترودهای مغناطیسی می تواند اثر یک دریچه اسپینی^۴ قابل کنترل به وسیله میدان الکتریکی را ایجاد کند.

روش محاسباتی استفاده شده در این مقاله بر پایه نظریه اختلال [۲۴] بوده است. نظریه اختلال در مواردی که عناصر ماتریس اختلال خیلی کوچکتر از فواصل سطوح انرژی در سامانه مختل نشده است، قابل استفاده است. بنابراین، نظریه اختلال نمی تواند سامانه های تحت تاثیر پتانسیل های قوی و یا فرکانسهای بالا را مورد بررسی قرار دهد. لازم به توضیح است، اهمیت کار حاضر در استفاده از تابع گرین دقیق به وسیله روش بازپهنجارش^۵ است. بنابراین، در محاسبات انجام شده هیچ محدودیتی در انتخاب دامنه پتانسیل یا فرکانس پمپ اعمال نشده است.

در این مقاله، یک طرح ساده اما موثر برای پمپ اسپینی در رژیم آرام تغییر بر پایه نانونوار سیلیسینی زیگزاگ (ZSNR) به وسیله اعمال دو میدان وابسته به زمان در دو طرف سامانه و در حضور میدان تبدالی و میدان الکتریکی عمودی پیشنهاد شده است. با به کار بردن روش تابع گرین کلدیش در تقریب تنگ بست دیده میشود که می توان جریان پمپ شده ۱۰۰٪ قطبیده در سامانه القا کرد.

1. Luo
2. Khani
3. Zhang
4. Spin valve
5. Renormalization

ماتریس‌های اسپینی است. همچنین، M در چهارمین جمله معادله (۳) شدت میدان تبدلی بوده و در پنجمین جمله اثر میدان الکتریکی عمودی بهنجارشده با $\Delta_0 = e l E_z$ نشان داده شده است که در آن $\epsilon -$ بار الکترون و $2l = 0.46 A^0$ فاصله زیر شبکه‌های A و B (به شکل ۱ (b) مراجعه کنید) و E_z شدت میدان الکتریکی عمود بر صفحه نانو نوار است. به دلیل ساختار خمیده سیلیسین که انرژی‌های بر سایت اتمهای سیلیکون را یک در میان قرینه می‌کند در این معادلات برچسب $\xi = \pm 1$ را در نظر بگیریم. در نهایت به منظور تداخل بهتر حالت‌های برانگیخته و القای بهتر جریانهای اسپینی یک ساختار دو سدی با ارتفاع سد موضعی E_B در مکان اتم‌هایی که نوار را از الکترودها جدا می‌کند در نظر می‌گیریم [۱۵].

در این سامانه دو منبع ولتاژ ac غیر همفاز با جمله $V_0 \cos(\Omega_0 t)$ و $V_0 \cos(\Omega_0 t + \delta_{rs})$ نشان داده شده است. V_0 و δ_{rs} به ترتیب فرکانس و دامنه پتانسیل وابسته به زمان و اختلاف فاز دو منبع در دو طرف سامانه است که برای تداخل بهتر $\delta = \frac{\pi}{2}$ اختیار می‌شود. اشاره به این نکته ضروری است که در هامیلتونی نانونوار سیلیسینی از جمله‌ای که مربوط به برهم‌کنش اسپین مدار ذاتی از نوع راشبا است، صرف نظر شده است. این جمله از هامیلتونی تاثیر بسیار ناچیزی بر محاسبات ما در رفتار ترابرد جریان در نانونوار سیلیسینی داشت. به طوری که، اندازه انرژی جهش الکترون به همسایه دوم در برهم‌کنش اسپین مدار از نوع راشبا 0.7 meV است که در مقایسه، این انرژی برای برهم‌کنش اسپین مدار داخلی که 3.9 meV است قابل صرف نظر کردن است. به همین دلیل و به دلیل ساده سازی محاسبات از آن در محاسبات صرف نظر شد [۳۱].

محاسبات این پژوهش براساس روش تابع گرین کلدیش انجام شده است [۲۴-۲۵].

بر این اساس جریان وابسته به زمان در الکترودها η که به سمت سامانه مرکزی جاری می‌شود، به صورت زیر است [۲۵]:

$$J_\eta(t) = it_\eta \sum_{r_\eta} (c_{r_\eta}^\dagger c_{i_\eta} - c_{r_\eta} c_{i_\eta}^\dagger) = 2et_\eta R_\epsilon [G_{r_\eta i_\eta}^<(t, t)] \quad (5)$$

سامانه مورد نظر در مدل تنگ بست با هامیلتونی زیر توصیف می‌شود:

$$H = H_L + H_R + H_S + H_C \quad (1)$$

در این رابطه H_L (H_R) هامیلتونی الکترودها چپ (راست)، H_S هامیلتونی نانونوار سیلیسینی زیگزاگ و H_C هامیلتونی اتصال بین سامانه مرکزی و الکترودها را نشان می‌دهد که به صورت زیر نوشته می‌شوند [۲۵]:

$$H_L(H_R) = - \sum_{\langle r_{L(R)}, r'_{L(R)} \rangle, \alpha} t_h c_{r_{L(R)}}^\dagger c_{r'_{L(R)}} \alpha + \frac{i\lambda_{50}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle r_{L(R)}, r'_{L(R)} \rangle\rangle, \alpha, \beta} \mu_{r_{L(R)} r'_{L(R)}} c_{r_{L(R)}}^\dagger \alpha \sigma_{\alpha\beta}^z c_{r'_{L(R)}} \beta + h.c. \quad (2)$$

$$H_S = - \sum_{\langle r_s, r'_s \rangle, \alpha} t_h c_{r_s}^\dagger \alpha c_{r'_s} \alpha + \frac{i\lambda_{50}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle r_s, r'_s \rangle\rangle, \alpha, \beta} \mu_{r_s r'_s} c_{r_s}^\dagger \alpha \sigma_{\alpha\beta}^z c_{r'_s} \beta + \sum_{r_s, \alpha} V_0 \cos(\Omega_0 t + \delta_{rs}) c_{r_s}^\dagger \alpha c_{r_s} \alpha + M \sum_{r_s, \alpha} c_{r_s}^\dagger \alpha \sigma_{\alpha}^z c_{r_s} \alpha + (\Delta_0 + E_B) \sum_{r_s, \alpha} \xi_{r_s} c_{r_s}^\dagger \alpha c_{r_s} \alpha + h.c. \quad (3)$$

$$H_C = - \sum_{\gamma=L,R} (\sum_{\langle r_\gamma, r'_\gamma \rangle, \alpha} t_h c_{r_\gamma}^\dagger \alpha c_{r'_\gamma} \alpha + \frac{i\lambda_{50}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle r_\gamma, r'_\gamma \rangle\rangle, \alpha, \beta} \mu_{r_\gamma r'_\gamma} c_{r_\gamma}^\dagger \alpha \sigma_{\alpha\beta}^z c_{r'_\gamma} \beta) \quad (4)$$

