

## ترابرد اسپین و دره قابل کنترل در سیلیسین تحت کرنش

فرخ نژاد، محسن<sup>۱</sup>؛ اسماعیل زاده، مهدی<sup>۱</sup>؛

<sup>۱</sup>دانشکده فیزیک دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

### چکیده

ما یک فیلتر کامل دره (ولی) - اسپین و دره در سیلیسین تحت کرنش پیشنهاد می‌کنیم. این ناشی از پتانسیل برداری مؤثری است که بواسطه کرنش در سیلیسین ایجاد می‌شود. علاوه بر آن، ما یافتیم که قطبش اسپین-دره کامل در سیلیسین تحت کرنش می‌تواند در حضور میدان الکتریکی عمودی و بدون میدان تبادل ایجاد شود. همچنین ما نشان دادیم که دره فیلترینگ و دره-اسپین فیلترینگ به راستای کرنش اعمال شده در حضور میدان الکتریکی عمودی وابسته است، در اینجا، راستای قطبش اسپینی الکترون‌ها برای دره‌های  $K$  و  $K'$  می‌تواند به آسانی توسط میدان الکتریکی عمود بر صفحه سیلیسین تحت کرنش کنترل شود.

## Controllable spin and valley transport in strained silicene

Farokhnezhad, Mohsen<sup>1</sup>; Esmailzadeh, Mahdi<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

### Abstract

We propose a perfect valley-spin and valley filter in strained silicene. This is due to effective vector potential which induced by strain in silicene. In addition, we found that perfect spin-valley polarization can be created in the presence of perpendicular electric field and without exchange field. We also show that valley and valley-spin filtering depends on the direction applied tension in the presence of perpendicular electric field. Here, the spin polarization direction of electrons for valleys  $K$  and  $K'$  can easily be controlled by an electric field normal to plane of strained silicene.

PACS No: 75.76.+i

### مقدمه

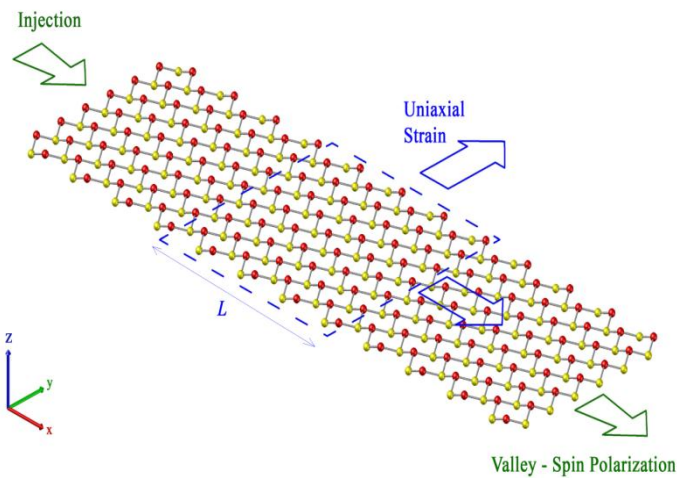
اسپینی طولانی دارند که با گرافین در دمای اتاق قابل مقایسه است [۳]. علاوه بر آن، سیلیسین سازگاری زیادی با صنعت نیم‌رسانا دارد که امروزه آن بطور زیادی به سیلیکون وابسته است. اثر کرنش یک روش مهم برای تنظیم کردن خواص الکترونیکی از طریق تغییر دادن گاف نواری در ساختارهای سیلیکونی است. سیلیسین در شرایط ایده‌آل می‌تواند به میزان ۲۰ درصد کشیده شود و آن به دلیل داشتن شکستگی در ساختارش، انعطاف‌پذیرتر از گرافین است [۴]. اثر کرنش در سیلیسین معادل وارد کردن پتانسیل برداری مؤثر با علامت‌های متفاوت برای دو دره  $K$  و  $K'$  در هامیلتونی دیراک است. در واقع در این حالت الکترون‌ها در دو دره  $K$  و  $K'$  پتانسیل‌های متفاوتی را تجربه می‌کنند.

