

ترابرد اسپینی در یک نانونوار سیلیسینی ابرشبکه

فرهاد خوئینی*، زهرا جمعفرخانی، مریم خلخالی

گروه فیزیک، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران

دریافت: ۱۳۹۵/۰۳/۰۱ ویرایش نهایی: ۱۳۹۵/۱۲/۱۲ پذیرش: ۱۳۹۶/۰۲/۰۴

چکیده

در این مقاله در رهیافت تنگابست و به‌روش تابع گرین، ویژگی‌های ترابرد اسپینی در یک نانونوار سیلیسینی زیگزاگ که به دو الکترون نیم نامتناهی فلزی متصل شده است را در حضور میدان‌های الکتریکی، تبادلی و بی‌نظمی بررسی می‌نماییم. محاسبات ما نشان می‌دهد که در حضور میدان الکتریکی عمود بر ورقه سیلیسین و بی‌نظمی، گذار فاز فلز-نیم‌رسانا در سامانه رخ می‌دهد. همچنین با تغییر پهنایی از نوار که میدان الکتریکی به آن اعمال می‌شود، پهنای گاف انرژی قابل کنترل خواهد بود به طوری که با افزایش پهنای گاف نواری افزایش می‌یابد. افزون بر این، با اعمال بی‌نظمی، شاهد کاهش رسانش و افزایش پهنای گاف نواری خواهیم بود. می‌توان با کنترل پارامترهایی مانند پهنای مؤثر، غلظت بی‌نظمی، بزرگی میدان الکتریکی و تبادلی گاف اسپینی سامانه را کنترل نمود.

کلیدواژگان: نانونوار سیلیسینی، ابرشبکه، ترابرد اسپینی، مدل تنگابست، تابع گرین.

مقدمه

پس از موفقیت‌های چشمگیر در زمینه کاربردهای گرافین، توجه پژوهشگران به سمت مواد دوبعدی دیگر بیشتر شده است. سیلیسین، ورقه دوبعدی از اتم‌های سیلیکون با ساختار لانه‌زنبوری، یکی از این مواد دوبعدی است که سنتز شده است [۱، ۲]. به دو دلیل عملکرد سیلیسین بهتر از گرافین است نخست اینکه با فناوری مبتنی بر سیلیکون سازگار است، دوم اینکه گاف نواری قابل کنترل دارد [۳]. با توجه به بزرگی بودن شعاع یونی اتم سیلیکون و بلند بودن طول پیوند بین اتم‌های سیلیکون در سیلیسین نسبت به طول پیوند کربن در گرافین، برهم‌کنش $\pi-\pi$ سست‌تر شده و بر خلاف گرافین که صفحه‌ای کاملاً تخت است، منجر به شکل‌گیری ساختاری کمی خمیده در سیلیسین می‌شود. به‌علت همین شعاع یونی بزرگ‌تر در

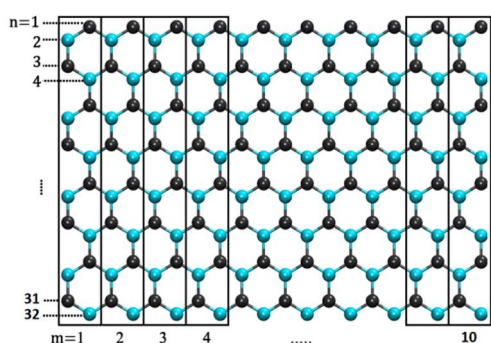
سیلیکون، انتظار می‌رود که هیبریداسیون در سیلیسین از نوع sp^3 باشد اما در واقع، در این نانوساختار، هیبریداسیون ویژه مخلوط sp^2 و sp^3 حاکم است [۴]. این موضوع سبب می‌شود که مقدار خمیدگی سیلیسین بین گرافین تخت و ساختارهای خیلی خمیده sp^3 کم باشد. این ساختار از دو زیرشبکه براوه A و B تشکیل شده است که به‌دلیل خمیدگی آن، هر کدام از زیر شبکه‌هایش روی یک صفحه مجزا قرار دارند. چنین خمیدگی سبب می‌شود که ویژگی‌های الکتریکی این نوع ساختارها قابل تنظیم باشد. با اعمال میدان الکتریکی عمود بر صفحات، E_z ، بین زیرشبکه‌های A و B اختلاف پتانسیل $2\ell E_z$ ایجاد می‌شود. این اختلاف پتانسیل سبب باز شدن گاف نواری قابل کنترل در این ساختار می‌شود [۴-۸].

* نویسنده مسئول: khoeini@znu.ac.ir

آنها بدون گاف انرژی است بسیار مهم بوده و کاربرد آنها در صنعت الکترونیک را سهل تر می کند [۱۲، ۱۳].

توصیف مدل و محاسبات عددی

سامانه مورد نظر یک نانونوار سیلیسینی زیگزاگ با پهنا $N=32$ اتم است که به دو الکترون نیم نامتناهی از همان نوع متصل است. شکل ۱ طرحی از سامانه مورد بررسی را نشان می دهد



شکل ۱. طرحی از یک نانو نوار سیلیسینی زیگزاگ با پهنا ۳۲ اتم، که هر اتم با شاخص (n, m) معرفی می شود.

