

آثار قطبش اسپینی روی رفتار فرکانسی پذیرفتاری باری نانولوله ها و صفحات شبه گرافنی

رضانیا ، حامد¹؛ ناصری، یوسف²

¹دانشکده علوم دانشگاه رازی ، باغ ابریشم ، کرمانشاه

²گروه فیزیک، دانشگاه رازی، کرمانشاه

چکیده

در این مقاله می‌خواهیم با استفاده از محاسبه تابع گرین و تحلیل و بررسی رفتار فرکانسی تابع پذیرفتاری باری در محیط سیستم‌های نانومتری، صفحه و نانولوله ساختارهای شبه گرافنی در حضور نظم مغناطیسی بلندبرد بر حسب تغییرات قطبیدگی اسپین پردازیم. تقریب پاسخ خطی را برای محاسبه تابع پذیرفتاری باری بر حسب تابع همبستگی چگالی بار-چگالی بار بکار می‌گیریم. قله های تیز این تابع نشان دهنده ظهور برانگیختگی جمعی پلاسمونی موجود در دستگاه نانومتری می-باشد. ما قصد داریم اثرات میزان قطبیدگی اسپین و دما را روی مکان‌های این قله‌ها و همچنین شدت آنها را در جزئیات بررسی کنیم. محاسبات برای قطرهای متنوع نانولوله های شبه گرافنی آرمچیر انجام می شود.

The effects of spin polarization on frequency behavior the charge suseptibility of Graphene – like structures nanotube and nano sheet

Rezania, Hamed¹; Naseri, Yousef²

¹ Department of Physics, University of Kermanshah, Kermanshah

² Department of Physics, Razi University, Kermanshah

Abstract

In this article , we intend to investigate frequency behavior of change response function of Graphene - like structures sheet and nano tubes using green's function approach . This behavior is studied in the presence of long range magnetic ordering . Also the effect of the variation of spin polarisation on the frequency behavior of charge response function is analysed . Linear response theory has been implemented to calculate change response function in terms of charge-charge correlation function . Sharp peaks in the charge response function is a criterion of collective excitations , namely plasmons , of nano material systems . We intend to study the effects of the spin polarization and temprature on the positions and intensities of peaks,in details . Furthermore the calculatiens is performed for various diameters and configuration of Graphene-like structures nono tube.

است[6].تابع پاسخ باری برای گرافن گافدار و گرافن در حضور

میدان مغناطیسی مطالعه شده است[7].

فرمالیسم نظری

قطبش اسپینی سیستم گرافن گافدار که با وابستگی اسپینی پتانسیل شیمیایی مشخص می شود را در نظر می گیریم $\mu_{\sigma} = \uparrow(\downarrow)$ ، بعنوان مثال توسط الکتروود فرومغناطیس در بالای صفحه گرافن چنین قطبشی را می توان تزریق کرد.الکترون های غیربرهمکنشی دینامیکی روی شبکه لانه زنبوری ساختار گرافن گاف دار می تواند توسط مدل تنگ بست با پارامتر گاف Δ توصیف شود [8,9,10].

مقدمه

گرافن یک مفهوم جدید سیستم الکترونی دوبعدی است که علایق زیادی را بخاطر فیزیک جدید و بالقوه اش بعنوان یک ماده جدید برای فناوری های الکتریکی جلب کرده است[1]. مشاهدات اولیه ، اثر میدان تک قطبی[2] و اثر عدد صحیح فرد هال [3]تحقیق های شگرفی را روی ساختار الکترونیکی گرافن تحریک کرده است. عامل ساختار ایستایی در بردار موج فرمی که طول استتار توماس- فرمی را می دهد برای انتقال خواص گرافن دو بعدی اهمیت دارد[4,5]. در مورد گرافن بدون ناخالصی در دمای صفر ، قطبش پذیری توسط گزنالس و همکارانش کشف شده

در اینجا σ درجه آزادی اسپین الکترون است. سهم الکترونها با $\sigma = \uparrow$ متفاوت با الکترون های با $\sigma = \downarrow$ است. همچنین A مساحت نانوساختار نمونه و $\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta}$ فرکانس ماتسویبارای بوزونی که در آن β وارون دمای تعادلی و برابر $\frac{1}{k_B T}$ است. عناصر تابع گرین غیر برهمکنشی حل شده توسط ماتسویبارا بصورت زیر معرفی می شود.

