جریان ترموالکتریکی دره و اسپین خالص قابل کنترل در گرافین کشیده شده

غلامی، زینب[۱] ؛ اسماعیل زاده، مهدی[۱] ؛فرخ نژاد، محسن[۱]

[۱]دانشکده فیزیک دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

چکیده

در این مقاله، ما جریان ترموالکتریک دره و اسپین خالص را در گرافین کشیده شده در حضور میدان تبادلی بررسی کرده‌ایم. ما نشان دادیم که جریان ولی خالص می‌تواند در غیاب میدان تبادلی در محدوده دمای اتاق بطور گرمایی ایجاد شود. علامت جریان ولی خالص می‌تواند با تغییر راستای کشش کنترل شود. ما همچنین یافتیم که جریان اسپینی خالص در گرافین کشیده شده و در حضور میدان تبادلی می‌تواند القاء شود بطوری که علامت جریان اسپینی می‌تواند با راستای میدان تبادلی تنظیم شود. علاوه بر آن، ضرایب سی‌بک اسپین – دره را در گرافین کشیده شده و در حضور میدان تبادلی محاسبه کردیم. نتایج، یک راه عملی برای تولید جریان اسپین و دره خالص در گرافین پیشنهاد می‌کند.

Controllable pure valley and spin thermoelectric current in strained graphene

Gholami, Zainab[1]; Esmaeilzadeh, Mahdi[1]; Farokhnezhad, Mohsen[1]

[1] *Department of Physics, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran*

Abstract

In this paper, we have investigated the pure valley and spin thermoelectric current in strained graphene and in the presence of exchange field. We show that the pure valley current thermally can be created in the absence of exchange field and in the range of room temperature. The sign of pure valley current can be controlled by changing the direction of tension. We also find that the pure spin current can be induced in strained graphene and in the presence of exchange field so that the sign of spin current can be tuned with direction of exchange field. In addition, we calculated the valley and spin Seebeck coefficients in strained graphene. The results propose a feasible way for generating a pure valley and spin current in graphene.

PACS No: 03.65.Nk

مقدمه

با توجه به افزایش روزافزون تقاضای انرژی، مدیریت گرمای تولید شده در ادوات نانوالکترونیک، در سال‌های اخیر مورد توجه قرار گرفته است [۱]. اثر ترموالکتریک با تبدیل مستقیم اختلاف دما به ولتاژ الکتریکی می‌تواند برای تبدیل گرمای اتلافی به انرژی مفید، بسیار کارآمد باشد [۲]. تولید ولتاژ الکتریکی با قرار دادن رسانا در گرادیان دما، اثر سیبک نام دارد[۳] و بازده‌ی آن توسط ضریب سیبک بیان می‌شود، پارامترهای تعیین کننده ضریب سیبک نرخ پراکندگی و چگالی الکترون‌های رسانشی می‌باشد. در مواد دوبعدی نشان داده شده است که جریان دره و اسپین می‌تواند ایجاد شود[٤].

در این میان، گرافین به دلیل خواص الکترونیکی جالب مانند طیف انرژی خطی و دارا بودن الکترونهای دیراک بدون جرم و با سرعت بالا نامزدی عالی برای کاربردهای ترموالکتریک به شمار می‌رود. تلاشهای زیادی برای تولید جریان ترموالکتریک دره و اسپین خالص بدون ترابرد بار در مواد دو بعدی صورت گرفته است. به عنوان مثال، ترابرد ترموالکتریک وابسته به اسپین و دره در یک پیوندگاه سیلیسینی مغناطیسی بررسی شده است که در آن علامت جریان‌های دره و اسپین خالص با میدان الکتریکی خارجی و میدان تبادلی قابل کنترل بود. اما این پدیده در دمای پایین ۲۰۰ کلوین روی داد که انجام آن از نظر تجربی مشکل

بود[۵]. علاوه بر این، اخیراً جریان ترموالکتریک دره و اسپین بدون ترابرد بار که کالریترونیک اسپین و دره نام دارد، در یک سیستم اتصال نقطه کوانتومی به کمک بایاس دما و ولتاژ انجام شد[۶]. در این مقاله قصد داریم بر خلاف روش‌های قبلی، جریان ترموالکتریک دره و اسپین بدون ترابرد بار را در گرافین کشیده شده در حضور میدان تبادلی و بدون بایاس ولتاژ بررسی کنیم. همچنین ما پدیده کالریترونیک اسپین و دره را در دمای اتاق مشاهده کردیم که می‌تواند نقطه شروعی برای کارهای تجربی باشد.