در این روابط $(c_{r_\gamma \alpha} \text{ یا } c_{r_{L(R)\alpha}}) c_{r_s \alpha}$ عملگرهای خلق و فنی الکترون با اسپین α در مکان $r_s (r_\gamma \text{ یا } r_{L(R)}) = (x, y)$ در سامانه مرکزی (الکترودها)، $\langle\langle r_s, r'_s \rangle\rangle$ و $\langle r_s, r'_s \rangle$ نشان دهنده به ترتیب نزدیکترین همسایه و دومین همسایه نزدیک، α و β عدد کوانتومی اسپینی و جفت شدگی اسپین مدار ذاتی سیلیسین با مقدار $\lambda_{50} = 3.9 \text{ meV}$ و $u_{\alpha\beta} = +1(-1)$ اگر $\alpha = \beta$ (خاسته

می‌شوند: t_h پارامتر انرژی جهش الکترون در سامانه مرکزی و الکترودها است که اندازه آن $t_h = 1.6 \text{ eV}$ است. بردار پاولی

به شکل $\Gamma_{\eta}(\omega) = i[\Sigma_{\eta}(\omega) - \Sigma_{\eta}^{\dagger}(\omega)]$ تعریف می‌شود. در این رابطه $\Sigma_{\eta}(\omega)$ سلف انرژی ناشی از الکتروود η است. برای محاسبه سلف انرژی از روش تابع گرین بازگشتی استفاده می‌شود [۲۶]. جریان باری $I_c = I_{\uparrow} + I_{\downarrow}$ و جریان اسپینی به صورت $I_s = I_{\uparrow} - I_{\downarrow}$ و مقدار قطبیدگی اسپینی با $P = \frac{I_{\uparrow} - I_{\downarrow}}{I_{\uparrow} + I_{\downarrow}}$ تعریف می‌شوند. در محاسبه P اگر $|I_{\uparrow}| = |I_{\downarrow}|$ یا $I_{\uparrow} = 0$ یا $I_{\downarrow} = 0$ باشد تابع P به ترتیب به صورت $p = +1$ و $p = 0$ و $p = -1$ خواهد بود.

۳- نتایج و بحث

در این بخش، نتایج حاصل از محاسبه جریانهای پمپ شده باری و اسپینی در ZSNRs را ارائه می‌دهیم. در این پژوهش، طول، عرض و تعداد اتم‌هایی که تحت تاثیر پتانسیل وابسته به زمان قرار می‌گیرد، به ترتیب $N_x = 40$ ، $N_y = 6$ و $N_z = 6$ است. همچنین، پارامتر انرژی جهش الکترون را به صورت $t_h = 1$ به عنوان واحد انرژی بهنجار کرده‌ایم. برای جداسازی جریان‌های اسپینی بالا و پایین شدت میدان تبدلی را $M = 0.2t_h = 320 \text{ meV}$ و به منظور پراکندگی بیشتر و تداخل بهتر برای جداسازی جریان‌های اسپینی، اختلاف فاز دو پتانسیل ac در دو طرف سامانه $\delta = \frac{\pi}{2}$ در نظر گرفته شده است. در این بخش، ابتدا جریان‌های پمپ شده اسپینی را در رژیم آرام تغییر (آدیاباتیک) بررسی کرده، سپس، اثر پهنا بر شدت جریانهای پمپ شده را مورد بررسی قرار می‌گیریم.

در رژیم آرام تغییر فرکانس پتانسیل وابسته به زمان از عکس میانگین مدت زمان پراکندگی الکترون کوچکتر است [۲۷]. برای اعمال شرایط آرام تغییر مقادیر $\Omega_0/t_h = 0.01$ و $V_0/t_h = 0.01$ اختیار می‌شود.

ابتدا در شکل ۲ برای بررسی تاثیر مقادیر متفاوت میدان تبدلی بر القای جریانهای وابسته به اسپین نمودار جریانهای اسپینی بر حسب میدان تبدلی به هنجار شده رسم شده است. همانطور که این نمودار نشان می‌دهد، در مقادیر ضعیف شدت میدان تبدلی، اندازه جریان‌های اسپینی بالا و پایین نسبت به هم تغییر می‌کند و در نتیجه می‌توان با انتخاب مقدار مناسب برای میدان تبدلی مقدار القای هر یک از جریانهای وابسته به اسپین را

در این رابطه، پارامتر انرژی جهش بین کانال (سامانه مرکزی) و الکتروودها است. t_{η} مکان اتمهایی از الکتروود چپ (راست) را نشان می‌دهد که به کانال متصل هستند. همچنین، مکان اتم-هایی از کانال را نشان می‌دهد که به الکتروودها متصل هستند. تابع گرین کوچکتر سامانه است [۲۵]. طبق معادله دایسون، تبدیل فوریه جریان $J_{\eta}(t)$ به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$i_{\eta}(\omega) = 2\text{Im}[G^0(\omega)]\Gamma_{\eta}(\omega)f_{\eta}(\omega) + \sum_{\gamma=L,R} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \{\Gamma_{\eta}(\omega + k\Omega_0)f_{\gamma}(\omega)G^k(\omega)\Gamma_{\gamma}(\omega)G^{k\dagger}(\omega)\} \quad (6)$$

در واقع $i_{\eta}(\omega)$ به عنوان تابع طیفی جریان (یا جریان در واحد انرژی) تعریف می‌شود که می‌تواند اطلاعاتی درباره سطوح انرژی سامانه ارائه دهد. در معادله (۶) با استفاده از روش تابع گرین غیرتعدالی کلدیش تابع گرین تاخیری سامانه را می‌توان به شکل زیر به دست آورد [۲۵]:

$$G_{r,r'}^R(t, t') = -i\theta(t - t')\{c_{r'}^{\dagger}, c_r\} = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} [e^{-ik\Omega_0 t} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} G_{r,r'}^k(\omega)] \quad (7)$$