$$\begin{aligned} G_{AA,\sigma}^{(0)}(k, \tau) &= -\langle T(a_{k,\sigma}(\tau) a_{k,\sigma}^\dagger(0)) \rangle \\ G_{AB,\sigma}^{(0)}(k, \tau) &= -\langle T(a_{k,\sigma}(\tau) b_{k,\sigma}^\dagger(0)) \rangle \\ G_{BA,\sigma}^{(0)}(k, \tau) &= -\langle T(b_{k,\sigma}(\tau) a_{k,\sigma}^\dagger(0)) \rangle \\ G_{BB,\sigma}^{(0)}(k, \tau) &= -\langle T(b_{k,\sigma}(\tau) b_{k,\sigma}^\dagger(0)) \rangle \end{aligned} \quad (5)$$

تبدیلات فوریه هریک از عناصر تابع گرین فوق توسط رابطه زیر بدست می آید

$$G_{\alpha\beta,\sigma}^{(0)}(k, i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} G_{\alpha\beta,\sigma}^{(0)}(k, \tau) \quad , \quad \alpha, \beta = A, B \quad (6)$$

در اینجا $\omega_m = \frac{(2m+1)\pi}{\beta}$ فرکانس ماتسویبارای فرمیونی است. پس از برخی محاسبات ریاضی، عبارت زیر برای تبدیلات فوریه تابع گرین ماتسویبارای غیربرهمکنشی در بیان فوریه بدست می آید.

$$G_{\alpha\beta,\sigma}^{(0)}(k, i\omega_n) = \sum_{j=\pm} \frac{c_j^{\alpha\beta}(k)}{i\omega_n - E_j(k) + \mu_\sigma} \quad (7)$$

α, β مربوط به هر کدام از پایه های اتمی شبکه لانه زنبوری و $E_j(k)$ ساختار نواری شبه گرافن گافدار است. همچنین ضرایب $c_j^{\alpha\beta}(k)$ بصورت زیر داده می شوند.

$$\begin{aligned} c_{\pm}^{AA}(k) &= \frac{1}{1 + \frac{|\epsilon_k|^2}{E_{\pm}(k) + \Delta}} \\ c_{\pm}^{AA}(k) &= \frac{|\epsilon_k|^2}{(E_{\pm}(k) + \Delta)^2 \left(1 + \frac{|\epsilon_k|^2}{E_{\pm}(k) + \Delta}\right)} \\ c_{\pm}^{AB}(k) &= \frac{\epsilon_k^*}{(E_{\pm}(k) + \Delta) \left(1 + \frac{|\epsilon_k|^2}{E_{\pm}(k) + \Delta}\right)} \end{aligned} \quad (8)$$

برای نوشتن پاسخ باری، در بخش عناصر ماتریسی تابع گرین غیربرهمکنشی، قضیه ویک بکار برده شده است. هر یک از عناصر ماتریسی تابع پاسخ باری یعنی $\chi_{\alpha\beta}$ می تواند از بخش های عناصر تابع گرین حاصل و بصورت زیر بیان شود.

$$\chi_{\alpha\beta}^{(0)}(q, \tau) = -\frac{1}{N} \sum_k G_{\alpha\beta}^{(0)}(k+q, -\tau) G_{\beta\alpha}^{(0)}(k, \tau) \quad (9)$$

$$\begin{aligned} H &= -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} + b_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma}) + \epsilon_a \sum_{i,\sigma} a_{i,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma} \\ &\quad + \epsilon_b \sum_{i,\sigma} b_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} \\ &\quad - \sum_{i,\sigma} \mu_\sigma (a_{i,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma} + b_{i,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma}) \\ \epsilon_a &= -\epsilon_b = \Delta \end{aligned} \quad (1)$$

در اینجا $a_{i,\sigma}(b_{j,\sigma})$ نشان دهنده نابودی الکترون با اسپین σ روی زیرشبکه $A(B)$ در سلول واحد i و $t \approx 2.9 \text{ eV}$ به انتگرال جهش نزدیکترین همسایه اشاره دارد. جمع روی $\langle i,j \rangle$ در معادله 1 روی همه همسایه های نزدیک متمایز انجام می شود. همچنین $\epsilon_a(\epsilon_b)$ انرژی درون سایتی الکترون روی زیرشبکه $A(B)$ است. با تبدیلات فوریه عملگرهای الکترونی هامیلتونی در معادله 1 در تقریب نزدیکترین همسایه به صورت زیر است.

