

## نقطه کوانتومی فسفرین شش گوشه با لبه زیگزاگ به عنوان یک وارونگر اسپینی

## در حضور برهم‌کنش راشبا

لیلا امام‌جمعه شهیدی، ادریس فیض‌آبادی\*

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

دریافت: 1395/10/28 پذیرش: 1397/11/24

## چکیده

در این پژوهش با استفاده از روش تابع گرین به بررسی جریان با قطبش اسپینی در نقاط کوانتومی 24 و 54 اتمی فسفرینی شش گوشه با لبه زیگزاگ پرداخته‌ایم. با این فرض که تمام الکترون‌های ورودی به ساختار نقطه کوانتومی فسفرین دارای اسپین بالا باشند، با انتخاب مناسب میدان الکتریکی که از خارج توسط یک ولتاژ گیت کنترل می‌شود، می‌توان یک جریان خروجی با قطبش اسپینی دلخواه داشت به‌ویژه شرایطی وجود دارد که می‌توان اسپین کلیه الکترون‌ها را معکوس کرد و بنابراین سیستم به‌عنوان یک وارونگر اسپینی عمل می‌کند که دارای کاربردهای ویژه در اسپینترونیک و پروسه اجرایی محاسبات کوانتومی می‌باشند. علاوه بر آن نشان داده‌ایم که با بزرگ شدن اندازه نقطه کوانتومی فسفرین اندازه جریان قطبیده افزایش می‌یابد.

**کلیدواژگان:** نقطه کوانتومی شش گوشه فسفرین، وارونگر اسپینی، قطبش اسپینی، روش تابع گرین

## مقدمه

به محدودسازی و ورود ناخالصی به ساختار اشاره نمود. ایجاد تک لایه فسفرین در سال 2014 به‌عنوان ماده جدید دوبعدی توجه خاصی را به‌خود جلب کرد. فسفرین برخلاف گرافین دارای گاف نواری ذاتی و تنظیم‌پذیر است و یک گاف مستقیم  $2-1.5\text{ eV}$  در نقطه گامای منطقه اول بریلوئن دارد که البته با افزایش تعداد لایه‌ها این مقدار کاهش می‌یابد [4]. کنترل گاف انرژی با ضخامت فسفرین، در اپتوالکترونیک به‌ویژه در ناحیه مادون‌قرمز از پتانسیل کاربردی بالایی برخوردار است [5]. فسفرین دارای تحرک پذیری بالای حامل‌های بار ( $10^4\text{ cm}^2\text{ V}^{-1}\text{ s}^{-1}$ ) در

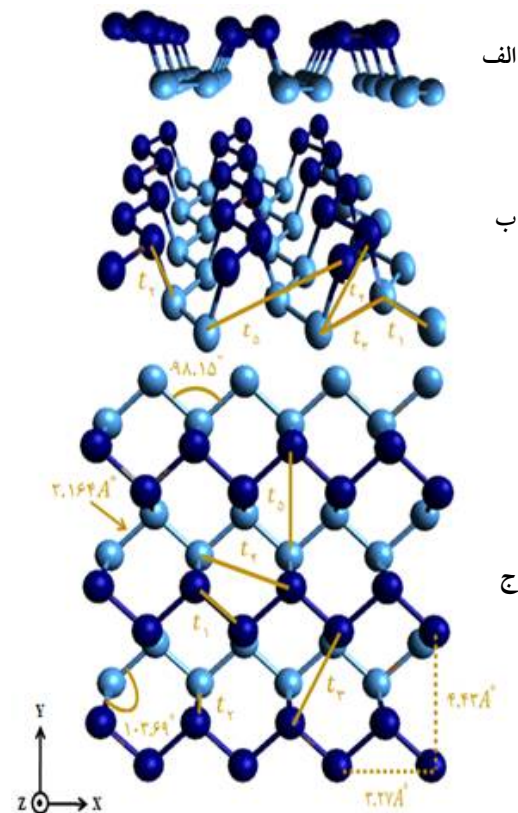
در سال‌های اخیر شاهد پیشرفت شگرف و سریع اسپینترونیک و نانو الکترونیک بوده‌ایم که در آن سعی شده است از خواص مواد نانو ساختار به‌صورت عملی استفاده شود. در این میان نانو ساختارهای مسطح به‌دلیل داشتن توان مصرفی پایین و بازده بالا و حجم کم مورد توجه ویژه قرار گرفته‌اند. در سال 2004 با کشف گرافین چشم‌انداز ویژه‌ای در کاربردهای تکنولوژیک آن، پیش روی محققین قرار گرفت [1-3]. از آنجایی که گرافین فاقد گاف نواری انرژی است، تمرکز این تحقیقات بر روی روش‌هایی برای ایجاد گاف در ساختارها بوده است که از جمله آن‌ها می‌توان

\*نویسنده مسئول: edris@iust.ac.ir

دمای اتاق است [6]. همانند آنچه در شکل 1 نشان داده شده است، فسفرین ساختار هندسی لانه زنبوری شبیه گرافین دارد با این تفاوت که یک ساختار شبه دوبعدی است و سطح آن دارای چین خوردگی می باشد.

