

خواص ترابرد الکترونی از سد پتانسیل لایه های بسیار نازک عایق توپولوژی

سیزه، طاهره^۱؛ چراغچی، حسین^۲

^{۱,۲} دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان

چکیده

با روش لاندایر بوتیکر و به کمک تابع گرین غیر تعادلی به بررسی خواص تراپردی لایه نازک عایق توپولوژی در حضور هیبریداسیون بین دو لایه و سد پتانسیل پرداختیم. وجود نوردایی معکوس زمانی حالت های سطحی لایه ی نازک عایق توپولوژی منجر به نوسانات غیر میرای ضریب عبور سیستم می شود. تغییرات ضریب عبور برحسب قدرت سد پتانسیل و انرژی ورودی رفتار سوئیچ کنندگی از خود نشان می دهد و قابلیت تنظیم شدن الکتریکی با تغییر قدرت سد پتانسیل و انرژی ورودی را دارد.

Transport properties through topological insulator ultra-thin film barriers

Taahereh. Sabzeh¹; Cheraghchi. Hosain²

^{1,2} Department of Physics, University of Damghan, Damghan

Abstract

We have investigated the transmission properties of the topological insulator ultra-thin films (TI UTFs) through the single potential barrier structure by using the non-equilibrium Green's Function and Landauer-Buttiker formalism. The hybridization between the top and bottom surface states of TI UTFs are considered. Under this condition, it is found that the transmission spectra oscillate in terms of the barrier strength, but the amplitudes of the transmission never decay by increasing the barrier strength. Besides, the transmission spectra exhibit an on/off switching effect by tuning the barrier strength or incident energy.

PACS No. (73.50)

مقدمه

معرفی شدند و سپس در آزمایشگاه به صورت تجربی مشاهده شدند [2]. در دمای پایین، حالت های لبه ای بدون گاف عایق های توپولوژی در ترابرد بار سهیم اند و با فرمیون های دیراک بدون جرم توصیف می شوند [3]. این حالت های لبه ای^۲ با نظم توپولوژی تقارن نوردایی معکوس زمانی ناشی شده از جفت شدگی اسپین مدار شناخته شده و نسبت به اختلالات نوردای معکوس زمانی، پراکندگی از بی نظمی ها و برهمکنش الکترون-الکترون مقاوم هستند [1]. به دلیل وجود این حالت های لبه ای بدون گاف توپولوژی و برهمکنش

عایق های توپولوژی^۱ به عنوان حالت های کوانتومی جدید مواد با گاف نواری در حجم و حالت های بدون گاف لبه ای یا سطحی (دوبعدی و سه بعدی) ناشی شده از تقارن نوردایی زمان و برهمکنش اسپین مدار قوی در سال های اخیر توجهات زیادی را در حوزه فیزیک ماده چگال به خود جلب کرده اند [1]. عایق های توپولوژی دوبعدی به عنوان نمایندگان حالت های کوانتومی اسپینی

امکان بررسی سیستم در شرایط پیچیده‌تری را فراهم می‌آورد که روش‌های دیگر در آن ناکام بوده‌اند.

هامیلتونی و روش محاسباتی

هامیلتونی موثر مرتبه‌ی پایین لایه نازک عایق توپولوژی در صفحه عمود بر راستای محور z و در نزدیکی نقطه Γ و در پایه‌های $|u \uparrow\rangle$ و $|u \downarrow\rangle$ و $|l \uparrow\rangle$ و $|l \downarrow\rangle$ که متناظر به لایه بالایی و پایینی و \uparrow و \downarrow به ترتیب نمایانگر اسپین‌های پایین و بالا هستند به صورت زیر نوشته می‌شود

$$H = \begin{bmatrix} h_+ & 0 \\ 0 & h_- \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$h_{\tau_z} = \hbar v_F (\vec{\sigma} \times \vec{k})_z + \tau_z \sigma_z m_k \quad (2)$$

