

برهمکنش الکترون - الکترون در نانوپولک‌های شش ضلعی سیلیسن

رضایی، فاطمه^۱؛ فرقدان، روح اله^۱

^۱دانشکده فیزیک دانشگاه کاشان، کیلومتر ۵ بلوار قطب راوندی، کاشان

چکیده

در این مقاله اثر متقابل برهمکنش اسپین مدار ذاتی و برهمکنش الکترون - الکترون روی مغناطش نانوپولک‌های سیلیسنی بررسی شده است. به منظور این مطالعه پولک‌های شش ضلعی با لبه زیگزاگ که مغناطش ذاتی دارند انتخاب شده‌اند. در توصیف برهمکنش الکترون - الکترون از مدل هابارد و توصیف برهمکنش اسپین مدار ذاتی از مدل کین-مل در تقریب تنگ بست استفاده شده است. نتایج ما نشان می‌دهد که پولک‌های سیلیسنی در حضور برهمکنش الکترون - الکترون و برهمکنش اسپین مدار ذاتی خاصیت نیم‌رسانایی خود را حفظ می‌کنند، هرچند که مقادیر گاف انرژی می‌تواند با تغییر قدرت برهمکنش اسپین مدار ذاتی تغییر کند. با توجه به حضور برهمکنش اسپین مدار ذاتی، مغناطش پولک‌ها می‌تواند عمود بر صفحه و درون صفحه‌ای باشند. بررسی ما نشان می‌دهد، در هر دو حالت با افزایش قدرت اسپین مدار ذاتی، مغناطش نانوپولک به صوت ناگهانی کاهش می‌یابد. کاهش ناگهانی مغناطش در نظم درون صفحه‌ای زودتر رخ می‌دهد و پولک‌هایی با ابعاد کوچکتر سریعتر واقطبیاده می‌شوند.

Electron-electron interaction in hexagonal silicene nanoflakes

Rezaei, Fatemeh¹ ; Farghadan, Rouhollah¹

Department of Physics, University of Kashan, Kashan

Abstract

In this paper, the mutual effect of intrinsic spin-orbit and electron - electron interactions on the of silicene nanoflakes has been investigated. Our results show that in the presence of electron-electron and intrinsic spin-orbit interactions, nanoflakes retain their semiconducting properties, however, the values of the energy gap can be changed with changing the strength of intrinsic spin-orbit interaction. Due to the presence of intrinsic spin-orbit interaction, magnetization of nanoflakes can be in-plane and out-of-plane. Our study shows that, in both cases by strengthening the intrinsic spin-orbit interaction, the magnetization of nanoflakes suddenly decreases. These behaviors in magnetization happen in smaller spin-orbit strength in the case of in-plane and in the nanoflakes with smaller dimensions.

PACS No. 70

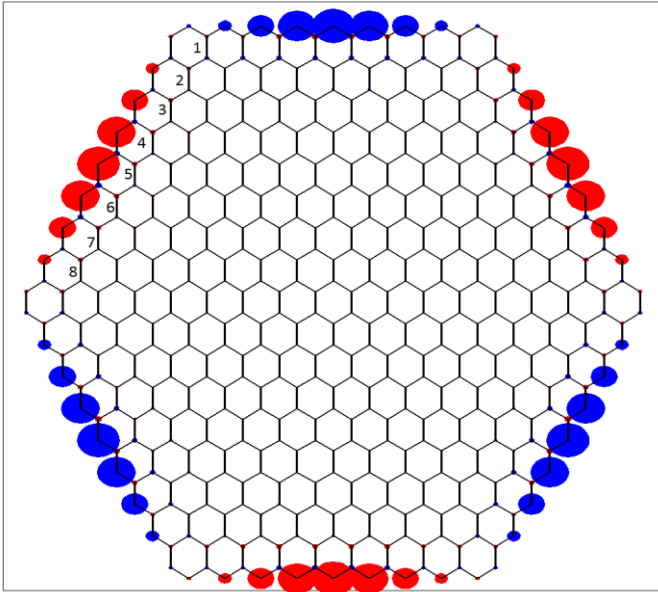
مغناطیسی متفاوتی از خود نشان می‌دهند به صورتی که نمونه مثلثی خاصیت فرومغناطیس و نمونه شش ضلعی خاصیت آنتی فرومغناطیس دارد [۳و۴].