حال هامیلتونی سیلیسین در مدل تنگابست با در نظر گرفتن برهم کنش بین همسایه های اول و دوم را به صورت زیر می توان نوشت [۱۴]

$$H = -t \sum_{\langle i, j \rangle, \alpha} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + i \frac{\lambda_{SO}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle i, j \rangle\rangle, \alpha, \beta} v_{ij} c_{i\alpha}^\dagger (\sigma_z)_{\alpha\beta} c_{j\beta} + M_z \sum_{i, \alpha} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_z c_{i\alpha} + e\ell E_z \sum_{i, \alpha} \xi_i c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha} + H. c. \quad (1)$$

که در آن $(c_{i\alpha}^\dagger)c_{i\alpha}$ عملگر نابودی (خلق) یک الکترون با اسپین α ، که می تواند \uparrow یا \downarrow باشد، در نقطه \vec{R}_i از شبکه است. نماد $\langle ij \rangle$ و $\langle\langle ij \rangle\rangle$ به ترتیب بیانگر اولین و دومین همسایه ها است. جمله اول، انرژی جهش بین همسایه های اول با مقدار $t = 1.6 \text{ eV}$ است [۱۴]، جمله دوم برهم کنش اسپین-مدار ذاتی (SOC) بین همسایه های دوم را نشان می دهد. در این جمله $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ ماتریس های پائولی هستند و قدرت

تفاوت مهم دیگر که از این خمیدگی ناشی می شود برهم کنش اسپین-مدار نسبتاً بزرگی است که آن را به سامانه ای برای مطالعه اثرهای کوانتومی از نوع عایق های توپولوژیکی تبدیل می کند [۹].

در سال ۲۰۰۵ برای اولین بار اثر هال اسپینی برای گرافین به طور نظری پیشنهاد شد [۱۰]. در گرافین، قدرت اسپین-مدار، یک گاف نواری در نقطه دیراک ایجاد می کند. این موضوع باعث می شود که سامانه به عایق توپولوژیکی تبدیل شود. چون قدرت اسپین-مدار سیلیسین نسبت به گرافین بسیار بزرگتر است بنابراین، در این موضوع، سیلیسین اهمیت بیشتری نسبت به گرافین پیدا می کند.

محاسبات ساختار نواری نشان می دهد که سیلیسین در تقریب همسایه های اول یک نیم رسانای بدون گاف انرژی است و حامل های بار در آن فرمیون های دیراک بدون جرم هستند. این امر منجر به تحرک پذیری بسیار بالای آنها شده و در ساخت ادوات الکترونیکی مفید خواهد بود [۱۱].

در این مقاله، سامانه مورد بررسی، یک نانونوار زیگزاگ سیلیسینی است که ساختار نواری، عبوردهی الکترونی، چگالی حالت های الکترون، و قطبش اسپینی را با استفاده از روش تابع گرین و مدل تنگابست به دست می آوریم و به بررسی تأثیر اعمال میدان الکتریکی بر ویژگی های تراپردی نانونوارهای با پهناهای گوناگون می پردازیم. در پایان به بررسی اثر نقص از دو نوع تهی جایی و بی نظمی در ساختار نانونوار، بر ویژگی الکترونی آن می پردازیم. خواهیم دید که ایجاد نقص، سبب ایجاد گاف انرژی در طیف انرژی آن می شود و با افزایش تعداد نقص و همچنین تغییر مکان آن به سمت لبه نانونوار، گاف انرژی افزایش می یابد. ایجاد گاف انرژی در چنین سامانه هایی که رسانندگی بالایی دارند و نوع خالص

$$\tilde{t}_i = [\mathbf{I} - \mathbf{t}_{i-1}\tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1}\mathbf{t}_{i-1}]^{-1}\tilde{t}_{i-1}^2 \quad 10$$

بنابراین تابع گرین سامانه به صورت زیر، به شکل بلوک قطری تعریف می‌شود:

$$\mathbf{G}_S(E) = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_S^\uparrow & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{G}_S^\downarrow \end{pmatrix} \quad 11$$

با داشتن تابع گرین برای هر مؤلفه اسپینی، می‌توان رسانش وابسته به اسپین را به دست آورد

$$\mathbf{G}^\alpha = \frac{e^2}{h} \text{Tr}[\mathbf{r}_L^\alpha \mathbf{G}_S^\alpha \mathbf{r}_R^\alpha \mathbf{G}_S^{\alpha\dagger}], \alpha = \uparrow, \quad 12$$

نتایج عددی

نخست با اعمال میدان الکتریکی عمود بر سامانه، ویژگی‌های ترابردی مانند ساختار نواری، چگالی حالت‌ها و رسانش اسپینی را با در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین-مدار به دست می‌آوریم.

شکل ۲ ساختار نواری نانونوار سیلیسینی زیگزاگ خالص را در حضور میدان‌های الکتریکی و تبادلی نشان می‌دهد. شدت میدان الکتریکی و تبادلی به ترتیب برابر $E_Z = 0.1 \frac{V}{\text{\AA}}$ و $M_Z = 4\lambda_{SO}$ است. نمودار ۲ الف ساختار نواری سامانه در نبود میدان الکتریکی، نمودار ۲ ب و پ ساختار نواری در حضور میدان الکتریکی اعمال شده به نیم‌پهنا و تمام‌پهنای نوار است.

مطابق شکل الف، سامانه برای هر حالت اسپینی رسانا است و نوارهای رسانش و ظرفیت یکدیگر را در نزدیک انرژی فرمی قطع نموده‌اند. به دلیل حضور میدان تبادلی برابر با $4\lambda_{SO}$ ، ساختار نواری حالت اسپین بالا برابر شدت میدان تبادلی به سمت انرژی‌های مثبت جابه‌جا شده است در حالی که برای حالت اسپین پایین جابه‌جایی ساختار نواری به سمت انرژی‌های منفی می‌باشد.

با مقایسه شکل‌های ۲b و ۲c می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش پهنایی از نوار که میدان الکتریکی به آن اعمال شده است گاف انرژی سامانه افزایش می‌یابد.