اشاره کرد که یک ترانزیستور اثر میدان چندلایه ای از فسفرین ساختند و خواص الکترونیکی ترانزیستور را با اثر میدان الکتریکی مورد مطالعه قرار دادند و موفق به ساخت یک ترانزیستور اثر میدان نوع p بر اساس چندلایه از فسفرین شدند که تحرک پذیری حامل های بار آن تا حد  $1000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  در دمای اتاق افزایش می یابد [5].

علاوه بر آن تحقیقات زیادی برای ساخت نقاط کوآنتومی فسفرین انجام شد که نهایتاً گروه ژانگ و همکاران در سال 2015 با رویکرد بالا به پایین روشی برای آماده سازی نقاط کوآنتومی فسفرین در محلول ارائه دادند [9]. گروهی دیگر از محققین در همان سال خواص اپتیکی و الکترونیکی نقاط کوآنتومی فسفرین را مورد بررسی قرار دادند و نقاط کوآنتومی فسفرینی با سه شکل مستطیلی، مثلثی و شش گوشه با لبه های زیگزاگی و آرمنچیری را در نظر گرفتند همچنین اثرات لبه آنها را در گاف انرژی این نقاط مورد بررسی قرار داده و نشان دادند که اثر لبه فقط در جهت لبه دسته میلی نقاط کوآنتومی فسفرینی با اشکال ذکر شده در بالا، ظاهر می شود، در ادامه به تحلیل اثرات اندازه بر گاف انرژی، اثرات لبه بر روی چگالی حالات نقاط کوآنتومی فسفرینی شش گوشه و مثلثی پرداخته اند [4]. در این کار ما به بررسی جریان وابسته به اسپین در حضور اعمال میدان الکتریکی خارجی خواهیم پرداخت و به طور ویژه به محاسبه ترابرد وابسته به اسپین می پردازیم که کاربردهای فراوان در اسپینترونیک و نانو الکترونیک دارد، را مورد مطالعه قرار می دهیم.



شکل 1. تصویر ساختار به همراه انرژی های پرش فسفرین. نمایش طرحواره فسفرین (الف) از نمای جانبی، (ب) به صورت مایل، و (ج) از بالا. لبه های سمت چپ و راست دسته میلی (آرمنچیری) هستند در حالی که لبه های بالا و پایین زیگزاگی هستند.

برخلاف گرافین که تمام طول پیوندهای یک اتم با 3 اتم مجاورش  $1/42 \text{ \AA}$  است، فسفرین دو پیوند به طول  $2/16 \text{ \AA}$  و یک پیوند به طول  $2/207 \text{ \AA}$  دارد. ثابت های شبکه فسفرین  $4/43 \text{ \AA}$  و  $3/27 \text{ \AA}$  است و سلول واحد آن 4 اتم فسفر دارد. امروزه خواص و کاربردهای متفاوتی از نظر تئوری و تجربی برای فسفرین پیش بینی شده است. از جمله آنها می توان به کار لی و همکاران در سال 2014

### تئوری و روش کار

همچنان که در شکل 2 مشخص است سیستم های مورد بررسی نقاط کوآنتومی فسفرینی شش گوشه با لبه زیگزاگ هستند که به دو رابط خطی نیمه بی نهایت متصل شده اند و به ترتیب دارای 24 و 54 اتم فسفر می باشند. برای سادگی فرض می کنیم رابطه ها یکسان هستند. برای بررسی جریان با قطبش اسپینی دلخواه در رابط خروجی از روش تابع

برهم‌کنش راشبا است که ناشی از میدان الکتریکی عمود بر نقطه کوانتومی می‌باشد (در راستای محور  $Z$ ):

$$H_R = i\lambda(\sigma_{\alpha\beta} \times \hat{u}_{ij})_z \quad 3$$

$\sigma_{\alpha\beta}$  درایه  $\alpha\beta$  ام از ماتریس‌های پائولی هستند و  $\lambda$  قدرت جفت‌شدگی اسپین مدار راشبا را نشان می‌دهد.  $\hat{u}_{ij}$  بردار واحد وصل‌کننده جایگاه اتم  $j$  به جایگاه اتم  $i$  می‌باشد که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\hat{u}_{ij} = \frac{\vec{u}_{ijx}}{|\vec{u}_{ij}|} \hat{i} + \frac{\vec{u}_{ijy}}{|\vec{u}_{ij}|} \hat{j} \quad 4$$

شکل ماتریسی هامیلتونی برهم‌کنش راشبا را در فضای اسپینی می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$H_R = \begin{pmatrix} \circ & h_R^{\uparrow\downarrow} \\ h_R^{\downarrow\uparrow} & \circ \end{pmatrix} \quad 5$$