تمام نانوساختارهایی که لبه زیگزاگ دارند، دارای مغناطش ذاتی هستند که منشاء آن به ساختار خاص الکترونی لبه زیگزاگ و برهمکنش الکترون - الکترون برمی گردد [۵]. یکی از دلایل تضعیف مغناطش، برهمکنش اسپین مدار ذاتی است [۶].

برهمکنش اسپین مدار ذاتی باعث ایجاد گاف انرژی در صفحه گرافنی می‌شود که در ساخت ترانزیستورهای اثر میدانی بسیار مهم است. همچنین این برهمکنش باعث از بین رفتن همسانگردی اسپینی در نانونوارهای لبه زیگزاگ شده و در نتیجه خاصیت مغناطیسی سیستم را تضعیف می‌کند [۷]. سیلیسن برهمکنش

مقدمه

بررسی و ساخت نانوساختارهای دوبعدی به دلیل ویژگی‌های منحصر بفرد، همواره مورد توجه محققین بوده است. گرافیت پرکاربردترین ماده در تولید این ساختارها می‌باشد. اما ساختارهای دوبعدی برپایه گرافیت معایبی چون سمی بودن و ناسازگاری با الکترونیک رایج را دارند. بنابراین در این راستا استفاده از دیگر عناصر چون سیلیسیوم مورد توجه قرار گرفته است. سیلیسن ساختار دوبعدی بر پایه سیلیکون می‌باشد. به دلیل تمایل به کاهش ابعاد سیستم‌های نانومتری، پولک‌های سیلیسنی پیشنهاد شده‌اند [۱و۲]. این نانوپولک‌ها که به صورت مثلثی و شش ضلعی معرفی و بررسی شده‌اند لبه‌های زیگزاگ و آرمچیر دارند و جالب است که بسته به شکل و ابعاد ساختارها، خواص الکترونی و



شکل ۱: مغناطش لبه‌ها در پولک شش ضلعی سیلیسن. دایره‌های قرمز نشان دهنده جهت عمود بر صفحه و دایره‌های آبی نشان دهنده جهت درون صفحه‌ای هستند. مغناطش پولک در مجموع توزیع آنتی فرومغناطیس دارد.

بحث و نتایج

مغناطش‌ها برای دو نمونه نانوپولک سیلیسنی محاسبه شده است. یکی از نانوپولک‌ها در هر ضلع از خارجی‌ترین لبه، ۸ سلول لانه زنبوری و دیگری ۶ سلول دارد. نمونه اول شامل ۴۸۹ اتم و نمونه دوم شامل ۲۹۴ اتم است. طرحواره پولک بزرگتر به همراه مغناطش محاسبه شده، در شکل ۱ نشان داده شده است. همانطور که در شکل ۱ نیز مشخص است، مغناطش در ناحیه میانی لبه‌ها بیشترین مقدار را داشته (دایره‌های بزرگتر)، اما به صورت یکی در میان درون صفحه‌ای (آبی) و عمود بر صفحه (قرمز) می‌باشد. در نتیجه پولک در کل، توزیع آنتی فرومغناطیس داشته و مغناطش کل آن صفر است. در ادامه به بررسی اثرات تغییر قدرت برهمکنش اسپین مدار ذاتی (t_{so}) پرداخته‌ایم. نتایج این بررسی برای نانوپولک کوچکتر (با ۶ سلول در هر ضلع) در شکل ۲ و برای نانوپولک بزرگتر (با ۸ سلول در هر ضلع) در شکل ۳ آمده است.

