

## رسانش اسپینی گرافین گاف‌دار

سعید مروی<sup>۱\*</sup>، رستم مرادیان<sup>۲</sup>، حامد رضانیا<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup> گروه فیزیک، واحد ایلام، دانشگاه آزاد اسلامی، ایلام، ایران

<sup>۲</sup> گروه فیزیک، دانشگاه رازی، کرمانشاه، ایران

دریافت: ۱۳۹۶/۰۳/۰۹ ویرایش نهائی: ۱۳۹۷/۰۱/۲۸ پذیرش: ۱۳۹۷/۰۲/۰۳

### چکیده

در این مقاله رسانش اسپینی گرافین گاف‌دار را محاسبه و نحوه تغییرات آن را با پارامترهای مختلفی از جمله مغناطش، اندرکنش کولنی و گاف انرژی بررسی می‌کنیم. برای هامیلتونی سیستم از مدل هابارد استفاده می‌کنیم. در دو وضعیت رسانندگی را به دست می‌آوریم. یکی بدون در نظر گرفتن اندرکنش کولنی بین الکترون‌ها و دیگری با حضور اندرکنش کولنی بین الکترون‌ها. می‌بینیم که در حالت غیر اندرکنشی با افزایش مغناطش، قله‌های رسانندگی اسپینی به سمت فرکانس‌های پایین‌تر منتقل شده و ارتفاع قله‌ها نیز بیشتر می‌گردد. با افزایش گاف انرژی قله‌های رسانندگی اسپینی به سمت فرکانس‌های بالاتر منتقل شده و ارتفاع قله‌ها نیز بیشتر می‌شود. در حالت اندرکنشی نمودارهای رسانندگی برحسب فرکانس دو قله دارند که یکی از قله‌ها مربوط به الکترون‌های اسپین بالا و دیگری مربوط به الکترون‌های اسپین پایین است. با افزایش مغناطش قله‌های مربوط به الکترون‌های اسپین بالا به سمت فرکانس‌های پایین‌تر و قله‌های مربوط به الکترون‌های اسپین پایین به سمت فرکانس‌های بالاتر منتقل می‌شوند. با افزایش گاف انرژی و قدرت اندرکنش کولنی، قله‌های مربوط به الکترون‌های اسپین بالا و اسپین پایین با هم به سمت فرکانس‌های بالاتر انتقال می‌یابند.

کلیدواژگان: رسانش اسپینی، گرافین، مدل هابارد

### مقدمه

به‌وسیله یک میدان مغناطیسی می‌توان قطبش اسپینی یک الکترون را کنترل کرد و آن را برحسب نیاز در حالت اسپین بالا و یا اسپین پایین قرار داد. با این مفهوم می‌توان یک سیستم منطقی باینری ساخت، بدین صورت که اسپین بالا و اسپین پایین را به ترتیب با "۱" و "۰" نام‌گذاری کنیم. ادوات اسپینترونیکی در مقایسه با ادوات ساخته شده با تکنولوژی الکترونیک مزایایی از جمله، سرعت بالاتر پردازش داده‌ها، ابعاد کوچکتر و مصرف انرژی کمتر دارند. تعدادی از ادواتی که توسط تکنولوژی اسپینترونیکی قابل ساخته شدن هستند

اسپینترونیکی، یا الکترونیک بر پایه اسپین، ترکیبی از حالت اسپین حامل‌های بار و الکترونیک متعارف می‌باشد. در الکترونیک متعارف به‌طور کامل از اسپین الکترون‌ها، که برای ما یک شانس بی‌نظیر و یک نقطه شروع برای جستجو در آینده نیم‌رساناها و صنعت اطلاعات است، چشم‌پوشی می‌شود. اسپینترونیکی از دو دهه پیش تاکنون مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است. برای ذخیره و انتقال اطلاعات به‌جای استفاده از بار الکترون می‌توان از درجه آزادی اسپینی الکترون‌ها استفاده کرد. مفهوم اسپینترونیکی بر این اساس است که

\* نویسنده مسئول: saeed.marvi@gmail.com

عبارتند از، ترانزیستورهای اثر چرخشی اسپین، دیویدهای گسیل کننده نوری اسپینی، حافظه‌های مقاومت مغناطیسی با دسترسی تصادفی و الکترودهای شفاف گرافینی.

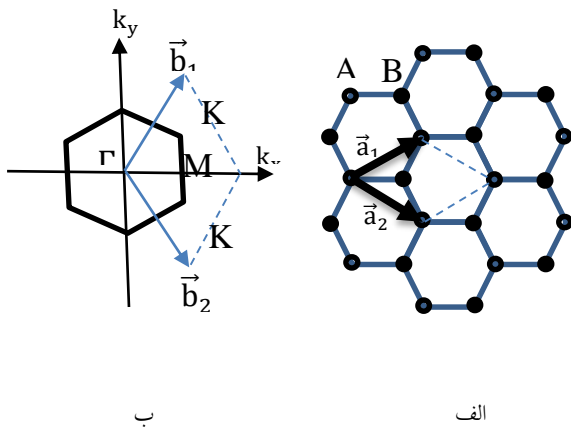
با توسعه اسپینترونیک در سال‌های اخیر، جریان اسپینی توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است. رسانش اسپینی وابسته به یک جریان اسپینی کمیتی بنیادی در اسپینترونیک محسوب می‌شود. رسانش اسپینی به‌عنوان پاسخ خطی جریان اسپینی به یک میدان نیروی خارجی که ایجاد کننده این جریان است، تعریف می‌شود. رسانش اسپینی به صورت نظری برای آنتی فرو مغناطیس‌های یک بعدی بررسی شده است [۲۰۱]. برای مواد دو بعدی آنتی فرو مغناطیس نارسانا توسط مدل  $XXZ$  هایزنبرگ رسانندگی محاسبه شده است [۳]. ترابرد اسپینی برای مواد آنتی فرومغناطیس نیل و فرو مغناطیس در فاز هم راستا برای شبکه مربعی دو بعدی [۴] و برای فاز غیر هم راستا [۵] بررسی شده است. همچنین انتقال اسپینی برای نارسانا‌های فرومغناطیسی [۶ و ۷] و آنتی فرومغناطیسی مطالعه شده است [۸-۱۴]. در بین وسایل نانو مقیاس گوناگونی که وجود دارند نانو ساختارهای تولید شده توسط کربن جذابیت بیشتری دارند. زیرا اندرکنش نسبتاً ضعیف اسپین-مدار و فوق ریز در کربن باعث طولانی شدن طول پویس آزاد و زمان همدوسی اسپینی می‌شود [۱۵]. همین موضوع باعث شده گرافین، به‌عنوان یک شبکه کربنی دو بعدی با داشتن ساختار نواری ویژه، کاندیدای مناسبی برای اسپینترونیک باشد و توجه بسیاری از پژوهشگران را به خود معطوف کند [۱۶ و ۱۷].