که در رابطه بالا عناصر ماتریسی  $h_R^{\uparrow\downarrow}, h_R^{\downarrow\uparrow}$  از روابط زیر به دست می‌آیند:

$$h_R^{\uparrow\downarrow}(i, j) = \frac{i\lambda(\vec{u}_{ijy} + i\vec{u}_{ijx})}{|\vec{u}_{ij}|} \quad 6$$

$$h_R^{\downarrow\uparrow}(i, j) = \frac{i\lambda(\vec{u}_{ijy} - i\vec{u}_{ijx})}{|\vec{u}_{ij}|} \quad 7$$

برای محاسبه قطبش اسپینی جریان خروجی از عبارت زیر استفاده می‌کنیم:

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

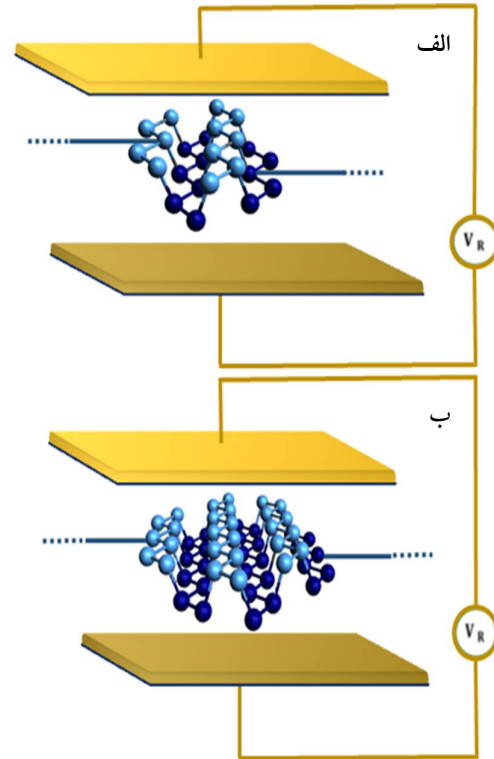
که در این عبارت  $T_{\downarrow}, T_{\uparrow}$  به ترتیب ضرایب عبور الکترون با اسپین بالا و پایین است. برای به دست آوردن ضریب عبور الکترون از روش تابع گرین استفاده می‌کنیم. تابع گرین تأخیری را به صورت زیر می‌توان نوشت [10]:

$$G^R = ((E + i\eta)\hat{I} - H - \sum_L - \sum_R)^{-1} \quad 9$$

که در این عبارت  $H$  هامیلتونی نقطه کوانتومی در حضور اثر راشبا است که در بالا معرفی شد و  $\sum_{L,R}$  ماتریس‌های

گرین استفاده می‌نمائیم. برای این منظور هامیلتونین سیستم را در مدل بستگی قوی به شکل زیر بیان می‌کنیم:

$$H = \begin{pmatrix} H_0 & \circ \\ \circ & H_0 \end{pmatrix} + H_R \quad 1$$



شکل 2. نقطه کوانتومی الف: 24 اتمی، ب: 54 اتمی فسفرین در اتصال به دو رابط خطی نیمه بی‌نهایت و  $V_R$  پتانسیل راشبا است.

که درایه‌های ماتریس  $H_0$  در غیاب اثر راشبا تعیین می‌شود:

$$H_0(i, j) = \begin{cases} \varepsilon & i = j \\ t_{ij} & i, j \text{ همسایه نزدیک باشند} \\ \circ & \text{در غیر این صورت} \end{cases} \quad 2$$

$i, j$  شماره جایگاه اتمهای فسفر و  $\varepsilon$  انرژی جایگاهی هر اتم است که آن را برابر صفر در نظر می‌گیریم.  $t_{ij}$  انرژی پرش بین اتم‌های همسایه است.  $H_R$  هامیلتونین

با داشتن  $T_{\downarrow} = T_{\uparrow\downarrow} + T_{\downarrow\downarrow}$  و  $T_{\uparrow} = T_{\downarrow\uparrow} + T_{\uparrow\uparrow}$  ضرایب عبور اسپین‌های بالا و پایین، در نهایت می‌توان با استفاده از رابطه 8 قطبش اسپینی جریان خروجی از نقطه کوآنتومی را به دست آورد. جریان الکتریکی وابسته به اسپین از رابطه لاندائر بوتیکر به دست می‌آید:

$$I_{\uparrow} = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T_{\uparrow}(E)(f_L(E) - f_R(E))dE$$

$$I_{\downarrow} = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T_{\downarrow}(E)(f_L(E) - f_R(E))dE$$

در اینجا  $e$  بار الکترون،  $h$  ثابت پلانک می‌باشند و  $f_L(E)$  و  $f_R(E)$  تابع توزیع فرمی-دیراک رابط‌های چپ و راست هستند و با فرمول زیر تعریف می‌شوند:

$$f_{R,L}(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu_{R,L}}{kT}\right)}$$

$k$  ثابت بولتزمن و  $T$  دمای سیستم است که برحسب کلوین می‌باشد.  $\mu_{R(L)}$  پتانسیل شیمیایی رابط‌های سمت راست (چپ) است.

