

نانونوارهای زیگزاگی سیلیسن در حضور میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی خارجی

مظهری موسوی^۱، فاطمه^۱؛ فرقدان، روح اله^۱

دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان، کیلومتر ۶ بلوار قطب راوندی، کاشان

چکیده

در این پژوهش به بررسی خواص الکترونی نانونوارهای زیگزاگی سیلیسن در حضور میدان‌های الکتریکی عمود و مغناطیسی تبادلی پرداخته‌ایم. این شبیه‌سازی با توجه به مدل تنگ‌بست تک نواری در حضور برهمکنش اسپین مدار ذاتی (با قدرت λ) انجام شده است. نتایج نشان می‌دهند که میدان الکتریکی یک گاف انرژی ایجاد می‌کند و میدان مغناطیسی، تقارن وارونی وابسته به اسپین را می‌شکند. همچنین با تغییر اندازه‌های میدان الکتریکی (E_z) و مغناطیسی (قدرت میدان مغناطیسی M_z) در حد $e|E_z| \geq M_z > \lambda$ (l ثابت خمیدگی) یک نیمه‌رسانای مغناطیسی دو قطبی در نانونوارهای زیگزاگی سیلیسن در حضور برهمکنش اسپین مدار ذاتی خواهیم داشت. با توجه به نتایج به دست آمده، گاف‌های انرژی وابسته به اسپین مربوط به نیمه‌رسانای مغناطیسی دو قطبی با تغییر میدان‌های خارجی به شدت تغییر می‌کنند.

Zigzag silicene nanoribbons in the presence of external magnetic and electric fields

Mazhari Mousavi, Fatemeh¹; Farghadan, Rouhollah¹

¹ Department of Physics, University of kashan, kashan

Abstract

In this research we studied the electronic properties of the zigzag silicene nanoribbons (ZSiNR) in the presence of the electric and magnetic fields. This simulation has been done using the singleband tight-binding approximation in the presence of the intrinsic spin-orbit interaction (whit strength λ). Our results show that the electric field induces a energy gap while the magnetic field breaks the spin-inverse symmetry. Also, by variation of electric (E_z) and exchange magnetic (Magnetic field strength M_z) field strengths about $e|E_z| \geq M_z > \lambda$ (l is the buckling parameter) in the presence of the intrinsic spin-orbit interaction in the ZSiNR, we find a bipolar magnetic semiconductor. The results show that the variation of electric and exchange magnetic field strengths could change the value of spin-flip gap in the bipolar magnetic semiconductor.

PACS No. 70

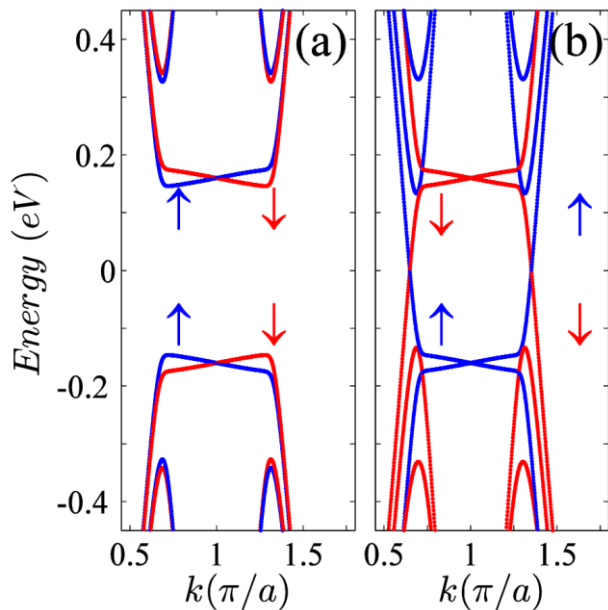
کرد [۲،۳]. نانونوارهای سیلیسن در ساخت ترانزیستورهای اثر

میدانی و دستگاه‌های اسپین فیلتر بازده بالا [۶] و ایجاد مقاومت مغناطیسی بزرگ [۷] مورد استفاده قرار می‌گیرند.