می‌شود. در مرجع [۱۸] با استفاده از روش ماتریس انتقال، ضریب انتقال اسپینی و رسانش اسپینی، به صورت نظری، برای گرافین تک لایه و دولایه با سدهای تناوبی فرومغناطیسی که توسط یک میدان الکتریکی یکنواخت مدوله شده، مورد مطالعه قرار گرفته است. مشاهده شده که رسانش اسپینی این سیستم برحسب میدان الکتریکی خارجی، یک رفتار تناوبی دارد که به حالت اسپینی وابسته است. به علاوه دامنه تناوب رسانش اسپینی و قطبش اسپینی با افزایش تعداد سدها زیاد می‌شود. در مرجع [۱۹] با بهره‌گیری از بسط چیشف و فرمول کوبو-باستین، تانسور رسانندگی در مدل تنگ بست برای گرافینی که ناخالصی‌ها به صورت تصادفی بالای اتم‌های کربن جذب شده، محاسبه گردیده است. در این تحقیق ملاحظه می‌شود که رسانش اسپینی عرضی هال و رسانش اسپینی طولی به قدرت مشارکت و غلظت ناخالصی‌ها بستگی دارد. در مرجع [۲۰] تانسور رسانش اسپینی با استفاده از نظریه‌های انتقال کوبو و بولتزمن محاسبه شده و نتایج به دست آمده از این دو نظریه، با یکدیگر مقایسه شده‌اند.

در این پژوهش قصد داریم رسانش اسپینی را برای گرافین گاف دار به دست آوریم. سناریوهای مختلفی برای ایجاد گاف در ساختار نواری گرافین وجود دارد. یکی از آنها ایجاد گاف از طریق آرایش گرافین با ترکیبات شیمیایی می‌باشد [۲۱]، که ناشی از شکستن تقارن انتقالی است. خواص الکترونیکی گرافین که با مولکول‌های  $CrO_3$  اندرکنش دارند با استفاده از روش *ab initio* محاسبه شده است، که گاف انرژی حدود  $0.12 \text{ eV}$  را نتیجه می‌دهد [۲۲]. سناریوی دیگر برای ایجاد گاف در گرافین، قرار دادن آن روی یک زیر لایه مناسب است که تقارن زیر شبکه را بشکند [۲۳]. به‌عنوان مثال زیر لایه ساخته شده از  $SiC$  هگزاگونال گافی حدود  $0.26 \text{ eV}$  ایجاد می‌کند [۲۴]. همچنین می‌توان با اعمال میدان مغناطیسی در گرافین گاف ایجاد

پژوهش‌های زیادی در مورد خواص اسپینی گرافین صورت گرفته که به‌عنوان نمونه مواردی از آنها ذکر

$H^{(0)}$ ، هامیلتونی غیر اندرکنشی است.  $H_U$  مربوط به اندرکنش کولنی بین الکترون‌ها است.  $\alpha$  و  $\beta$  معرف دو زیر شبکه در ساختار گرافین می‌باشند.  $j$  و  $i$  مکان سلول‌های شبکه براوه شانه عسلی را مشخص می‌کنند که هر کدام شامل دو اتم هستند که با  $A$  و  $B$  مشخص می‌شوند.  $c_{i\alpha\sigma}$  و  $c_{i\alpha\sigma}^\dagger$  به ترتیب عملگرهای نابودی و خلق یک الکترون با اسپین  $\sigma$  در زیر شبکه  $\alpha$  از سلول واحد  $i$ ام است.  $\mu_\sigma$  پتانسیل شیمیایی وابسته به اسپین است.  $U$  قدرت اندرکنش کولنی بین الکترونی درون جایگاهی است.  $t_{ij}^{\alpha\beta}$  انتگرال پرش می‌باشد. همچنین  $t_{ii}^{AA} = \epsilon_0$  و  $t_{ii}^{BB} = -\epsilon_0$  تعریف می‌شوند.



شکل ۱ الف. شبکه گرافین با بردارهای پایه شبکه  $\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$ . ب. منطقه اول بریلون و بردارهای شبکه وارون گرافین  $\vec{b}_1$  و  $\vec{b}_2$ .

در ادامه ساختار نواری هامیلتونی ۱ برای دو حالت بدون اندرکنش کولنی و با اندرکنش کولنی، با استفاده از تقریب تنگ بست و در نظر گرفتن تقریب نزدیک‌ترین همسایه‌ها، که بردارهای اتصال آنها به صورت  $\vec{\delta}_1 = \left(\frac{a}{\sqrt{3}}, 0\right)$ ،  $\vec{\delta}_2 = \left(-\frac{a}{2\sqrt{3}}, \frac{a}{2}\right)$  و  $\vec{\delta}_3 = \left(-\frac{a}{2\sqrt{3}}, -\frac{a}{2}\right)$  هستند را می‌نویسیم.

