

## برهمکنش RKKY در نانونوار آرمچیر برن- نیتريد

رضانیا ، حامد<sup>۱</sup>؛ صادقی خمارتاجی ، الهام

<sup>۱</sup>دانشکده فیزیک دانشگاه رازی ، باغ ابریشم ، کرمانشاه

### چکیده

در این مقاله شدت اندرکنش دو ناخالصی اسپینی جایگزیده درون شبکه نانونوار آرمچیر برن- نیتريد در حضور نظم مغناطیسی بلند برد با فاصله بین آنها بررسی شده است. برای این منظور پذیرفتاری مغناطیسی گاز الکترونی موجود در شبکه نانونوار آرمچیر برن- نیتريد را در راستای  $z$  مورد بررسی قرار داده‌ایم. از نظریه پاسخ خطی و بر اساس نظریه RKKY شدت برهمکنش تبدلی دو اسپین جایگزیده را از طریق تابع همبستگی عملگرهای اسپینی در راستای  $z$  گاز الکترونی شبکه نانونوار آرمچیر برن- نیتريد بدست آورده‌ایم.

## RKKY Interaction in armchair Boron- Nitride Nanoribbon

Rezania, Hamed<sup>1</sup>; Sadeghi khomartaji, Elham

<sup>1</sup> Department of Physics, University of Razi, Kermanshah,

### Abstract

*In this paper, the intensity of the interaction between localized spin impurities within the lattice long-range magnetic order armchair Boron – Nitride nanoribbon in the presence of the distance between them is investigated. For this purpose, magnetic susceptibility of electron gas along  $z$  direction in Boron Nitride nanoribbon lattice has been studied. Using linear response theory and the RKKY theory, the exchange interaction between localized spins has been obtained via the  $z$ - component spin correlation function of electron gas on armchair Boron – Nitride nanoribbon structure.*

PACS No.

### مقدمه

اثرات تجربی و نظری جالب در ساختارهای با ابعاد کم (نانومتری) در زمینه مغناطیسی انگیزه‌های فراوانی را برای طراحی ادوات الکترونی در بین محققان به وجود آورده است. کشف ادوات با خواص وابسته به اسپین شاخه جدیدی در فیزیک به نام اسپین‌ترونیک برای تحقیق و کاربرد باز کرده که در این شاخه هدف یافتن راه‌های برای کنترل اسپین الکترون است [۱]. در این پژوهش ما به بررسی شدت اندرکنش دو ناخالصی اسپینی جایگزیده در شبکه نانونوار آرمچیر برن- نیتريد و تاثیر دما و گاف انرژی محیط میزبان روی این برهمکنش پرداخته‌ایم. برن نیتريد ترکیبی شیمیایی با فرمول تجربی BN است که از تعداد یکسانی از

اتم های بورون و نیتروژن تشکیل شده است. اگر یک صفحه تک لایه‌ی نیتريد بور را در راستای پهنا باریک و باریک تر کنیم تا به شکل روبان درآید به نانو ساختار حاصله نانونوار نیتريد بور میگویند. نانونوارهای نیتريد بور ساختاری کاملا مشابه با نانونوارهای گرافنی دارند در حالی که دارای ویژگی‌های الکترونی کاملا متفاوت نسبت به نانونوارهای گرافنی میباشند [۲]. نانونوارهای نیتريد بور براساس نوع لبه نوار به دو دسته زیگزاگ و آرمچیر تقسیم میشوند که ما در اینجا نانونوار آرمچیر را انتخاب کرده‌ایم. برهمکنش تبدلی غیرمستقیم بین دو ناخالصی برای گرافن بررسی شده و نشان داده شده است که وابستگی این برهمکنش به

$$H = \sum_{n,k} \varepsilon_{nk} C_{nk}^\dagger C_{nk} \quad (1)$$

سپس با استفاده از تئوری تابع گرین، توابع گرین نانونوار آرمچیر برن نیتريد در نمايش ماتسوبارا محاسبه شده که در ادامه مولفه‌های پذیرفتاری بر اساس این توابع بدست آمده است. طبق قاعده کوبو مولفه‌های پذیرفتاری مغناطیسی بصورت زیر بیان میشوند [۱۰].