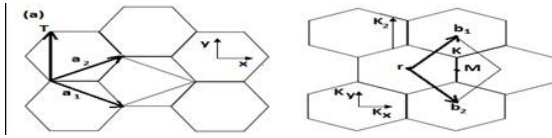
$$H = \sum_{k,\sigma} (\epsilon_k a_{k,\sigma} b_{k,\sigma} + \epsilon_k^* b_{k,\sigma} a_{k,\sigma} + \Delta a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} - \Delta b_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma} - \mu_\sigma (a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} + b_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma})) \quad (2)$$

که $\epsilon_k = 1 + \cos(ak_x/2) \exp(-\frac{iak_y \sqrt{3}}{2})$ و در اینجا k_x و k_y متعلق به ناحیه اول بریلوئن شبکه لانه زنبوری است. نظریه پاسخ خطی تابع پاسخ باری غیربرهمکنشی (χ^0) را براساس تصحیح تابع از عملگرهای چگالی-چگالی (ρ) بصورت زیر می دهد.

$$\begin{aligned} \chi^0(q, i\omega_n) &= -\frac{1}{A} \sum_{\sigma} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T(\rho^\sigma(q, \tau) \rho^\sigma(-q, 0)) \rangle, \\ \rho^\sigma(q) &= \frac{1}{N} \sum_k (a_{k+q,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} + b_{k+q,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma}) \end{aligned} \quad (3)$$

N تعداد سلول واحد در شبکه لانه زنبوری می باشد. T عملگر مرتب کننده زمانی و τ زمان موهومی است که نخستین بار توسط ماتسویبارا پیشنهاد شد. پس از جایگزینی عملگر چگالی الکترونی درون تصحیحات تابع همبستگی عبارت زیر را برای χ^0 بدست می آوریم.

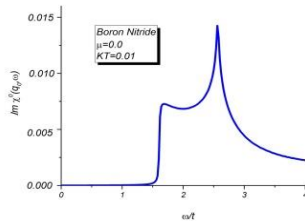
$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta}^{(0)}(q, i\omega_n) &= \sum_{\sigma} \frac{1}{N\beta} \sum_{k,m} G_{\alpha\beta,\sigma}^{(0)}(k+q, i\omega_m) G_{\beta\alpha,\sigma}^{(0)}(k, i\omega_n + i\omega_m) \end{aligned} \quad (4)$$



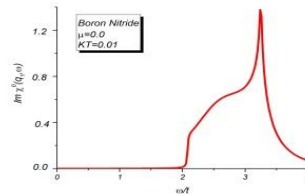
شکل 1: تصاویر سمت چپ، شبکه مستقیم، و تصاویر سمت راست، منطقه اول بریلوئن مربوط به نانو لوله آرمچیر را نمایش می دهند.

نتیجه گیری

در این بخش نتایج عددی بدست آمده را برای پذیرفتاری باری ساختار شبه گرافن گافدار ارائه می دهیم. این پذیرفتاری ها مرتبط با بخش موهومی و دینامیکی تابع همبستگی بین عملگرهای باری است. در زیر رفتار فرکانسی پذیرفتاری دینامیکی برای دو عدد موج ثابت $q = q_0$ و $q = q_1$ مورد مطالعه قرار گرفته است. موقعیت نقطه q_0 با دامنه $|q_0| = \frac{1}{10\sqrt{3}a}$ و زاویه قطبی $\frac{\pi}{6}$ در ناحیه بریلوئن می باشد. همچنین q_1 روی محور k_y با دامنه $|q_1| = \frac{2\pi}{3a}$ قرار دارد.



شکل 2: بخش موهومی پذیرفتاری باری نانوصفحه برن نیتريد با عامل بهنجارش انرژی ω/t (که t همان انتگرال جهش است و دارای بعد انرژی می باشد) در بردار موج q_0 با دامنه $|q_0| = \frac{1}{10\sqrt{3}a}$ و زاویه $\frac{\pi}{6}$. دمای تعادلی $\frac{kT}{t} = 0.01$ فرض شده است.



شکل 3: بخش موهومی پذیرفتاری باری نانوصفحه برن نیتريد با عامل بهنجارش انرژی ω/t (که t همان انتگرال جهش است و دارای بعد انرژی می باشد) در بردار موج q_1 با دامنه $|q_1| = \frac{2\pi}{3a}$. دمای تعادلی $\frac{kT}{t} = 0.01$ فرض شده است.

نمودار قسمت موهومی تابع پاسخ نابهرمکنشی بر حسب فرکانس در دو بردار موج دلخواه رسم شده است.