کرد [۲۵]. به‌علاوه زمانی که گرافین توسط مولکول‌های آب و آمونیاک احاطه شود در طیف انرژی گاف ایجاد می‌شود [۲۶]. در این تحقیق با معرفی مدل هابارد برای شبکه شانه عسلی گرافین، در تقریب میدان متوسط ویژه مقادیر و ویژه بردارها را معرفی کرده و توابع گرین غیر اندرکنشی و اندرکنشی گرافین را به دست می‌آوریم. با استفاده از نظریه پاسخ خطی رابطه رسانندگی اسپینی را در حالت کلی نوشته و سپس آن را برای محاسبه رسانندگی اسپینی گرافین به کار می‌بریم. نحوه تغییرات رسانندگی را با تغییر پارامترهایی مانند گاف انرژی، مغناطش و قدرت اندرکنش کولنی بررسی می‌کنیم.

### مدل هامیلتونی و توابع گرین تک ذره‌ای برای گرافین

گرافین را می‌توان به‌عنوان یک صفحه تخت به ضخامت یک اتم تعریف کرد که اتم‌های کربن به‌صورت محکم در یک شبکه دو بعدی شانه عسلی کنار هم قرار گرفته‌اند. گرافین یک شبکه دو بخشی با دو زیر شبکه  $A$  و  $B$  می‌باشد، که در شکل ۱ نمایش داده شده است. برای این سیستم مدل هابارد را به کار می‌بریم، که به‌صورت زیر است:

$$H = H^{(0)} - H_U \quad 1$$

$$E_\sigma^\pm(\vec{k}) = -\mu_\sigma + \frac{U}{2} n_\sigma \pm \sqrt{\left(\frac{Um}{2}\right)^2 + |\phi(\vec{k})|^2} + \epsilon_0^2$$

$$H_U = U \sum_{i,\alpha} c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\alpha\downarrow}^\dagger c_{i\alpha\downarrow} c_{i\alpha\uparrow}$$

$$d_1(\vec{k}) = \left[ \frac{\left( \epsilon_0 - \sqrt{|\phi(\vec{k})|^2 + \epsilon_0^2} \right)^2}{|\phi(\vec{k})|^2 + \left( \epsilon_0 - \sqrt{|\phi(\vec{k})|^2 + \epsilon_0^2} \right)^2} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$d_2(\vec{k}) = \left[ \frac{\left( \epsilon_0 + \sqrt{|\phi(\vec{k})|^2 + \epsilon_0^2} \right)^2}{|\phi(\vec{k})|^2 + \left( \epsilon_0 + \sqrt{|\phi(\vec{k})|^2 + \epsilon_0^2} \right)^2} \right]^{\frac{1}{2}}$$

در حضور جمله اندرکنش کولنی در معادله ۱ و با استفاده از تقریب میدان متوسط، ساختار نواری معادله ۱ در فاز آنتی فرو مغاطیس به صورت زیر به دست می آید [۲۷]:

$$E_{\sigma}^{\pm}(\vec{k}) = -\mu_{\sigma} + \frac{U}{2} n_{\sigma} \pm \sqrt{\left( \frac{Um}{2} \right)^2 + |\phi(\vec{k})|^2 + \epsilon_0^2}$$

که  $n_{\sigma}$  چگالی الکترون‌ها با اسپین  $\sigma$  و  $m$  مغناطس دستگاه است. در این حالت توابع گرین به شکل زیر هستند:

$$G_{\sigma}^{AA}(\vec{k}, i\omega_n) = \sum_{j=\pm} \frac{|X_{\sigma j}(\vec{k})|^2}{i\omega_n - E_{\sigma}^j(\vec{k})} \quad 5$$

$$G_{\sigma}^{BB}(\vec{k}, i\omega_n) = \sum_{j=\pm} \frac{|Y_{\sigma j}(\vec{k})|^2}{i\omega_n - E_{\sigma}^j(\vec{k})} \quad 6$$

$$G_{\sigma}^{AB}(\vec{k}, i\omega_n) = \sum_{j=\pm} \frac{X_{\sigma j}(\vec{k}) Y_{\sigma j}^*(\vec{k})}{i\omega_n - E_{\sigma}^j(\vec{k})} \quad 7$$

$$G_{\sigma}^{BA}(\vec{k}, i\omega_n) = \sum_{j=\pm} \frac{X_{\sigma j}^*(\vec{k}) Y_{\sigma j}(\vec{k})}{i\omega_n - E_{\sigma}^j(\vec{k})} \quad 8$$

در حالتی که از اندرکنش بین الکترون‌ها چشمپوشی کنیم، ویژه‌مقادیر هامیلتونی بخش غیر برهم‌کنشی معادله ۱ به صورت زیر به دست می آید:

$$E_{\sigma}^{\pm}(\vec{k}) = -\mu_{\sigma} \pm \sqrt{|\phi(\vec{k})|^2 + \epsilon_0^2} \quad 2$$

که در آن

$$|\phi(\vec{k})|^2 = t^2 \times \left( 1 + 4\cos^2\left(\frac{a}{2}k_y\right) + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}k_x\right)\cos\left(\frac{a}{2}k_y\right) \right)$$

است و  $t = 2.7\text{eV}$  می باشد. همچنین  $\epsilon_0 = \frac{\Delta}{2}$  که در اینجا  $\Delta$  پهنای گاف انرژی است.