$$\chi_{s_z s_z}(q, i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau s_z(q, \tau) s_z(-q, 0) \rangle \quad (2)$$

$$\chi_{s_+ s_-}(q, i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau s_+(q, \tau) s_-(-q, 0) \rangle \quad (3)$$

در روابط فوق  $q$  یک نقطه از ناحیه اول بریلون است.  $T_\tau, \beta = \frac{1}{k_B T}$  عملگر مرتب کننده زمانی  $\omega_n$  فرکانس ماتسوبارا و  $\langle s(q, \tau) s(-q, 0) \rangle$  تابع همبستگی گشتاورهای مغناطیسی وابسته به اسپین است که بصورت زیر تعریف میشوند [۱۰].

$$s_z = \sum_{kx} \sum_{\alpha=N, B} \sum_{i=1}^n (C_{kx+q, \uparrow, ai}^\dagger C_{kx, \uparrow, ai} - C_{kx+q, \downarrow, ai}^\dagger C_{kx, \downarrow, ai})$$

$$s_+ = \sum_{kx} \sum_{\alpha=N, B} \sum_{i=1}^n C_{kx+q, \uparrow, ai}^\dagger C_{kx, \downarrow, ai} \quad (4)$$

$$s_- = \sum_{kx} \sum_{\alpha=N, B} \sum_{i=1}^n C_{kx+q, \downarrow, ai}^\dagger C_{kx, \uparrow, ai}$$

در نتیجه با جایگذاری رابطه ۴ در روابط ۱ و ۲ مولفه‌های پذیرفتاری بر اساس توابع گرین نانونوار بصورت زیر بدست می‌آیند [۱۰].

$$\chi_{s_z s_z}(q, i\omega) = \mu_0^2 \sum_{kx, i, j, \sigma} \frac{\sigma^2}{\beta} \sum_{m'} \{ G_\sigma^{ai\alpha j}(k_x, i\omega + i\omega_{m'}) G_\sigma^{\alpha j ai}(k_x + q, i\omega) \} \quad (5)$$

$$\chi_{s_+ s_-}(q, i\omega) = \frac{\mu_0^2}{2} \sum_{k_x, i, j} \frac{1}{\beta} \sum_{m'} \left\{ G_\uparrow^{ai\alpha j}(k_x, i\omega + i\omega_{m'}) G_\downarrow^{\alpha j ai}(k_x + q, i\omega) + G_\downarrow^{ai\alpha j}(k_x, i\omega + i\omega_{m'}) G_\uparrow^{\alpha j ai}(k_x + q, i\omega) \right\} \quad (6)$$

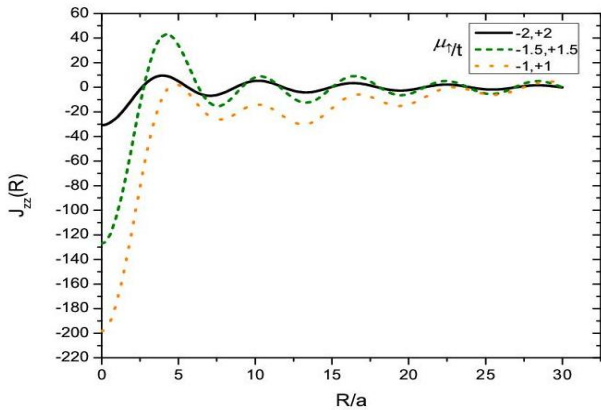
در رابطه فوق  $\mu_0$  مگنتون بوهر و  $G^{ai\alpha j}$  توابع گرین نانونوار میباشند.  $\sigma = \pm 1$  بیانگر اسپین بالا و پایین است اکنون که پذیرفتاری نانونوار آرمچیر برن- نیتريد را بدست آوردیم به محاسبه برهمکنش تبادلی بین دو ناخالصی مغناطیسی جایگزیده میپردازیم. برهمکنش تبادلی صرفا یک اثر کوانتومی بوده و منشاء آن برهمکنش کولنی و برهمکنش بین اسپینهای ناشی از اصل طرد