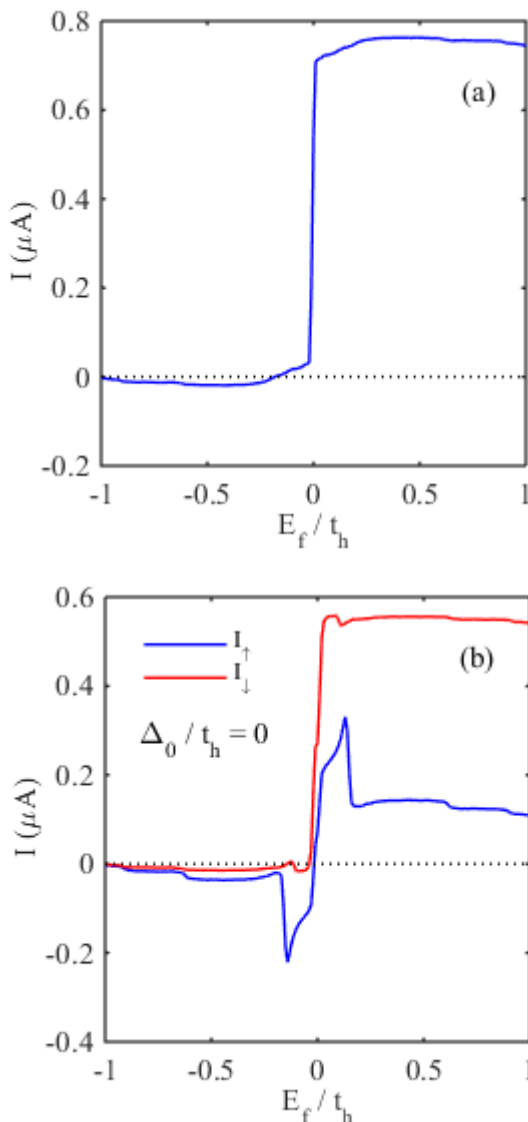
در این مقاله، محاسبه جریان dc متمرکز کرده‌ایم که با معادله (۸) تعریف می‌شود:

$$I_{\eta} = \frac{e}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} i_{\eta}(\omega) \quad (8)$$

در این فرمول بندی جریان dc که از الکتروود η به کانال جاری می‌شود، به شکل زیر به دست می‌آید:

$$I_{\eta} = \frac{e}{\hbar} \sum_{\gamma=L,R} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{E_f} d\omega \text{Tr}\{\Gamma_{\eta}(\omega + k\Omega_0)G^k(\omega)\Gamma_{\gamma}(\omega)G^{k\dagger}(\omega)[f_{\gamma}(\hbar\omega) - f_{\eta}(\hbar\omega + k\hbar\Omega_0)]\} \quad (9)$$

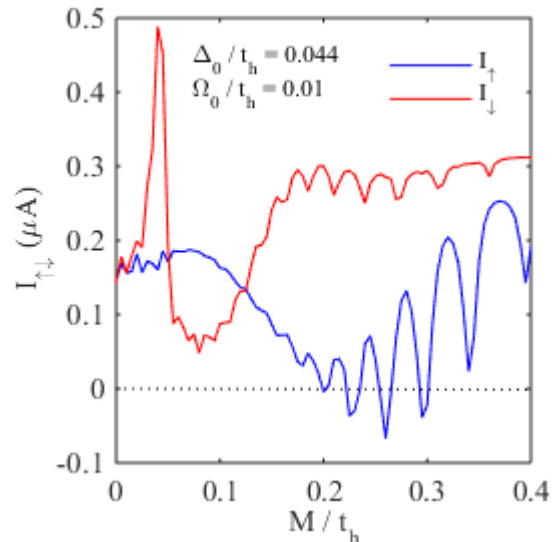
که در این رابطه، $f_{\eta}(\omega) = [1 + e^{(\omega - \mu_{\eta})/T_{\eta}}]^{-1}$ تابع توزیع فرمی دیراک در لید η با پتانسیل شیمیایی μ_{η} و دمای T_{η} و انرژی الکترون ω است. اشاره به این نکته ضروری است که با توجه به اینکه برهم‌کنش الکترون-الکترون در محاسبات در نظر گرفته نشده است، تقریب دمایی صفر و ثابت بولترمن $k_B = 1$ انتخاب شده است. مقدار خروج الکترون از کانال به الکتروودها به عنوان عامل $\Gamma_{\eta}(\omega) = i[\Sigma_{\eta}(\omega) - \Sigma_{\eta}^{\dagger}(\omega)]$ تعریف می‌شود که در آن $\Sigma_{\eta}(\omega)$ سلف انرژی الکتروود $\eta = L, R$ است. برای جفت شدگی بین سامانه و الکتروود η از طریق عامل Γ_{η} است که



شکل ۳: (a) جریان پمپ شده بر حسب انرژی فرمی E_f/t_h (b) جریانهای پمپ شده وابسته به اسپین بر حسب انرژی فرمی E_f/t_h . در این نمودارها فرکانس و دامنه پتانسیل پمپ به ترتیب $\Omega_0/t_h = 0.01$ و $V_0/t_h = 0.01$ است.

همانطور که دیده می‌شود، مقدار جریان در مقادیر منفی انرژی فرمی بسیار کوچک است. در حالی که، جریانهای مربوط به مقادیر مثبت انرژی فرمی بزرگ و مثبت است و جریان رفتار دیود گونه-ای را از خود نشان داده است. در اینجا جریان مثبت (منفی) نشان می‌دهد که جریان الکترون از سمت چپ (راست) سامانه به سمت راست (چپ) سامانه جریان می‌یابد (شکل ۱). به منظور بررسی جریانهای وابسته به اسپین، میدان تبدالی را بر روی کانال رسانایی اعمال کرده و نمودار جریانهای اسپینی بر حسب انرژی فرمی در شکل (a) رسم شده است. همانطور که در این نمودار دیده می‌شود، حضور میدان تبدالی باعث از بین رفتن تبهگنی

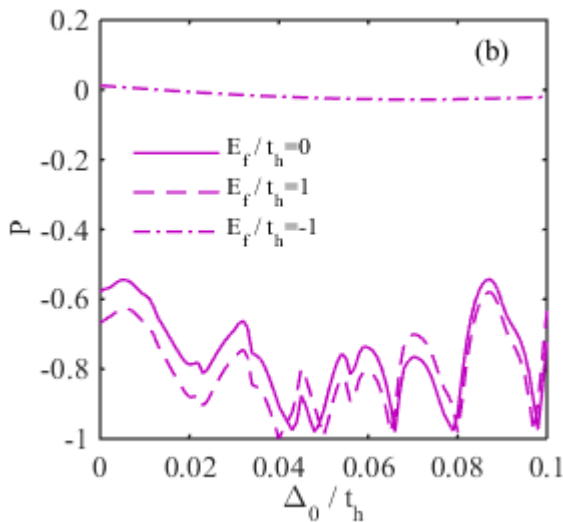
نسبت به دیگری افزایش داد. در حالی که این مسئله در مورد جریانهای ایجاد شده به وسیله پتانسیل ثابت تنها با تغییر جهت میدان تبدالی ($M \rightarrow -M$) قابل انجام است [۳۳].



شکل ۲: جریان پمپ شده بر حسب میدان تبدالی بهنجار شده M/t_h . در این نمودار دامنه پتانسیل پمپ $V_0/t_h = 0.01$ است.