در این پژوهش به بررسی خواص الکترونی نانونوارهای زیگزاگی سیلیسن در حضور میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی خارجی پرداخته‌ایم که می‌تواند جهت کاربرد نانونوارهای زیگزاگی به عنوان فیلتر اسپینی ضروری باشد. این شبیه‌سازی با توجه به مدل تنگ‌بست تک نواری در حضور برهمکنش اسپین مدار ذاتی انجام شده است. نتایج نشان می‌دهند که میدان الکتریکی یک گاف انرژی در حدود $2e|E_z|$ ایجاد می‌کند. همچنین با تغییر اندازه‌های میدان الکتریکی و مغناطیسی در حد $e|E_z| \geq M_z > \lambda$ یک نیمه‌رسانای مغناطیسی دو قطبی^۱ در نانونوارهای زیگزاگی سیلیسن در حضور برهمکنش اسپین مدار ذاتی خواهیم داشت.

مقدمه

امروزه بررسی ساختارهایی که بر پایه سیلیسیم هستند به منظور استفاده در قطعات الکترونیکی مورد توجه می‌باشند و مطالعات بسیاری روی ویژگی‌های این ساختارها صورت گرفته است. سازگاری کامل سیلیسن با قطعات الکترونیکی امروزی، این ماده را برای کاربردهای تکنولوژیکی و اسپینترونیکی مورد توجه قرار داده است [۱]. سیلیسن، یک تک لایه از اتم‌های سیلیسیم با ساختار لانه زنبوری غیر مسطح است [۲]. ساختار غیرمسطح سیلیسن، باعث بزرگتر شدن جفت شدگی اسپین مدار ذاتی آن نسبت به گرافن شده است [۳، ۴]. برهمکنش اسپین مدار ذاتی که اولین بار توسط کین و میل در گرافن مورد بررسی قرار گرفت [۵]، در سیلیسن نیز همچون گرافن موجب ایجاد یک گاف انرژی، می‌شود. اثرات میدان‌های الکتریکی عمود بر صفحه در سیلیسن با توجه به ساختار غیرمسطح آن قوی‌تر از گرافن می‌باشد و می‌توان اندازه گاف انرژی را با اعمال میدان‌های الکتریکی عمود، کنترل

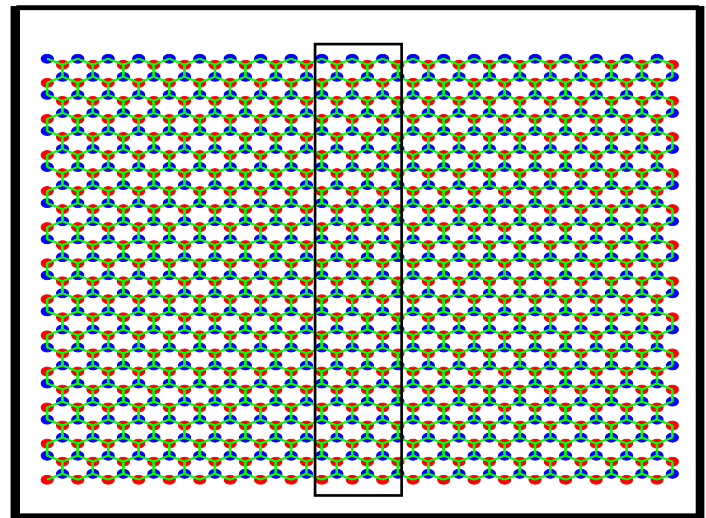


شکل (۱) ساختار نواری نانونوار سیلیسن لبه زیگزاگ برای $M_z = 0$ (a) و $M_z = 0.10t$ (b) $elE_z = 0$ و $elE_z = 0.10t$. شدت برهمکنش اسپین مدار ذاتی نیز برابر $\lambda = 0.01t$ است. \uparrow و \downarrow به ترتیب متناظر با اسپین بالا و پایین است.

مغناطیسی تبادلی در حضور برهمکنش اسپین مدار ذاتی، جهت بررسی خواص الکترونی فیلتر نانونوارهای سیلیسن پرداخته‌ایم. شکل (۱) طرحی از نانونوار سیلیسن با لبه زیگزاگ که در آن سلول واحد توسط مستطیل مشکی مشخص شده را می‌بینیم که دارای سه زنجیره زیگزاگ و ۱۴۴ اتم سیلیسیم در ابرسلول است. در این بررسی‌ها همه محاسبات روی ابرسلول نمایش داده شده صورت پذیرفته است.

