

محاسبه رسانش الکتریکی اسپینی نانو نوار گرافین در حضور ناخالصی مغناطیسی به روش تابع

گرین بازگشتی

گودینی، سعید؛ ربانی، فرشته؛ نمیرانیان، افشین

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

چکیده

در این مقاله رسانش الکتریکی یک نانونوار گرافینی متصل به دو الکتروود نیم بینهایت، در حضور اتمهای مغناطیسی جایگزین شده روی نانو نوار گرافین مورد مطالعه قرار می گیرد. برای این کار از روش لاندایر در چارچوب تقریب بستگی قوی سود جسته ایم و برای محاسبه ضرایب عبور حالت‌های اسپین بالا و پایین رهیافت تابع گرین بازگشتی را گسترش داده و از آن استفاده کرده ایم. براساس نتایج، رسانش اسپین بالا و پایین وابسته به قدرت مغناطش ناخالصی، جهت، درصد و مکان ناخالصی می باشد.

Spin electrical conductance of Graphene nanoribbon in the presence of magnetic impurity using recursive Green's function method

Gowdini, Saeid; Rabbani, Fereshte; Namiranian, Afshin

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

Abstract

In this paper, the spin conductance of an armchair graphene nano-ribbon in the presence of a few magnetic impurities attached to two semi-infinite leads have been studied. we have employed the Landauer formalism in the framework of the tight-binding approximation and in order to calculate the spin depended transmission coefficients, an extended recursive Green function is used. Our results show that the spin conductance depends on hopping energy of electron with different spin states, which are interacted with magnetic impurity, the energy of the incoming electrons and concentration of magnetic impurities.

PACS No. 72,73

می تواند استفاده گرافین در اسپین ترونیک را فراهم نماید [۴]. کاربرد کردن یافته های نظری اسپین ترونیک با مواد نیمه رسانا و فلزات و رسانا های عادی که تابحال شناخته شده، بسیار دشوار و گاه غیر ممکن می باشد. بیشتر این مشکلات به حساس بودن اسپین الکترون و داشتن برهمکنشهای مختلف در محیط دو بعدی مربوط می شود. خوشبختانه گرافین بسیاری از این مشکلات را نداشته و حتی خواص مربوط به ویژگی های اسپینی خوبی هم از خود نشان داده است. از جمله مواردی که به گرافین خاصیت مغناطیسی می دهد، وجود یک یا چند اتم ناخالصی بر روی سطح گرافین [۵]، یا بجای اتم های کربن [۶] است. اتمهای مغناطیسی به

مقدمه

گرافین با خواص بسیار ویژه و عجیبی که از نظر ترابرد الکترونیکی دارد می تواند در ساخت قطعات الکترونیکی تحول اساسی ایجاد نماید [۱]. یکی از مهمترین خواص گرافین رسانش الکتریکی بسیار بالای آن است، بطوریکه رسانندگی اش از تمام رساناهای شناخته شده در دمای اتاق بیشتر می باشد [۲]. بنابراین محققان گرافین را به عنوان یکی از بهترین مواد برای ساخت قطعات الکترونیکی انتخاب کردند [۳]. پس از تحقیقات نظری و تجربی معلوم شد گرافین که از اتمهای غیر مغناطیس ساخته شده است می تواند دارای خواص مغناطیسی باشد. این ویژگی جدید

گرفتن دو حالت اسپین بالا و پایین و با توجه به اینکه روی الکترونها عامل پراکندگی اسپینی نداریم می توان ماتریس های تابع گرین اسپینی الکترونها را برای برشهای $(-\infty, 0]$ و $[N+1, +\infty)$ به صورت زیر تشکیل داد.

$$G_{0\sigma,0\sigma'}^{-\infty} = \begin{bmatrix} \overbrace{G_{0,0}^{-\infty}}^{up} & \overbrace{[00]}^{up.down} \\ \overbrace{[00]}^{down.up} & \overbrace{G_{0,0}^{-\infty}}^{down} \end{bmatrix}_{2N \times 2N} \quad (3)$$