سیلیسین، یک شبکه لانه زنبوری دو بعدی از اتم‌های سیلیکون است که در سال‌های اخیر به دلیل خواص الکترونیکی جالب مورد توجه قرار گرفته است. سیلیسین با داشتن هندسه مشابه با گرافین، دارای خواص الکترونیکی مشابه از جمله دارا بودن الکترون‌های دیراک با تحرک پذیری بالا و طیف انرژی خطی در تراز فرمی است. در این ساختار یک شکستگی به دلیل شعاع یونی زیاد سیلیکون رخ می‌دهد بطوری که اتم‌های دو زیر شبکه در دو صفحه به فاصله  $0.46 \text{ nm}$  قرار گرفته‌اند [۱]. مهمترین کاربرد این ویژگی آن است که گاف نواری و حالت‌های قطبیده اسپینی با میدان الکتریکی می‌تواند به راحتی تنظیم شود [۲]. حامل‌های بار در نانومواد سیلیکونی زمان واهلش اسپینی و طول همدوسی

حضور میدان الکتریکی، هامیلتونی مؤثر انرژی پایین نزدیک دره‌های  $K$  و  $K'$  به صورت زیر می‌تواند توصیف شود [۱].

$$H = v_F (\hbar k_x + e\tau A_x) \sigma_x - \tau v_F (\hbar k_y + e\tau A_y) \sigma_y - \tau \sigma_z \lambda_{SO} + \Delta \sigma_z e E_z \quad (1)$$

در اینجا  $\tau = +(-)$  متناظر با دره‌های  $K(K')$  می‌باشد و  $\sigma_i$  ماتریس‌های پائولی شبه اسپینی و  $\sigma = \pm 1$  اندیس‌های اسپینی هستند. در اینجا  $\lambda_{SO} = 3/9 \text{ meV}$  قدرت برهم کنش اسپین مدار ذاتی است. در اینجا  $v_F$  سرعت فرمی است.  $A_y$  و  $A_x$  پتانسیل‌های برداری مؤثر در راستاهای  $x$  و  $y$



شکل ۱: صفحه سیلیسین که به سه ناحیه نرمال/تحت کرنش/نرمال تقسیم شده است. ناحیه تحت کرنش به طول  $L$  می‌باشد که کرنش تک محوره در راستای زیگزاگ و آرمیچر به آن اعمال می‌شود.

می‌باشند که بخاطر کرنش در دو دره  $K$  و  $K'$  ایجاد می‌شوند. در اینجا این پتانسیل‌های برداری مؤثر در سیلیسین مشابه با گرافین مطابق با مراجع [۸،۵] بصورت زیر بدست می‌آیند:

$$e v_F A_x = \frac{3\beta t_0}{4(1 + \cot^2(\varphi))} (\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22}) \quad (2)$$

$$e v_F A_y = \frac{3\beta t_0}{4(1 + \cot^2(\varphi))} (2\varepsilon_{12}) \quad (3)$$

در اینجا  $t_0 = 1/6 \text{ eV}$  و  $\varphi = 10.1^\circ$  زاویه بین ثابت شبکه و محور  $Z$  در شبکه سیلیسین می‌باشد. همچنین  $\beta \approx 3$  یک پارامتر ثابت است.  $\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{12}$  مؤلفه‌های تانسور کرنش بصورت زیر می‌باشند [۸]:

$$\varepsilon_{11} = \varepsilon (\cos^2 \theta - \nu \sin^2 \theta) \quad (4)$$

بطوری که در گرافین پتانسیل برداری مؤثر وابسته به دو دره  $K$  و  $K'$  بوسیله کرنش در گرافین، می‌تواند برای فیلتر ولی (دره) بکار رود [۵]. برخلاف گرافین، اثر برهم کنش اسپین مدار ذاتی در سیلیسین موجب ترابرد وابسته به اسپین و جفت شدگی بین درجه آزادی دره و اسپین در ترابرد الکترونی می‌شود. بنابراین سیلیسین پتانسیل زیادی برای تولید جریان‌های قطبیده اسپین- دره دارد [۶]. همچنین یک فیلتر دره- اسپین با سد دوگانه مغناطیسی در سیلیسین تحت کشش با بازده ۹۰٪ طراحی شده است [۶]. فیلتر اسپین - دره پیشنهادی آنها با راستای کشش اعمال شده قابل کنترل نبود و از فرومغناطیس و کرنش بطور همزمان استفاده شده بود. اما در این مقاله بدون استفاده از فرومغناطیس و تنها با استفاده از کرنش توانستیم فیلتر کامل اسپین - دره و دره داشته باشیم که با راستای کشش اعمال شده نیز قابل کنترل است. علاوه بر آن، قطبش اسپین - دره الکترون‌ها با راستای میدان الکتریکی عمودی قایل تنظیم است. اخیراً محققان یک ابر شبکه سیلیسینی با نواحی کرنش و بدون کرنش در نظر گرفتند و اسپین - دره فیلتر کامل را در آن مشاهده کردند [۷]. در آنجا اثر پتانسیل برداری ناشی از کرنش به صورت یک پارامتر ثابت فرض شده بود و اثر کرنش بر روی پارامتر شکستگی در آن بررسی نشده بود. اما در این مقاله، ما معادلات پتانسیل برداری ناشی از کرنش را بصورت تحلیلی استخراج کردیم که وابسته به تانسور کرنش است. این منجر می‌شود که پتانسیل برداری به راستای کشش اعمال شده بستگی داشته باشد و منجر به یک فیلتر اسپین - دره قابل کنترل شود.

## تئوری و روش محاسباتی

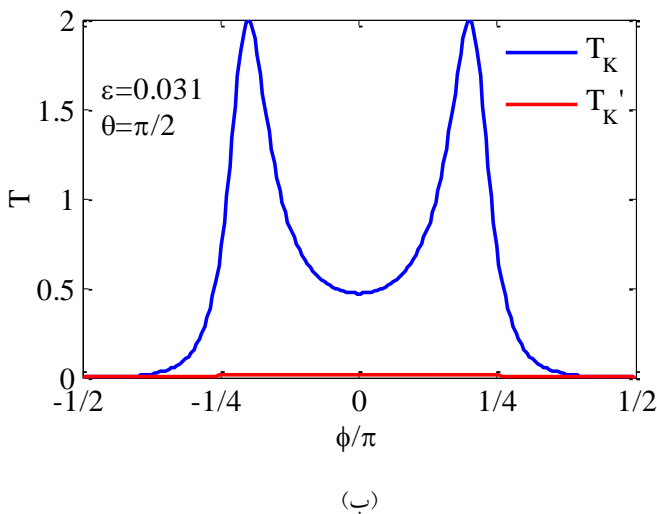
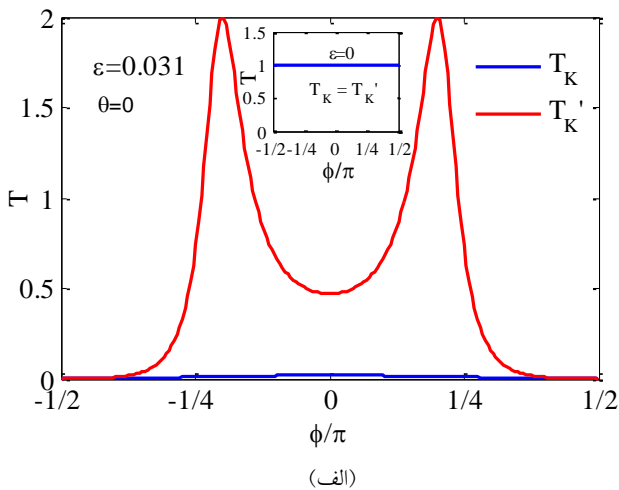
ما یک صفحه سیلیسین با یک ناحیه تحت کرنش مطابق شکل ۱ در نظر می‌گیریم. ما از برهم کنش اسپین مدار راشبا بخاطر ناچیز بودن آن در مقایسه با برهم کنش اسپین مدار ذاتی و پارامترهای دیگر صرف نظر می‌کنیم. در اینجا طول ناحیه تحت کرنش در امتداد راستای زیگزاگ  $L = 112 \text{ nm}$  و برای کرنش در امتداد راستای آرمیچر  $L = 116 \text{ nm}$  می‌باشد. برای سیلیسین تحت کرنش و در