برهم‌کنش اسپین-مدار برابر $\lambda_{SO} = 3.9 \text{ meV}$ است [۱۴].

جمله سوم میدان تبادلی با شدت M_Z را نشان می‌دهد که در نتیجه مجاورت سیلیسین با یک فرومغناطیس، مانند رشد سیلیسین روی یک زیرلایه از جنس ماده فرومغناطیس به وجود می‌آید. و در پایان جمله آخر پتانسیلی است که در اثر اعمال میدان الکتریکی عمود بر سطح، E_Z ، بین دو زیرشبکه A و B به وجود می‌آید. $\xi_i = +1$ برای زیرشبکه A و $\xi_i = -1$ برای زیرشبکه B است.

برای محاسبه رسانش سامانه، اگر هامیلتونی یک سلول واحد را H_{00} و برهم‌کنش آن با همسایه راست و چپ را به ترتیب H_{01} و H_{10} در نظر بگیریم. تابع گرین سامانه برای هر مؤلفه اسپینی، در زیر فضای سلول واحد به صورت زیر خواهد بود:

$$\mathbf{G}_S^\alpha = [(E + i\eta)\mathbf{I} - H_{00} - H_{10}\tilde{T} - H_{01}T]^{-1} \quad 2$$

در اینجا $\alpha = \uparrow, \downarrow$ است. خود-انرژی الکترودهای راست و چپ به ترتیب به صورت زیر است:

$$\sum_R = H_{01}T \quad 3$$

$$\sum_L = H_{10}\tilde{T} \quad 4$$

در روابط بالا T و \tilde{T} ماتریس‌های انتقال هستند که به صورت زیر به دست می‌آیند [۱۵-۱۸]:

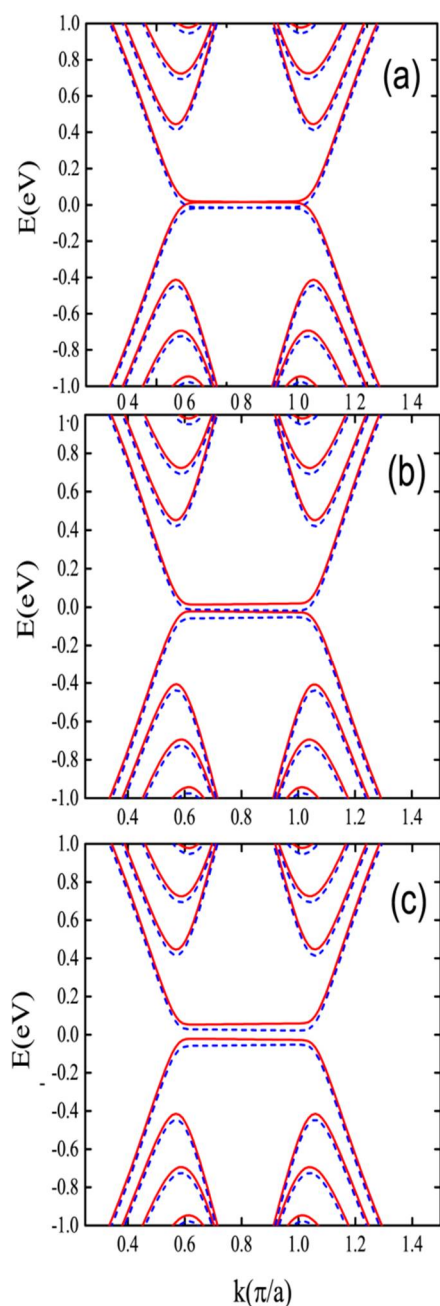
$$T = t_0 + \tilde{t}_0 t_1 + \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 t_2 + \dots + \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 \dots \tilde{t}_{i-1} t_i \quad 5$$

$$\tilde{T} = \tilde{t}_0 + t_0 t_1 + t_0 t_1 \tilde{t}_2 + \dots + t_0 t_1 \dots t_{i-1} \tilde{t}_i \quad 6$$

$$t_0 = [(E + i\eta)\mathbf{I} - H_{00}]^{-1} H_{10} \quad 7$$

$$\tilde{t}_0 = [(E + i\eta)\mathbf{I} - H_{00}]^{-1} H_{01} \quad 8$$

$$t_i = [\mathbf{I} - \mathbf{t}_{i-1}\tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1}\mathbf{t}_{i-1}]^{-1}\mathbf{t}_{i-1}^2 \quad 9$$



شکل ۲. ساختار نواری نانونوار سیلیسینی زیگزاگ با پهنا $N=32$ اتم و در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار. **a** در نبود میدان الکتریکی، **b** در حضور میدان الکتریکی $E_z = 0.04 \frac{V}{\text{\AA}}$ که به نیم‌پهنای نوار اعمال شده است و **c** در حضور میدان الکتریکی که به پهنا کامل نوار اعمال شده است. نمودار قرمز حالت اسپین بالا و آبی حالت اسپین پایین را نشان می‌دهد.

به‌طوری که پهناهای گاف انرژی در حالتی که میدان الکتریکی خارجی به نیم‌پهنا و پهناهای کامل نوار به‌ترتیب برابر $E_g = 3 \text{ eV}$ و $E_g = 0.07 \text{ eV}$ است. شکل ۳ نمودارهای رسانش اسپینی برحسب انرژی الکترون را نشان می‌دهد. نمودار **a** رسانش در نبود میدان الکتریکی و نمودارهای **b** و **c** به‌ترتیب در حضور میدان الکتریکی عمود به نیم‌پهنا و تمام‌پهنا و در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار و میدان تبدلی را نشان می‌دهند.