فاصله بین دو ناخالصی متناسب با  $\frac{1}{r}$  که  $r$  فاصله بین دو ناخالصی است و اگر ناخالصی‌های در زیر شبکه یکسان (متفاوت) باشند برهمکنش فرومغناطیس (پادفرومغناطیس) میباشد [۳، ۴، ۵] در بررسی انجام شده بدست آمده که برهمکنش تبادلی بین دو ناخالصی در شبکه نانونوار گرافن در دمای صفر بطور نمایی افت میکند و برای عرض‌های باریک این افت سریع تر است همچنین اثر پتانسیل شیمیایی روی رفتار فضایی برهمکنش تبادلی بررسی شده است [۶].

### تئوری مسئله

هنگامی که دو ناخالصی مغناطیسی جایگزیده در شبکه نانونوار آرمچیر برن نیتريد قرار میگیرند، الکترونهاي رسانش با اسپین ناخالصی جایگزیده جفت میشوند سپس این سامانه گازی میتواند با اسپین ناخالصی دوم نیز جفت شود، برهمکنش اسپین ناخالصی با الکترونهاي رسانش نوسانات چگالی اسپین را در گاز الکترونی القا کرده و از این طریق بر اسپین دیگر تاثیر میگذارد در نتیجه یک برهمکنش تبادلی غیرمستقیم بین زوج ناخالصی‌های مغناطیسی روی میدهد. مقدار این برهمکنش موثر که به برهمکنش RKKY<sup>۱</sup> معروف است با فاصله بین ناخالصی‌های اسپینی جایگزیده نوسان میکند و با توجه به این فاصله میتواند یک برهمکنش فرومغناطیس یا پادفرومغناطیس باشد [۷، ۸]. در گرافن دوپ شده با منگنز نشان داده شده که برهمکنش RKKY برحسب فاصله یون‌های مغناطیسی میتواند فرومغناطیس یا پادفرومغناطیس باشد و با استفاده از این برهمکنش نظم مغناطیسی موجود در ترکیب توضیح داده شده است [۹]. بر طبق رهیافت استاندارد نظری حاکم بر این برهمکنش واسطه‌ای، شدت اندرکنش دو ناخالصی اسپینی جایگزیده به تابع پذیرفتاری محیط میزبان ارتباط دارد. به کمک نظریه تابع پاسخ خطی، برهمکنش تبادلی بین دو ناخالصی بر اساس تابع همبستگی ایستای اسپینی در راستاهای مختلف فضا بستگی دارد [۱۰]. در این پژوهش از مدل هامیلتونی تنگ بست در تقریب نزدیکترین همسایه‌ها استفاده شده است که در رابطه زیر  $\varepsilon_{nk}$  ویژه مقدار انرژی میباشد

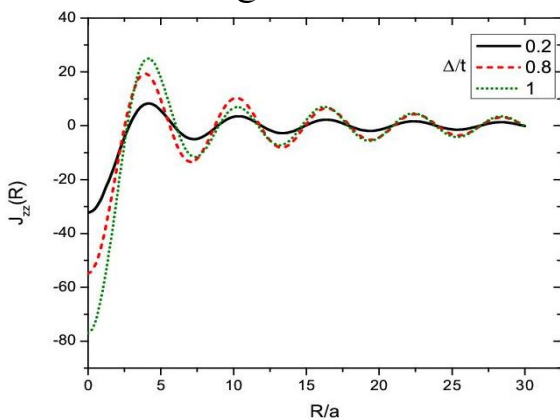
<sup>۱</sup> (Ruderman, Kittel, Kasuya, Yosida)