تابع گرین تک ذره‌ای غیر اندرکنشی در نمایش ماتسوبارا برای گرافین به صورت زیر به دست می آید:

$$G_{\sigma}^{0\alpha\beta}(\vec{k}, i\omega_n) = - \left( \frac{u_{1\alpha}(\vec{k}) u_{1\beta}^*(\vec{k})}{i\omega_n - E_{\sigma}^-(\vec{k})} + \frac{u_{2\alpha}(\vec{k}) u_{2\beta}^*(\vec{k})}{i\omega_n - E_{\sigma}^+(\vec{k})} \right) \quad 3$$

که ضرایب  $u_{2\beta}(\vec{k})$  و  $u_{2\alpha}(\vec{k})$ ،  $u_{1\beta}(\vec{k})$ ،  $u_{1\alpha}(\vec{k})$  به صورت زیر تعریف می شوند:

$$u_{1A}(\vec{k}) = \frac{-\phi^*(\vec{k}) d_1(\vec{k})}{\epsilon_0 - \sqrt{|\phi(\vec{k})|^2 + \epsilon_0^2}}, \quad 4$$

$$u_{1B}(\vec{k}) = d_1(\vec{k})$$

$$u_{2A}(\vec{k}) = \frac{-\phi^*(\vec{k}) d_2(\vec{k})}{\epsilon_0 + \sqrt{|\phi(\vec{k})|^2 + \epsilon_0^2}},$$

$$u_{2B}(\vec{k}) = d_2(\vec{k})$$

که در اینجا  $h^z(l, t) = g \mu_B B^z(l, t)$  ۱۰

در اینجا  $l$  مکان،  $t$  زمان،  $g$  ثابت ژیرومغناطیسی  $\mu_B$  مگنتون بور و  $B^z$  مؤلفه میدان مغناطیسی در راستای محور  $z$  است که به مکان و زمان بستگی دارد.

چگالی جریان اسپینی در راستای محور  $x$  که ناشی از مؤلفه  $z$  اسپین الکترون است به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\langle J^{xz} \rangle = \sigma_{xx} i q_x h^z \quad 11$$

با استفاده از نظریه خطی می‌توان نوشت:

$$\langle J^{xz}(\vec{q}, \omega) \rangle = \chi_{js}(\vec{q}, \omega) h^z(\vec{q}, \omega) \quad 12$$

$\chi_{js}(\vec{q}, \omega)$  تابع همبستگی است که به صورت زیر می‌باشد:

$$\chi_{js}(\vec{q}, \omega) = \quad 13$$

$$\frac{i}{N} \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i0^+)t} \langle J^{xz}(\vec{q}, t), S^z(-\vec{q}, 0) \rangle$$

به دلیل کوچک بودن اندرکنش اسپین مدار در گرافین می‌توان از معادله پیوستگی جریان اسپینی استفاده کرد:

$$\frac{dS^z}{dt} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad 14$$

با استفاده از معادله پیوستگی ۱۴ و انتگرال‌گیری جزء به جزء،  $\langle J^{xz}(\vec{q}, \omega) \rangle$  به شکل زیر به دست می‌آید:

$$\langle J^{xz}(\vec{q}, \omega) \rangle = \quad 15$$

$$-\frac{\langle -K_x \rangle - \Lambda_{xx}(\vec{q}, \omega)}{i(\omega+i0^+)} i q_x h^z(\vec{q}, \omega)$$

در اینجا  $\Lambda_{xx}(\vec{q}, \omega)$  و  $\langle -K_x \rangle$  با روابط زیر تعریف می‌شوند:

$$|X_{\sigma\pm}(\vec{k})|^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{Um\sigma}{2E_\sigma^\pm(\vec{k})} \right]$$

$$|Y_{\sigma\pm}(\vec{k})|^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{Um\sigma}{2E_\sigma^\pm(\vec{k})} \right]$$

$$X_{\sigma j}(\vec{k}) Y_{\sigma j}^*(\vec{k}) = -\frac{\phi(\vec{k})}{2E_\sigma^\pm(\vec{k})}$$

است. در بخش‌های بعد برای به دست آوردن رسانندگی اسپینی از توابع گرین غیربرهم‌کنشی و برهم‌کنشی که در اینجا به دست آوردیم، استفاده خواهیم کرد.

### تعریف رسانندگی اسپینی با استفاده از نظریه

#### پاسخ خطی

در این بخش رسانندگی اسپینی را تعریف کرده و رابطه آنرا به دست می‌آوریم. رسانندگی به عنوان پاسخ خطی جریان به یک میدان نیروی خارجی که ایجاد کننده جریان است تعریف می‌شود. در مورد انتقال اسپینی این میدان نیرو گرادیان مؤلفه  $z$  میدان مغناطیسی است. در اینجا با استفاده از نظریه خطی پاسخ رابطه رسانندگی را به دست می‌آوریم.

چگالی جریان اسپینی را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\langle J^{xz}(\vec{q}, \omega) \rangle = \chi_{js}(\vec{q}, \omega) h^z(\vec{q}, \omega) \quad 9$$

$\sigma$  تانسور رسانندگی است و  $h^z$  به صورت زیر تعریف می‌شود:

در اینجا  $R_l^x$  مؤلفه  $x$  بردار مکان سلول واحد در شبکه براوه است.  $S_{i\alpha}^z$  نیز مؤلفه  $z$  اسپین الکترون اتم واقع در سلول واحد  $l$  ام در زیر شبکه  $\alpha$  است. چگالی جریان اسپینی در راستای محور  $x$ ، که ناشی از مؤلفه  $z$  اسپین است، با استفاده از معادله حرکت هایزنبرگ به دست می آید:

$$J^{xz} = \frac{d\mathbb{R}^{xz}}{dt} = i[H, \mathbb{R}^{xz}] \quad 23$$

$H$  هامیلتونی دستگاه است که در رابطه ۱ معرفی شد.