الف، در نبود میدان الکتریکی، سامانه برای هر حالت اسپینی رفتار فلزی دارد زیرا رسانش اسپینی در اطراف انرژی فرمی صفر نشده و برابر واحد است. یعنی یک کانال عبوری برای هر حالت اسپینی وجود دارد. پله‌های نمودار، تکینگی‌های ون هوف را نمایش می‌دهند.

نتایج مربوط به این شکل، با شکل ۲a سازگاری کامل دارد. همچنین در حضور میدان الکتریکی، سامانه به یک نیم‌رسانا تبدیل می‌شود. گاف انرژی مشاهده شده در طیف رسانش دیده شده در شکل‌های ۳b و ۳c با گاف انرژی مشاهده شده در شکل‌های ۲b و ۲c منطبق هستند.

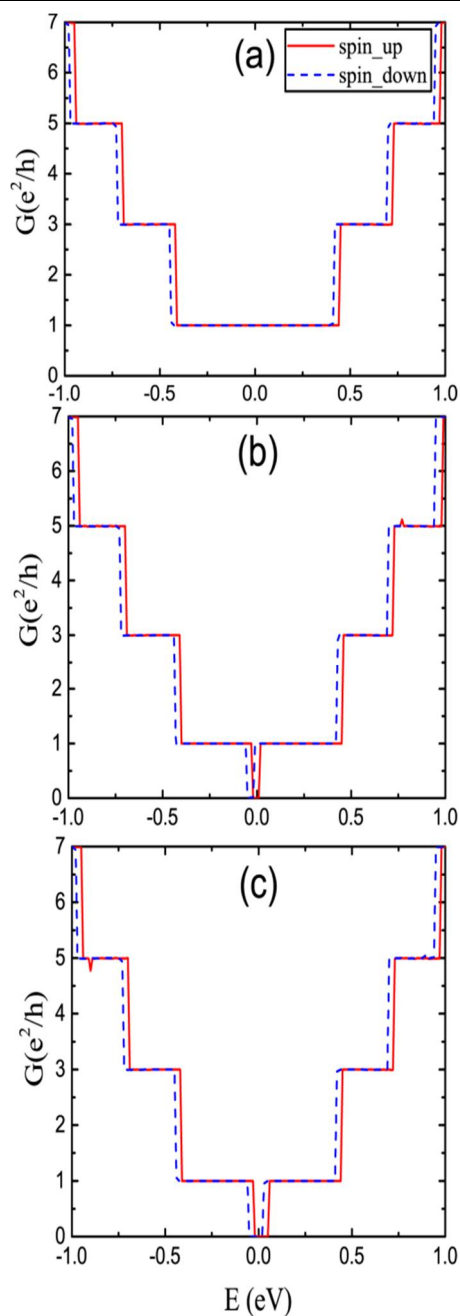
اگر جفت شدگی اسپین-مدار صفر شود نتایج حاصل، مانند نتایج مربوط به گرافین خواهد بود. بنابراین عمده تفاوت ویژگی الکترونی انرژی پایین سیلیسین و گرافین در نتیجه حضور برهم‌کنش اسپین-مدار در سیلیسین است. شدت میدان الکتریکی و تبدلی به‌ترتیب برابر $E_z = 0.04 \frac{V}{\text{\AA}}$ و $M_z = 4\lambda_{so}$ است (مطابق شکل ۳).

حضور میدان الکتریکی، میدان تبدلی و نقص تهی‌جا نشان می‌دهد.

شدت میدان الکتریکی و تبدلی به ترتیب برابر $E_z = 0.1 \frac{V}{p}$ و $M_z = 4\lambda_{SO}$ است. نقص تهی‌جا فقط در قطعه (ناحیه مرکزی) قرار دارد.

شکل ۴a، رسانش اسپینی را برای حالتی که بی‌نظمی در ۸ مکان با شاخص‌های (۱و۱)، (۱و۴)، (۱و۷)، (۱و۱۰)، (۱و۱۳)، (۱و۱۶)، (۱و۱۹) و (۱و۲۲) قرار گرفته باشند، نشان می‌دهند. همان‌طور که از شکل دیده می‌شود در حضور بی‌نظمی، پله‌های رسانش ناپدید شده و نوساناتی در طیف رسانش مشاهده می‌شود. همچنین بر اثر پراکندگی الکترون هنگام عبور از قطعه مرکزی، مقدار رسانش کاهش می‌یابد. نمودار رسانش سامانه خالص (نقطه‌چین) به‌عنوان مرجعی برای مقایسه نشان داده شده است.

شکل ۴b، مربوط به اعمال نقص تهی‌جا در ۱۶ مکان با شاخص‌های ۱، ۳، ۳۰ و ۳۲ و $n=1, 3, 30, 32$ و $m=1, 4, 7, 10$ می‌باشد. همچنین، هنگامی که بی‌نظمی در ۲۴ مکان با شاخص‌های ۱، ۳، ۵، ۲۸، ۳۰ و $n=1, 3, 5, 28, 30$ و $m=1, 4, 7, 10$ قرار بگیرد (شکل ۴c)، پهنای گاف انرژی افزایش بیشتری را نشان می‌دهد. در شکل ۴d، نتایج را برای حالتی که نقص تهی‌جا در ۳۲ مکان با شاخص‌های ۱، ۳، ۵، ۷، ۲۶، ۲۸، ۳۰ و $n=1, 3, 5, 7, 26, 28, 30$ و $m=1, 4, 7$ قرار گرفته باشد، نشان می‌دهد.