### بحث و نتیجه‌گیری

با استفاده از روش توضیح داده شده در بخش قبل در این قسمت به تحلیل و بررسی نتایج به دست آمده می‌پردازیم.

لازم به ذکر است که در کلیه محاسبات  $t_1 = -1,22ev$ ،  $t_4 = -0,105ev$ ،  $t_3 = -0,205ev$ ،  $t_2 = 3,665ev$ ،  $t_5 = 0,055ev$  و  $\varepsilon = 0$  در نظر گرفته شده است. الکترون‌هایی که با انرژی مشخص از رابط سمت چپ وارد سیستم می‌شوند، درون سیستم تحت تأثیر اثر راشبا قرار گرفته و سپس از رابط سمت خارج می‌گردند. فرض بر این است که باریکه الکترون ورودی قطبیده با اسپین بالا است.

در شکل‌های 3 الف، ب و ج نتایج را برای ترابرد وابسته به اسپین از یک نقطه کوآنتومی 24 اتمی با ضریب

خود انرژی نامیده می‌شوند و بیانگر اثرات رابط‌های نیمه بی‌نهایت سمت چپ و راست می‌باشد که تمام درایه‌های آن به جز درایه‌هایی که در اتصال با اتم‌های نقطه کوآنتومی است، صفر هستند و به صورت زیر تعریف می‌شود [11]:

$$\Sigma_{L,R} = \tau_{L,R}^{\dagger} g_{L,R} \tau_{L,R}$$

$g_{L,R}$  تابع گرین سطحی برای رابط‌های نیمه بی‌نهایت چپ و راست است.  $\tau_{L,R}$  ماتریس‌های جفت‌شدگی بین رابط‌ها و نقطه کوآنتومی نامیده می‌شوند. ضریب عبور الکترون از نقطه کوآنتومی به صورت زیر است:

$$T = Tr(\Gamma_L G^R \Gamma_R G^{R\dagger})$$

که در آن  $\Gamma_{L,R}$  تابع پهن‌شدگی رابط‌ها است و به صورت زیر بیان می‌شود [11]:

$$\Gamma_{L,R} = i(\Sigma_{L,R} - \Sigma_{L,R}^{\dagger})$$

همچنین برای محاسبه ضرایب عبور وابسته به اسپین الکترون، باید خود انرژی‌های وابسته به اسپین را محاسبه کرد که به شکل زیر ارائه می‌شود [12]:

$$\Sigma_{L,R} = \Sigma_{L,R\uparrow} + \Sigma_{L,R\downarrow}$$

با جای‌گذاری هامیلتونی نقطه کوآنتومی و خود انرژی‌ها در تابع گرین به رابطه زیر می‌رسیم:

$$G^R = ((E + i\eta)\hat{I} - H - \Sigma_{L\uparrow} - \Sigma_{L\downarrow} - \Sigma_{R\uparrow} - \Sigma_{R\downarrow})^{-1}$$

با داشتن تابع گرین وابسته به اسپین می‌توان ترابردهای وابسته به اسپین را محاسبه نمود، بنابراین چهار حالت زیر را داریم:

$$T_{\uparrow\downarrow} = Tr(\Gamma_{L\uparrow} G^R \Gamma_{R\downarrow} G^{R\dagger})$$

$$T_{\uparrow\uparrow} = Tr(\Gamma_{L\uparrow} G^R \Gamma_{R\uparrow} G^{R\dagger})$$