می توان  $H_U$  را به صورت زیر نوشت [۲۸]:

$$[H_U, \mathbb{R}^{xz}] = 0 \quad 24$$

می دانیم که  $S_{i\alpha}^z$  با  $S_{i\alpha}^z$  جابه جا می شود یعنی  $[S_{i\alpha}^z, S_{i\alpha}^z] = 0$  پس می توان نتیجه گرفت که

$$[H_U, \mathbb{R}^{xz}] = 0 \quad 25$$

است. همچنین با محاسبات سر راست می توان نشان

$$\text{داد که } \left[ \sum_{i,\sigma,\alpha} \mu_\sigma c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma}, \mathbb{R}^{xz} \right] = 0 \text{ است.}$$

پس برای به دست آوردن  $J^{zx}$  کافیت جابه جا گر زیر را حساب کنیم:

$$J^{zx} = i \left[ - \sum_{\substack{i,j,\sigma \\ \alpha \neq \beta}} t_{ij}^{\alpha\beta} (c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma} + h.c.), \mathbb{R}^{xz} \right] \quad 26$$

با محاسبه جابه جاگر ۲۶،  $J^{zx}$  به صورت زیر به دست می آید:

$$\Lambda_{xx}(\vec{q}, \omega) = \quad 16$$

$$\frac{i}{N} \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i0^+)t} \langle J^{xz}(\vec{q}, t), J^{xz}(-\vec{q}, 0) \rangle$$

$$\frac{i}{N} \langle J^{xz}(\vec{q}, 0), S^z(-\vec{q}, 0) \rangle = iq_x \langle -K_x \rangle \quad 17$$

حال با مقایسه روابط ۱۱ و ۱۵ می توان نتیجه گرفت که:

$$\sigma_{xx}(\omega) = - \frac{\langle -K_x \rangle - \Lambda_{xx}(\vec{q}=0, \omega)}{i(\omega+i0^+)} \quad 18$$

قسمت حقیقی رسانندگی اسپینی به صورت زیر است:

$$Re[\sigma_{xx}(\omega)] = D\delta(\omega) + \sigma_{xx}^{reg}(\omega) \quad 19$$

که در آن

$$\sigma_{xx}^{reg}(\omega) = \frac{Im[\Lambda_{xx}(\vec{q}=0, \omega)]}{\omega} \quad 20$$

$$D = \pi \lim_{\omega \rightarrow 0} \omega Im[\sigma_{xx}(\omega)] \quad 21$$

است.  $\sigma_{xx}^{reg}(\omega)$  قسمت منظم یا بدون تکینگی رسانندگی بوده و رسانندگی AC را توصیف می کند و  $D$  وزن درود است که بیان کننده جریان DC یا به بیانی رسانندگی اسپینی در فرکانس صفر می باشد. در این مقاله  $\sigma_{xx}^{reg}(\omega)$  برای گرافین محاسبه و نحوه تغییرات آن با پارامترهایی از جمله مغناطش، اندرکنش کولنی و گاف انرژی بررسی می شود.

### رسانندگی اسپینی گرافین گاف دار

در این بخش رسانندگی اسپینی را برای گرافین گاف دار به دست می آوریم. به این منظور  $\mathbb{R}^{xz}$  که یک بردار کمکی است به صورت زیر تعریف می کنیم:

$$\mathbb{R}^{xz} = \sum_l R_l^x (S_{lA}^z + S_{lB}^z) \quad 22$$

۳۳

$$\Lambda_{xx}(i\omega_n) = \frac{t^2}{\beta} \sum_{\Delta, \Delta', l} R_{\Delta}^x R_{\Delta'}^x [-e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{\Delta} + \vec{R}_{\Delta'})} \times G_{\sigma}^{BA}(\vec{k}, i\omega_l) G_{\sigma}^{BA}(\vec{k}, i\omega_l + i\omega_n) + e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{\Delta} - \vec{R}_{\Delta'})} G_{\sigma}^{BB}(\vec{k}, i\omega_l) G_{\sigma}^{AA}(\vec{k}, i\omega_l + i\omega_n) + e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{\Delta} - \vec{R}_{\Delta'})} G_{\sigma}^{AA}(\vec{k}, i\omega_l) G_{\sigma}^{BB}(\vec{k}, i\omega_l + i\omega_n) - e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{\Delta} + \vec{R}_{\Delta'})} G_{\sigma}^{AB}(\vec{k}, i\omega_l) G_{\sigma}^{AB}(\vec{k}, i\omega_l + i\omega_n)]$$

با قرار دادن توابع گرین الکترونی غیر اندرکنشی ۳ یا اندرکنشی ۵ تا ۸ در رابطه فوق و استفاده از جمع فرکانس‌های ماتسوبارا می‌توان  $\Lambda_{xx}(i\omega_n)$  را به ترتیب برای حالت غیر اندرکنشی و اندرکنشی محاسبه کرد. با به دست آمدن  $\Lambda_{xx}(i\omega_n)$  می‌توان  $\sigma_{xx}^{reg}(\omega)$  را توسط رابطه ۲۰ به دست آورد. در بخش بعد نمودار  $\sigma_{xx}^{reg}(\omega)$  را برای دو حالت اندرکنشی و غیر اندرکنشی رسم می‌کنیم.

### نتایج عددی و رسم نمودار رسانندگی

در این بخش نمودار  $\sigma_{xx}^{reg}(\omega)$  را برای حالت غیر اندرکنشی و اندرکنشی، برحسب فرکانس رسم کرده و نحوه تغییرات آن را با تغییر پارامترهایی چون مغناطش، گاف انرژی و اندرکنش کولنی بررسی می‌کنیم.

### حالت غیر اندرکنشی

در شکل ۲ نمودار رسانندگی برحسب فرکانس برای مغناطش‌های ۰/۱، ۰/۵ و ۰/۹ رسم شده است. در اینجا  $\frac{t}{k_B T} = 100$  و  $\frac{\Delta}{t} = 0.2$  قرار می‌دهیم بر اساس این شکل در می‌یابیم که با افزایش مغناطش، قله‌های رسانندگی اسپینی به سمت فرکانس‌های پایین‌تر منتقل شده و ارتفاع آنها زیاد می‌شوند. به علاوه شکاف فرکانسی

$$J^{xz} = \frac{i}{2} t \sum_{\substack{i, \Delta, \sigma \\ \alpha \neq \beta}} R_{\Delta}^x \sigma c_{i\alpha\sigma}^{\dagger} c_{i+\Delta\beta\sigma} + h.c. \quad 27$$

که در اینجا  $R_{\Delta}^x = R_j^x - R_i^x$ ،  $\sigma = \pm, \uparrow\downarrow$  می‌باشند.