به ازای هر دو بردار موج گاف وجود دارد و یک قله تیز در اطراف فرکانس 3 ایجاد شده است با این تفاوت که در بردار موج q_1

با جایگزینی معادله 7 در معادله 9 و با انجام جمع فرکانسی ماتسوبارا روی انرژی ماتسوبارای فرمیونی ω_m عبارت زیر برای عناصر تانسور پذیرفتاری دینامیکی بدست می آید.

$$\chi_{\alpha\beta}^{(0)}(q, i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_{k, l, j = \pm} \left(c_j^{\alpha\beta}(k) c_i^{\beta\alpha}(k+q) \times \frac{n_F(\xi_{i,k+q}^{\sigma}) - n_F(\xi_{j,k}^{\sigma})}{i\omega_n + \xi_{i,k+q}^{\sigma} - \xi_{j,k}^{\sigma}} \right) \quad (10)$$

$\xi_{j,k}^{\sigma} \equiv E_j(k) - \mu^{\sigma}$

در اینجا $n_F(x) = \frac{1}{e^{\beta(x)} + 1}$ تابع توزیع فرمی دیراک است. پاسخ باری الکترون ها روی شبکه لانه زنبوری از جمع روی تمام عناصر پاسخ خطی حاصل می شود. وابستگی اسپینی پتانسیل شیمیایی μ^{σ} توسط شرط بهنجارش زیر تعیین می شود.

$$n^{\sigma} = \frac{1}{2N} \sum_{k, j} \frac{1}{e^{\beta(E_j(k) - \mu^{\sigma})} + 1} \quad (11)$$

که در آن n^{σ} اشغال الکترون ها با اسپین σ است. بمنظور تعیین μ^{σ} درجه قطبش پذیری اسپین را تعریف می نماییم. یعنی مغناطش $m = |n \uparrow - n \downarrow| / n$ و $n = n \uparrow + n \downarrow$ اشغال کل الکترون هاست. تابع پذیرفتاری موهومی مفهوم فیزیکی ندارد به همین خاطر از تابع پذیرفتاری تاخیری استفاده می نماییم. و در نهایت تابع پذیرفتاری تاخیری مورد نظر ما بصورت زیر می باشد.

$$\chi^{\text{ret}}(q, \omega) = \lim_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+} \chi(q, i\omega_n) \quad (12)$$

محاسبه منطقه اول بریلوئن نانولوله های آرمچیر

با رول کردن صفحه گرافن می توان به ساختار متفاوتی به نام نانو لوله گرافنی دست یافت. مطابق شکل با دوران صفحه برن حول محور y به نانو لوله آرمچیر می رسیم.

در نتیجه این دوران بردار موج در راستای محور x ، $(\vec{k}_x)$ کوانتیده خواهد شد و روابط مربوط به محاسبه منطقه اول بریلوئن نانو لوله آرمچیر به صورت زیر می باشد:

$$L = a\sqrt{n^2 + m^2} + n.m \quad \text{محیط نانو لوله}$$

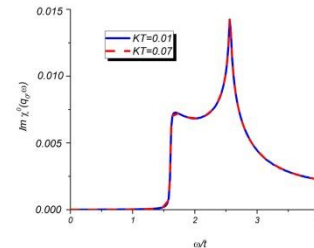
$$\text{armchair: } n = m \rightarrow L_{\text{arm}} = a n \sqrt{3}$$

$$e^{ik_x L} = e^{2\pi i q} \rightarrow k_x L = 2\pi q \rightarrow k_{x \text{ arm}} = \frac{2\pi q}{a n \sqrt{3}}$$

با توجه به مرزهای منطقه اول بریلوئن

$$\begin{aligned} -\frac{2\pi}{\sqrt{3}} \leq k_x \leq \frac{2\pi}{\sqrt{3}} &\rightarrow -\frac{2\pi}{\sqrt{3}} \leq \frac{2\pi q}{\sqrt{3}n} \leq \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \\ &\rightarrow -n \leq q \leq n \end{aligned}$$

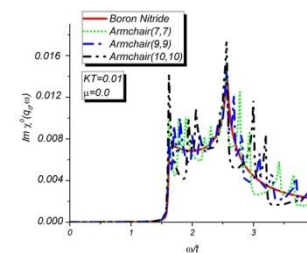
مقادیر قسمت موهومی تابع پاسخ بزرگتر است و نشان می‌دهد شدت پراکندگی ذرات پس از برخورد با صفحه برن نیتريد در این بردار موج بیشتر است.



شکل 4: نمودار تاثیر دما روی بخش موهومی پذیرفتاری باری نانوصفحه برن

نیتريد در بردار موج q_0 با دامنه $|q_0| = \frac{1}{10\sqrt{3}a}$.

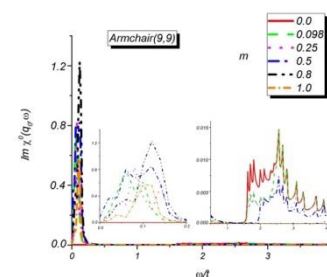
همان طور که ملاحظه می‌شود به دلیل گاف دار بودن صفحه برن نیتريد افزایش دما تاثیری بر روی سطح مقطع پراکندگی و مکان پیک های پلاسمونی ندارد.