و $\tau_z = \pm$ متناظر به بلوک‌های بالا (پایین) 2×2 هامیلتونی معادله (1) است. v_F سرعت فرمی، $\vec{k} = (k_x, k_y)$ ، با $(i = 1, 2, 3)$ ماتریس‌های پاولی هستند که در فضای اسپینی عمل می‌کنند. لایه‌های بالایی و پایینی است. هامیلتونی کل در حضور پتانسیل خارجی عبارت است از

$$H_{\text{total}} = H + V \sigma_0 \otimes \tau_0 \quad (3)$$

که در آن v پتانسیل خارجی و τ_0, σ_0 ماتریس‌های 2×2 می‌باشند که به ترتیب بر روی فضای اسپین و لایه اثر می‌کنند. با روش لاندائیر-بوتیکر و تابع گرین غیرتعادلی، تراپرد بالستیک از ساختار تعریف شده را محاسبه کرده‌ایم. ضریب عبور از الکتروند j به الکتروند i در انرژی فرمی E_F برابر است با

$$T_{ij}(E_F) = \text{Tr}[\Gamma^i G^r \Gamma^j G^a] \quad (4)$$

که در آن $G^r(E)$ تابع گرین تاخیری به شکل ذیل $G^r(E) = [E + i0^+ - H - \sum_L^r(E) - \sum_R^r(E)]^{-1}$ (5) و تابع گرین پیشرونده به صورت $G^a(E) = (G^r(E))^+$ است. $\sum_{L(R)}^r(E) = (\sum_{L(R)}^a(E))^+$ خود انرژی مربوط به جفت‌شدگی سیستم مرکزی با الکتروند راست و چپ، H هامیلتونی سیستم مرکزی و $\Gamma^{L(R)} = i(\sum_{L(R)}^r - \sum_{L(R)}^a)$ تابع طیفی است.

نتایج

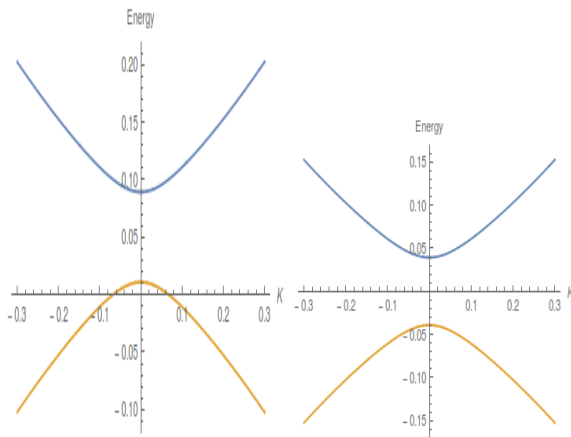
این محاسبات، بر روی لایه‌ی نازک عایق توپولوژی Bi_2Se_3 با ضخامت $(L = 5 \text{ nm})$ و پارامترهای تجربی گزارش شده‌ی با

اسپین مدار قوی، ابزار الکترونیکی بر پایه عایق‌های توپولوژی کاندیداهای مناسبی برای کاربردهای اسپینترونیک و محاسبات کوانتومی هستند [4,5].

کنترل و تنظیم خواص تراپردی حالت‌های سطحی عایق‌های توپولوژی از اهمیت بالایی برخوردار است. با این وجود در اغلب عایق‌های توپولوژی مطالعه شده تا امروز، در حقیقت حالت‌های حجمی به دلایلی از قبیل جانثانی مواد و نواقص شبکه رسانا هستند [6]. از این رو اندازه‌گیری تراپرد واقعی حالت‌های توپولوژی سطحی با دشواری همراه است. یکی از روش‌های موثر برای کاهش رسانش حجمی، بررسی عایق‌های توپولوژی به فرم لایه فوق نازک 3 است (UTF). در مقایسه با نمونه‌های حجمی در لایه نازک، نظم توپولوژی با تنظیم ضخامت لایه کنترل می‌شود [7].