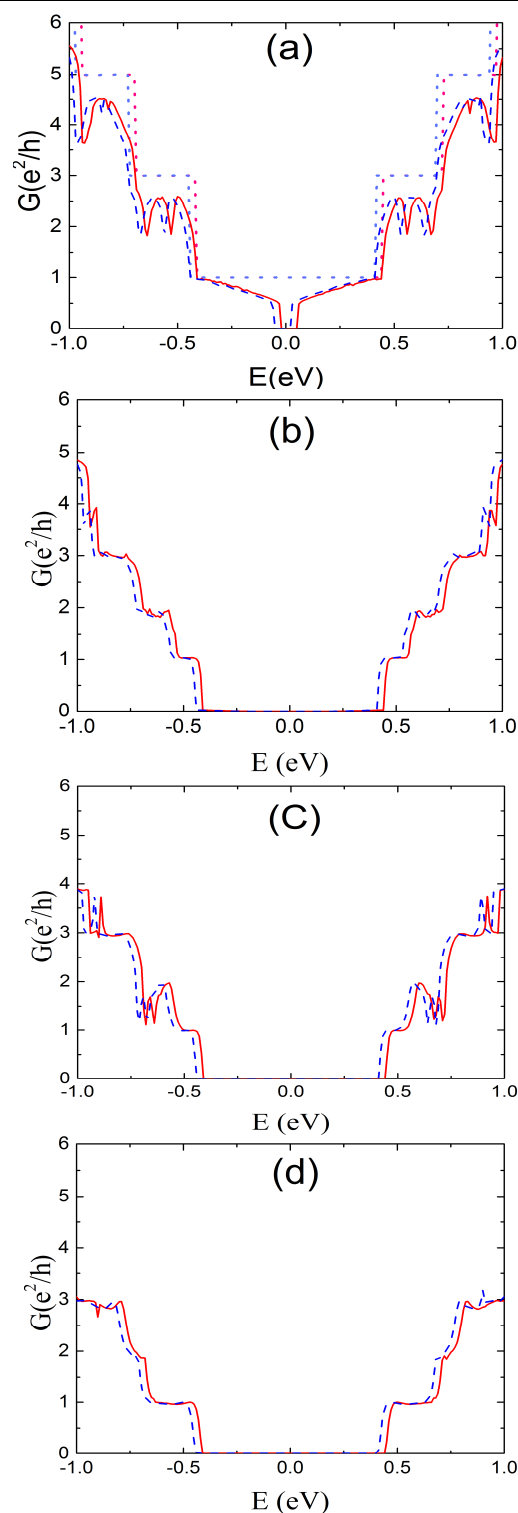
شکل ۳. رسانش اسپینی برای نانونوار سیلیسینی. a در نبود میدان الکتریکی، b در حضور میدان الکتریکی که به نیم‌پهنای نوار اعمال شده است c در حضور میدان الکتریکی که به پهنای کامل نوار اعمال شده است.

در مرحله بعد نقص تهی‌جا [۱۸-۱۹] را در جایگاه‌های نزدیک به لبه ایجاد کرده و اثر افزایش تعداد نقص‌ها بر ویژگی‌های ترابرد را بررسی می‌نماییم. شکل ۴ نمودارهای رسانش اسپینی را در

با مقایسه شکل **a** با سایر شکل‌ها، می‌توان نتیجه گرفت که سهم بی‌نظمی در افزایش گاف انرژی بیشتر از سهم میدان الکتریکی است. با افزایش غلظت بی‌نظمی، پراکندگی الکترون‌ها هنگام عبور از قطعه افزایش یافته و احتمال عبور کاهش می‌یابد و همچنین پهنای گاف انرژی افزایش می‌یابد. بنابراین به‌طور کلی می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش غلظت ناخالصی، رسانش اسپینی کاهش یافته، اما پهنای گاف انرژی سامانه افزایش می‌یابد. پهنای گاف انرژی ایجاد شده در نمودارها به ترتیب برابر با 0.7 ، 0.11 ، 0.85 و 0.85 الکترون ولت است.

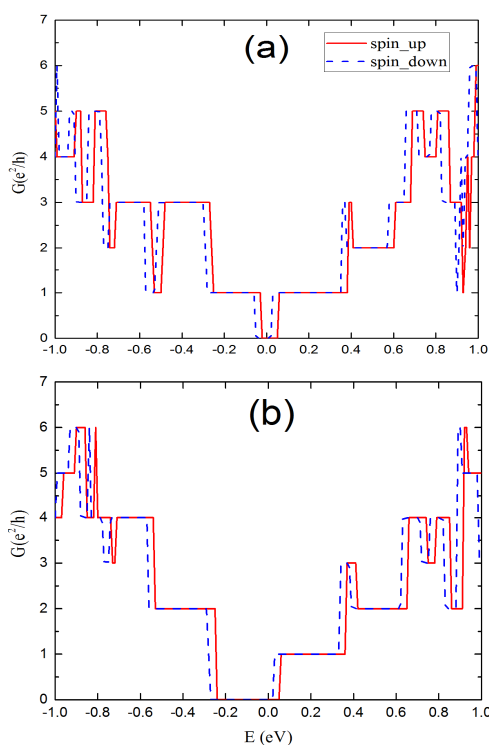
در این قسمت می‌خواهیم اثر بی‌نظمی از نوع ناخالصی اتم بور و آلومینیوم و تغییر مکان ناخالصی از مرکز به سمت لبه را بررسی نماییم. در این کار انرژی جایگاهی اتم بور را برابر 6.21 eV و انرژی جایگاهی اتم آلومینیوم را برابر 2.28 eV در نظر می‌گیریم [۲۰]. شکل ۵ نمودارهای ساختار نواری مربوط به نانونوار سیلیسینی بی‌نظم را در حضور میدان الکتریکی عمود و میدان تبدالی نشان می‌دهند. شکل **a**، حالتی را نشان می‌دهد که بی‌نظمی از نوع اتم‌های بور در مکان‌هایی با شاخص‌های $n=30$ و m های فرد (ناخالصی نزدیک به لبه نوار) قرار دارد. همچنین شکل **b** مربوط به اعمال ناخالصی در مکان‌هایی با شاخص‌های $n=32$ و m های فرد (ناخالصی در لبه) می‌باشد. در نمودارهای **a** و **b**، به ترتیب گاف انرژی برابر $E_g = 0.7 \text{ eV}$ و $E_g = 0.24 \text{ eV}$ است. در نتیجه سامانه یک گذار فاز فلز-نیم‌رسانا نشان می‌دهد.