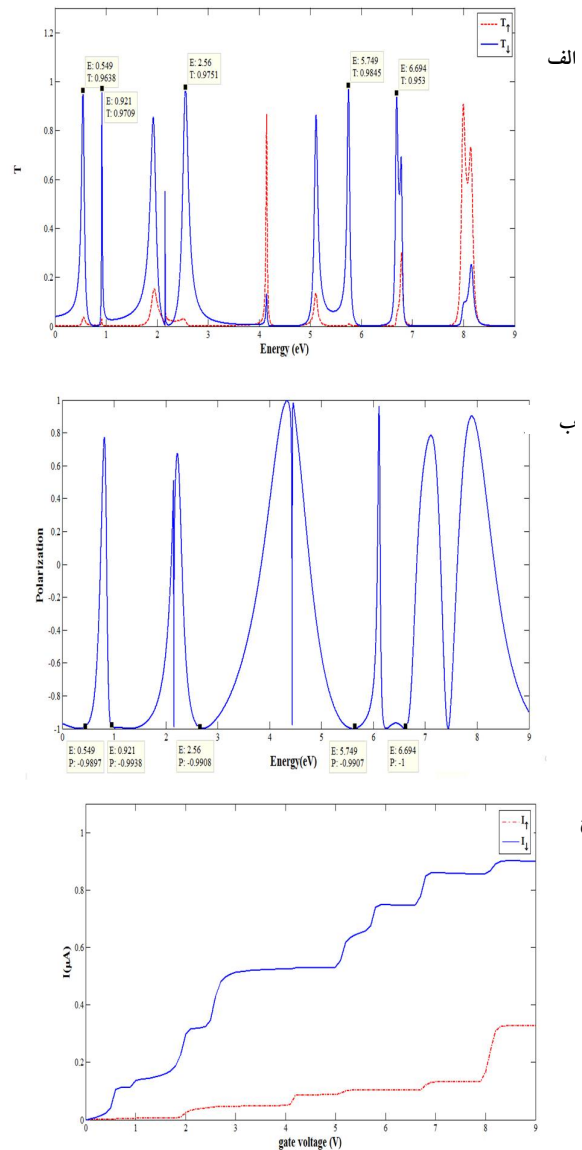
$$T_{\downarrow\uparrow} = Tr(\Gamma_{L\downarrow} G^R \Gamma_{R\uparrow} G^{R\dagger})$$

$$T_{\downarrow\downarrow} = Tr(\Gamma_{L\downarrow} G^R \Gamma_{R\downarrow} G^{R\dagger})$$

با اعمال پتانسیل راشبا در نقطه کوانتومی یک میدان مغناطیسی ناشی از نیروی لورنتس  $\vec{B} = -\frac{1}{c}v \times E$  ایجاد می‌شود. اسپین الکترون‌های ورودی با این میدان مغناطیسی برهم‌کنش داشته و جهت‌گیری آنها تغییر می‌کند. برای مثال در انرژی  $5.75\text{eV}$  در شکل 3 الف ضریب عبور  $T_{\downarrow}$  به مقدار  $0.98$  می‌رسد که در آن الکترون‌ها با حداقل بازتاب از داخل سیستم عبور می‌کنند و چرخش اسپینی کامل است. حالت‌های مشابه در انرژی‌های دیگر در شکل نشان داده شده است. با محاسبه ضرایب عبور الکترون‌ها، با استفاده از رابطه 8 می‌توان قطبش اسپینی جریان خروجی را محاسبه نمود. قطبش برحسب انرژی الکترون‌های ورودی در شکل 3-ب آورده شده است. با توجه به شکل می‌توان به خوبی مشاهده کرد که الکترون‌های ورودی در انرژی‌های مشخص شده در شکل 3-الف، قطبش اسپینی 1- دارند. به این معنی که الکترون‌های خروجی دارای اسپین پایین هستند و الکترون‌ها با اسپین بالا به‌طور کامل چرخیده‌اند و همانگونه که ذکر شد دلیل این چرخش میدان مغناطیسی ایجاد شده توسط الکترون‌های سیستم به دلیل میدان الکتریکی اعمالی توسط گیت است. در بعضی از نقاط نیز قطبش 1- مشاهده می‌شود ولی با توجه به قسمت الف در آن انرژی‌ها عبور کم است که برای کاربردهای عملی مناسب نیست.

در شکل 3 ج جریان عبوری وابسته به اسپین برای همان نقطه کوانتومی آورده شده است. مطابق شکل 3-ج جریان رفتاری پله‌ای دارد و در برخی نقاط افزایش ناگهانی جریان را شاهد هستیم، در واقع در این نقاط انرژی الکترون‌های ورودی با ترازهای انرژی سیستم برابر می‌شود و جریان در داخل سیستم برقرار می‌گردد. همان‌طور که دیده می‌شود، جریان خروجی الکترون‌ها با اسپین پایین بیشتر از الکترون‌هایی با اسپین بالا است که به دلیل بیشتر بودن قله‌های انرژی الکترون‌ها با اسپین پایین در قسمت الف است.

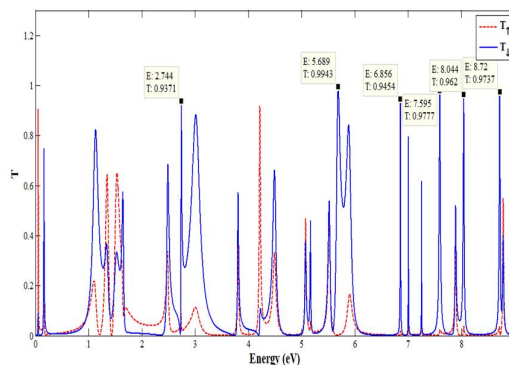
جفت‌شدگی اسپین مدار راشبا  $0.78$  به‌نمایش گذاشته‌ایم. همچنان که در شکل 3-الف مشخص است نتایج این بررسی برای ضریب عبور وابسته به اسپین برحسب انرژی الکترون‌های ورودی به‌نمایش گذاشته شده است. خطوط پیوسته نشان‌دهنده ضریب عبور الکترون‌ها با اسپین پایین و خط چین‌ها الکترون‌هایی با اسپین بالا هستند.