در این مقاله، ما خواص تراپردی لایه نازک عایق توپولوژی را در حضور سد پتانسیل بررسی می‌کنیم. از دیدگاه عملی چنین سد پتانسیلی را از طریق اتصالات فلزی و یا قرار دادن گیت‌های موازی روی سطح، می‌توان به سیستم القاء کرد. اخیراً گزارشی مبنی بر تولید ابزاری قابل تنظیم با پتانسیل گیت بر پایه‌ی عایق توپولوژی از طریق رشد لایه SrTiO_3 بر روی زیر لایه Bi_2Se_3 به کمک تکنیک رشد پرتویی مولکولی 4 ارائه شده است که به دلیل ثابت دی‌الکتریک بزرگ در دمای پایین، تراز فرمی حالت‌های سطحی بالایی قابل تنظیم با پتانسیل گیت است [8]. در این مطالعه لایه نازک عایق توپولوژی با ضخامت $(L = 5 \text{ nm})$ در نظر گرفته شده که حالت‌های سطحی لایه بالایی و لایه پایینی هیبرید شده و گاف انرژی در نقطه دیراک را سبب می‌شوند [9]. این هیبریداسیون موجب سهمی‌گونه شدن ساختار نواری می‌شود.

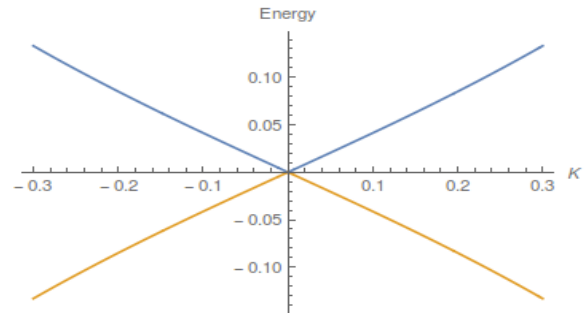
در این مقاله به بررسی خواص تراپردی لایه نازک عایق توپولوژی در حضور هیبریداسیون بین دو لایه و سد پتانسیل خارجی پرداختیم. برای این بررسی از روش لاندائیر-بوتیکر و تابع گرین غیر تعادلی بهره گرفتیم. روش به کار رفته در مطالعه ما، نسبت به دیگر روش‌هایی که تا کنون در مقالات گزارش شده است [10] دارای مزیت‌های فراوانی است. این روش قدرت محاسباتی بالایی دارد و



شکل ۲: طیف انرژی سلناید بیسموت حول نقطه Γ در حضور هیبریداسیون بین دو لایه ($m_0 \neq 0$). الف) در غیاب پتانسیل خارجی و ب) در حضور سد پتانسیل $V = 0.05 \text{ eV}$

علاوه بر آن اسپین و اندازه حرکت فرمیون‌های دیراک همچنان جفت شده باقی می‌مانند و طیف ضریب عبور بدون اتلاف نوسان می‌کند. ضریب عبور رفتار سوئیچ کنندگی را با تغییرات قدرت سد پتانسیل و انرژی نشان می‌دهد. این ویژگی سوئیچ کنندگی الکتریکی از گاف هیبریداسیون بین دو لایه ناشی شده و در لایه‌های ضخیم که حالت-های سطحی بدون گاف هستند دیده نمی‌شود. این ویژگی را می‌توان از روی طیف نواری توضیح داد. برای نمودارهای فوق با تنظیم قدرت سد پتانسیل، انرژی ورودی و نیز پهنای سد پتانسیل دو مکانیزم تونل زنی بین نواری و تونل زنی از گاف نواری وجود دارد. برای یک انرژی ورودی ثابت $E > 0$ فرایند عبور از نوار رسانش به نوار ظرفیت در حضور سد پتانسیل با شرط $V > E + m_0$ و برای $E < 0$ با $V < E - m_0$ از نوار ظرفیت به نوار رسانش برقرار شده و طیف ضریب عبور نوسانات غیر میرایی را تجربه می‌کند. شکل (۲) نشان می‌دهد که فرایندهای عبوری متناظری را می‌توان با تنظیم قدرت سد پتانسیل و یا انرژی ورودی ایجاد کرد که بیانگر این است که خواص تراپردی با تنظیمات الکتریکی کنترل می‌شود که این ویژگی برای کاربرد در ابزار قابل کنترل الکتریکی لازم است و موجب می‌شود این مواد کاندیدهای بسیار مهمی برای کاربرد در ابزار قابل کنترل به صورت الکتریکی باشد.