در این نمودار مشاهده می‌شود که قطبیدگی کامل جریانهای اسپینی برای القای جریان کاملاً قطبیده الکترونها اسپین پایین ($P=-1$) از مقدار $M = 0.2t_h$ آغاز می‌شود و در چندین نقطه تقریبی تا مقدار $M = 0.3t_h$ ادامه دارد. از آنجا که در پژوهشهای مبتنی بر نظریه تابعی چگالی نشان داده شده است که درمواد دوبعدی با ساختارهای لانه زنبوری و با استفاده از موادی مانند EuO می‌توان تقریب میدان تبدالی با مقدار $M=300$ meV القا کرد، $M = 0.2t_h$ انتخاب شده است [۳۰].

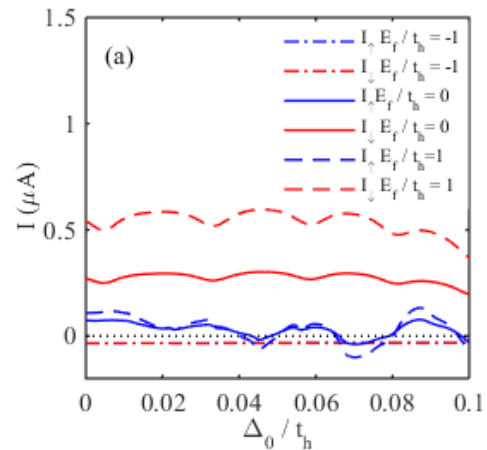
در شکل (a) ۳ جریان پمپ شده باری بر حسب انرژی فرمی در غیاب میدان تبدالی و میدان الکتریکی عمودی رسم شده است.



شکل ۴: (a) جریانهای پمپ شده وابسته به اسپین بر حسب میدان الکتریکی عمودی به هنجار شده Δ_0/t_h (b) مقدار قطبیدگی جریانهای اسپینی بر حسب میدان الکتریکی عمودی به هنجار شده Δ_0/t_h . در این نمودارها فرکانس و دامنه پتانسیل پمپ به ترتیب $\Omega_0/t_h = 0.01$ و $V_0/t_h = 0.01$ است.

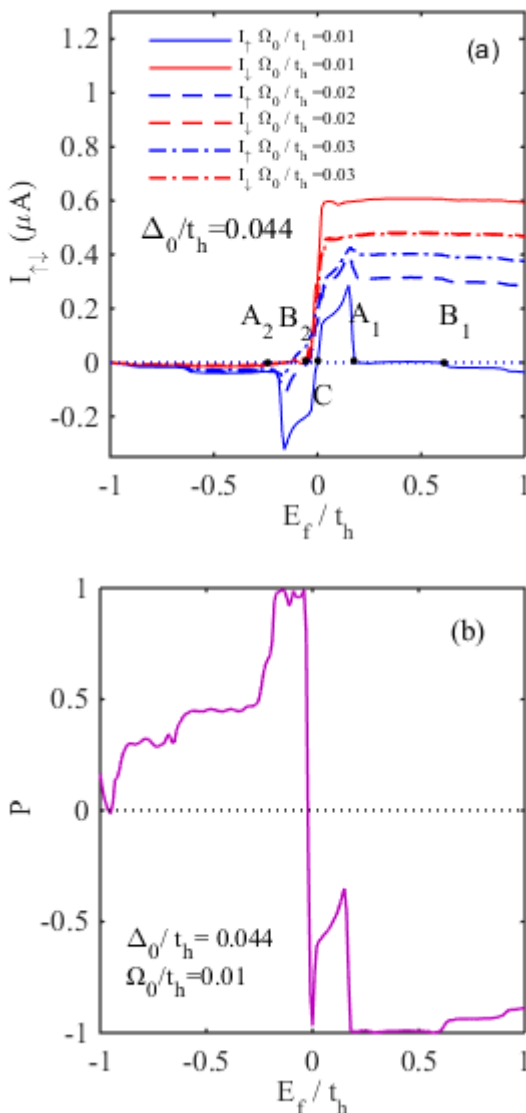
اسپینی الکترونها شده و دیده میشود که جریان الکترونها اسپین پایین رفتار دیود گونه خود را حفظ کرده است. همچنین، در نمودارهای شکل ۳ مشاهده میشود، جریان با افزایش انرژی فرمی به یک مقدار ثابت می‌رسد. با رسم نمودار برای گستره انرژی فرمی بزرگتر دیده میشود که بیشترین جریان پمپ شده در ناحیه $-1 < (E_f/t_h) < +1$ القا میشود و پس از این گستره جریان ثابت باقی می‌ماند که این مقدار به مقدار شدت میدان الکتریکی عمودی و دامنه و فرکانس پتانسیل وابسته به زمان بستگی دارد.

در شکل ۴ اثر میدان الکتریکی عمود بر سامانه، جریانهای وابسته به اسپین را بر حسب میدان الکتریکی به هنجار شده Δ_0/t_h در انرژی فرمی‌های متفاوت نشان داده شده است. در شکل‌های (a) و (b) دیده میشود که جریانهای اسپینی بالا به ازای انرژی فرمی های $E_f/t_h = 1, 0$ در بعضی از مقادیر Δ_0/t_h صفر شده و قطبیدگی منفی ($P = -1$) را ایجاد کرده است. یکی از این مقادیر $\Delta_0/t_h = 0.044$ است که جهت اعمال بر سامانه انتخاب شده است.



در شکل ۴(a) مشاهده میشود که رفتار جریانهای وابسته به اسپین بالا و پایین رفتاری به نسبت نوسانی و متناوب است (این رفتار تناوبی در جریانهای اسپینی نمودار ۲ هم مشاهده میشود). که البته ناشی از ماهیت نوسانی پتانسیل‌های وابسته به زمان است. از آنجایی که پتانسیل اعمال شده در دو طرف سامانه بصورت نوسانی تغییر می‌کند، این رفتار نوسانی باعث ایجاد رفتار نوسانی تابع گرین شده و به رفتار نوسانی جریان بر حسب میدان الکتریکی عمودی منجر شود. لازم به ذکر است دوره تناوب جریان پمپ شده بر حسب میدان الکتریکی عمودی می‌تواند به عوامل متفاوتی از جمله فرکانس، دامنه پتانسیل و اختلاف فاز پتانسیل‌های اعمال شده در دو طرف سامانه و به احتمال ابعاد سامانه بستگی داشته باشد.