چگالی جریان موضعی در محل سایت  $i$  ام بدین صورت نوشته می‌شود:

$$J^{xz}(i) = \frac{i}{2} t \sum_{\substack{\Delta, \sigma \\ \alpha \neq \beta}} R_{\Delta}^x \sigma c_{i\alpha\sigma}^{\dagger} c_{i+\Delta\beta\sigma} + h.c. \quad 28$$

با استفاده از تبدیلات فوری که به صورت زیر معرفی می‌شوند

$$c_{i\alpha\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_{\vec{k}\alpha\sigma} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \quad 29$$

$$c_{i\alpha\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_{\vec{k}\alpha\sigma}^{\dagger} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \quad 30$$

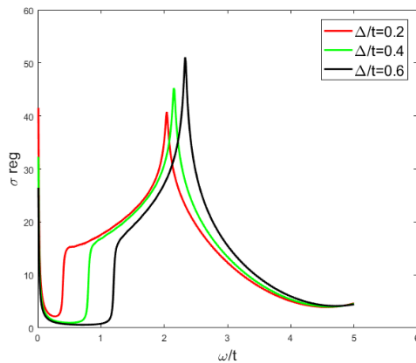
$$J^{xz}(\vec{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i J^{xz}(i) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i} \quad 31$$

رابطه ۲۸ را در فضای بردار موج می‌نویسیم. پس از انجام محاسبات، چگالی جریان موضعی در این فضا به صورت زیر به دست می‌آید:

$$J^{xz}(\vec{q}) = \frac{i}{2} t \sum_{\substack{\Delta, \sigma, k \\ \alpha \neq \beta}} R_{\Delta}^x \sigma e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\Delta}} c_{\vec{k}+\vec{q}\alpha\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}+\vec{q}\beta\sigma} + h.c. \quad 32$$

با جای‌گذاری رابطه ۳۲ در رابطه ۱۶،  $\Lambda_{xx}(i\omega_n)$  به صورت زیر به دست می‌آید:

انرژی زیاد می‌شود لذا ارتفاع قله‌ها با افزایش گاف انرژی افزایش می‌یابد.

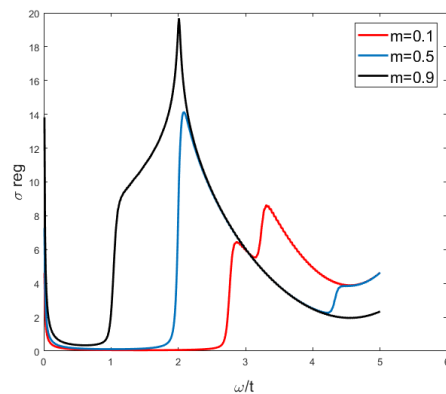


شکل ۳. رسانندگی برحسب فرکانس برای گاف‌های انرژی مختلف.

### حالت اندرکنشی

در شکل‌های الف، ب و ج نمودار رسانندگی برحسب فرکانس به ترتیب برای مغناطش‌های ۰٫۱، ۰٫۵ و ۰٫۷ رسم شده است. در اینجا  $\frac{U}{t} = ۰٫۴$ ،  $\frac{\Delta}{t} = ۰٫۲$  و  $\frac{t}{k_B T} = ۱۰۰$  است. ملاحظه می‌شود که در هر حالت دو قله داریم که قله سمت چپ مربوط به الکترون‌های اسپین بالا و قله سمت راست مربوط به الکترون‌های اسپین پایین است. با افزایش مغناطش قله‌ها از هم دور می‌شوند به بیانی دیگر قله مربوط به الکترون‌های اسپین بالا به سمت فرکانس‌های پایین‌تر و قله مربوط به الکترون‌های اسپین پایین به فرکانس‌های بالاتر منتقل می‌شوند. در ضمن ارتفاع قله‌های سمت چپ افزایش و ارتفاع قله‌های سمت راست کاهش می‌یابند.

موجود در رسانش اسپینی با افزایش مغناطش کاهش می‌یابد. در واقع افزایش مغناطش در مقدار ثابت پارامتر گاف، سبب کاهش گاف نواری در چگالی حالات الکترونی می‌شود. بنابراین انرژی کمتری برای موج الکترومغناطیسی جهت تحریک و گذار الکترونی بین نواری انرژی صفحه گرافن مورد نیاز می‌شود. در نتیجه با افزایش مغناطش قله موجود در رسانندگی دینامیکی به سمت فرکانس‌های پایین جابه‌جا می‌شود و ارتفاع آنها افزایش می‌یابد.



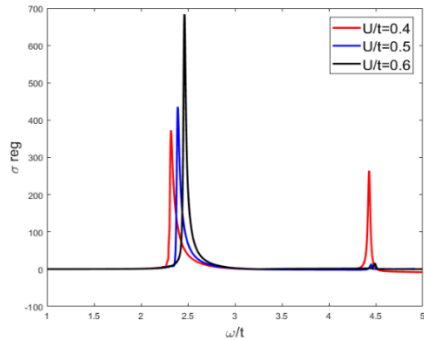
شکل ۴. رسانندگی برحسب فرکانس برای مغناطش‌های مختلف.