با توجه به نمودارها و با محاسبه پهنای گاف انرژی مشخص است که در مقایسه با نانو نوار خالص، اعمال ناخالصی باعث ایجاد گاف انرژی و تغییر مکان ناخالصی به سمت لبه نوار سبب افزایش پهنای گاف انرژی می‌شود. شکل ۶ نمودارهای رسانش اسپینی



شکل ۴. رسانش اسپینی برحسب انرژی الکترون در شکل الف نمودارهای نقطه چین به‌عنوان مرجع هستند. **a**، **b**، **c** و **d** به ترتیب مربوط به نانونوار بی‌نظم با اعمال نقص تهی‌جا در ۸ مکان، ۱۶ مکان، ۲۴ مکان و ۳۲ مکان است.

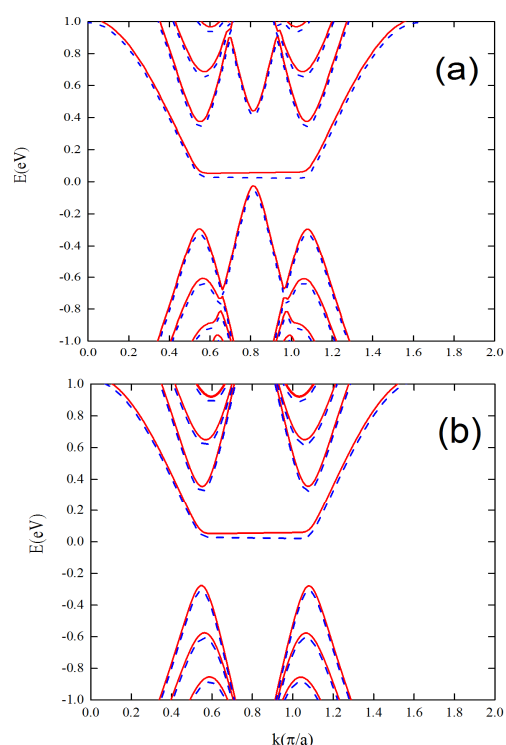
m های فرد (لبه نوار) را نشان می‌دهند. این ناخالصی‌ها به اتم‌های الکترونها هم اعمال شده است. با توجه به نمودارها و با محاسبه پهنای گاف انرژی مشخص است که در مقایسه با نانو نوار خالص، اعمال ناخالصی باعث افزایش پهنای گاف انرژی می‌شود و هر چه مکان ناخالصی به لبه نانو نوار نزدیک تر می‌شود پهنای گاف انرژی افزایش می‌یابد.



شکل ۶. نمودارهای رسانش اسپینی نانونوار سیلیسینی در حضور میدان الکتریکی عمود a و b . به ترتیب اعمال ناخالصی از نوع اتم بور را در مکان با شاخص‌های $n=30$ و m های فرد و $n=$ و m های فرد نشان می‌دهند.

در مقایسه نوع ناخالصی‌ها می‌توان گفت وقتی ناخالصی در اتم 30 است پهنای گاف انرژی ایجاد شده توسط هر دو عنصر (بور و آلومینیوم) یکسان است اما وقتی ناخالصی به لبه اضافه می‌شود اتم بور گاف انرژی بزرگتری در مقایسه با آلومینیوم ایجاد کرده است که به دلیل بزرگتر بودن انرژی جایگاهی اتم بور می‌باشد.

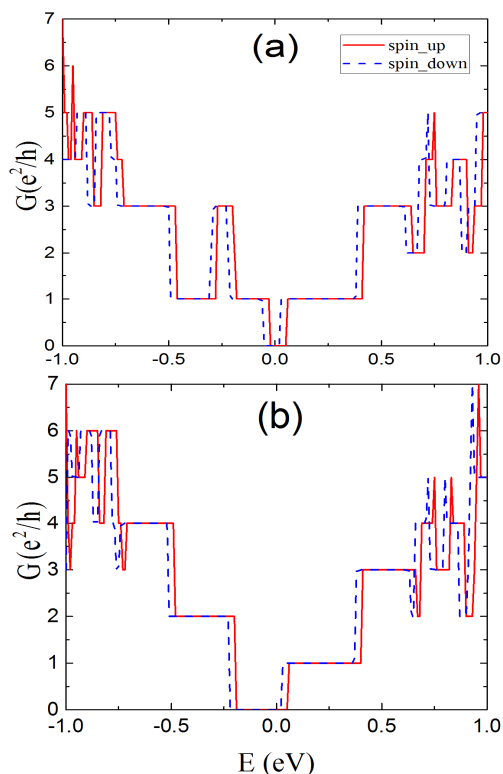
سامانه را با مشخصات درج شده در شکل ۵ نمایش می‌دهد. نتایج شکل ۶ منطبق بر نتایج شکل ۵ است. با اعمال ناخالصی، یک گاف نواری در اطراف انرژی فرمی ایجاد می‌شود که پهنای آن با تغییر مکان ناخالصی به سمت لبه نانونوار افزایش می‌یابد. در اینجا تقارن الکترون-حفره در رسانش الکترونی شکسته می‌شود اما پله‌های رسانش همچنان باقی می‌ماند.