احتمال عبور وابسته به دره از طریق رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$T_{K^0} = T_{K^0}^{\uparrow} + T_{K^0}^{\downarrow} \quad (10)$$

### نتایج و بحث

برای همه محاسبات، بر هم کنش اسپین مدار ذاتی بهنجار شده، بصورت  $\lambda_{SO}/E = 0.5$  و  $\varepsilon = 0.31$  انتخاب می‌شود. در شکل ۲ ضریب عبور بر حسب زاویه فرود الکترون رسم شده است. با توجه به شکل ۲-الف با اعمال کرنش در راستای زیگزگ (  $\theta = 0$  ) یک دره فیلتر تقریباً کامل روی داده است. بطوری که تنها الکترون‌ها با دره  $K'$  از سیستم عبور می‌کنند. در زیر شکل ۲-الف همچنین در غیاب کرنش (  $\varepsilon = 0$  )  $T_K = T_{K'}$  است. با اعمال کرنش در راستای آرمیچر  $\theta = \frac{\pi}{2}$  (شکل ۲-ب) تنها الکترون‌ها با دره  $K$  از سیستم عبور می‌کنند. بنابراین در اینجا ما یک دره فیلتر قابل تنظیم با تغییر راستای کرنش داریم.



شکل ۲: الف) ضریب عبور الکترون‌ها بر حسب زاویه فرودی الکترون برای کرنش در راستای زیگزگ (ب) در راستای آرمیچر

$$\varepsilon_{22} = \varepsilon (\sin^2 \theta - \nu \cos^2 \theta) \quad (5)$$

$$\varepsilon_{12} = \varepsilon (1 + \nu) \sin \theta \cos \theta \quad (6)$$

در اینجا  $\theta$  زاویه بین راستای کرنش و خط موازی راستای زیگزگ است. بطوری که برای کرنش در امتداد راستای زیگزگ  $\theta = 0$  و برای کرنش در امتداد راستای آرمیچر  $\theta = \frac{\pi}{2}$  می‌باشد. همچنین  $\nu = 0.31$  ضریب پواسون در سیلیسین و  $\varepsilon$  قدرت کرنش است. ترم آخر در معادله (۱) اختلاف پتانسیل دو زیر شبکه  $A$  و  $B$  در سیلیسین تحت کرنش می‌باشد. در اینجا  $E_z$  میدان الکتریکی عمودی و  $e$  بار الکترون است.  $\Delta$  پارامتر شکستگی در حضور کرنش است که با استفاده از مرجع [۸] بصورت زیر استخراج می‌شود.

$$\Delta = (1 - \nu \varepsilon) \Delta_0 \quad (7)$$

در اینجا  $\Delta_0 = 0.46 \text{ nm}$  پارامتر شکستگی در غیاب کرنش می‌باشد. با بکاربردن هامیلتونی معادله (۱) ما می‌توانیم ویژه مقادیر انرژی را به صورت زیر محاسبه کنیم.

$$E = \pm \sqrt{(\hbar v_F k)^2 + (\tau \sigma \lambda_{SO})^2} = \pm \sqrt{(\hbar v_x k_x' + e \tau v_F A_x)^2 + (\hbar v_y k_y + e \tau v_F A_y)^2 + \Delta_s^2} \quad (8)$$

توابع موج برای دره  $\tau$  و اسپین  $\sigma$  در نواحی نرمال و تحت کرنش می‌تواند بصورت زیر توصیف شود.