در شکل (۲a) اثر میدان‌های الکتریکی بر ساختار نواری نانونوار سیلیسن مورد بررسی قرار گرفت. نوارها دارای تقارن وارونی وابسته به اسپین نسبت به محور $k = \frac{\pi}{2}$ می‌باشند. میدان الکتریکی تبهگنی بین اسپین بالا و پایین را از بین می‌برد و یک گاف انرژی در حدود $2elE_z$ ایجاد می‌کند.

شکل (۲b) اثر میدان مغناطیسی بر روی ساختار نواری نانونوار سیلیسن را نشان می‌دهد، میدان مغناطیسی تبادلی یکنواخت در راستای Z تقارن وارونی اسپین بالا و پایین را نسبت به مرز منطقه وارون می‌شکند. در نتیجه، میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی تبادلی یکنواخت، به طور جداگانه نمی‌توانند چگالی اسپینی غیر صفر، تولید کنند. به منظور بهینه‌سازی چگالی حالت‌های اسپینی در نانونوارهای سیلیسن، اثرات میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی تبادلی را به طور همزمان در نظر می‌گیریم.



شکل (۱). طرحی از نانونوار سیلیسن با لبه زیگزاگ، ابرسلول مورد بررسی توسط مستطیل مشخص شده است، دایره‌های قرمز و آبی نشان دهنده زیرشبکه‌های مختلف در سیلیسن هستند.

روش محاسبات

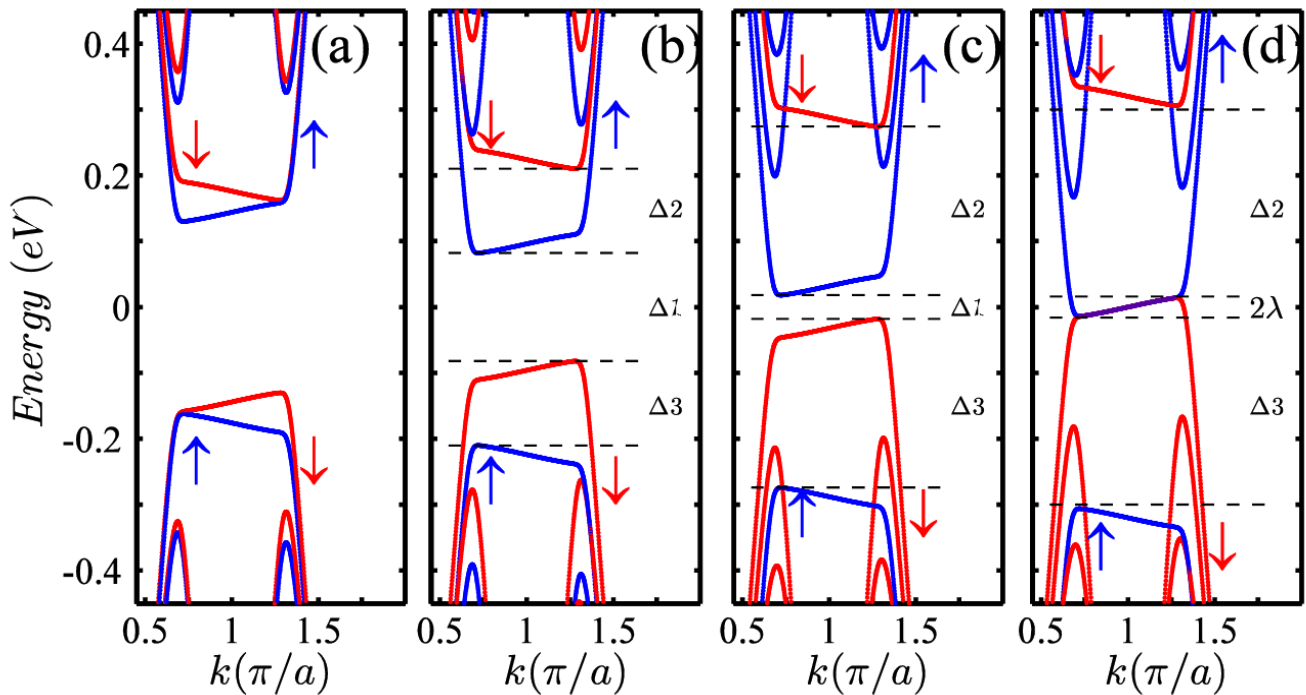
هامیلتونی تنگ‌بست برای نانونوار زیگزاگی سیلیسن در حضور برهم کنش اسپین مدار ذاتی و میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی را می‌توان به صورت زیر نوشت [۸،۲]:

$$\hat{H}_\sigma = -t \sum_{\langle i,j \rangle \alpha} C_{i\alpha}^\dagger C_{j\alpha} + i \frac{\lambda}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle \alpha\beta} v_{ij} C_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z C_{j\beta} + M_z \sum_{i\alpha} C_{i\alpha}^\dagger \sigma_z C_{i\alpha} + elE_z \sum_{i\alpha} \mu_i C_{i\alpha}^\dagger C_{i\alpha} + h.c. \quad (1)$$

در این رابطه $C_{i\alpha}$ و $C_{i\alpha}^\dagger$ عملگرهای خلق و نابودی ذره با اسپین α در مکان i هستند و t پارامتر تنگ‌بست می‌باشد که برابر با $t = 1.6eV$ است، $\langle i, j \rangle$ و $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ به ترتیب بر جمع روی همسایه اول و دوم اشاره می‌کنند. ترم دوم، بیانگر جفت شدگی اسپین مدار ذاتی با ضریب $\lambda = 3.9meV$ است. همچنین در رابطه فوق، σ ماتریس‌های پائولی می‌باشد. در اینجا v_{ij} دو مقدار $+1$ یا -1 می‌گیرد، که با توجه به راستای محور z ، اگر جهت جهش به همسایه دوم، به ترتیب ساعتگرد یا پادساعتگرد باشد. M_z شدت میدان مغناطیسی تبادلی می‌باشد. ترم چهارم پتانسیل شبکه متناوب بر اثر ساختار غیرمسطح سیلیسن است که در آن E_z معرف میدان الکتریکی خارجی عمود بر سطح سیلیسن و $l = 0.23A^\circ$ پارامتر خمیدگی است و با توجه به اینکه زیرشبکه‌های A و B غیر هم‌سطح هستند μ_i مقادیر $+1$ و -1 را می‌گیرد.

بحث و نتایج

در این پژوهش ما به مطالعه اثر میدان‌های الکتریکی و



شکل (۳). ساختار نواری نانونوار سیلیسن لبه زیگزاگ در حضور میدان الکتریکی عمودی که $elE_z = 0.10t$ برای $M_z = 0.01t$ (a) $M_z = 0.10t$ (b) $M_z = 0.08t$ (c) $M_z = 0.04t$ (d) به ترتیب متناظر با اسپین بالا و پایین است.

تبادلی بسیار بزرگتر از برهمکنش اسپین مدار ذاتی و مقدار elE_z نیز بیشتر از شدت میدان مغناطیسی تبادلی باشد. همچنین می‌بینیم که قدرت نیمه‌رسانای مغناطیسی دوقطبی در عرض نوار بیشتر است که نشان دهنده امکان استفاده از نانونوارهای زیگزاکی سیلیسن در دستگاه‌های وابسته به اسپین است. دوقطبی‌های مغناطیسی را می‌توان با سه پارامتر انرژی Δ_1 و Δ_2 و Δ_3 تعریف کرد. Δ_1 معرف گاف انرژی مربوط به دو نوع اسپین متفاوت بین بالاترین نقطه نوار ظرفیت و پایین‌ترین نقطه نوار رسانش^۲ می‌باشد. $\Delta_1 + \Delta_2$ و $\Delta_1 + \Delta_3$ معرف گاف انرژی مربوط به یک نوع حالت اسپینی بین نوارهای اسپین بالا و اسپین پایین^۳، که گاف انرژی حالت اسپینی پایا نامیده می‌شود که در آن جهت اسپین عوض نمی‌شود، همانطور که در شکل (۳b) می‌بینیم. همچنین با توجه به تقارن وارونی (وابسته به اسپین) نسبت به محور انرژی، مقادیر Δ_2 و Δ_3 با یکدیگر برابر هستند، بنابراین نانونوار زیگزاکی سیلیسن دارای دو گاف پایای اسپینی برابر می‌باشد.