در شکل ۳ نمودار رسانندگی برحسب فرکانس برای گاف‌های انرژی مختلف (۰٫۲، ۰٫۴ و ۰٫۶) رسم شده است. می‌بینیم که با افزایش گاف انرژی، مکان فرکانسی قله‌های رسانش اسپینی به سمت فرکانس‌های بالاتر منتقل می‌شوند و ارتفاع قله‌ها نیز بیشتر می‌گردد زیرا با افزایش گاف انرژی، انرژی بیشتری برای تحریک الکترون‌ها مورد نیاز است در نتیجه قله‌های نمودار به سمت فرکانس‌های بالاتر منتقل می‌شوند. از طرفی میزان انرژی موج الکترومغناطیسی مورد نیاز برای تحریک و گذار الکترونی بین نواری با افزایش گاف



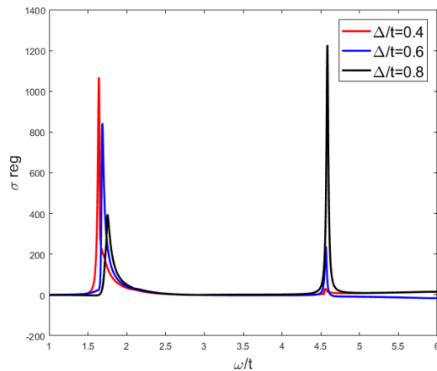
الف

سمت چپ) افزایش یافته ولی در عوض ارتفاع قله‌های مربوط به الکترون‌های اسپین پایین (قله‌های سمت راست) کاهش می‌یابد. همچنین قله‌ها به سمت فرکانس‌های بالاتر انتقال می‌یابند.

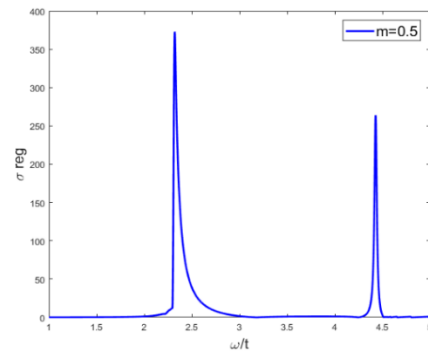
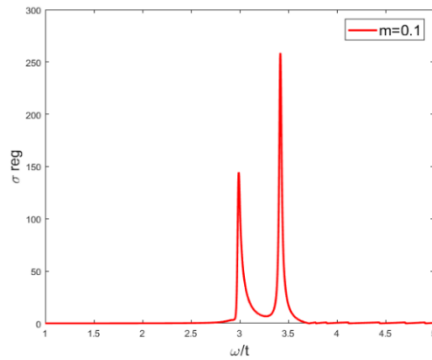


شکل ۵. رسانندگی برحسب فرکانس برای اندرکنش‌های کولنی مختلف.

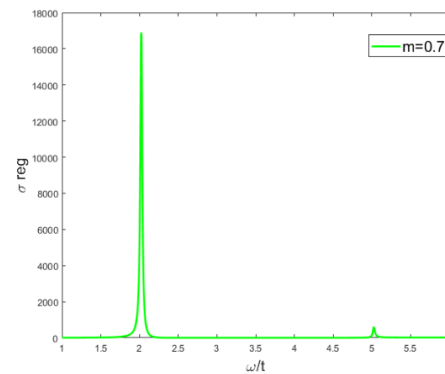
در شکل ۶ نمودار رسانندگی برحسب فرکانس برای گاف‌های انرژی ۰٫۴، ۰٫۶، و ۰٫۸ رسم شده است. در اینجا  $\frac{U}{t} = ۰٫۴$ ،  $\frac{t}{k_B T} = ۱۰۰$ ، و مغناطش ۰٫۵ است. ملاحظه می‌شود که با افزایش گاف انرژی قله‌ها به سمت فرکانس‌های بالاتر منتقل می‌شوند در ضمن ارتفاع قله‌های سمت چپ کاهش و ارتفاع قله‌های سمت راست افزایش می‌یابد.



شکل ۶. رسانندگی برحسب فرکانس برای گاف‌های انرژی مختلف.



ب.



ج

شکل ۷الف. نمودار رسانندگی برحسب فرکانس برای مغناطش ۰٫۱. ب. نمودار رسانندگی برحسب فرکانس برای مغناطش ۰٫۵. ج. نمودار رسانندگی برحسب فرکانس برای مغناطش ۰٫۷.

در شکل ۵ نمودار رسانندگی برحسب فرکانس برای اندرکنش‌های کولنی ۰٫۴، ۰٫۵، و ۰٫۶ رسم شده است. در اینجا مغناطش ۰٫۵ و  $\frac{t}{k_B T} = ۱۰۰$  است. ملاحظه می‌شود با افزایش اندرکنش کولنی الکترون‌ها، ارتفاع قله‌های مربوط به الکترون‌های اسپین بالا(قله‌های

## نتیجه گیری

در این مقاله رسانندگی اسپینی گرافین برای دو حالت اندرکنشی و غیراندرکنشی محاسبه شد. برای هامیلتونی سیستم از مدل هابارد استفاده کردیم و برای به دست آوردن ساختار نواری در حالت اندرکنشی، تقریب میدان متوسط را به کار بردیم. نحوه تغییرات رسانندگی اسپینی را برحسب تغییر پارامترهایی همچون مغناطش، گاف انرژی و اندرکنش کولنی بررسی کردیم. دیدیم که در حالت غیر اندرکنشی با افزایش مغناطش، قله های رسانندگی اسپینی به سمت فرکانس های پایین تر منتقل شده و ارتفاع قله ها نیز بیشتر شد. با افزایش گاف انرژی قله های رسانندگی اسپینی به سمت فرکانس های بالاتر منتقل شده و ارتفاع قله ها نیز بیشتر شد. در حالت اندرکنشی دیدیم که نمودارهای رسانندگی برحسب فرکانس دو قله دارند که یکی از قله ها مربوط الکترون های اسپین بالا و دیگری مربوط به الکترون های اسپین پایین است. با افزایش مغناطش قله های مربوط به الکترون های اسپین بالا به سمت فرکانس های پایین تر و قله های مربوط به الکترون های اسپین پایین به سمت فرکانس های بالاتر منتقل می شوند و با افزایش گاف انرژی قله ها مربوط به الکترون های اسپین بالا و اسپین پایین با هم به سمت فرکانس های بالاتر انتقال می یابند. با افزایش قدرت اندرکنش کولنی نیز قله ها به سمت فرکانس های بالاتر منتقل می گردند.