سپس با استفاده از سری دایسون و روابط بازگشتی می توان تابع گرین اسپینی کل سامانه شامل ناخالصی را بدست آورد [8].
شکل (1)

$$G_{N+1,N+1}^{(N+1)} = [EI - H_{N+1}^1 - V_{N,N+1}^\dagger G_{N,N}^{(N)} V_{N,N+1}]$$

$$G_{i,N+1}^{(N+1)} = G_{i,N}^{(N)} V_{N,N+1} G_{N+1,N+1}^{(N+1)}$$

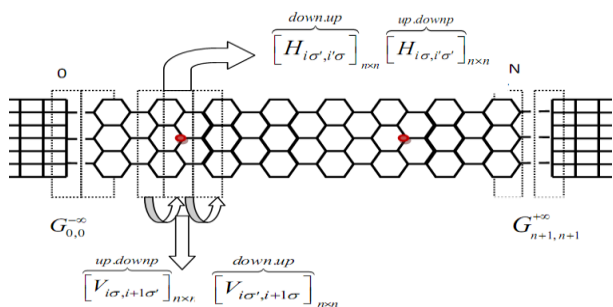
$$G_{0,n+1\sigma,\sigma'} = \begin{bmatrix} \overbrace{G_{0,n+1\sigma,\sigma'}}^{up} & \overbrace{G_{0,n+1\sigma,\sigma'}}^{up.down} \\ \overbrace{G_{0,n+1\sigma,\sigma'}}^{down.up} & \overbrace{G_{0,n+1\sigma,\sigma'}}^{down} \end{bmatrix}_{2N \times 2N}$$

سپس با استفاده از رابطه تعمیم داده شده، ماتریس ضریب عبور برای اسپین بالا و پایین را بدست آورد.

$$t_{mn} = \sqrt{\frac{v_m}{v_n}} \{U(+)^{-1} V G_{0,L+1} U(+)[\Lambda(-) - \Lambda(+)]\}_{mn}$$

$$T_{Down}(E_F) = \sum_{\sigma', m=(1+N_R)}^{2 \times N_R} \sum_{\sigma, n=(1+N_L)}^{2 \times N_L} |t_{m\sigma,n\sigma'}|^2$$

$$T_{up}(E_F) = \sum_{\sigma, m=1}^{N_R} \sum_{\sigma', n=1}^{N_L} |t_{m\sigma,n\sigma'}|^2$$



شکل (1) مراحل بدست آوردن تابع گرین کل سامانه به همراه ناخالصی مغناطیسی

علت برهمکنشهایی که با اسپین دارند، می توانند هنگام عبور الکترون تغییراتی در جهت اسپین آنها ایجاد کنند. در این مقاله با در نظر گرفتن برخی شرایط، رفتار یک جریان غیر اسپینی از الکترونها تزیق شده به نانو نوارگرافین، شامل یک اتم ناخالصی مغناطیسی با دو جهت مغناطش بررسی شده است. نتایج این پژوهش می تواند در مدارهای اسپین ترونیکی بر پایه گرافین مفید باشد.

مدل و روش

روش محاسبات، گسترش تابع گرین بازگشتی [7] غیر اسپینی به حالت اسپینی است. با توجه به برهمکنش اسپین الکترون با ناخالصی مغناطیسی و جریان ورودی غیر قطبیده به نانو نوارگرافین، باید هر چهار احتمال برهمکنش اسپین با ناخالصی در نظر گرفته شوند:

- الکترون با اسپین بالا با ناخالصی مغناطیسی برهمکنش کند و با اسپین بالا یا پایین عبور کند.
- الکترون با اسپین پایین با ناخالصی مغناطیسی برهمکنش کند و با اسپین پایین یا بالا عبور کند.