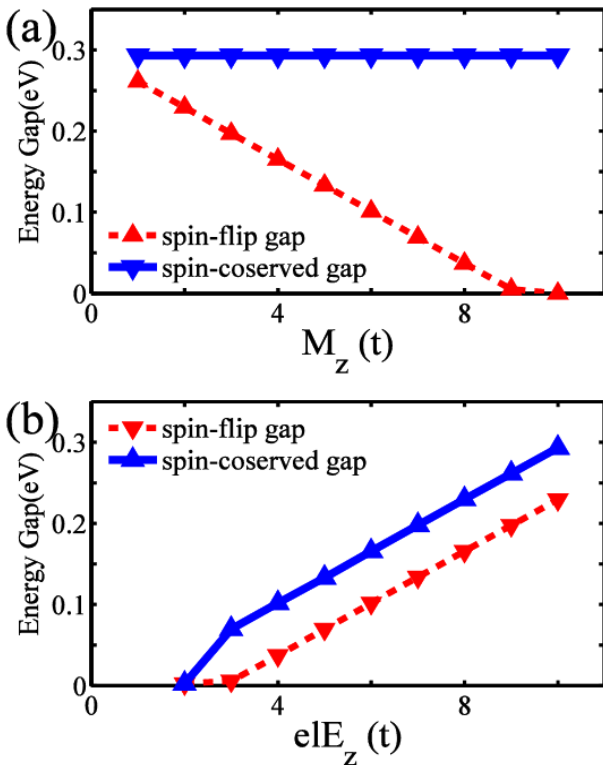
از شکل (۳) نتیجه می‌گیریم که با افزایش شدت میدان مغناطیسی تبادلی، انرژی گاف مربوط به جهش اسپینی حین انتقال از نوار رسانش به ظرفیت، کاهش می‌یابد و هنگامی که شدت

در شکل (۳) ساختار نواری نانونوار سیلیسن زیگزاگ، در یک میدان الکتریکی ثابت و میدان مغناطیسی تبادلی با چهار مقدار مختلف را محاسبه کرده‌ایم. با اعمال همزمان میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی تبادلی، تبهگنی بین حالت‌های اسپینی با چگالی بالا و پایین شکسته می‌شود.

در شکل (۳a) شدت میدان مغناطیسی با برهمکنش اسپین مدار ذاتی برابر است ($M_z = \lambda$) ولی نسبت به شدت میدان الکتریکی، ضعیف می‌باشد. نتایج حاصل بیان می‌کند که در حضور میدان الکتریکی خارجی و برهمکنش اسپین مدار ذاتی، حتی یک میدان مغناطیسی تبادلی ضعیف نیز، می‌تواند تقارن وارونی وابسته به اسپین را برای ساختار نواری بشکند. در سه قسمت دیگر شکل (۳) شدت میدان مغناطیسی تبادلی را افزایش داده‌ایم. در شکل (۳b) دو نوار با اسپین بالا و پایین به طور کامل از یکدیگر جدا می‌شوند. ساختار نواری نشان می‌دهد که نانونوارهای زیگزاکی در حضور میدان الکتریکی و مغناطیسی تبادلی به عنوان یک نیمه‌رسانای مغناطیسی دوقطبی عمل می‌کنند، که در آن جهت‌گیری اسپین در بالاترین نقطه نوار ظرفیت و پایین‌ترین نقطه نوار رسانش در حول انرژی فرمی عوض می‌شود. بطور کلی می‌توان گفت در نانونوار زیگزاکی سیلیسن، ویژگی نیمه‌رسانای مغناطیسی دوقطبی زمانی وجود دارد که شدت میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی

2 - spin-plit gap

3 - spin-converved gap



شکل (۴). تغییر گاف انرژی در نانونوار زیگزگی سیلیسن در حضور برهمکنش اسپین مدار ذاتی با $\lambda = 0.01t$ (a) گاف انرژی نانونوار زیگزگی سیلیسن به عنوان تابعی از شدت میدان مغناطیسی تبادلی در حضور میدان الکتریکی با $eE_z = 0.10t$ (b) گاف انرژی نانونوار زیگزگی سیلیسن به عنوان تابعی از شدت میدان الکتریکی در حضور میدان مغناطیسی تبادلی با $M_z = 0.02t$.

مغناطیسی داریم که در آن گاف‌های انرژی قابل کنترل هستند. علاوه بر این، دستگاه اسپین فیلتر دوقطبی پیشنهادی ما بر اساس نانونوارهای زیگزگی سیلیسن را می‌توان به عنوان دستگاه‌های اسپینی چند منظوره به کار گرفت.

