

# اثر برهم‌کنش الکترون-فونون بر خواص مغناطیسی و تراپردی زنجیره کربنی با اتصالات گرافینی

مرضیه یوسفی<sup>۱</sup>، روح اله فرقدان<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup> دانشگاه کاشان

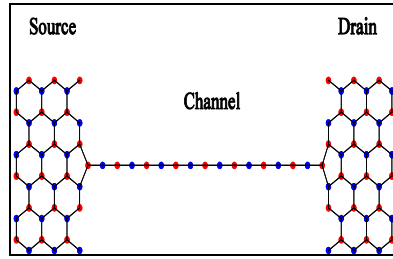
## چکیده

با در نظر گرفتن مدل  $HH$  و با استفاده از فرمول‌بندی لانداونور-بوتیکر به بررسی خواص مغناطیسی و تراپردی نانوترانزیستور مغناطیسی پایه کربنی می‌پردازیم. این نانوترانزیستور از یک زنجیره کربنی متصل به دو الکتروگرافینی لبه زیگزاگ تشکیل شده است. مدل  $HH$  با در نظر گرفتن پتانسیل هابارد و برهم‌کنش الکترون-فونون خواص الکتریکی و مغناطیسی زنجیره کربنی را مورد مطالعه قرار می‌دهد. خواهیم دید مغناطش‌های جایگزیده در زنجیره کربنی حتی با تغییرات کوچک پتانسیل‌های فونونی بشدت کاهش یافته و خواص فیلتر شدگی را در زنجیره کربنی بطور محسوسی کاهش می‌دهد.

بررسی‌های انجام شده در زمینه زنجیره‌های کربنی و پیشرفت در زمینه ساخت آن‌ها، نشان می‌دهد که این ساختارها می‌توانند در قطعات اسپینترونیک مورد استفاده قرار گیرند [۱]. اوربیتال‌های اتمی کربن در یک ساختار زنجیره‌ای کربنی دارای همپوشانی  $sp$  بوده و بنابراین به ازای هر اتم کربن دو پیوند  $\pi$  وجود دارد. با توجه به خواص فلزی این ساختارهای کربنی، استفاده از آن‌ها در ناحیه کانال ترانزیستورهای مغناطیسی بسیار مناسب می‌باشد [۲]. از جمله بررسی‌های انجام شده استفاده از آن‌ها در شیرهای اسپینی و قطعات اسپین فیلتر، به دلیل مقاومت مغناطیسی بالای آن‌ها می‌باشد [۳-۴]. به طوری که اتصال این زنجیره‌ها به دو الکتروگرافینی می‌تواند قطعه اسپین فیلتر کامل ایجاد کند [۵]. با توجه به هندسه ساختارهای یک‌بعدی و پیوندهای محدود اتم‌ها در این ساختارها، تأثیر برهم‌کنش‌های فونونی در یک ملکول زنجیره‌ای و یا زنجیره کربنی، می‌تواند خواص الکترونی و تراپردی زنجیره را تغییر دهد. به همین دلیل در این تحقیق قصد داریم با استفاده از مدل Holstein-Hubbard (HH) به بررسی خواص تراپردی و مغناطیسی زنجیره کربنی به عنوان کانال در یک نانو ترانزیستور کربنی و در حضور برهم‌کنش الکترون-فونون بپردازیم. با استفاده از مدل (HH) اعمال دافعه کولنی هابارد، در حضور برهم‌کنش الکترون-فونون صورت گرفته [۶-۸] و به این ترتیب می‌توان اثر این برهم‌کنش‌ها را بر یکدیگر و بر جریان‌های اسپینی بررسی نمود. شکل هامیلتونی مربوط به این مدل به صورت زیر خواهد بود:

$$H_{hh}^{LF} = -t \sum_{j\sigma} (d_{j+1\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + H.c.) + \omega_0 \sum_j a_j^\dagger a_j + (U - 2g^2 \omega_0) \sum_{j,\sigma} \langle n_{j\sigma}^d \rangle n_{j\sigma}^d - g^2 \omega_0 \sum_{j,\sigma} \langle n_{j\sigma}^d \rangle \quad (1)$$