مقادیر $m_1 = 56.6 \text{ eV \AA}^2$ ، $m_0 = 0.03924 \text{ eV}$ و نیز $v_F = 4.1 \text{ eV \AA}$ استفاده کرده‌ایم. طیف انرژی حالت‌های سطحی در غیاب هیبریداسیون بین دو لایه ($m_0 = 0$) در حوالی نقطه Γ ($k = 0$) به فرم مخروط‌های دیراک است (شکل ۱).



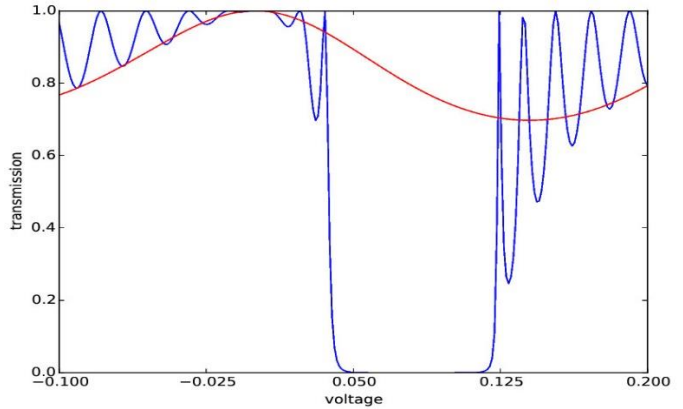
شکل ۱: طیف انرژی لایه نازک عایق توپولوژی سلناید بیسموت در غیاب جفت شدگی بین دو لایه ($m_0 = 0$).

در حضور ترم m_0 توابع موج بین دو لایه‌ی بالا و پایین همپوشانی دارند و گاف انرژی m_0 را در نقطه Γ موجب شده و طیف پاشندگی انرژی به صورت حالت‌های سطحی سهمی وار در می‌آیند (شکل ۲-الف). در حضور سد پتانسیل طیف نواری جابه‌جا شده و گاف در محدوده $-m_0 + V$ تا $m_0 + V$ قرار می‌گیرد (شکل ۲-ب). در ادامه، نتایج بدست آمده از بررسی خواص تراپردی حالت-های سطحی لایه‌ی نازک عایق توپولوژی در حضور هیبریداسیون بین دو سطح آورده شده است. طیف ضریب عبور بر حسب تغییرات قدرت سد پتانسیل با دو پهنای متفاوت ۷۰ و ۵ نانومتر در شکل (۳) و بر حسب تغییرات انرژی ورودی در شکل (۴) نمایش داده شده است. طیف ضریب عبور با تغییرات قدرت سد پتانسیل و انرژی ورودی نوسان می‌کند اما اندازه نوسانات ضریب عبور کاهش نمی‌یابد که این ویژگی در تضاد آشکار با گاز الکترون دوبعدی است که در آن نوسانات ضریب عبور با افزایش قدرت پتانسیل به طور توانی کاهش می‌یابد [11]. طیف غیر اتلافی نوسانی ضریب عبور لایه نازک عایق توپولوژی از هامیلتونی دیراک‌گونه حامل‌ها ناشی می‌شود. جمله مربوط به پتانسیل اعمالی به سیستم در معادله (۳) هرچند گاف انرژی را جابه‌جا می‌کند اما تقارن معکوس زمانی که وجود حالت‌های هلیکال را در سیستم تضمین می‌کند را نمی‌شکند.