تاثیر میدان الکتریکی عمودی بر جریانهای پمپ شده اسپینی $(I_T \text{ و } I_B)$ بر حسب انرژی فرمی در شکل (b) و (a) در فرکانس های متفاوت $\Omega_0/t_h = 0.01, 0.02, 0.03$ نشان داده شده و مشاهده میشود در فرکانس $\Omega_0/t_h = 0.01$ قطبیدگی اسپینی ۱۰۰٪ اتفاق افتاده است. لازم به توضیح است که در رژیم آرام تغییر فرکانس‌های انتخاب شده باید نسبت به انرژی جهش الکترون در سیلیسین کوچک باشد، به همین دلیل مقادیر بالا انتخاب شده‌اند. همانطور که در نمودار بالا مشاهده میشود، با



شکل ۵: (a) جریانهای پمپ شده وابسته به اسپین بر حسب انرژی فرمی E_f/t_h در حضور میدان الکتریکی عمودی در فرکانسهای $\Omega_0/t_h = 0.01, 0.02, 0.03$ مقدار قطبیدگی جریانهای پمپ شده وابسته به اسپین بر حسب انرژی فرمی E_f/t_h در حضور میدان الکتریکی عمودی و در فرکانس $\Omega_0/t_h = 0.01$.

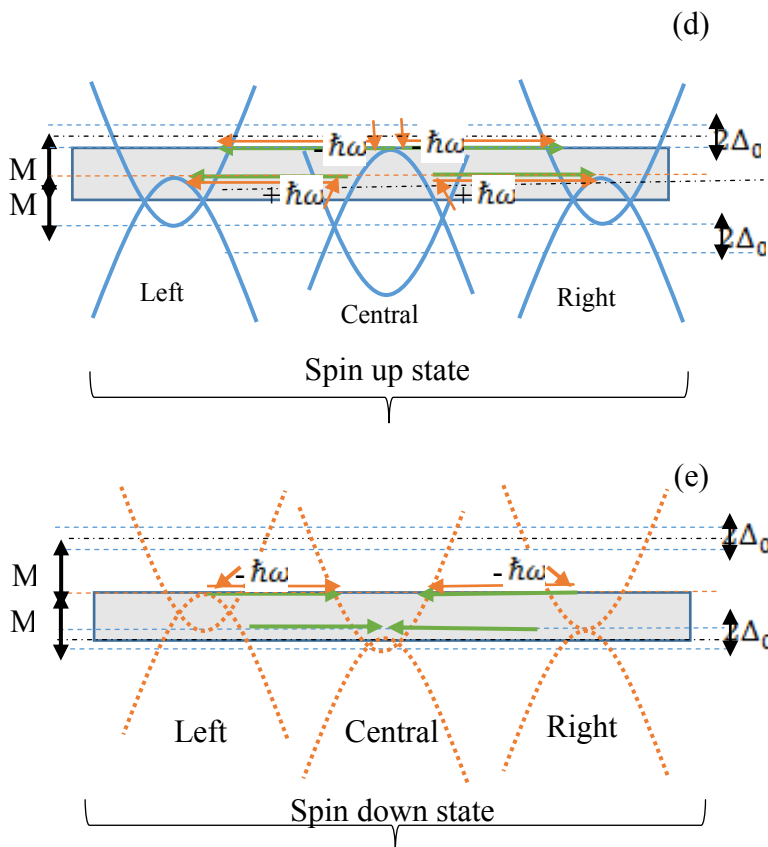
افزایش فرکانس، جداسازی^۷ جریانهای اسپینی بالا و پایین کاهش می‌یابد. بنابراین، برای داشتن قطبیدگی بهتر فرکانس 0.01 انتخاب شد.

در نمودار شکل ۵(a) دیده می‌شود، با افزایش فرکانس شدت جریانهای پمپ شده وابسته به اسپین بالا و پایین به هم نزدیک می‌شوند و فرایند جداسازی اسپینی کاهش می‌یابد. از آنجایی که در بررسی‌های انجام شده بر عایق‌های توپولوژیک در پدیده پمپینگ نشان داده شده است که با افزایش فرکانس، مدهای جدیدی وارد فرایند القای حالت‌های برانگیخته فوتونی^۸ و پمپ جریان می‌شود [۳۲]، این مدهای اضافی می‌تواند باعث افزایش سازوکارهای پراکندگی اسپینی و در نتیجه کاهش زمان استراحت اسپین الکترونها شده و باعث کاهش جداسازی اسپینی و جریانهای خالص اسپینی شود. پیش بینی میشود که برای برطرف شدن این مشکل در فرکانسهای بالاتر، میتوان با انتخاب شدت میدان الکتریکی عمودی جدید و تنظیم گاف ساختار نواری، جریانهای اسپینی خوبی را در فرکانسهای بالاتر نیز القا کرد.

همچنین، در نمودار شکل (a) که در فرکانس $\Omega_0/t_h = 0.01$ به ازای طیف بزرگی از انرژی فرمی (از نقطه A_1 تا B_1)، جریان الکترونی اسپین بالا صفر شده ($I_T = 0$) و قطبیدگی منفی را سبب شده است. قطبیدگی جریان بر حسب انرژی فرمی در شکل ۵(b) قطبیدگی منفی ($P = -1$) را در این گستره نشان میدهد. به همین ترتیب، در گستره انرژی فرمی که از نقطه A_2 تا B_2 نشان داده شده است، برعکس جریان پمپ شده اسپین پایین صفر شده ($I_T = 0$) و قطبیدگی مثبت ($P = +1$) را موجب می‌شود.

همچنین، نمودارهای جریان در شکل ۵(a) نشان دهنده رفتار پله ای (دیود گونه) جریان الکترونها اسپین پایین و تقریباً رفتار تابع فرد جریان الکترونها اسپین بالا است. شکل ۶ (b) (a) (c) نمای کلی^۹ ساختار نواری یک نوار سیلیسین برای الکترون-های اسپین بالا (نوار آبی) و الکترونها اسپین پایین (نوار قرمز) را در حضور و عدم حضور میدانهای تبدالی و الکتریکی عمودی نشان می‌دهد. در شکل (d) (e) ۶ نوار هاشور زده شده میانی

7. Splitting
8. Photon-assisted



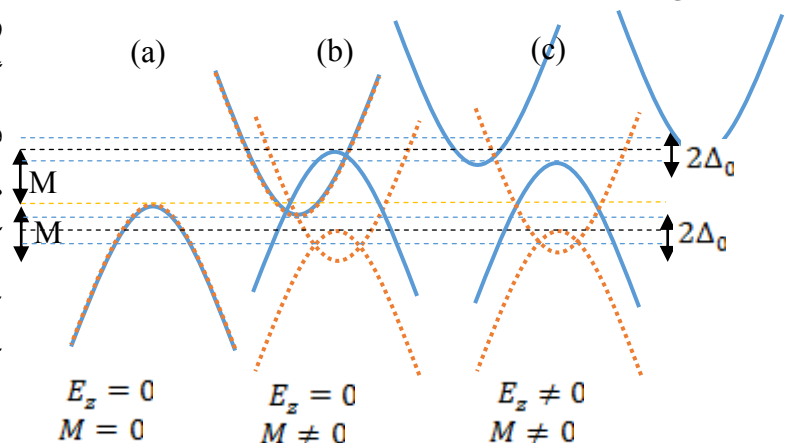
شکل ۶: طرح کلی ساختار نواری قسمت مرکزی سیستم در شکل ۱. نوارهای مرتبط با الکترونهای اسپین بالا با رنگ آبی (توپر) و نوارهای مرتبط با الکترونهای اسپین پایین با رنگ قرمز (خط چین) مشخص شده اند. (a) در غیاب میدان تبادل و میدان الکتریکی عمودی (b) در غیاب میدان الکتریکی عمودی و در حضور میدان تبادل (c) در حضور میدان تبادل و میدان الکتریکی عمودی (d) ترابرد الکترونی با جذب و یا گسیل فوتون در حضور میدانهای تبادل و الکتریکی عمودی در نوار مرتبط با الکترونهای اسپین بالا (e) ترابرد الکترونی با گسیل فوتون در حضور میدانهای تبادل و الکتریکی عمودی در نوار مرتبط با الکترونهای اسپین پایین.