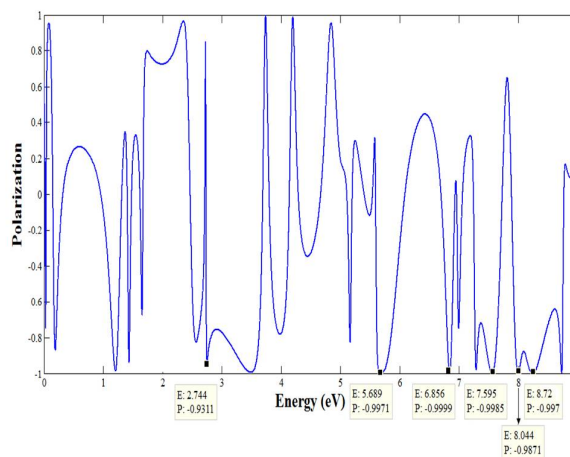
شکل 3. الف: ضریب عبور الکترون‌ها برحسب انرژی، ب: قطبش اسپینی برحسب انرژی، ج: جریان عبوری برحسب اختلاف ولتاژ رابطه‌ها برای یک نقطه کوانتومی مسفرینی 24 اتمی در حضور برهم‌کنش راشبا

الف

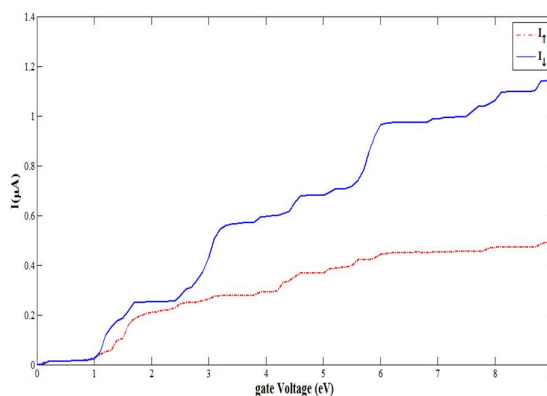
در شکل های 4 الف، ب و ج نیز نتایج را برای ترابرد وابسته به اسپین از یک نقطه کوآنتومی 54 اتمی با ضریب جفت شدگی اسپین مدار راشبا 0/78 نشان داده ایم. در شکل 4 الف ضریب عبور وابسته به اسپین برحسب انرژی الکترون های ورودی به نمایش گذاشته شده است. نقاط نشان داده شده در شکل، ماکزیمم ضرایب عبور الکترون ها با اسپین پایین در انرژی های مختلف است. همچنان که مشاهده می شود در آن انرژی ها، ضرایب عبور الکترون با اسپین بالا نزدیک به صفر است و مطابق شکل 4 ب این نقاط دارای قطبش اسپینی 1- هستند که این نکته را نشان می دهد، علاوه بر قطبش 100 درصدی الکترون ها با اسپین پایین، عبور ماکزیمم نیز داریم و با تقریب خوبی می توان گفت الکترون ها با اسپین بالا چرخیده اند. با مقایسه شکل 3 الف و 4 الف در می یابیم که با افزایش تعداد اتم های سیستم، حالت های مجاز انرژی افزایش می یابد و تعداد پیک های سیستم بیشتر می شود، بنابراین در بازه انرژی مورد بررسی تعداد نقاط بیشتری با قطبش و عبور بیشتر خواهیم داشت. برای نقطه کوآنتومی 54 اتمی با توجه به شکل 4 در محدوده انرژی 5-9 eV و 2-4 eV ضریب عبور برای اسپین پایین مقادیری نزدیک به 1 دارد در حالی که در شکل 3 برای یک نقطه کوآنتومی فسفرین با 24 اتم، این نتیجه برای نواحی 0-4 eV و 5-7 eV مشاهده می شود. در شکل 4 ج نتایجی همانند جریان خروجی اسپینی نقطه کوآنتومی 24 اتمی است با این تفاوت که جریان به دلیل بیشتر شدن قله های انرژی نقطه کوآنتومی 54 اتمی فسفرین نسبت به قله های نقطه کوآنتومی فسفرین 24 اتمی، افزایش یافته است. در واقع زمانی که نقطه کوآنتومی بزرگ تر می شود تعداد الکترون های آزاد در سیستم افزایش می یابد، بنابراین شاهد افزایش جریان هستیم. می توان به کمک یک میدان الکتریکی خارجی اعمالی به سیستم که از طریق یک گیت کنترل می شود، قدرت جفت شدگی اسپین مدار راشبا را به گونه ای تنظیم نمود که در آن مقدار