البته جهت ناخالصی را نیز می توان بالا یا پایین گرفت. هر برش سیم کوانتومی یا الکتروند با اندیس i برچسب می خورد. هامیلتونی چنین سامانه ای برای تک الکترون در مدل بستگی قوی و تقریب نزدیکترین همسایه با در نظر گرفتن اسپین به صورت زیر است:

$$\hat{H} = \sum_i \langle i | H_{i,i} | i \rangle + \sum_{\langle i\sigma, j\sigma' \rangle} \langle i, \sigma | H_{i\sigma, j\sigma'} | \sigma', j \rangle$$

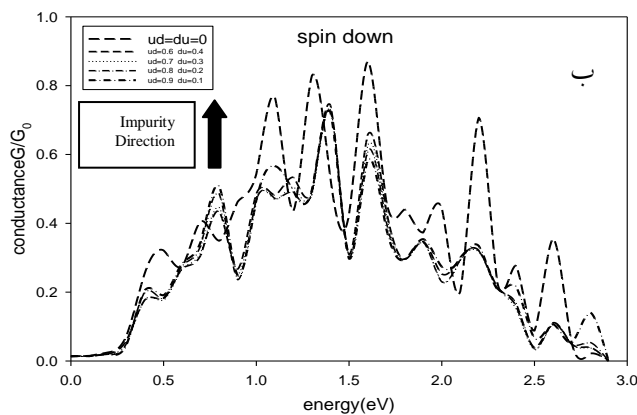
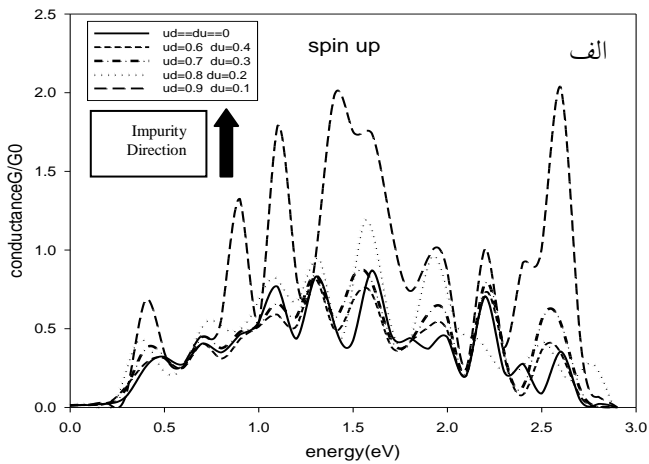
جمله اول مربوط به هامیلتونی یک نقطه از سیم یا الکتروند برای حالت جایگزیده وانیر $|i\rangle$ است و جمله دوم مربوط به نقاط دو برش در سیم یا الکتروند است که شامل پراکندگی اسپینی نیز می شود. جمع $\langle \dots \rangle$ روی نزدیکترین همسایه ها برای هر الکترون در برشهای i و j است. معادله ماتریسی تابع گرین برای تمام نقاط شبکه روی برشهای i و j به این صورت است:

$$[Z - H_{i,i}] G_{i,j} - H_{i,i+1} G_{i+1,j} - H_{i,i-1} G_{i-1,j} = I \delta_{i,j}$$

با استفاده از شرایط مرزی می توان تابع گرین را برای برش اول $(G_{0,0}^{-\infty})$ و آخر $(G_{n+1,n+1}^{+\infty})$ الکتروند بدست آورد. حال برای در نظر

بررسی نتایج

در این قسمت یک ناخالص مغناطیسی بر روی نانو نوار گرافین، در یک مکان ثابت گذاشته و با تغییر پارامتر پرش الکترون برهمکنش با ناخالصی مغناطیسی، برای حالت‌های بالا به پایین (UD) و پایین به بالا (DU)، جداشدگی رسانش اسپین الکترون‌های عبوری با اسپین بالا (Up) و پایین (Down) در برهمکنش با ناخالصی را بررسی می‌نماییم. پارامترهای جدول (۱) برای انرژی‌های مختلف برهمکنش اسپین با ناخالصی مغناطیسی ثابت هستند.



1ev	انرژی پرش بین اتمهای الکترون	1ev	انرژی پرش بین اتمهای گرافین
7 points	تعداد نقاط عرضی الکترون و گرافین	0.8 ev	انرژی پرش بین الکترون و گرافین
9 Rings	10 slice	0ev	انرژی جایگاهی اتمهای گرافین و الکترون