تئوری و روش محاسباتی

ما یک تک لایه گرافین با یک ناحیه تحت کشش مطابق شکل ۱ در نظر می‌گیریم. در تمام محاسبات طول ناحیه تحت کشش $L = ۲۰۰\text{nm}$ می‌باشد. برای گرافین تحت کشش هامیلتونی دیراک مؤثر با انرژی پایین نزدیک دره‌های K و K' بصورت زیر می‌باشد[۷].

$$H = v_x(\hbar k_x + e\tau A_x)\sigma_x + \hbar v_y k_y \sigma_y - \sigma h \qquad (۱)$$

در اینجا $\tau = +1(-1)$ متناظر با دره‌های $K(K')$ می‌باشد و σ_i $(i = x, y)$ ماتریس‌های پائولی شبه اسپینی هستند و $\sigma = \pm ۱$ متناظر با اندیس‌های اسپینی بالا و پایین می‌باشد. در اینجا A_x پتانسیل برداری مؤثر در راستای x می باشد که بخاطر کشش در دو دره‌ی K و K' ایجاد می‌شود. در اینجا این پتانسیل برداری بصورت زیر محاسبه می‌شود.

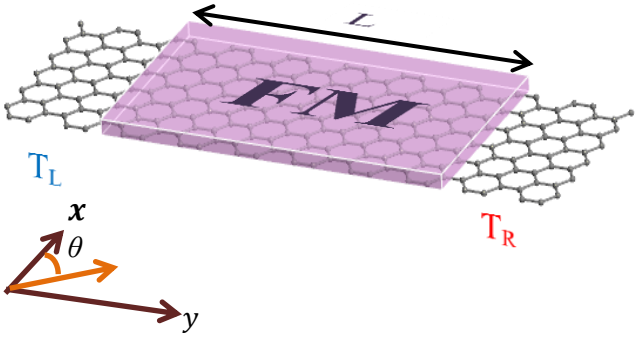
$$ev_x A_x = \frac{3}{4}\beta t_0\left(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}\right) \qquad (۲)$$

که در آن $t_0 = ۲/۷eV$ پارامتر جهش و $\beta = ۳/۷\ eV$ یک پارامتر ثابت است. ε_{xx} و ε_{yy} مؤلفه‌های تانسور کشش هستند که بصورت زیر می‌باشند[۷].

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon(\cos^2\theta - \upsilon\sin^2\theta) \qquad (۳)$$

$$\varepsilon_{yy} = \varepsilon(\sin^2\theta - \upsilon\cos^2\theta) \qquad (۴)$$

در اینجا θ زاویه بین راستای کشش و امتداد خط موازی راستای زیگزاگ می‌باشد، بطوری که برای کشش در امتداد زیگزاگ



شکل۱: یک پیوندگاه گرافینی نرمال/ کشیده شده/ نرمال بطول L که در ناحیه‌ی تحت کشش میدان تبادلی از طریق اثر مجاورت با یک فرومغناطیس القاء می‌شود. لیدهای راست(چپ) در دمای $T_{R(L)}$ می‌باشند.

$\theta = ۰$ و در امتداد آرمیچر $\theta = \frac{\pi}{2}$ است. همچنین، $\upsilon = ۰/۱۶$ ضریب پواسون در گرافین و ε قدرت کشش می‌باشد.ترم آخر در معادله (۱) میدان تبادلی است که در اینجا بصورت اثر مجاورت توسط زیر لایه فرومغناطیس به سیستم القاء می‌شود که درآن h قدرت میدان تبادلی است. با قطری کردن هامیلتونی معادله (۱) ویژه مقادیر انرژی بصورت زیر محاسبه می‌شود.

$$E = \pm\sqrt{(\hbar v_F k_x)^2 + (\hbar v_F k_y)^2}$$
$$= \pm\sqrt{(\hbar v_x q_x + e\tau A_x v_x)^2 + (\hbar\tau v_x q_y)^2} - \sigma h \qquad (۵)$$