اسپین مدار ذاتی قوی‌تر و گاف انرژی بزرگتری نسبت به گرافن دارد که دلیل آن ساختار حجمی سیلیسن است. تضعیف خاصیت مغناطیسی نیز در سیلیسن بیشتر بوده که منجر به ظهور مشکلاتی در کاربردهای مغناطیسی می‌شود [۸].

در این تحقیق پولک‌های سیلیسنی شش ضلعی با لبه زیگزاگ انتخاب شده‌اند و مغناطش لبه آنها محاسبه شده است. بدین منظور برای توصیف برهمکنش الکترون- الکترون از مدل هابارد و برای توصیف برهمکنش اسپین مدار ذاتی از مدل کین- مل استفاده کرده‌ایم [۷]. محاسبات انجام شده نشان می‌دهد که مغناطش لبه در نانوپولک با قدرت برهمکنش اسپین مدار ذاتی رابطه عکس دارد همچنین به ابعاد نانوپولک وابسته است.

محاسبات

هامیلتونی کین- مل- هابارد برای نانوپولک سیلیسنی به صورت زیر است:

$$H = \sum_{(i,j),\sigma} t c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_{(i,j),\sigma} t_{so} \sigma_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + H_{int} \quad (1)$$

در رابطه (۱)، جمله H_{int} هامیلتونی هابارد است. $c_{i\sigma}^{\dagger}$ ($c_{j\sigma}$) اپراتور خلق (نابودی) الکترون در مکان i می‌باشد. تصویر اسپین روی محور عمود بر کریستال دو بعدی شامل مقادیر $\sigma = \pm 1$ است. یک براکت نشان دهنده همسایگی اول، دو براکت نشان دهنده همسایگی دوم و $v_{ij} = \pm 1$ بیانگر ساعتگرد یا پادساعتگرد بودن همسایگی دوم است. همچنین مقدار انرژی (پارامتر) جهش $t = -1.6\text{eV}$ می‌باشد. در تقریب میدان موثر هامیلتونی هابارد به صورت زیر است:

$$H_{int} = U \left[\langle n_{i\uparrow(\alpha)} \rangle \langle n_{i\downarrow(\alpha)} \rangle + n_{i\uparrow(\alpha)} \langle n_{i\downarrow(\alpha)} \rangle - \langle n_{i\uparrow(\alpha)} \rangle \langle n_{i\downarrow(\alpha)} \rangle \right] \quad (2)$$

که $n_{i\uparrow}$ عملگر اشغال سایت i در طول محوری دلخواه و $U = 1.1t$ پارامتر دافعه کولنی درون شبکه است. مغناطش جایگزیده از رابطه زیر بدست می‌آید:

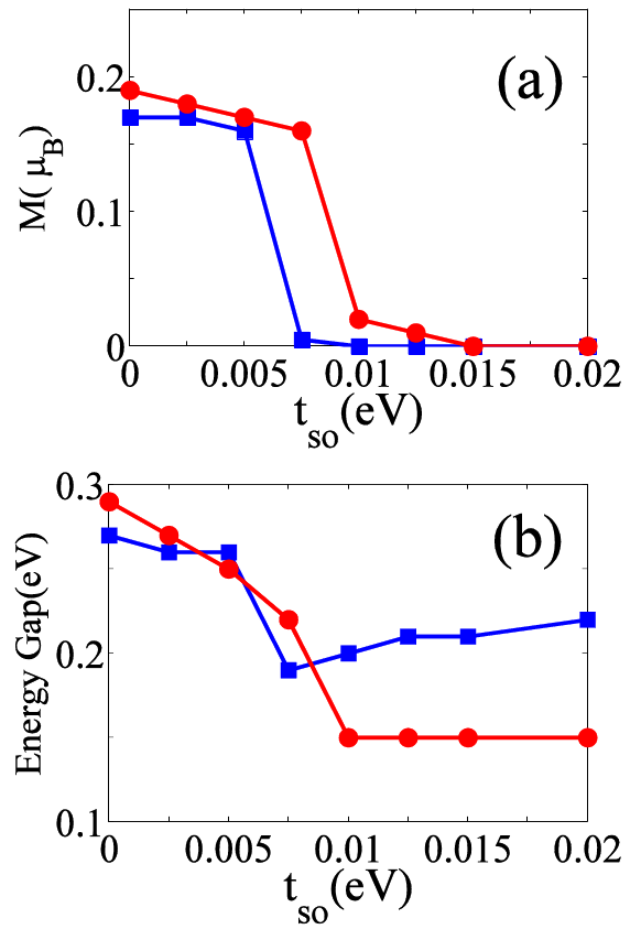
$$m_{i(\alpha)} = g\mu_B \frac{[\langle n_{i\uparrow(\alpha)} \rangle - \langle n_{i\downarrow(\alpha)} \rangle]}{2} \quad (3)$$