جدول (۱) پارامترهای ثابت در محاسبات

در حالت اول جهت اسپین ناخالصی را به سمت بالا گرفته و با تغییر در انرژی‌های پراکندگی اثر آن را در رسانش بررسی می‌کنیم. با توجه به شکل (۲) دیده می‌شود که در حالت جریان اسپین بالا با قرار دادن ناخالصی با جهت بالا، رسانش اسپین بالا افزایش یافته، و با افزایش قدرت ناخالصی، سهم رسانش اسپین بالا، از رسانش کل، (نمودار خط چین طولانی) بتدریج افزایش می‌یابد. این وضعیت برای رسانش اسپین پایین برعکس است و با افزایش قدرت ناخالصی مغناطیسی، رسانش اسپین پایین بتدریج کاهش پیدا می‌کند. آنچه که از هر دو نمودار شکلهای (۲) الف و ب مشاهده می‌شود اینست که در حالت وجود ناخالصی، نمودارهای الگوهای یکسانی دارند، به این معنی که نقاط بیشینه و کمینه آنها برای حالت‌های مختلف انرژی تداخلی برهمکنش با ناخالصی، یکسان است. این موضوع به این دلیل است که عرض الکترون و نانو نوار تغییر نکرده و همه نمودارها دارای طیف انرژی مشابه هستند، بنابراین حالت‌های پراکندگی آنها نیز مشابه است. همچنین علت تغییر در رسانش اسپینی با تغییر در قدرت ناخالصی مغناطیسی و جهت آنرا می‌توان اینگونه توصیف کرد که ناخالصی

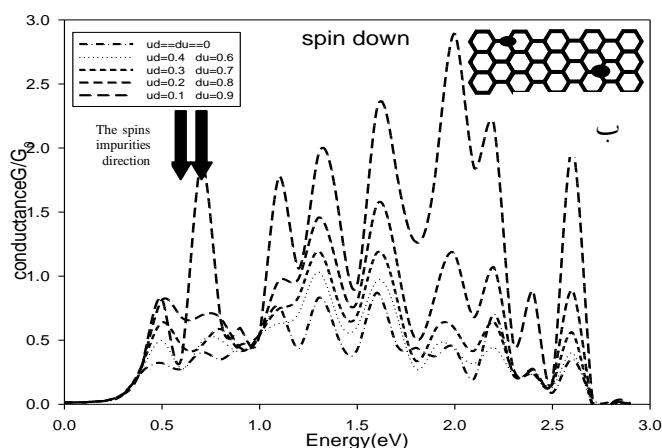
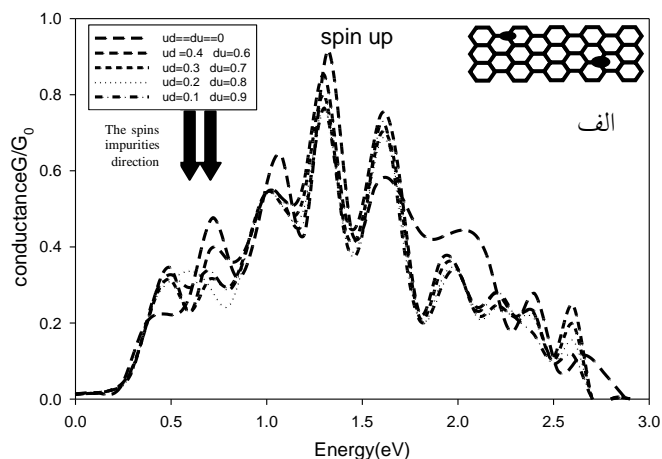
شکل (۲) الف) رسانش اسپین بالا (ب) اسپین پایین برای انرژی‌های متفاوت

$$G_0 = e^2/h$$

برهمکنش ناخالص با اسپین الکترون

مغناطیسی در واقع مانند یک سد (چاه) پتانسیل دلتا مانند عمل می‌کند. ارتفاع این سد (چاه) برای حالت‌های عبور الکترون، با اسپین بالا و اسپین پایین متفاوت است. چراکه تراز انرژی الکترون به دلیل اثر زیمان هنگام عبور از روی ناخالصی شکافته می‌شود. این شکافتگی به قدرت گشتاور ناخالصی مغناطیسی و جهت آن و جهت اسپین الکترون عبوری بستگی دارد که چهار حالت مختلف عبور را ایجاد می‌کند. از این رو انرژی پرش برای حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین متفاوت است. حال هر چقدر انرژی پرش از روی ناخالصی، با انرژی پرش بدون ناخالصی تفاوت بیشتر داشته باشد، چشمه پراکندگی قوی تر شده و امواج الکترون فرودی یا عبوری را بیشتر انعکاس می‌دهد. همانگونه که پیداست، نمودارهای رسانش، حالت نوسانی دارند. این نوسانها با افزایش

آن بر روی یک نانو نوار گرافینی دسته مبلی جریان اسپین قطبیده تولید نمود.