شکل ۱: ثابت جفت شدگی عرضی ( $J_{zz}(R)$ ) برحسب فاصله جدایی بین دو

ناخالصی ( $R$ ) به ازای پتانسیل شیمیایی مختلف  $\mu_m$

در ادامه به بررسی تاثیر عامل گاف انرژی و دمای محیط میزبان روی برهمکنش RKKY میپردازیم. در شکل ۲ ثابت جفت شدگی تبادل عرضی برحسب فاصله بین دو ناخالصی به ازای مقادیر مختلف گاف انرژی در دمای ۰٫۰۵ رسم شده است. مشاهده میشود که با افزایش گاف انرژی دامنه نوسان که نشان از شدت برهمکنش بین دو ناخالصی دارد افزایش می یابد ملاحظه میشود که تغییر گاف تأثیری قابل ملاحظه‌ای روی تعیین نوع برهمکنش ندارد.



شکل ۲: ثابت جفت شدگی عرضی ( $J_{zz}(R)$ ) برحسب فاصله جدایی بین دو

ناخالصی ( $R$ ) به ازای مقادیر مختلف گاف انرژی  $\Delta$

در ادامه به بررسی تاثیر عامل دما روی برهمکنش بین دو ناخالصی پرداخته‌ایم. در شکل ۳ و ۴ به ترتیب ثابت جفت شدگی عرضی و طولی برحسب فاصله بین دو ناخالصی به ازای مقادیر مختلف دما گاف ۰٫۸ رسم شده است. برای ثابت جفت شدگی تبادل عرضی در فواصلی که برهمکنش فرومغناطیس است ( $J_{zz}(R) < 0$ ) افزایش دما باعث افزایش شدت برهمکنش میشود اما در فواصلی که برهمکنش از نوع پادفرومغناطیس است ( $J_{zz}(R) > 0$ ) افزایش دما

پائولی است. برهمکنش تبدیلی غیر مستقیم مسئول نظم مغناطیسی سیستم است [۱۰، ۱۲]. هامیلتونی این سیستم بصورت

$$H_{\text{int}} = -J\Omega S_1 \cdot s\delta(r) - J\Omega S_2 \cdot s\delta(r-R) \quad (7)$$

در رابطه فوق  $J$  انتگرال تبادل،  $S_1, S_2$  اسپین ناخالصی‌های جایگزیده که به فاصله  $R$  از یکدیگر قرار گرفته‌اند و  $s$  اسپین الکترون‌های رسانش میباشد.

$$H_{\text{RKKY}} = J_{xx}(R)(s_{1x}s_{2x} + s_{1y}s_{2y}) + J_{zz}(R)(s_{1z}s_{2z}) \quad (8)$$

که  $J_{zz}(R), J_{xx}(R)$  را به ترتیب ثابت جفت شدگی تبدیلی طولی و عرضی می‌نامند. این دو ضریب را میتوان از طریق تحلیل رفتار فضایی پذیرفتاری استاتیک گاز الکترونی محیط میزبان بدست آورد که روابط آن بصورت زیر تعریف میشود [۸، ۱۰، ۱۱].

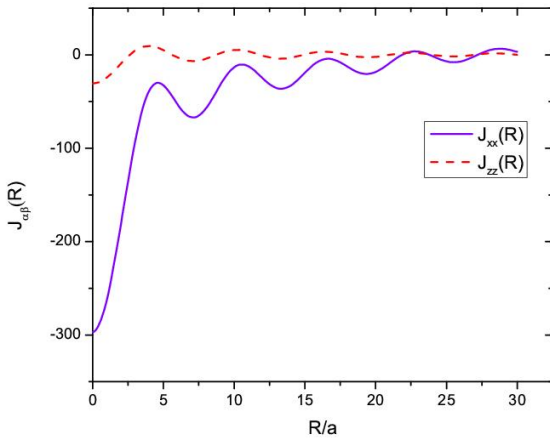
$$J_{xx}(R) = \int \frac{dq_x}{\pi} \chi_{s_x s_x}(q_x, \omega=0) e^{iq_x R_x} \quad (9)$$

$$J_{zz}(R) = \int \frac{dq_x}{\pi} \chi_{s_z s_z}(q_x, \omega=0) e^{iq_x R_x} \quad (10)$$