شکل ۵. نمودارهای ساختار نواری نانونوار سیلیسینی در حضور میدان الکتریکی و تبدلی. a و b . به ترتیب مربوط به نانونوار بی‌نظم با اعمال ناخالصی از نوع اتم بور در مکان با شاخص‌های $n=30$ و m های فرد و $n=32$ و m های فرد است.

در نمودار a و b ، به ترتیب پهنای گاف نواری برابر است با $E_g = 0.24 \text{ eV}$ و $E_g = 0.07 \text{ eV}$. شکل ۷ نمودارهای ساختار نواری سامانه بی‌نظم را در حضور میدان الکتریکی عمود و میدان تبدلی نشان می‌دهد. a و b ، به ترتیب سامانه بی‌نظم با اعمال ناخالصی از نوع اتم آلومینیوم در مکان با شاخص‌های $n=30$ و m های فرد (نزدیک به لبه نوار) و $n=32$ و

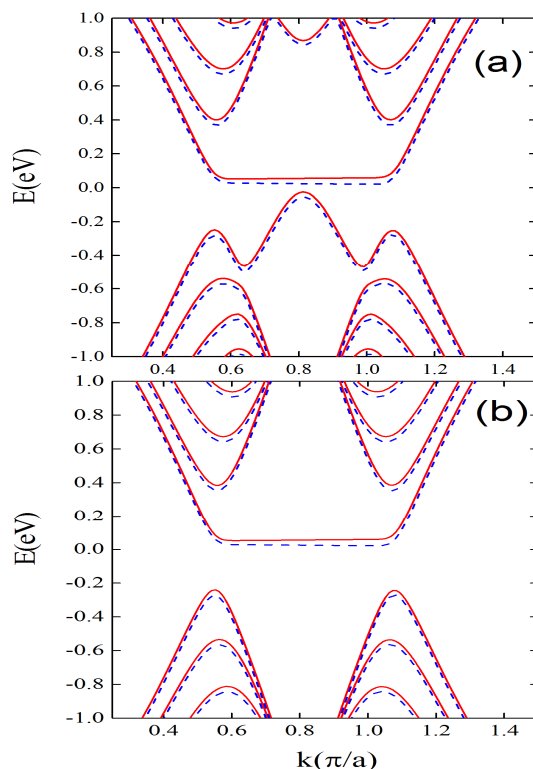
تقارن ندارد بنابراین تقارن الکترون حفره شکسته می‌شود.



شکل ۸ نمودارهای رسانش اسپینی سامانه بی‌نظم در حضور میدان الکتریکی عمود و میدان تبادل. **a** و **b**، به ترتیب نانونوار بی‌نظم با اعمال ناخالصی از نوع اتم آلومینیوم در مکان با شاخص‌های $n=30$ و m های فرد و $n=32$ و m های فرد را نشان می‌دهند.

بحث و نتیجه‌گیری

در این مقاله ویژگی‌های ترابرد اسپینی در یک نانونوار سیلیسینی با لبه زیگزاگ به پهنای $N=32$ اتم که به دو الکترون نیم نامتناهی فلزی متصل است، با روش تابع گرین و مدل تنگابست بررسی شده است. نتایج محاسبات عددی نشان می‌دهند که نوار سیلیسینی زیگزاگ رفتار فلزی دارد اما در حضور میدان الکتریکی عمود، گاف نواری در سامانه ایجاد می‌شود که با افزایش پهنایی از نوار که میدان به آن اعمال شده، پهنای گاف انرژی افزایش می‌یابد. در حضور بی‌نظمی، رسانش اسپینی کاهش و یک گاف



شکل ۷. نمودارهای ساختار نواری نانونوار سیلیسینی با حضور میدان الکتریکی عمود و میدان تبادل. **a** و **b**، به ترتیب اعمال ناخالصی از نوع اتم آلومینیوم در مکان با شاخص‌های $n=30$ و m های فرد و $n=32$ و m های فرد نشان می‌دهند.

شکل ۸ نمودارهای رسانش اسپینی سامانه بی‌نظم را در حضور میدان الکتریکی عمود و میدان تبادل نشان می‌دهد. شکل ۸a مربوط به نانونوار بی‌نظم با اعمال ناخالصی از نوع آلومینیوم در مکان با شاخص‌های $n=30$ و m های فرد (نزدیک به لبه نوار) می‌باشد.

شکل ۸b نانونوار بی‌نظم با اعمال ناخالصی از نوع آلومینیوم در مکان با شاخص‌های $n=32$ و m های فرد (لبه نوار) را نشان می‌دهد.

در مقایسه بین نمودار **a** و **b** به این نتیجه می‌رسیم که با تغییر مکان ناخالصی و با حرکت به سمت لبه نانو نوار پهنای گاف در اطراف انرژی فرمی افزایش می‌یابد. وجود ناخالصی، تأثیری در شکل پله‌ای نمودار رسانش اسپینی ندارد اما نمودار حول انرژی فرمی

[7] M. Ezawa, Valley-Polarized Metals and Quantum Anomalous Hall Effect in Silicene *Physical Review Letters* 109 (2012) 055502.

[8] M. Farokhnezhad, M. Esmaeilzadeh, S. Ahmadi, N. Pournaghavi. Controllable spin polarization and spin filtering in a zigzag silicene nanoribbon, *Journal of Applied Physics* 117 (2015) 173913.