ب



ج

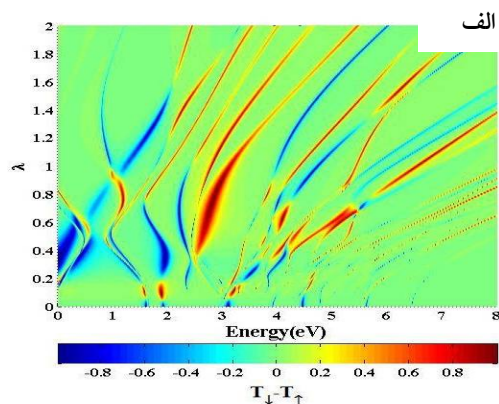


شکل 4. الف: ضریب عبور الکترون ها برحسب انرژی، ب: قطبش اسپینی برحسب انرژی، ج: جریان عبوری برحسب اختلاف ولتاژ رابطها برای یک نقطه کوآنتومی فسفرینی 54 اتمی در حضور برهم کنش راشبا

اسپین الکترون‌های ورودی کاملاً از اسپین بالا به حالت اسپین پایین می‌چرخند و این به آن معناست که سیستم می‌تواند به عنوان یک وارون گر اسپینی عمل کند. در شکل 5 الف برای نواحی انرژی  $2.7 < E < 3.2 eV$ ، اختلاف ضرایب عبور با اسپین پایین و بالا،  $T_{\downarrow} - T_{\uparrow}$ ، مقادیر نزدیک به یک دارند به این معنی که در آن انرژی‌ها اسپین به طور کامل چرخیده است و در شکل 5 ب برای همان ناحیه نیز می‌توان مشاهده کرد  $T_{\downarrow} + T_{\uparrow}$  نیز مقادیر نزدیک به یک را دارند بنابراین در این ناحیه عبور هم ماکزیمم است. کارایی وارونگر اسپینی با رابطه زیر داده می‌شود:

$$\eta = (T_{s \rightarrow s'} - T_{s \rightarrow s}) \times 100 \quad 18$$

که در آن  $s \neq s'$  است و نشان دهنده جهت گیری اسپینی است. طبق رابطه بالا در ناحیه انرژی  $2.7 < E < 3.2 eV$  کارایی وارون کننده اسپینی 100% است، به این معنی که اگر تغییرات اختلاف ضرایب عبور وابسته به اسپین  $T_{\downarrow} - T_{\uparrow}$ ، مقداری نزدیک به یک داشته باشند به این معنا که اسپین الکترون‌ها در آن انرژی به دلیل اثر راشبا چرخیده‌اند، همچنین قطبش اسپینی برابر 1- دارند بنابراین بهره کارایی وارون کننده اسپینی ماکزیمم است و سیستم از نظر عملی و کاربردی در اسپیترونیک و پروسه اجرایی محاسبات کوآنتومی مناسب است.



ضریب عبور الکترون‌هایی با اسپین پایین نزدیک به یک و ضریب عبور الکترون‌هایی با اسپین بالا نزدیک صفر باشد. بدین منظور قدرت جفت‌شدگی اسپین مدار راشبا را هم‌زمان با مقادیر انرژی الکترون‌های ورودی تغییر می‌دهیم، تا جایی که علاوه بر حداکثر ضریب عبور، چرخش اسپینی با قطبش 1- داشته باشیم. حال برای آنکه تأثیر سایر مقادیر راشبا را بر قطبش اسپینی بررسی کنیم، در شکل 5 نتایج مربوط به ترابری وابسته به اسپین نقطه کوآنتومی 54 اتمی فسفرین ارائه شده است.

در قسمت 5 الف، نمودار سه بعدی تغییرات اختلاف ضرایب عبور وابسته به اسپین  $T_{\downarrow} - T_{\uparrow}$  برحسب انرژی الکترون‌های ورودی و نیز قدرت جفت‌شدگی اسپین مدار راشبا به نمایش درآمده است. مطابق شکل با توجه به اینکه کلیه الکترون‌های ورودی دارای اسپین بالا بوده‌اند با تنظیم دقیق پتانسیل  $V_R$  می‌توان جمعیت اسپینی الکترون‌هایی که دارای اسپین معکوس هستند را در خروجی تنظیم کرد. شکل 5 ب تغییرات مجموع ضرایب عبور وابسته به اسپین  $T_{\downarrow} + T_{\uparrow}$ ، و شکل 5 ج قطبش اسپینی را برحسب تغییرات قدرت جفت‌شدگی اسپین مدار راشبا و انرژی الکترون‌های ورودی برای یک نقطه کوآنتومی فسفرین 54 اتمی نمایش می‌دهد. همان‌طور که در شکل 5 ج دیده می‌شود با تغییر ضریب راشبا می‌توان قطبش اسپینی با مقادیر 1+ (عبور الکترون با اسپین بالا و بدون چرخش) و 1- (عبور الکترون با اسپین پایین و چرخش کامل) را به دست آورد. همان‌طور که در شکل 5 ج نشان داده شده برای مثال به ازای  $E = 0.9 eV$  و  $0.2 < \lambda < 0.5$  ضریب راشبا الکترون‌های ورودی پس از عبور از نقطه کوآنتومی جهت اسپینی خود را حفظ می‌کنند و در این محدوده وارون شدگی اسپینی بسیار کوچک و قابل صرف نظر است. برای چرخش حالت اسپینی این دسته از الکترون‌ها ضریب راشبا بزرگ‌تری نیاز است. اما به ازای محدوده ضریب راشبا  $0.5 < \lambda < 1$  و در ناحیه انرژی  $2.7 < E < 3.2 eV$