که $\alpha = 0, \pi/2$ زاویه‌ای است که مغناطش طبق مدل هابارد در امتداد آن محاسبه شده است.

واقطبیده می‌شود. در شکل ۲(b) تغییرات انرژی گاف بر حسب قدرت‌های مختلف برهمکنش اسپین مدار ذاتی رسم شده‌است. نمودار ۲(b) نیز دارای تغییر ناگهانی است و این افت ناگهانی در انرژی گاف، تقریباً در همان محدوده از t_{so} اتفاق می‌افتد که برای مغناطش اتفاق افتاد. با مقایسه دو نمودار شکل ۲(b) می‌توان نتیجه گرفت که محدوده تغییر گاف انرژی برای نظم عمود بر صفحه بیشتر از درون صفحه‌ای است. تغییرات گاف انرژی برای مغناطش درون صفحه‌ای در بازه (۰/۲۷ - ۰/۱۸) و برای مغناطش عمود بر صفحه در بازه (۰/۲۹ - ۰/۱۵) اتفاق می‌افتد.

در شکل ۳(a) نیز تغییرات بیشترین مغناطش (تغییر مغناطش در نقطه میانی هر لبه) بر حسب قدرت‌های مختلف برهمکنش اسپین مدار ذاتی رسم شده‌است. مشاهده می‌شود، بیشترین مقدار مغناطش در بازه (۰/۰۷۵ - ۰/۰۱۲) از پارامتر t_{so} ، افت ناگهانی دارد. البته این کاهش ناگهانی برای نظم درون صفحه‌ای (خط-مربع) در مقدار کمتری از t_{so} اتفاق می‌افتد و نشان می‌دهد که در نظم درون صفحه‌ای، با قدرت اسپین مدار کمتری می‌توان سیستم را غیرمغناطیسی کرد. البته برای t_{so} بزرگتر از ۰/۰۲ هم برای نظم درون صفحه‌ای و هم نظم عمود بر صفحه سیستم به صورت کامل واقطبیده می‌شود. در شکل ۳(b) تغییرات انرژی گاف بر حسب قدرت‌های مختلف برهمکنش اسپین مدار ذاتی رسم شده‌است.

نمودار ۳(b) نیز دارای تغییر ناگهانی است و این افت ناگهانی در انرژی گاف، تقریباً در همان محدوده از t_{so} اتفاق می‌افتد که برای مغناطش اتفاق افتاد. با مقایسه دو نمودار شکل ۳(b) می‌توان نتیجه گرفت که محدوده تغییر گاف انرژی برای نظم عمود بر صفحه بیشتر از درون صفحه‌ای است. تغییرات گاف انرژی برای مغناطش درون صفحه‌ای در بازه (۰/۲۵ - ۰/۱۴) و برای مغناطش عمود بر صفحه در بازه (۰/۲۸ - ۰/۱) اتفاق می‌افتد. باتوجه به شکل‌های ۲ و ۳ درمی‌یابیم که گاف انرژی در حضور برهمکنش اسپین مدار ذاتی، از بین نرفته و خاصیت نیم رسانایی حفظ می‌شود. همچنین به نظر می‌رسد که حلقه‌های بزرگتر در حضور برهمکنش اسپین مدار ذاتی دیرتر واقطبیده می‌شوند و برای مشاهده اثرات مغناطیسی مناسب‌تر هستند.