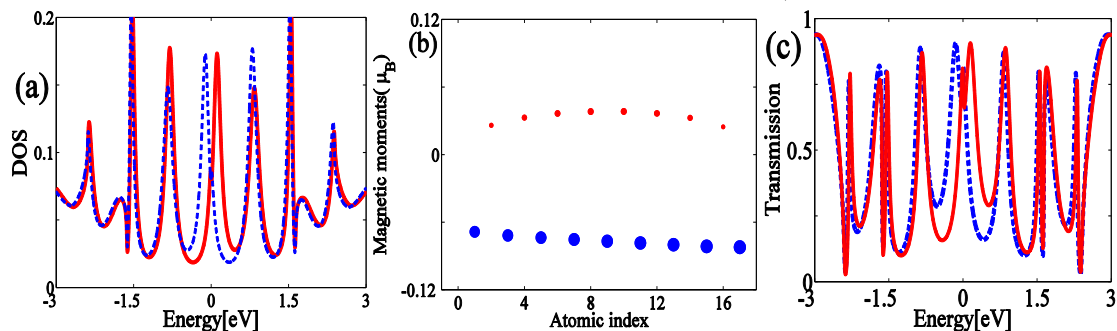
در این هامیلتونی  $t$  انرژی جهش بوده و عملگرهای  $d_j^\dagger$  و  $a_j^\dagger$  (به ترتیب عملگر خلق (فنا) الکترون پوشیده شده با اسپین  $\sigma$  (به کمک تبدیل Lang-Firsov (LF) به دست می‌آید) و فونون در محل  $j$  ام هستند.  $\langle n_{j\downarrow}^d \rangle$  مقدار متوسط عملگر چگالی الکترونی با اسپین  $\sigma$  را در مکان  $j$  ام نشان می‌دهد. کمیت‌های  $\omega_0$  و  $g$  به ترتیب مقادیر فرکانس فونونی و ثابت جفت‌شدگی الکترون-فونون را نشان داده و  $U$  پتانسیل دافعه هابارد می‌باشد.



شکل ۱: قطعه اسپین فیلتر شامل دو الکتروود گرافینی لبه زیگزاگ و یک کانال رسانا به صورت زنجیره کربنی

برای بررسی اثرات مغناطیسی و تراپردی ضریب جمله سوم را به صورت کمیت  $U_{eff}$  تعریف می‌کنیم که رقابت بین پتانسیل مؤثر هابارد و اثرات فونونی را نشان می‌دهد. به طوری که افزایش این کمیت به معنای کاهش اثرات فونونی می‌باشد. شکل ۱ طرح پیشنهادی قطعه اسپین فیلتر را نشان می‌دهد که از دو الکتروود گرافینی لبه‌زیگزاگ به عنوان چشمه و چاه و یک زنجیره کربنی با ۱۷ اتم کربن به عنوان کانال ساخته شده است. مقدار پتانسیل مؤثر هابارد برای ساختارهای کربنی به صورت  $U = 3$  تعریف می‌شود که بدلیل وجود زیرشبه‌کمان‌های گوناگون (نقاط قرمز و آبی) در ساختارهای کربنی، اعمال این پتانسیل، مغناطش‌های موضعی ایجاد خواهد کرد [۹].

در ساختار پیشنهادی پتانسیل هابارد تنها به ناحیه کانال وارد می‌شود. در شکل ۲ به ازای  $U_{eff} = 3$  تأثیر فونون‌ها حذف شده و اعمال دافعه هابارد باعث ایجاد مغناطش‌های موضعی در ناحیه زنجیره کربنی می‌گردد (شکل ۲b). مقدار مغناطش ماکزیمم در این حالت حدود ۰,۰۹ مگنتون بوهر می‌باشد. اما برخلاف نظریه لایب مغناطش‌های ایجاد شده بر روی اتم‌های زنجیره کربنی یکسان نبوده و توزیع مغناطش‌های بالا و پایین متفاوت خواهد بود. در شکل ۲a و ۲c منحنی مربوط به چگالی حالات و ضرایب عبور برای دو جریان اسپینی بالا و پایین دیده می‌شود. با توجه به وجود چگالی حالات در سطح فرمی ( $E=0$ ) خاصیت فلزی زنجیره‌های کربنی قابل درک است. طبق این دو منحنی، وجود مغناطش‌های موضعی در ناحیه کانال چگالی حالات و در نتیجه ضرایب عبور متفاوتی را در اطراف سطح فرمی برای دو نوع جریان اسپینی ایجاد خواهد کرد. در واقع مغناطش‌های موضعی باعث جدایی اسپین‌های بالا و پایین در اطراف سطح فرمی خواهد شد. در نهایت به ازای بعضی مقادیر انرژی، عبور یک نوع جریان اسپینی نسبت به نوع دیگر بیشتر بوده و جریان قطبیده اسپینی خواهیم داشت.