در شکل ۷ جریانهای اسپینی برحسب اختلاف فاز پتانسیلهای وابسته به زمان اعمال شده در دو طرف سامانه مورد بررسی قرار گرفته است. در این شکل مشاهده می شود که به ازای اختلاف فازهای $\delta = \frac{\pi}{2}$ و $\delta = \frac{3\pi}{2}$ بین پتانسیلهای اعمال شده در دو طرف سامانه میتوان قطبیدگی ۱۰۰٪ منفی ($P = -1$) ایجاد کرد. در نمودار شکل ۷ و همچنین، نمودارهای پیشین مربوط به جریانهای اسپینی، مشاهده می شود که رفتار و همچنین، شدت جریانهای اسپینی با هم متفاوت است.

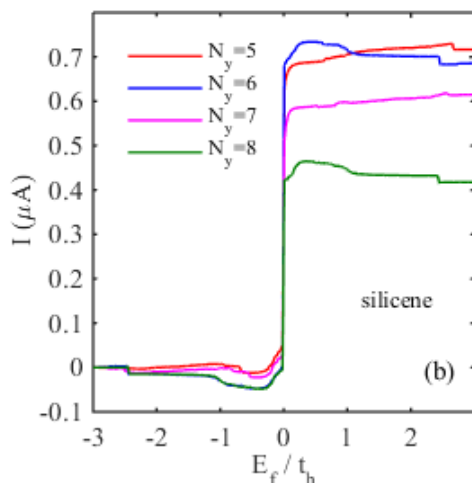
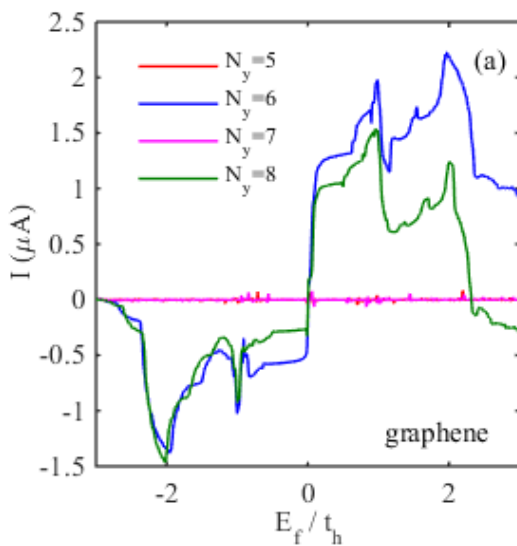
نشان دهنده ناحیه‌ای است که در آن ترابرد الکترونی از لیده‌های راست و چپ به قسمت مرکزی و برعکس بدون نیاز به پمپینگ و با اعمال میدان تبدالی و الکتریکی در قسمت مرکزی (conductor) اتفاق می افتد که البته چون احتمال ترابردهای الکترونی از لید به مرکز و برعکس با هم برابر است، برآیند آن جریان تقریبی صفر است و ترابردهای الکترونی احتمالی آن با فلش‌های سبز رنگ نشان داده شده است. اما ترابردهای الکترونی که با فلش‌های قرمز رنگ نشان داده شده است، در اثر حضور پتانسیل‌های وابسته به زمان است. همانطور که مشاهده می شود، در ساختار نواری الکترونهای اسپین بالا، هم در انرژی فرمی‌های مثبت و هم در انرژی فرمی‌های منفی، ترابرد الکترونی داریم که باعث ایجاد رفتار تابع فرد جریان پمپ شده‌ی الکترونهای اسپین بالا می شود. اما دیده می شود که در الکترونهای اسپین پایین، این ترابرد فقط می تواند در انرژی فرمی‌های مثبت انجام شود که باعث ایجاد رفتار پله‌ای این جریان پمپ شده میشود.

لازم به توضیح است شکل جریانهای پمپ شده کاملاً وابسته به دامنه و فرکانس پتانسیل وابسته به زمان و همچنین، احتمال جذب و یا گسیل فوتون در ترابردهای الکترونی در پدیده پمپینگ است که توجیه این رفتارها بسیار مشکل و پیچیده است.

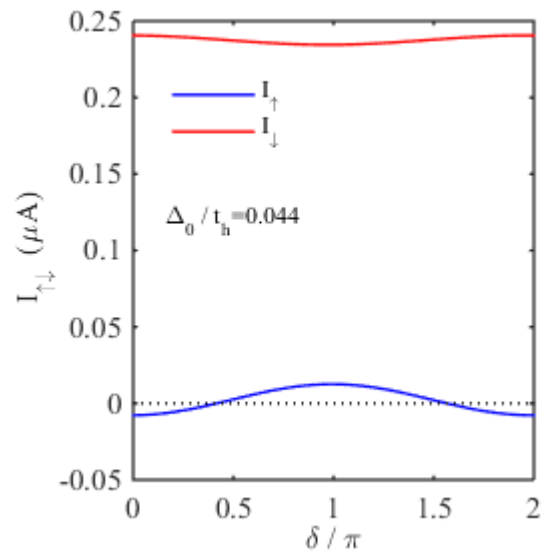
اشاره به این نکته ضروری است که در پدیده پمپینگ الکترونهای متفاوت با انرژی‌های متفاوت از دو الکتروند به سامانه مرکزی پمپ شده و جاری می شود و جمع تمام این جریانهای مثبت و منفی جهت جریانی نهایی را مشخص می کند. می توان گفت که ماهیت پیچیده الکترونیکی و ترابرد الکترونی در پدیده پمپینگ باعث شده که تحلیل و پیش بینی جهت جریان کار بسیار دشوار و سختی باشد [۲۴].