شکل ۲: تغییرات مغناطش و گاف انرژی برای نانوپولک با ۲۹۴ اتم. نمودار خط- دایره (قرمز) نشان دهنده نظم مغناطیسی عمود بر صفحه و نمودار خط- مربع (آبی) نشان دهنده نظم درون صفحه‌ای است. (a) تغییرات بزرگترین مقدار مغناطش بر حسب قدرت اسپین مدار ذاتی. (b) تغییرات مقدار گاف انرژی بر حسب قدرت اسپین مدار ذاتی.

در شکل ۲(a) تغییرات بیشترین مغناطش (تغییر مغناطش در نقطه میانی هر لبه) بر حسب قدرت‌های مختلف برهمکنش اسپین مدار ذاتی رسم شده‌است. مشاهده می‌شود، بیشترین مقدار مغناطش در بازه (۰/۰۱ - ۰/۰۰۵) از پارامتر t_{so} ، افت ناگهانی دارد. البته این کاهش ناگهانی برای نظم درون صفحه‌ای (خط-مربع) در مقدار کمتری از t_{so} اتفاق می‌افتد و نشان می‌دهد که در نظم درون صفحه‌ای، با قدرت اسپین مدار کمتری می‌توان سیستم را غیرمغناطیسی کرد. البته برای t_{so} بزرگتر از ۰/۰۱۵ هم برای نظم درون صفحه‌ای و هم نظم عمود بر صفحه، سیستم به صورت کامل

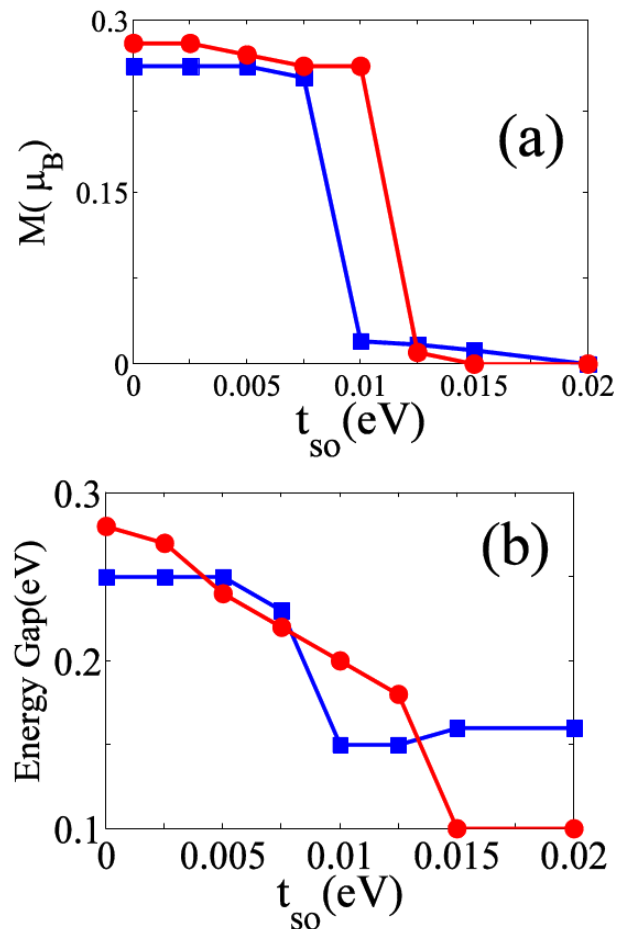
می‌کنند. در این صورت مقدار t_{so} که سیستم را واقطیبده می‌کند بزرگتر است. مثلاً برای حلقه بزرگتر $0/15$ الکترون-ولت است.