که در آن

$$q_y = \sqrt{(\mathrm{E} + \sigma h)^2 - (\hbar v_x q_x + e\tau A_x v_x)^2} \qquad (۶)$$

توابع موج الکترونی در راستای انتشار y برای دره τ و اسپین σ در سه ناحیه نرمال / کشیده شده/ نرمال بصورت زیر توصیف می‌شود.

$$\psi_I = e^{ik_y y}\begin{pmatrix}1\\ e^{i\phi}\end{pmatrix} + r_{\tau\sigma}e^{-ik_y y}\begin{pmatrix}1\\ e^{-i\phi}\end{pmatrix} \quad x<0$$
$$\psi_{II} = A_{\tau\sigma}e^{iq_y y}\begin{pmatrix}1\\ e^{i\varphi}\end{pmatrix} + B_{\tau\sigma}e^{-iq_y y}\begin{pmatrix}1\\ e^{-i\varphi}\end{pmatrix} \quad 0<x<L \qquad (۷)$$
$$\psi_{III} = t_{\tau\sigma}e^{ik_y y}\begin{pmatrix}1\\ e^{i\phi}\end{pmatrix} \quad x>L$$

همچنین شرط پایستگی تکانه در این راستا بصورت زیر است.

$$\hbar v_F k_x = E\cos\phi \qquad (۸)$$

$$\hbar v_x q_x + e\tau A_x v_x = E\cos\varphi \qquad (۹)$$

در اینجا v_F سرعت فرمی الکترون، ϕ و φ به ترتیب زاویه فرود الکترون در ناحیه نرمال و در ناحیه کشش شده می‌باشد. در اینجا با استفاده از شرط پایستگی تابع موج در $y = L, y = ۰$ و شرط پایستگی تکانه ضریب عبور $t_{\tau\sigma}$ بدست می‌آید. در اینجا با بکاربردن ضریب عبور، جریان و ضریب سی‌بک اسپین- دره بصورت زیر قابل محاسبه است[۵].

$$I_{\tau\sigma} = \frac{e}{h}\int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{|E|}{\hbar v_F}\int_0^{\pi} d\phi \sin(\phi)|t_{\tau\sigma}|^2 \left(f_L(E) - f_R(E)\right) \qquad (۱۰)$$

$$S_{\tau\sigma} = -\frac{1}{eT}\frac{L_{\tau\sigma,1}}{L_{\tau\sigma,0}} \qquad (۱۱)$$

$$L_{\tau\sigma,n} = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{|E|}{\hbar v_F}(E - E_F)^n \int_0^{\pi} d\phi \sin(\phi)|t_{\tau\sigma}|^2 (-\partial_E f(E)) \qquad (۱۲)$$

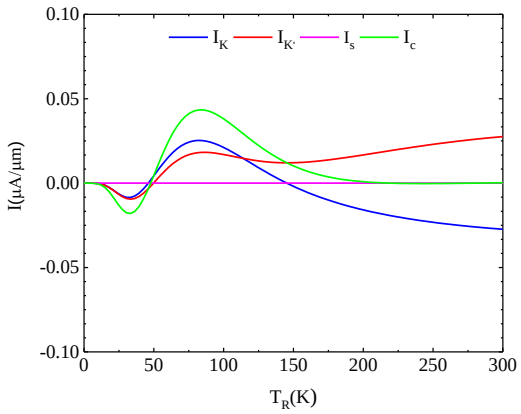
معادله () با فرض پاسخ خطی $T_R \approx T_L = T$ بدست آمده است. در اینجا $f_\alpha(\alpha = L, R)$ تابع توزیع فرمی دیراک برای الکترود راست و چپ بصورت زیر می‌باشد که در آن $T_{L(R)}$ دمای الکترود راست(چپ)، E_F و k_B به ترتیب انرژی فرمی و ثابت بولتزمن هستند.

$$f_\alpha(E) = \frac{1}{1 + e^{(\frac{E - E_F}{k_B T})}} \quad \alpha = L, R \qquad (۱۳)$$