شکل (۳) الف) رسانش اسپین بالا (ب) اسپین پایین برای انرژی های متفاوت برهمکنش دو ناخالص با جهت پایین و اسپین الکترون $G_0 = e^2/h$

طول نانو نوار بیشتر می شود. علت این موضوع می تواند مربوط به تداخلهای کوانتومی ناشی از انعکاس امواج الکترونی باشد. در واقع هنگام انعکاس امواج الکترون به دلیل وجود ناخالصی، یا علل دیگر فاز موج تغییر کرده، که در برهم نهی با امواج عبوری حالت های نوسانی را بوجود می آورند. این پدیده قبل از این در نانولوله های کربنی گزارش شده است [۹].

در مرحله بعد از دو ناخالصی مغناطیسی با ساختار نشان داده شده در شکل ۳ و جهت پایین به عنوان چشمه پراکندگی اسپین استفاده شده است. همانطور که از نمودارها پیداست، الگویی مشابه حالت تک ناخالصی برای جریان اسپین بالا و اسپین پایین وجود دارد. با توجه به نمودارهای شکل ۳ دیده می شود که نسبت به حالت تک ناخالصی رسانش بیشتر، کاهش یافته و اینکه، دو ناخالصی تاثیر بیشتری در جهت دهی اسپینهای رسانش دارند. همچنین با توجه به نمودارهای شکل ۳ الف و ب دیده می شود که رسانش اسپین پایین برای دو ناخالصی به سمت پایین، با افزایش قدرت مغناطش ناخالصی، بیشتر افزایش پیدا می کند، درحالی که برای اسپین بالا با افزایش قدرت مغناطش ناخالصی، رسانش زیاد تحت تاثیر قرار نمیگیرد. مورد قابل توجه دیگر قطبیدگی اسپینی قابل توجه برای محدوده های انرژی مشخصی است (۲ eV) که با افزایش قدرت مغناطش بوجود می آید.

نتیجه گیری

در این مقاله مساله رسانش اسپینی نانو نوار گرافینی دسته مبلی به همراه یک ناخالصی مغناطیسی با دو جهت متفاوت بررسی شد. برای بدست آوردن ضرایب عبور از تابع گرین بازگشتی و بسط به حالت اسپینی استفاده شده است. نتایج محاسبات نشان داد که درصد ناخالصی، جهت و قدرت برهمکنش آن با اسپین الکترون از فاکتورهای مهم و تاثیر گذار بر روی رسانش اسپینی است. همچنین می توان با انتخاب ناخالصی مغناطیسی و درصد غلظت

مرجع ها

- [۱] A.K. Geim, K.S. Novoselov, *Nature mater*, **6** (2007) 183.
- [۲] D.D. Awschalom, M.E. Flatté, *Nature Phys*, **3** (2007) 153.
- [۳] X. Liang, Z. Fu, S.Y. Chou, *Nano Lett*, **7** (2007) 3840.
- [۴] D. Boukhalov, M. Katsnelson, *Nano Lett*, **8** (2008) 4373.
- [۵] M. Sargolzaei, F. Gudarzi, *J. Appl. Phys*, **110** (2011) 064303.
- [۶] E.J. Santos, D. Sánchez-Portal, A. Ayuela, *Phys. Rev. B*, **81** (2010) 125433.
- [۷] K. Nikolic, A. MacKinnon, *Phys. Rev. B* **69** (1994) 155422
- [۸] A.A. Shokri, A.H. Mosavat, *Superlattices and Microstructures*, **51** (2012) 523.
- [۹] D. Orlikowski, H. Mehrez, J. Taylor, H. Guo, J. Wang, C. Roland, *Phys. Rev. B*, **63** (2001) 155412.