[9] C.-C. Liu, W. Feng, Y. Yao, Quantum Spin Hall Effect in Silicene and Two-Dimensional Germanium *Physical Review Letters* 107 (2011) 076802.

[10] C.L. Kane, E.J. Mele, Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect, *Physical Review Letters* 95 (2005) 146802.

[11] C.C. Liu, H. Jiang, Y. Yao, Low-energy effective Hamiltonian involving spin-orbit coupling in silicene and two-dimensional germanium and tin, *Physical Review B* 84 (2011) 195430.

[12] A. Dimoulas, Silicene, germanene: Silicon and germanium in the "flatland", *Microelectronic Engineering* 131 (2015) 68.

[13] L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, C. Grazianetti, M. Fanciulli, M. Dubey, A. Molle, D. Akinwande, Silicene field-effect transistors operating at room temperature, *Nature nanotechnology* 10 (2015) 227.

[14] K. Shakouri, H. Simchi, M. Esmaeilzadeh, H. Mazidabadi, F.M. Peeters, Tunable spin and charge transport in silicene nanoribbons, *Physical Review B* 92 (2015) 035413.

[15] M.L. Sancho, J.L. Sancho, J. Rubio, Quick iterative scheme for the calculation of transfer matrices: application to Mo (100), *Journal of Physics F: Metal Physics* 14 (1984) 1205.

[16] M.L. Sancho, J.L. Sancho, J.L. Sancho, J. Rubio, Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface Green functions, *Journal of Physics F: Metal Physics* 15 (1985) 851.

[17] T.C. Li, S.P. Lu, Quantum conductance of graphene nanoribbons with edge defects, *Physical Review B* 77 (2008) 085408.

[18] F. Khoeini, Kh. Shakouri, F.M. Peeters, Peculiar half-metallic state in zigzag nanoribbons of MoS_2 : Spin filtering, *Physical Review B* 94 (2016) 125412.

در طیف آن مشاهده شد که با افزایش غلظت آن، پهنای گاف افزایش می‌یافت. همچنین با تغییر مکان بی‌نظمی از مرکز به سمت لبه رسانش کاهش و پهنای گاف افزایش یافت. افزون بر این، نتایج ما نشان می‌دهند که به ترتیب بی‌نظمی تهی‌جا، ناخالصی بور و آلومینیوم اثر بیشتری در کاهش رسانش و افزایش گاف انرژی داشته‌اند. سامانه در حضور میدان الکتریکی و ناخالصی یک گذار فاز فلز-نیم‌رسانا نشان می‌دهد و همچنین سهم بی‌نظمی در ایجاد گاف انرژی بیشتر از سهم میدان الکتریکی عمود بوده و با کنترل بزرگی میدان الکتریکی و غلظت ناخالصی می‌توان رسانش اسپینی را کنترل نمود.

مرجع‌ها

[1] B. Lalmi, H. Oughaddou, H. Enriquez, A. Kara, S. Vizzini, B. Ealet, and B. Aufray, Epitaxial growth of a silicene sheet, *Applied Physics Letters* 97 (2010) 223109.

[2] P. Vogt, P.D. Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M. Asensio, A. Resta, B. Ealet, G.L. Lay, Silicene: compelling experimental evidence for graphenelike two-dimensional silicon, *Physical review letters* 108 (2012) 155501.

[3] J.Y. Wu, S.C. Chen, M.F. Lin, Temperature-dependent Coulomb excitations in silicene, *New Journal of Physics* 16 (2014) 125002.

[4] N.D. Drummond, V. Zolyomi, V.I. Fal'Ko, Electrically tunable band gap in silicene, *Physical Review B* 85 (2012) 075423.

[5] M. Ezawa, Monolayer Topological Insulators: Silicene, Germanene, and Stanene, *Journal of the Physical Society of Japan* 84 (2015) 121003.

[6] Z. Ni, Q. Liu, K. Tang, J. Zheng, J. Zhou, R. Qin, Z. Gao, D. Yu, J. Lu, Tunable bandgap in silicene and germanene, *Nano letters* 12 (2012) 113.

[۱۹] ک. قادری، ف. خوئینی، مطالعه نظری رسانش الکترونی در یک سامانه کوانتومی با الکترودهای دو زنجیری، پژوهش سیستم‌های بس‌ذره‌ای ۳ (۱۳۹۲)، ۳۹-۲۹.

[20] J. Sivek, H. Sahin, B. Partoens, F.M. Peeters, Adsorption and absorption of boron, nitrogen, aluminum, and phosphorus on silicene: Stability and electronic and phonon properties, *Physical Review B* 87 (2013) 085444.

Spin transport in a superlattice silicene nanoribbon

Farhad Khoeini*, Zahra Jafarkhani, Maryam Khalkhali

Department of Physics, University of Zanjan, PO Box 45195–313, Zanjan, Iran

Received: 21.05.2016 Final revised: 02.03.2017 Accepted: 24.04.2017

Abstract

In this article, we investigate the spin transport properties of a superlattice silicene nanoribbon connected to two semi-infinite metallic leads, in the tight-binding model and Green's function approach, and in the presence of disorder and electric and exchange fields. Our calculations show that the metal-semiconductor phase transition occurs, when a perpendicular electric field and/or disorder is applied to the system. Also by changing the steplike electric field, the width of the energy gap will be controlled. In addition, by applying the disorder such as vacancy and impurity, the conductance of the system decreases and its band gap increases. Namely, the band gap of the system can be tuned by varying the relevant parameters, such as disorder concentration, steplike electric field and exchange field strength.

Keywords: Silicene nanoribbon, Superlattice, Spin transport, Tight-binding, Green's function

* Corresponding Author: khoeini@znu.ac.ir