[2] A.C. Neto, F. Guinea, N.M. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, The electronic properties of graphene, *Reviews of modern physics* 81 (2009) 109.

[3] A.K. Geim, K.S. Novoselov, The rise of graphene, in, *Nanoscience and Technology: A Collection of Reviews from Nature Journals, World Scientific* (2010) 11-19.

[4] R. Zhang, X. Zhou, D. Zhang, W. Lou, F. Zhai, K. Chang, Electronic and magneto-optical properties of monolayer phosphorene quantum dots, *2D Materials* 2 (2015) 045012.

[5] L. Li, Y. Yu, G.J. Ye, Q. Ge, X. Ou, H. Wu, D. Feng, X.H. Chen, Y. Zhang, Black phosphorus field-effect transistors, *Nature nanotechnology*, 9 (2014) 372.

[6] X. Niu, Y. Li, H. Shu, J. Wang, Anomalous size dependence of optical properties in black phosphorus quantum dots, *The journal of physical chemistry letters* 7 (2016) 370-375.

[7] J. Zhang, H. Liu, L. Cheng, J. Wei, J. Liang, D. Fan, J. Shi, X. Tang, Q. Zhang, Phosphorene nanoribbon as a promising candidate for thermoelectric applications, *Scientific reports* 4 (2014) 6452.

[8] E.T. Sisakht, M.H. Zare, F. Fazileh, Scaling laws of band gaps of phosphorene nanoribbons: A tight-binding calculation, *Physical Review B* 91 (2015) 085409.

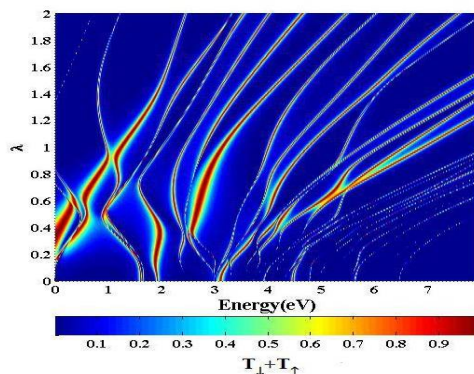
[9] X. Zhang, H. Xie, Z. Liu, C. Tan, Z. Luo, H. Li, J. Lin, L. Sun, W. Chen, Z. Xu, Black phosphorus quantum dots, *Angewandte chemie international edition* 54 (2015) 3653-3657.

[10] S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*: Cambridge university press, (1997).

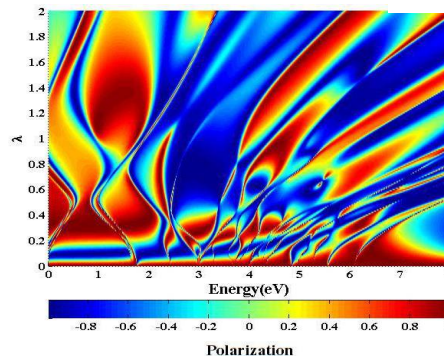
[11] D.A. Ryndyk, *Theory of Quantum Transport at Nanoscale, Springer Series in Solid-State Sciences*, 184 (2016).

[12] F. Fallah, M. Esmailzadeh, Spin transport properties in an organic molecule in the presence of Rashba spin-orbit interaction, *AIP Advances* 1 (2011)032113.

ب



ج



شکل 5. نمودار سه بعدی الف تغییرات اختلاف ضرایب عبور وابسته به اسپین  $T_{\downarrow} - T_{\uparrow}$  ب: عبور کل وابسته به اسپین  $T_{\downarrow} + T_{\uparrow}$  ج: قطبش اسپینی، برحسب انرژی الکترون‌های ورودی و نیز قدرت جفت شدگی اسپین مدار راشبا.

### سپاس‌گزاری

با تشکر از دانشگاه علم و صنعت ایران که از این کار در قالب طرح پژوهشی شماره 502/160 حمایت کرده است.

### مرجع‌ها

[1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, Electric field effect in atomically thin carbon films, *science*, 306 (2004) 666-669.