با جایگذاری مولفه‌های پذیرفتاری مغناطیسی نانونوار آرمچیر برن نیتريد و با انتگرال‌گیری روی منطقه اول بریلوئن نانونوار مذکور ثابت جفت شدگی تبدیلی طولی و عرضی برهمکنش تبدیلی غیر مستقیم بین دو ناخالصی مغناطیسی جایگزیده برای نانونوار برن نیتريد با عرض  $n=6$  بدست آمده که نتایج آن در قسمت بعدی ذکر شده است.

### محاسبات عددی

ثابت جفت شدگی تبادل عرضی برحسب فاصله جدایی بین دو ناخالصی مغناطیسی جایگزیده در دمای ۰٫۰۵ و گاف انرژی ۰٫۸ در حالت مغناطش یک در شکل ۱ رسم شده است. مشاهده میشود که ثابت جفت شدگی بر حسب فاصله بین دو ناخالصی دارای یک رفتار نوسانی است. در فواصل نزدیک برای پتانسیل شیمیایی  $\pm 1.5$  و  $\pm 2$  برهمکنش از نوع فرومغناطیس ( $J_{zz}(R) < 0$ ) است و در فواصل بعدی فرومغناطیس پادفرومغناطیس بودن بطور متناوب اتفاق می‌افتد این در حالی است که برای پتانسیل شیمیایی  $\pm 1$  در تمام فواصل برهمکنش از نوع فرومغناطیس است و افزایش فاصله جدایی بین دو ناخالصی جایگزیده فقط شدت برهمکنش را تغییر میدهد.



شکل ۵: ثابت جفت شدگی تبدیلی طولی ( $J_{xx}(R)$ ) و عرضی ( $J_{zz}(R)$ ) برحسب فاصله بین دو ناخالصی ( $R$ ) جایگزیده

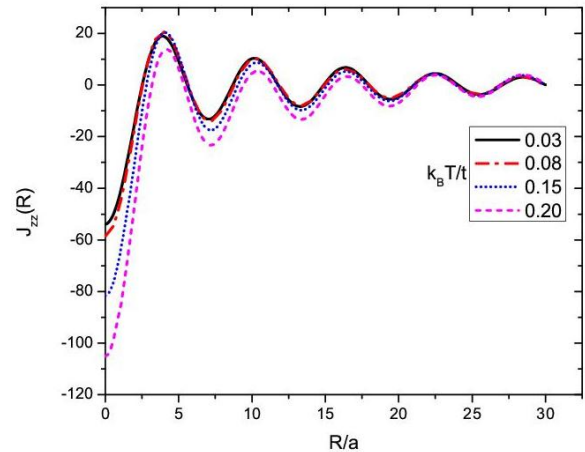
### نتیجه گیری

از این پژوهش نتیجه میگیریم که برهمکنش تبدیلی غیرمستقیم بین دو ناخالصی مغناطیسی جایگزیده در شبکه نانونوار آرمچیر برن-نیتريد برحسب فاصله جدایی بین دو ناخالصی دارای یک رفتاری نوسانی است و در حالت مغناطش یک برهمکنشی ناهمسانگرد است همچنین پتانسیل شیمیایی میتواند بعنوان عاملی در تعیین نوع برهمکنش (فرومغناطیس- پادفرومغناطیس) در نظر گرفته شود این در حالی است که دمای محیط میزبان و گاف انرژی سیستم هیچ نقشی در تعیین نوع برهمکنش ندارند و تنها میتوانند شدت برهمکنش را تغییر دهند.