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= \frac{1}{\sqrt{2E(E + \tau \sigma \lambda_{SO})}} e^{ik_x x} \begin{pmatrix} \hbar v_F k_+ \\ E + \tau \sigma \lambda_{SO} \end{pmatrix} \\ &+ \frac{r}{\sqrt{2E(E + \tau \sigma \lambda_{SO})}} e^{-ik_x x} \begin{pmatrix} \hbar v_F k_- \\ E + \tau \sigma \lambda_{SO} \end{pmatrix} \quad x < 0, \\ \psi_{II}(x) &= a_S e^{ik_x x} \begin{pmatrix} E_+ \\ E_S \end{pmatrix} + b_S e^{-ik_x x} \begin{pmatrix} E_- \\ E_S \end{pmatrix} \quad 0 < x < L, \\ \psi_{III}(x) &= \frac{t}{\sqrt{2E(E + \tau \sigma \lambda_{SO})}} e^{ik_x x} \begin{pmatrix} \hbar v_F k_+ \\ E + \tau \sigma \lambda_{SO} \end{pmatrix} \quad x > L, \end{aligned} \quad (9)$$

در اینجا:

$$\begin{aligned} \hbar v_F k_x' &= \sqrt{E^2 - \Delta_s^2 - (\hbar v_F k_y + e \tau v_F A_y)^2} - e \tau v_F A_x \\ \Delta_s &= \tau \sigma \lambda_{SO} - \Delta_0 (1 - \varepsilon \nu) e E_z \\ k_{\pm} &= k_x \pm i \tau k_y \\ E_{\pm} &= \hbar v_x k_x' \pm i \tau (\hbar v_F k_y + e \tau v_F A_y) \\ E_s &= E + \Delta_s \end{aligned}$$

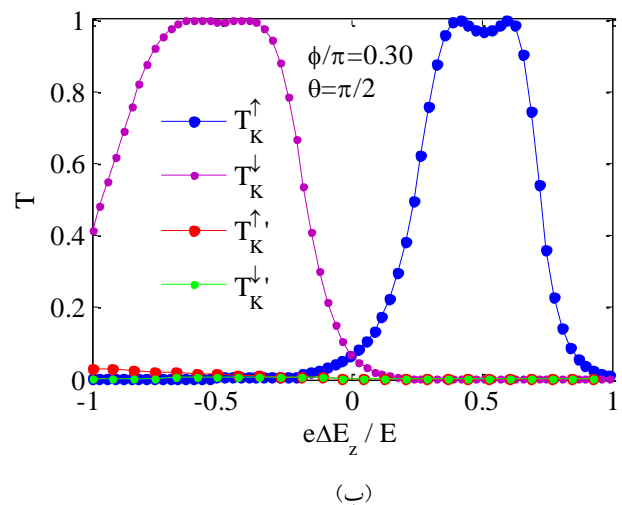
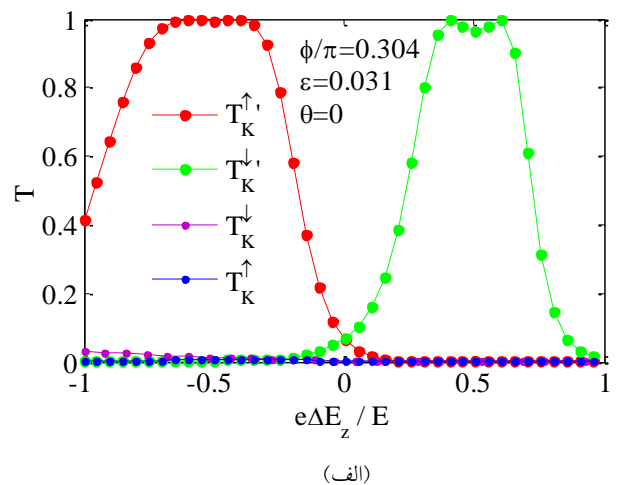
### نتیجه گیری