## مرجع ها

- [2] S. Langer, R. Darradi, F. Heidrich-Meisner, W. Brenig, Field-dependent spin and heat conductivities of dimerized  $\text{spin-}\frac{1}{2}$  chains, *Physical Review B* **82** (2010) 104424.
- [3] M. Sentef, M. Kollar, A.P. Kampf, Spin transport in Heisenberg antiferromagnets in two and three dimensions *Physical Review B* **75** (2007) 214403.
- [4] Z. Chen, T. Datta, D.X. Yao, Spin transport in the Néel and collinear antiferromagnetic phase of the two dimensional spatial and spin anisotropic Heisenberg model on a square lattice, *The European Physical Journal B* **86** **63** (2013).
- [5] Y. Kubo, S. Kurihara, Spin conductivity in two-dimensional non-collinear antiferromagnets, *Journal of the Physical Society of Japan* **82** **11** (2013) 113601.
- [6] S. Maekawa, A flood of spin current, *Nature Materials* **8** (2009) 777-778.
- [7] H. Adachi, J.I. Ohe, S. Takahashi, S. Maekawa, Linear response theory of spin seebeck effect in ferromagnetic insulators, *Physical Review B* **83** (2011) 094410.
- [8] X. Zotos, P. Prelovsek, Evidence for ideal insulating or conducting state in a one-dimensional integrable system, *Physical Review B* **53** (1996) 983.
- [9] A.S.T. Pires, L.S. Lima, Low-temperature spin transport in a  $S=1$  one-dimensional antiferromagnet, *Journal of Physics: Condensed Matter* **21** (2009) 245502.
- [10] F. Meie, D. Loss, Magnetization transport and quantized spin conductance, *Physical Review Letters* **90** (2003) 167204.
- [11] K.A. Van Hoogdalem, D. Loss, Frequency-dependent transport through a spin chain, *Physical Review B* **85** (2012) 054413.
- [12] K.A. Van Hoogdalem, D. Loss, Magnetic texture-induced thermal Hall effects, *Physical Review B* **87** (2013) 024402.
- [13] W. Zhuo, X. Wang, Y. Wang, Spin transport properties in Heisenberg antiferromagnetic spin

- [1] F.H. Meisner, A. Honecker, W. Brenig, Thermal transport of the XXZ chain in a magnetic field, *Physical Review B* **71** (2005) 184415.

- gap in graphene on hexagonal boron nitride: Ab initio density functional calculations. *Physical Review B* **76** (2007) 073103.
- [25] V.P. Gusynin, S.G. Sharapov, J.P. Carbotte, Ac conductivity of graphene: from tight-binding model to  $2 + 1$ -dimensional quantum electrodynamics *International Journal of Modern Physics B* **21** (2007) 4611.
- [26] R.M. Ribeiro, N.M.R. Peres, J. Coutinho, P.R. Briddon, Inducing energy gaps in monolayer and bilayer graphene: Local density approximation calculations. *Physical Review B* **78** (2008) 075442.
- [27] N.M.R. Peres, M.A.N. Araújo, D. Bozi, Phase diagram and magnetic collective excitations of the Hubbard model for graphene sheets and layers, *Physical Review B* **70** (2004) 195122.
- [28] P. fazekas, *Lecture notes on quantum magnetism*, World Scientific Publishing Co. Re. Ltd (1998).
- chains: Spin current induced by twisted boundary magnetic fields, *Physical Review B* **73** (2006) 212413.
- [14] A.S.T. Pires, L.S. Lima, Entanglement in the quantum phase transition of the half-Integer spin one-dimensional Heisenberg model, *Physical Review B* **79** (2009) 064401.
- [15] N. Tombros, C. Jozsa, M. Popinciuc, H.T. Jonkman, B.J. Van Wees, Electronic spin transport and spin precession in single graphene layers at room temperature, *Nature* **448** (2007) 571-574.
- [16] S. Sanvito, Organic electronics: Memoirs of a spin, *Nature Nanotechnology* **2** (2007) 204-206.
- [17] A.K. Geim, K.S. Novoselov, The rise of graphene, *Nature Materials* **6** (2007) 183-191.
- [18] F.Sattari, E.Faizabadi, Spin transport through electric field modulated graphene periodic ferromagnetic barriers, *Physica B*, **434** (2004) 69-73.
- [19] J.H. Garcia, G.T. Rappoport, Kubo–Bastin approach for the spin Hall conductivity of decorated graphene, *2D Materials* **3** (2016).
- [20] Z. Liu, L. Jiang, Y. Zheng, Conductivity tensor of graphene dominated by spin-orbit coupling scatterers: A comparison between the results from Kubo and Boltzmann transport theories, *Nature scientific reports* **6** (2016) 23762.
- [21] T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, E. Rotenberg, Controlling the electronic structure of bilayer graphene, *Science* **313** (2006) 951-954.
- [22] I. Zanella, S. Guerini, S.B. Fagan, J.M. Filho, A.G.S. Filho, Chemical doping-induced gap opening and spin polarization in graphene, *Physical Review B* **77** (2008) 073404.
- [23] D.S.L. Abergel, A. Russell, V.I. Falko, Visibility of graphene flakes on a dielectric substrate, *Applied Physics Letters* **91** (2007) 063125.
- [24] G. Giovannetti, P.A. Khomyako, G. Brocks, P.J. Kelly, J.V.D. Brink, Substrate-induced band