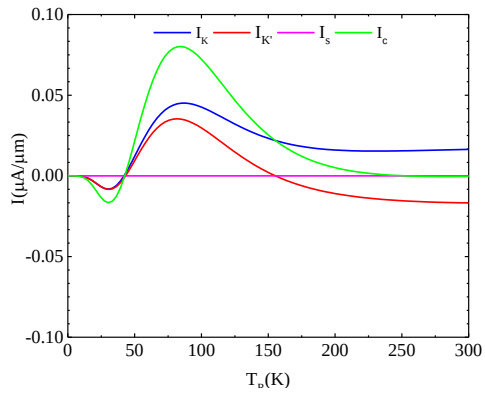
$I_\sigma = I_{K\sigma} + I_{K'\sigma}$ و $I_\tau = I_{\tau\uparrow} + I\tau_\downarrow$ به ترتیب جریان اسپین σ و جریان دره τ می‌باشد.همچنین $I_c = I_\uparrow + I_\downarrow$ ، $I_V = I_K - I_{K'}$ ، $I_s = I_\uparrow - I_\downarrow$ به ترتیب جریان بار،جریان دره وجریان اسپینی می‌باشد.

نتایج و بحث

در تمام محاسبات قدرت کشش $\varepsilon = ۰/۰۱$ و اختلاف دما بین دو لید راست و چپ $\Delta T = T_L - T_R$ برابر ۱۰ کلوین می‌باشد. در ابتدا در غیاب میدان تبادلی، اثر کشش را بر روی جریان ترموالکتریک دره و اسپین، بررسی می‌کنیم. همانطور که در شکل ۱- الف مشاهده می‌کنید با ایجاد گرادیان دمایی از طریق ثابت نگه داشتن دمای لید چپ به همراه تغییر دمای لید راست و همچنین در حضور کشش در راستای زیگزاگ جریان دره‌ای خالص K و K' در دو جهت پادموازی در محدوده ۳۰۰ کلوین (دمای اتاق) عبور می‌کند بطوری که جریان بار صفر است($I_c = ۰$) به این پدیده کالریترونیک دره گفته می‌شود.. همچنین به دلیل نبود میدان تبادلی در تمامی بازه‌های دمایی $I_s = ۰$ است. با اعمال کشش در راستای آرمیچر شکل ۱- ب جهت جریان خالص در دو دره K و K' تغییر می‌کند. بنابراین، جهت جریان دره‌ی خالص در محدوده دمای اتاق با تغییر راستای کشش قابل تنظیم است.



(الف)

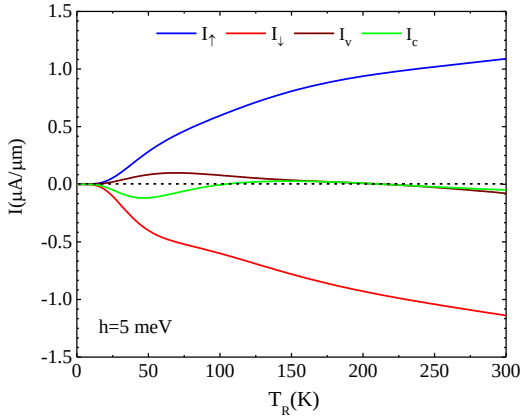


(ب)

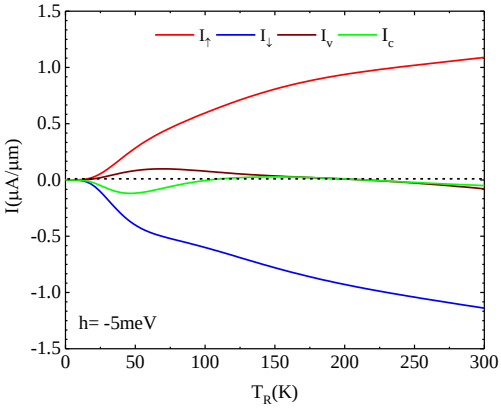
شکل۲: جریان ترموالکتریک وابسته به دو دره K و K' ، جریان اسپینی و جریان بار برحسب تغییر دمای لید راست در غیاب میدان تبادلی $h = ۰$ و در حضور کشش در راستای الف) زیگزاگ ب) آرمیچر

همانطور که در شکل ۳- الف مشاهده می‌شود، در حضور میدان تبادلی با قدرت $h = ۵\ meV$ و همچنین کشش در راستای