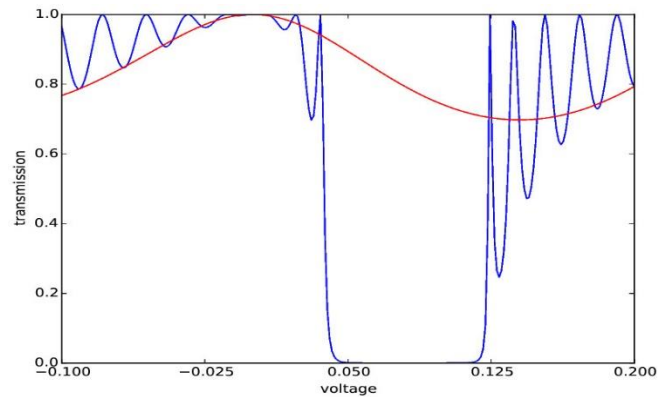
عبور الکتریکی تحت شرایطی که در آن سد پتانسیل دارای پهنای بزرگتری از طول واهلش مدهای واهلشی سیستم است نوسانات غیر میرایی را تجربه می کند و این رفتار در اثر تبعیت حامل های بار از معادله ی دیراک گونه و عدم شکست تقارن ناوردا معکوس زمانی (که حالت های سطحی هلیکال در سیستم را موجب می شود) توسط پتانسیل است. ضریب عبور رفتار سوئیچ کننده ای را با تغییرات قدرت سد پتانسیل و انرژی نشان می دهد. این ویژگی سوئیچ کنندگی الکتریکی از گاف هیبریداسیون بین دو لایه ناشی شده و قابل تنظیم با قدرت پتانسیل و انرژی ورودی از روی طیف انرژی است. این ویژگی برای کاربرد در ابزار قابل کنترل الکتریکی لازم است و موجب می شود این مواد کاندیدهای بسیار مهمی برای کاربرد در ابزار قابل کنترل به صورت الکتریکی باشند.

مرجع ها

[1] X.L. Qi and S.C. Zhang, Rev. Mod. Phys. 83 (2011) 1057.
 [2] Y.L. Chen, J.G. Analytis, J.H. Chu, et al., Science 325 (2009) 178.
 [3] H.J. Zhang, C.X. Liu, X.L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.C. Zhang, Nat. Phys. 5 (2009) 438.
 [4] Z.F. Liu, Q.P. Wu, and N.H. Liu, Commun. Theor. Phys. 57 (2012) 315.
 [5] S. Datta and B. Das, Appl. Phys. Lett. 56 (1990) 665.
 [6] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava and M. Z. Hasan, Nat. Phys., 2009, 5, 398.
 [7] T. Hirahara, Y. Sakamoto, Y. Saisyu, H. Miyazaki, S. Kimura, T. Okuda, I. Matsuda, S. Murakami and S. Hasegawa, Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys., 2010, 81, 165422.
 [8] T. Zhang, N. Levy, J. Ha, Y. Kuk and J. A. Stroscio, Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys., 2013, 87, 115410.
 [9] J. Linder, T. Yokoyama and A. Sudbø, Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys., 2009, 80, 205401.
 [10] H. Li, J. M. Shao, H. B. Zhang and G. W. Yang, Nanoscale., 2014, 6, 3127.
 [11] Z.-L. Ji and D. W. L. Sprung, Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys., 1997, 56, 1045.



شکل ۳: تغییرات ضریب عبور بر حسب ولتاژ سد در انرژی فرمی $E_F = 0.08 \text{ eV}$ و سد پتانسیل با پهنای ۷۰ نانومتر منحنی آبی رنگ و پهنای ۵ نانومتر منحنی قرمز رنگ.



شکل ۴: تغییرات ضریب عبور بر حسب انرژی فرمی و برای پتانسیل سد $V = 0.05 \text{ eV}$. سد پتانسیل با پهنای ۷۰ نانومتر منحنی آبی رنگ و پهنای ۵ نانومتر منحنی قرمز رنگ.

برای سدهای پتانسیل با طول کمتر از طول واهلش مدهای واهلشی سیستم (30 nm) [10] حامل ها از سد پتانسیل سیستم مرکزی به واسطه مدهای واهلشی تونل زنی می کنند و ضریب عبور محدودی در محدوده گاف سیستم مرکزی مشاهده می شود (منحنی قرمز رنگ شکل ۴). از آن رو که این مدها تنها در نزدیکی مرزها وجود دارند ضریب عبور با افزایش فاصله از مرزها به طور توانی کاهش می یابد.

نتیجه گیری

در دمای پایین، حالت های لبه ای بدون گاف عایق های توپولوژی در برابر بار سهمی اند و با مطالعه ی ترابرد الکتریکی در لایه ی نازک عایق توپولوژی در حضور هیبریداسیون بین دو لایه، رفتار ضریب عبور الکتریکی بر حسب تغییرات قدرت سد پتانسیل و انرژی ورودی بررسی شد و نتایج بدست آمده حاصل از محاسبات عددی با روش لانداثر-بوتیکر و تابع گرین غیر تعادلی می باشد. ضریب