ما نشان دادیم که جدایشی دره در سیلیسین می تواند در مقادیر خاص زاویه فرودی در حضور کرنش اتفاق بیفتد بطوریکه سیلیسین می تواند به عنوان یک فیلتر کامل دره، عمل کند. در اینجا راستای دره فیلتر با راستای کرنش اعمال شده در سیلیسین قابل تنظیم است. همچنین سیلیسین تحت کرنش در حضور میدان الکتریکی می تواند به عنوان یک ابزار تولید کننده جریان قطبیده کامل اسپین - دره عمل کند که راستای قطبش اسپینی با راستای میدان الکتریکی عمودی قابل کنترل است.

### مراجع

- [1] C.-C. Liu, H. Jiang, and Y. Yao, "Low-energy effective Hamiltonian involving spin-orbit coupling in silicene and two-dimensional germanium and tin," *Physical Review B*, vol. 84, p. 195430, 2011.
- [2] N. Drummond, V. Zolyomi, and V. Fal'ko, "Electrically tunable band gap in silicene," *Physical Review B*, vol. 85, p. 075423, 2012.
- [3] C. Xu, G. Luo, Q. Liu, J. Zheng, Z. Zhang, S. Nagase, *et al.*, "Giant magnetoresistance in silicene nanoribbons," *Nanoscale*, vol. 4, pp. 3111-3117, 2012.
- [4] R. Qin, C.-H. Wang, W. Zhu, and Y. Zhang, "First-principles calculations of mechanical and electronic properties of silicene under strain," *Aip Advances*, vol. 2, p. 022159, 2012.
- [5] M. R. Masir, D. Moldovan, and F. Peeters, "Pseudo magnetic field in strained graphene: revisited," *Solid State Communications*, vol. 175, pp. 76-82, 2013.
- [6] C. Yesilyurt, S. G. Tan, G. Liang, and M. B. Jalil, "Efficient dual spin-valley filter in strained silicene," *Applied Physics Express*, vol. 8, p. 105201, 2015.
- [7] W. Sa-Ke and W. Jun, "Spin and valley filter in strain engineered silicene," *Chinese Physics B*, vol. 24, p. 037202, 2015.
- [8] V. M. Pereira, A. C. Neto, and N. Peres, "Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene," *Physical Review B*, vol. 80, p. 045401, 2009.

در شکل ۳ ما ضریب عبور الکترون را برحسب میدان الکتریکی بهنجار شده در یک زاویه ثابت الکترون  $\phi = 0.304 \pi$  رسم کردیم. همانطور که در شکل ۳-الف مشاهده می شود، در حضور میدان الکتریکی یک فیلتر کامل اسپین - دره داریم بطوریکه تنها الکترون ها با دره  $K'$  و با اسپین (بالا یا پایین) از سیستم عبور می کنند که این بخاطر از بین رفتن تقارن وارونی فضایی سیستم است. علاوه بر این، با تغییر راستای میدان الکتریکی در امتداد محور  $z$  از  $\theta_z +$  به  $\theta_z -$  راستای اسپین الکترون های عبوری از پایین به بالا قابل تنظیم است. همچنین این اتفاق برای دره  $K$  برای کرنش در امتداد آرمیچر  $\theta = \frac{\pi}{2}$  در شکل ۳-ب روی می دهد. بنابراین با توجه به شکل های بالا فیلتر دره و فیلتر دره - اسپین به کمک کرنش و میدان الکتریکی عمودی قابل کنترل است. این ابزار می تواند کاربردهای زیادی در اسپیترونیک و ولیترونیک داشته باشد.



شکل ۳: ضریب عبور اسپین - دره در یک زاویه فرود ثابت برحسب میدان الکتریکی عمودی برای کرنش (الف) در راستای زیگزاگ (ب) در راستای آرمیچر