آرمیچر، جریان ترموالکتریک اسپینی بالا و پایین، جریان دره و بار برحسب دمای لید راست رسم شده است. با توجه به شکل در محدوده دمایی ۲۰۰ کلوین تنها جریان اسپینی بالا و پایین از سیستم عبور می‌کند بطوریکه جریان بار و دره در این محدوده صفر است. به این پدیده کالریترونیک اسپینی گفته می‌شود. با تغییر راستای میدان تبادلی در امتداد محور z از $+\hat{e}_z$ به $-\hat{e}_z$ در شکل ۳ – ب جهت جریان اسپینی بالا و پایین تغییر می‌کند. بنابراین، راستای جریان اسپینی بالا و پایین با تغییر راستای میدان تبادلی قابل کنترل است. پدیده کالریترونیک اسپین و دره می‌تواند در ادوات ترموالکتریکی کارآمد کاربرد زیادی داشته باشد.



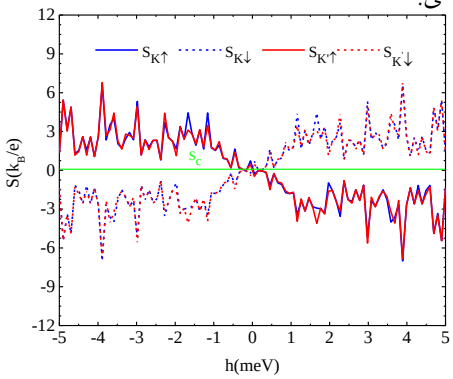
(الف)



(ب)

شکل ۳ : جریان اسپینی بالا و پایین، دره و بار بر حسب دمای لید راست برای کشش در راستای آرمیچر در حضور میدان تبادلی الف) $h = ۵\ meV$ ب) $h = -۵\ meV$

شکل ٤ ضریب سی‌بک دره – اسپین و بار را در حضورکشش در راستای آرمیچر و در دمای اتاق ۳۰۰ کلوین بر حسب میدان تبادلی نشان می‌دهد. همانطور که در شکل مشاهده می‌شود با تغییر راستای میدان تبادلی علامت ضریب سی‌بک تغییر میکند و ضریب سی‌بک دره – اسپین بر حسب h تابعی فرد است. همچنین در این شکل ضریب سی‌بک بار در تمامی محدوده میدان تبادلی صفر می‌باشد.



شکل ٤ : ضریب سی‌بک دره – اسپین و بار بر حسب قدرت میدان تبادلی در حضور کشش در راستای آرمیچر

نتیجه‌گیری

ما نشان دادیم که در حضور گرادیان دمایی سیلسین کشیده شده می‌تواند در غیاب میدان تبادلی تنها جریان دره‌ای خالص را از خود عبور می‌کند. بطوری که جهت جریان در دو دره K و K' می‌تواند با تغییر راستای کشش کنترل شود.. علاوه بر این، در حضور میدان تبادلی برای سیسیلین تحت کشش در راستای آرمیچر تنها جریان اسپینی خالص بالا و پایین عبور می‌کند. که راستای جریان اسپینی بالا و پایین با تغییر راستای میدان تبادلی کنترل می‌شود.

مراجع

[1]Y. Dubi and M. Di Ventra, "Colloquium: Heat flow and thermoelectricity in atomic and molecular junctions," *Reviews of Modern Physics*, vol. 83, p. 131, 2011.

[2] D. Parker and D. J. Singh, "Potential thermoelectric performance from optimization of hole-doped Bi 2 Se 3," *Physical Review X*, vol. 1, p. 021005, 2011.

[3] K. Uchida, S. Takahashi, K. Harii, J. Ieda, W. Koshibae, K. Ando, *et al.*, "Observation of the spin Seebeck effect," *Nature*, vol. 455, pp. 778-781, 2008.

[4] A. Rycerz, J. Tworzydło, and C. Beenakker, "Valley filter and valley valve in graphene," *Nature Physics*, vol. 3, pp. 172-175, 2007..

[5] Z. P. Niu and S. Dong, "Valley and spin thermoelectric transport in ferromagnetic silicene junctions," *Applied Physics Letters*, vol. 104, p. 202401, 2014.

[6] X. Chen, L. Zhang, and H. Guo, "Valley caloritronics and its realization by graphene nanoribbons," *Physical Review B*, vol. 92, p. 155427, 2015.

[7] Z. Khatibi, H. Rostami, and R. Asgari, "Valley polarized transport in a strained graphene based Corbino disc," *Physical Review B*, vol. 88, p. 195426, 2013.