نتیجه گیری

در حضور برهمکنش اسپین مدار ذاتی، گاف انرژی برای نانو پولک‌های شش ضلعی از بین نرفته و در نتیجه خاصیت نیم رسانایی خود را حفظ می‌کنند. افزایش قدرت برهمکنش اسپین مدار ذاتی باعث تغییر مقدار گاف انرژی و واقطیبدهی مغناطیسی در نانوپولک شش ضلعی سیلیسن با لبه زیگزاگ می‌شود. البته میزان تغییر گاف انرژی و واقطیبدهی مغناطیسی به ابعاد نانو پولک وابسته است. برای نانوپولک‌های بزرگتر قدرت اسپین مدار ذاتی لازم برای واقطیبدهی سیستم، بیشتر از نانوپولک‌های کوچکتر است، در نتیجه به منظور کاربردهای اسپینترونیکی مناسب‌تر است که در حضور برهمکنش‌های اسپین مدار ذاتی پولک‌هایی شش ضلعی با ابعاد بزرگتر استفاده شوند.

مرجع‌ها

- [۱] H. Michel and A. Dimoulas and A. Molle; "Silicene: a review of recent experimental and theoretical investigations." *Journal of Physics: Condensed Matter* **27**, No.25 (2015) 253002.
- [۲] C. Lok and L. Y. Voon; "Physical Properties of Silicene."; *Silicene*. Springer International Publishing, (2016) 3-33
- [۳] M. Brij and A. Kumar and P. K. Ahluwalia; "Shape and edge dependent electronic and magnetic properties of silicene nanoflakes"; *AIP Conference Proceedings*. **1665**, No.1 (2015).
- [۴] H. X. Luan and C. W. Zhang et al; "Electronic and magnetic properties of silicene nanoflakes by first-principles calculations"; *Physics Letters A* **377**, No.39 (2013) 2792-2795.
- [۵] M. Wierzbiński and J. Barnaś and R. Swirkowicz; "Zigzag nanoribbons of two-dimensional silicene-like crystals: magnetic, topological and thermoelectric properties."; *Journal of Physics: Condensed Matter* **27** No.48 (2015) 485301.
- [۶] J. L. Lado and N. G. Martínez and J. F. Rossier; "Edge states in graphene-like systems."; *Synthetic Metals* **210** (2015) 56-67.
- [۷] J. L. Lado and J. F. Rossier; "Magnetic Edge Anisotropy in Graphenelike Honeycomb Crystals"; *Physical review letters* **113** No.2 (2014) 027203.
- [۸] S. Krompiecki; "Edge magnetism of finite graphene-like nanoribbons in the presence of intrinsic spin-orbit interaction and perpendicular electric field"; *Nanotechnology* **27** No.31 (2016) 315201.
- [۹] R. Farghadan and A. Saffarzadeh; "Electric field control of spin-resolved edge states in graphene quantum nanorings"; *Journal of Applied Physics* **115** No.17 (2014) 174310.



شکل ۳: تغییرات مغناطش و گاف انرژی برای نانوپولک با 489 اتم. نمودار خط-دایره (قرمز) نشان دهنده نظم مغناطیسی عمود بر صفحه و نمودار خط-مربع (آبی) نشان دهنده نظم درون صفحه‌ای است. (a) تغییرات بزرگترین مقدار مغناطش برحسب قدرت اسپین مدار ذاتی. (b) تغییرات مقدار گاف انرژی بر حسب قدرت اسپین مدار ذاتی.

این نتیجه مشابه یافته‌های قبلی در نانوحلقه‌های گرافنی است. در این نانوحلقه‌ها بر اثر میدان الکتریکی خارجی مغناطش‌های لبه‌ای از بین می‌روند که این واقطیبدهی با اندازه نانوحلقه گرافنی رابطه عکس دارد [۹].

محاسبات ما نشان داد برای پولک‌هایی که در هر ضلع کمتر از ۶ سلول لانه زنبوری دارند هیچ اثر مغناطیسی چه برای مغناطش درون صفحه‌ای و چه مغناطش عمود بر صفحه مشاهده نمی‌شود. اگر یک میدان مغناطیسی به این نانوپولک‌ها اعمال کنیم، تمام ممان‌های مغناطیسی هم جهت می‌شوند و توزیع فرومغناطیس پیدا