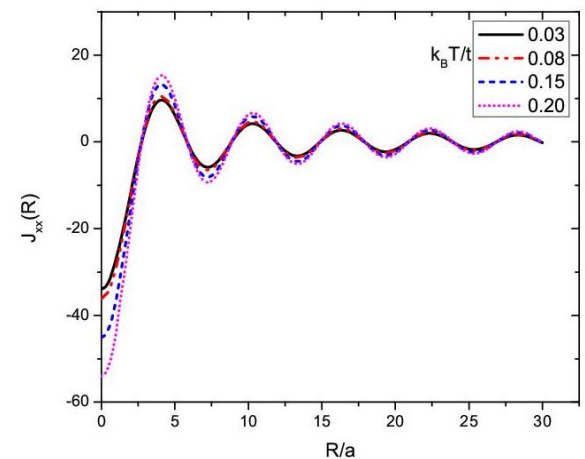
### مرجع ها

- [۱] M. Ziese, and M. J. Thornton, *Spin electronics* (Springer-Verlag, (۲۰۰۱)).
- [۲] L. Jiao, L. Zhang, L. Ding, J. Liu, H. Dai, *Nano Res.* ۳, ۳۸۷-۳۹۴ (۲۰۱۰)
- [۳] S. R. Power, F. S. M. Guimaraes, A. T. Costa, R. B. Muniz, and M. S. Ferreira, *Phys. Rev. B* ۸۵, ۱۹۰۴۱۱ (۲۰۱۲)
- [۴] P. Hyounki, A. Wadehra and Wilkins, *Phys. Rev. B* ۸۷, ۸۵۴۴۱ (۲۰۱۳)
- [۵] M. Sherafati and S. Satpathy, *Phys. Rev. B* ۸۳, ۱۶۰۴۲۵ (۲۰۱۱)
- [۶] H. Rezanian and F. Azizi, *Journal of Magnetism And Magnetics*, ۳۰۴-۸۸۵۳ (۲۰۱۶)
- [۷] M. A. Ruderman and C. Kittel, *Phys. Rev* ۹۶, ۹۹ (۱۹۵۴); T. Kasuya, *Prog. Theor. Phys* ۱۶, ۴۵ (۱۹۵۶); K. Yosida, *Phys. Rev* ۱۰۶, ۸۹۳ (۱۹۵۷)
- [۸] G. Grosso, G. P. Parravicini, *Solid State Physics*, Academic Press San Diego (۲۰۰۰)
- [۹] T. lei, J.J. Liu, Z.Z. Ynga and H. Guo, *Chin. Phys. B* vol. ۲۲ No. ۱۱, ۷۰۲ (۲۰۱۳)
- [۱۰] G D Mahan, *Many Particle Physics*, Plenum Press, New York, (۱۹۹۳)
- [۱۱] G. Giuliani and G. Vignale, *Quantum theory of the Electron liquid*, (Cambridge University Press, Cambridge), (۲۰۰۵)
- [۱۲] K. Szaowski, *arXiv*: ۱۲۱۱.۶۱ (۲۰۱۲)

باعث کاهش شدت برهمکنش میشود این در حالی است که برای ثابت جفت شدگی طولی، برهمکنش چه از نوع فرومغناطیس باشد چه پادفرومغناطیس افزایش دما باعث افزایش شدت برهمکنش میشود



شکل ۳: ثابت جفت شدگی عرضی ( $J_{zz}(R)$ ) برحسب فاصله جدایی بین دو ناخالصی ( $R$ ) به ازای مقادیر مختلف دما ( $k_B T$ )



شکل ۴: ثابت جفت شدگی طولی ( $J_{xx}(R)$ ) برحسب فاصله بین دو ناخالصی ( $R$ ) جایگزیده به ازای مقادیر مختلف دما ( $k_B T$ )

در گام آخر به بررسی ثابت جفت شدگی تبدیلی طولی و عرضی برحسب فاصله بین دو ناخالصی در حالت مغناطش یک پرداخته ایم مشاهده میشود با وجود اینکه در شرایط کاملا یکسان رسم شده اند اما رفتاری کاملا متفاوت دارند که بیانگر ناهمسانگردی برهمکنش است. لازم به ذکر است در این مقاله دما و گاف انرژی بدون بعد در نظر گرفته شده و  $t$  معرف انتگرال پرش میباشد که مقدار آن یک است.