در شکل (b) و (a) جریان‌های باری پمپ شده برحسب انرژی فرمی در پهنای متفاوت از نوارهای گرافینی و سیلیسینی با مقادیر $N_y = 5, 6, 7, 8$ و در فرکانس $\Omega_0/t_h = 0.01$ رسم شده است. همانطور که در شکل (a) مشاهده می‌شود، در گرافین شدت جریان پمپ شده به وضوح به پهنای نوار بستگی دارد. مطابق شکل جریان در نوارهایی که پهنای آنها دارای تعداد زوج است (فرد پهنای) به شدت ضعیف بوده و در مقایسه با نوارهایی که پهنای آنها دارای تعداد زوج است (زوج پهنای) اندازه جریان پمپ شده نزدیک به صفر است.



شکل ۸: (a) جریان‌های پمپ شده باری بر حسب انرژی فرمی E_f/t_h به ازای پهنای متفاوت در نوار گرافینی (b) جریان‌های پمپ شده باری بر حسب انرژی فرمی E_f/t_h به ازای پهنای متفاوت در نوار سیلیسینی. در این نمودارها فرکانس و دامنه پتانسیل پمپ به ترتیب $\Omega_0/t_h = 0.01$ و $V_0/t_h = 0.01$ است.



شکل ۷: جریان‌های پمپ شده وابسته به اسپین بر حسب اختلاف فاز پتانسیلهای وابسته به زمان در دو طرف سامانه در حضور میدان الکتریکی عمودی در فرکانس $\Omega_0/t_h = 0.01$.

همان‌طور که در نمودارهای طرح کلی ساختار نواری سامانه در شکل ۶ مشاهده کردیم، می‌توان نواحی مجاز انرژی فرمی برای القای جریان‌های اسپینی را پیش بینی کرد. اما بررسی و پیش‌بینی شدت و رفتار جریان‌های وابسته به اسپین نسبت به یکدیگر و مقایسه آنها با هم، لازم به توضیح است که در مساله پمپینگ جریان‌های پمپ شده در سامانه، نتیجه تاثیر متقابل بین گاف انرژی ایجاد شده با میدان الکتریکی عمودی و فرایند تونل زنی الکترونهاي برانگیخته فوتونی است. در این بین، مکانیزمهای پراکندگی اسپینی الکترون که توسط زیر لایه فرومغناطیسی تنظیم می‌شود، می‌تواند جداسازی جریان‌های پمپ شده مربوط به الکترونهای اسپین بالا و اسپین پایین را به صورت کامل متفاوت رقم بزند [۳۱].

در ادامه، نانونوار زیگزاگ گرافینی و سیلیسینی با هم مقایسه می‌شود. می‌دانیم که گرافین و سیلیسین هر دو از مواد دو بعدی بسیار مناسب برای ترابردهای الکترونیکی و اسپینترونیکی میباشند. اما ساختار خمیده سیلیسین آن را از گرافین بسیار متمایز می‌کند. بنابراین، برای بررسی تمایز این دو ماده جریان‌های پمپ شده باری، در غیاب میدان‌های تبادلی و الکتریکی در نانونوارهای ZGNR و ZSNR رسم و بررسی می‌شود.

شدت جریان‌های پمپ شده در هر دو نوع نوار یاد شده یکسان است.

مراجع

[1] M. Ezawa Phys. Rev. Lett., “Valley-Polarized Metals and quantum Anomalous Hall Effect in Silicene”, 109,055502- 055512, 2012.

[2] A. Kara, H. Enriquez, A. P. Seitsonen, L.C.L.Y. Voon, S. Vizzini, B. Aufray and H. Oughaddou, “review on silicene - New candidate for electronics,” Surf. Sci. Rep. 67, 1-10, 2012.

[3] W.F. Tsai, C.Y. Huang, T.R. Chang, H. Lin, H. T. Jeng and A. Bansil, “Gated silicene as a tunable source of nearly 100% spin-polarized electrons,” Nat. Commun. 4, 1500-1508, 2013.

[4] CC. Liu, W. Feng and Y. Yao Phys. “Quantum Spin Hall Effect in Silicene and Two-Dimensional Germanium,” Rev. Lett. 107, 076802-076812, 2011.

[5] P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M. C. Asensio, A. Resta, B. Ealet and G. Le Lay, “Silicene: compelling experimental evidence for graphenelike two-dimensional silicon,” Phys. Rev. Lett. 108, 155501-155511, 2012.

[6] S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Akturk, H.S ahin., and S. Ciraci, “Two- and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium ,” Phys. Rev. Lett. 102, 236804,236814, 2009.

[7] X.T. An, Y.Y. Zhang, J.J. Liu, and S.S. Li, Appl. Phys. Lett. “Interplay between edge and bulk states in silicene nanoribbon” 102, 213115-213120, 2013.

[8] C.C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, “Quantum spin Hall effect in silicene and two-dimensional germanium ,” Phys. Rev. Lett. 107, 076802-076812, 2011.

در این شکل، این نکته لازم به توضیح است که نمودارهای مربوط به جریان با پهناهای $N_y = 5, 7$ بر هم منطبق شده و قابل تمایز نیستند. این رفتار نوارهای زیگزگرافینی به دلیل تقارن و یا عدم تقارن تابع موج الکترون در دو سر نوارهای زیگزگرافین در پهناهای زوج و فرد است، که در مقالات از آن به اثر زوج-فرد یاد می‌شود [28-29]. در نوارهای سیلیسینی زیگزگرافین، این تقارن لبه ای در نوارهای زوج پهنا به دلیل خمیدگی ساختار سیلیسین، از بین رفته و این ویژگی در جریان‌های پمپ شده از نوارهای زوج پهنا و فرد پهنا دیده نمی‌شود.

لازم به توضیح است، در نانونوارهای گرافینی زیگزگرافین زوج پهنا یک تقارن دقیق و مسطح در دو طرف نوار دیده می‌شود که این مسئله باعث شده در تراورد باری این نوع نوار با نوارهای گرافینی فرد پهنا، تفاوت قابل توجهی دیده شود. اما در نوارهای سیلیسینی زیگزگرافین به دلیل خمیدگی ساختار، این تقارن دقیق در دو طرف از بین می‌رود و تفاوت چشمگیری بین این دو نوع نوار مشاهده نمی‌شود.

۴- نتیجه‌گیری

با استفاده از روش تابع گرین غیر تعادلی کلدیش، پمپ کوانتومی باری و اسپینی در نانو نوار سیلیسینی زیگزگرافین بررسی شده است. پمپ جریان باری و اسپینی به وسیله دو پتانسیل وابسته به زمان در دو طرف نوار که دارای اختلاف فاز اما با دامنه پتانسیل یکسان می باشند انجام شده و در حضور میدان تبادلی و الکتریکی عمودی جریان‌های باری و اسپینی در رژیم آرام تغییر القا شده است. در این بررسی شبیه سازی سامانه در تقریب تنگ بست و انجام عملیات محاسباتی و کدنویسی با استفاده از نرفازار متلب^{۱۰} انجام شده است. در سامانه مورد بررسی ما با اعمال میدان الکتریکی عمودی جریان ۱۰۰٪ پلاریزه القا می‌شود.