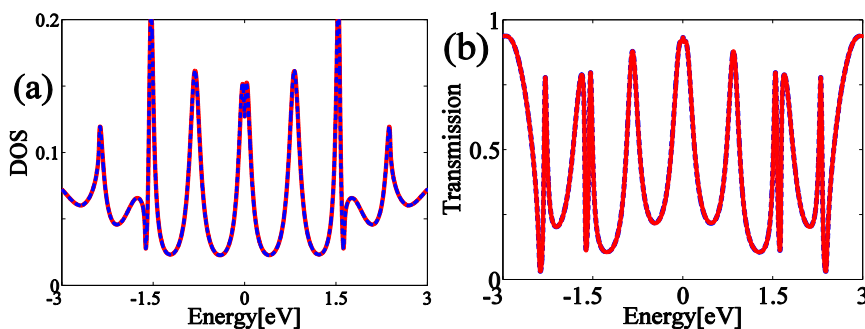


شکل ۲: (a) چگالی حالات مربوط به الکترون‌های با اسپین بالا (آبی) و اسپین پایین (قرمز)، (b) مغناطش‌های موضعی در ناحیه کانال (c) ضرایب عبور الکترون‌های با اسپین بالا (آبی) و اسپین پایین (قرمز) به ازای  $U_{eff} = 3$ .

طبق محاسبات انجام شده افزایش اثرات فونونی مقدار مغناطش‌های موضعی را کاهش داده و در نهایت به‌ازای مقادیر مختلف انرژی، چگالی حالات و ضرایب عبور برای اسپین بالا و پایین تفاوت کمی خواهند داشت؛ در واقع با انتخاب مقادیری مانند  $U_{eff} = 2.5$  و  $U_{eff} = 2$  مقادیر مغناطش به شدت افت پیدا کرده و ماکزیمم آن‌ها به ترتیب به ۰,۰۵ و ۰,۰۱ مگنتون بوه‌ر می‌رسد. در نتیجه نمودار چگالی حالات و ضرایب عبور بجز در بازه کوچکی در اطراف انرژی فرمی بر هم منطبق می‌گردند. از این رو میزان قطبیدگی جریان کاهش می‌یابد. در شکل ۳ مقدار  $U_{eff}$  برابر با صفر در نظر گرفته شده است. با این مقدار، منحنی چگالی حالات و ضرایب عبور بر هم منطبق شده و جریان‌های اسپینی بالا و پایین کاملاً تبهگن خواهند شد. در واقع در این حالت تأثیر فونون‌ها و پتانسیل هابارد یکسان شده و مغناطش‌های موضعی از بین خواهند رفت. انرژی فونون‌ها برای این حالت برابر با ۰,۰۸۹۲ الکترون‌ولت خواهد بود.

### نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از مدل HH و روش لاندائور-بوتیکر به بررسی خواص ترابردی و مغناطیسی یک زنجیره کربنی متصل به دو الکتروگرافینی لبه‌زیگزاگ در حضور برهم‌کنش الکترون-فونون پرداختیم. مدل HH به بررسی رقابت دو برهم‌کنش الکترون-فونون و الکترون-الکترون می‌پردازد. طبق نتایج به دست آمده، تغییر کوچکی در مقدار برهم‌کنش الکترون-فونون باعث تغییر شدید در اثرات مغناطیسی دافعه هابارد شده و میزان قطبیدگی جریان را به شدت تغییر خواهد داد. به طوری که با انتخاب  $U_{eff} = 0$  جریان‌های اسپینی بالا و پایین تبهگنی کامل خواهند داشت.



شکل ۳: (a) چگالی حالات مربوط به الکترون‌های با اسپین بالا (آبی) و اسپین پایین (قرمز)، (b) مغناطش‌های موضعی در ناحیه کانال (c) ضرایب عبور الکترون‌های با اسپین بالا (آبی) و اسپین پایین (قرمز) به ازای  $U_{eff} = 0$ .

### مرجع‌ها

- [1] Ch. Jin, H. Lan, L. Peng, K. Suenaga, S. Iijima, *Phys. Rev. Lett.* **102**, (2009) 205501.
- [2] L. Ravagnan, N. Manini, E. Cinquanta, G. Onida, D. Sangalli, C. Motta, M. Devetta, A. Bordoni, P. Piseri, P. Milani, *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 245502.
- [3] Z. Y. Li, W. Sheng, Z. Y. Ning, Z. H. Zhang, Z. Q. Yang, and H. Guo, *Phys. Rev. B* **80**, (2009) 115429.
- [4] Y. H. Wei, Y. Xu, J. Wang, and H. Guo, *Phys. Rev. B* **70**, (2004) 193406.
- [5] M. G. Zeng, L. Shen, Y. Q. Cai, Z. D. Sha, Y. P. Feng, *App. Phys. Lett.* **96**, (2010) 042104.
- [6] R. T. Clay, R.P. Hardikar, *Phys. Rev. Lett.* **95**, (2005) 096401.
- [7] M. Knap, E. Arrigoni, W. von der Linden, *Phys. Rev. B* **88**, (2013) 054301.
- [8] J. Bonča, S. A. Trugman, *Phys. Rev. B* **64**, (2001) 094507.
- [9] A. Saffarzadeh and R. Farghadan, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 023106 (2011).