مراجع

- [1] R.Jansen, "Silicon spintronics." Nature Materials **11.5** No (2012): 400-408.
- [2] M.Ezawa, "Valley-polarized metals and quantum anomalous Hall effect in silicene." Physical review letters **109.5** No (2012): 055502.
- [3] M.Farokhnezhad, et al; "Controllable spin polarization and spin filtering in a zigzag silicene nanoribbon." Journal of Applied Physics **117.17**No (2015): 173913.
- [4] C.Liu, F.Wanxiang and Y.Yugui; "Quantum spin Hall effect in silicene and two-dimensional germanium." Physical review letters **107.7** No (2011): 076802.
- [5] C.L.Kane, E.J. Mele. "Z 2 topological order and the quantum spin Hall effect." Physical review letters **95.14** No(2005): 146802.
- [6] A-B.Chen; et al. "Spin-dependent ballistic transport properties and electronic structures of pristine and edge-doped zigzag silicene nanoribbons: large magnetoresistance." Physical Chemistry Chemical Physics **16.11**No (2014): 5113-5118.
- [7] C.Xu, et al; "Giant magnetoresistance in silicene nanoribbons." Nanoscale **4.10**No (2012): 3111-3117.
- [8] X. T.An, et al.; "Spin-polarized current induced by a local exchange field in a silicene nanoribbon." New Journal of Physics **14.8**No (2012): 083039.

میدان‌های مغناطیسی و الکتریکی باهم برابر باشند، نانونوارهای زیگزگی سیلیسن، در انرژی فرمی $\epsilon_f = 0$ رفتار فلزی از خود نشان می‌دهند و انرژی گاف مربوط به جهش اسپینی حذف می‌شود، زیرا در بازه انرژی $|E(k)| < \lambda$ ، نوارهای اسپین بالا و پایین، تبهگن هستند. اما گاف پایای انرژی همچنان ادامه دارد و نانونوارهای زیگزگی، در مجاورت انرژی فرمی، رفتار اسپین قطبی دو قطبی^۴ در بازه انرژی $\lambda < |E(k)| < eE_z - \lambda$ را دارا هستند، شبیه نیمه‌رسانای مغناطیسی دوقطبی فاقد گاف، که در شکل (۳d) می‌بینیم.

شکل (۴a) تغییر گاف انرژی به عنوان تابعی از میدان مغناطیسی تبادلی برای میدان الکتریکی ثابت را نشان می‌دهد. با افزایش شدت میدان مغناطیسی تنها مقدار گاف انرژی مربوط به جهش اسپینی، کاهش می‌یابد و گاف پایای اسپینی، ثابت می‌ماند.

شکل (۴b) تغییر گاف انرژی به عنوان تابعی از میدان الکتریکی برای میدان مغناطیسی تبادلی ثابت را نشان می‌دهد. با افزایش شدت میدان الکتریکی، گاف انرژی مربوط به جهش اسپینی (Δ_1) و گاف پایای اسپینی $(\Delta_1 + \Delta_2)$ ، هر دو افزایش می‌یابند. بنابراین، نانونوار زیگزگی سیلیسن دارای ویژگی نیمه‌رسانای مغناطیسی دو قطبی با کنترل، گاف انرژی مربوط به جهش اسپینی و گاف پایای انرژی، می‌باشد. ویژگی‌های نیمه‌رسانای مغناطیسی دو قطبی، زمانی وجود دارد که شدت میدان الکتریکی و مغناطیسی تبادلی در مقایسه با برهمکنش اسپین مدار ذاتی، هر دو بزرگ باشند و مقدار $2eE_z$ نیز کمی بیشتر از شدت میدان مغناطیسی تبادلی در حد $eE_z \geq M_z > \lambda$ باشد.

نتیجه گیری

با تنظیم میدان الکتریکی و مغناطیسی تبادلی، یک نیمه‌رسانای مغناطیسی دو قطبی در نانونوارهای زیگزگی سیلیسن در حضور برهمکنش اسپین مدار ذاتی، خواهیم داشت. با استفاده از میدان الکتریکی می‌توان اندازه گاف انرژی را کنترل و با میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی می‌توان اندازه گاف انرژی مربوط به جهش اسپینی و گاف پایای اسپینی را بهینه کرد، در نهایت یک دوقطبی