همچنین، اثر پهنا بر شدت جریان‌های پمپ شده در نوارهای زیگزگرافین سیلیسینی و گرافینی با هم مقایسه شده و دیده می‌شود که برخلاف نوارهای گرافینی که جریان‌های پمپ شده در نوارهای با تعداد زنجیره‌های زوج بسیار قویتر از شدت جریان در پهناهای با تعداد زنجیره‌های فرد است، در نوارهای سیلیسینی

- [19] D. Bercioux, D. F. Urban, F. Romeo and R. Citro, "Energy-loss rate of a fast particle in two-dimensional semiconductors with Rashba spin-orbit coupling", *Appl. Phys. Lett.* 101 122405 (2012).
- [20] P. San-Jose, E. Prada, H. Schomerus and Kohler S, "Laser-induced quantum pumping in graphene", *Appl. Phys. Lett.* 101 153506 (2012).
- [21] J. F. Liu and Chan K S, "Spin-polarized quantum pumping in bilayer graphene", *Nanotechnology* 22 395201 (2011).
- [22] W. Luo, L. Sheng, B. G. Wang, D. Y. Xing, "Topological spin and valley pumping in silicene", *Sci. Rep.* 6, 31325-31330, 2016.
- [23] H. Khani, M. Esmailzadeh and F. Kanjouri "Controllable quantum valley pumping with high current in a silicene junction", *Nanotechnology*, 27, 495202-495212, 2016.
- [24] L. Arrachea and M. Moskalets, "Relation between scattering-matrix and Keldysh formalisms for quantum transport driven by time-periodic fields Lilianna Arrachea and Michael Moskalets", *Phys. Rev. B* 74, 245322-245329, 2006.
- [25] L. Arrachea, M. Moskalets, and L. Martin-Moreno, "Heat production and energy balance in nanoscale engines driven by time-dependent fields", *Phys. Rev. B* 75, 245420-245428, 2007.
- [26] M.P. Lop'ez Sancho, J.M. Lop'ez Sancho, J.M.L. Sancho, and J. Rubio, "Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface Green functions", *J. Phys. F* 15, 851-857, 1985.
- [27] Moskalets M and Buttiker M, "Floquet scattering theory of quantum pumps", *Phys. Rev. B* 66, 205320-205329, 2002.
- [28] D. Rainis, F. Taddei, F. Dolcini, M. Polini and R. Fazio, "Andreev reflection in graphene nanoribbons" *Phys. Rev. B* 79, 115131-115138, 2009.
- [29] K. Wakabayashi and T. Oaki, "Electrical conductance of zigzag nanographite ribbons with locally applied gate voltage", *Int. J. Mod. Phys. B* 32, 4897-4910, 2002,
- [30] Y. Baba, M. Saiz-Bretin, "Spin-dependent electronic lenses based on hybrid graphene nanostructures", *Physica E* 116, 113769-113778, 2020.
- [9] M. Ezawa *Phys. Rev. Lett.*, "Valley-Polarized Metals and quantum Anomalous Hall Effect in Silicene", 109, 055502-055512, 2012.
- [10] S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Akturk, H. Sahin., and S. Ciraci, "Two- and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium," *Phys. Rev. Lett.* 102, 236804-236814, 2009.
- [11] C. Xu, G. Luo, Q. Liu, J. Zheng, Z. Zhang, S. Nagase, Z. Gao, and J. Lu, "Giant magnetoresistance in silicene nanoribbons", *Nanoscale* 4(10), 3111-3117, 2012.
- [12] S. Ahmadi, M. Esmailzadeh, E. Namvar, and G. Pan, "Spin-dependent electron transport in graphene junctions in the presence of Rashba spin-orbit interaction", *AIP Adv.* 2, 012130-012136, 2012.
- [13] J. Guo, D. Gunlycke, and C. White, "Field effect on spin-polarized transport in graphene nanoribbons", *Appl. Phys. Lett.* 92, 163109-163119, 2008.
- [14] H. Haug and A.-P. Jauho, *Quantum kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*, 12, 112-119, 2008.
- [15] K.H. Ding, Z.G. Zhu, and J. Berakdar, "Time-dependent magnetotransport in a driven graphene spin valve", *Phys. Rev. B* 84, 115433-115439, 2011.
- [16] M. Switkes, C. M. Marcus, K. Campman, and A. C. Gossard, "An adiabatic quantum electron pump", *Science*, 283, 1905-1915, 1999.
- [17] M. Ridley, R. Tuovinen, "Time-dependent Landauer-Büttiker approach to charge pumping in ac-driven graphene nanoribbons", *Phys. Rev. B.* 12, 456-465, 2017.
- [18] Lin Zhang and Peiqing Tong "Electrical controllable spin pump based on a zigzag silicene nanoribbon junction", *J. Phys. Condens. Matter.* 29, 495303-495313, 2017.

[31] Kh, Shakouri, H. Simchi, M. Esmailzadeh, H, Mazidabadi and F M. Peeters, “Tunable spin and charge transport in silicene nanoribbons”, Phys. Rev. B 92, 035413-035418, 2015.

[32] W. Y. Deng, W. Luo, H. Geng, M.N. Chen, L. Sheng and DY. Xing “Non-adiabatic topological spin pumping”, New J. Phys. 17, 103018-103024,2015.

[33] A. Paul, Ch. Reitinger, C. Autieri, B. Sanyal, “Exotic exchange bias at epitaxial ferroelectric-ferromagnetic interfaces”, Applied Physics Letters 105, 022409-022415, 2014.



Spin and charge quantum pumping in zigzag silicene nanoribbon and investigating the effect of width on pumped currents

F. Bourbour¹, M. Esmailzadeh^{2*}, S. M. Elahi¹, L. Eslami¹, E. Darabi¹

²Department of Physics, Science and Research Branch, Islamic Azad University, Tehran

²Department of Physics, University of Science and Technology, Tehran

Abstract: In this work, the spin polarized currents based on zigzag silicene nano-ribbon (ZSNR) in adiabatic regime has investigated by using Keldysh Green function method. For generating spin pumped current, two times dependent potential in two side of system is used in the presence of ferromagnetic exchange field is used. In this condition with applying electric field one can induce 100% spin polarized pumped current. We also investigate the effects of width zigzag silicone nanoribbons (ZSNR) and compare them with zigzag graphene nanoribbon (GNR) and show that the pumped charge current in the ZSNR is nearly the same for odd and even numbers of carbon chains but in the zigzag graphene nanoribbon (ZGNR) strongly depends on nanoribbon width such that the maximum pumped current for width with even numbers of carbon chains is at least five times larger than the with odd numbers.

Keywords: quantum pumping, silicone nanoribbon, Graphene nanoribbon, Green's function, spin polarized current