شکل 5: نمودار تاثیر قطر نانولوله ی آرمچیر روی بخش موهومی پذیرفتاری

باری در بردار موج q_0 با دامنه $|q_0| = \frac{1}{10\sqrt{3}a}$.

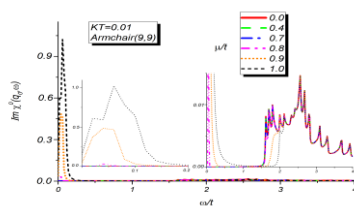
مشاهده می‌شود که پیک های پلاسمونی نانولوله آرمچیر دقیقا در ناحیه پیک های صفحه برن نیتريد واقع است.



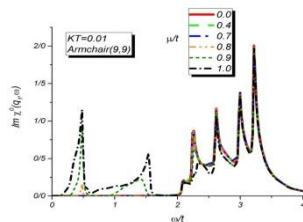
شکل 6: نمودار تاثیر مغناطش دستگاه روی بخش موهومی پذیرفتاری باری

نانولوله آرمچیر در بردار موج q_0 با دامنه $|q_0| = \frac{1}{10\sqrt{3}a}$.

با افزایش مغناطش سطح مقطع پراکندگی ذرات در فرکانس بالاتر کاسته می‌شود و در فرکانس های پایین یک مد تک ذره ای ایجاد می‌شود و با افزایش مغناطش سطح مقطع پراکندگی در فرکانس پایین افزایش می‌یابد .



شکل 7: بخش موهومی پذیرفتاری یاری نانولوله برن نیتريد با عامل بهنجارش انرژی ω/t (که t همان انتگرال جهش است و دارای بعد انرژی می باشد) برای مقادیر پتانسل شیمیایی μ/t در بردار موج q_0 با دامنه $|q_0| = \frac{1}{10\sqrt{3}a}$ و زاویه $\frac{\pi}{6}$ دمای تعادلی $\frac{kT}{t} = 0.01$ فرض شده است.



شکل 8: بخش موهومی پذیرفتاری یاری نانولوله برن نیتريد با عامل بهنجارش انرژی ω/t (که t همان انتگرال جهش است و دارای بعد انرژی می باشد) برای مقادیر پتانسل شیمیایی μ/t در بردار موج q_1 با دامنه $|q_1| = \frac{2\pi}{3a}$ دمای تعادلی $\frac{kT}{t} = 0.01$ فرض شده است.

تغییرات پتانسیل شیمیایی برای نانولوله آرمچیر با قطر 9 در دو بردار موج بررسی شده است. افزایش پتانسیل شیمیایی که در اثر تزریق الکترون ایجاد می شود تا مقادیر 0.7 الکترون ولت تاثیری روی پیک های تابع ندارد ، اما با افزایش میزان پتانسیل شیمیایی یک پیک پلاسمونی در فرکانس های پایین ایجاد می شود که ناشی از ظهور براگیختگی های جمعی در مقادیر بزرگتر پتانسیل شیمیایی می باشد. با افزایش پتانسیل شیمیایی شدت پراکندگی در فرکانس پایین (محل ایجاد پیک پلاسمونی) افزایش می یابد ولی تغییر چندانی روی پیک در فرکانس بالا اثر ایجاد نمی کند که نشان می دهد براگیختگی جمعی در فرکانس بالا مستقل از پتانسیل شیمیایی است.

مرجع ها

- [1] A.K. Geim and A.H. MacDonald, Phys. Today 60, 35 (2009).
- [2] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y.Zhang, S.V. Dubons, I.V. Grigorieva, and A.A. Firsov, Sci-525 ence 306, 666 (2004).
- [3] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H.L. Stormer, and P. Kim, Nature(2005) ..
- [4] S.A. Wolf, Science 294, 1488 (2001).
- [5] T. Stauber, J. Schliemann, and N.M. Peres, Phys. Rev. B 81, 085409 (2010).
- [6] V.K. Dugaev, V.I. Litvinov, and J. Barnas, Phys. Rev. B 74, 224438 (2006).
- [7] B. Uchoa et al., Phys. Rev. Lett. 101, 026805 (2008).
- [8] B. Uchoa et al., Phys. Rev. Lett. 101, 026805 (2008).
- [9] N.M.R. Peres, M.A.N. Araujo, and D. Bozi, Phys. Rev. B 70, 195122 (2004).
- [10] Y.-W. Son, M.L. Cohen, and S.G. Louie, Nature (Lond.) 444, 347 (2006).