

ترابرد دره‌ای و اسپینی و مقاومت مغناطیسی در تک لایه بوروفین

حسین گل فشان^۱، نرگس نیکوفرد^{۱*}، حسین نیکوفرد^۱، و مهدی اسماعیل‌زاده^۲

۱. پژوهشکده نانو، دانشگاه کاشان، کاشان

۲. دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت، تهران

*پست الکترونیکی: nikoofard@kashanu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۴/۰۲/۲۱؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۴/۰۵/۲۸)

چکیده

در این مقاله، به بررسی ترابرد اسپینی و دره‌ای الکترون‌ها از طریق اتصال فرومغناطیس - عادی - فرومغناطیس در تک لایه بوروفین 8-pmmn می‌پردازیم. به ناحیه عادی یک ولتاژ دریچه^۱ اعمال می‌شود و به دو طرف این ناحیه، میدان مغناطیسی تبدالی از طریق زیرلایه فرومغناطیس اعمال می‌گردد. میدان تبدالی باعث شکستن تبهگنی اسپین و در نتیجه قطبش اسپینی می‌گردد. از طرف دیگر، ولتاژ دریچه باعث قطبش دره‌ای در سامانه می‌شود. قطبش دره‌ای ناشی از ولتاژ دریچه به علت وجود مخروط‌های دیراک کج و ناهمسانگرد در ساختار بوروفین است. درحالی‌که، در موادی مانند گرافین با مخروط‌های همسانگرد، ولتاژ دریچه نمی‌تواند قطبش دره‌ای ایجاد کند و باید به سامانه کرنش اعمال گردد. سامانه پیشنهادی ما می‌تواند به عنوان صافی دره‌ای و اسپینی کامل رفتار کند؛ به طوری که ویژگی پالایشی با تغییر انرژی فرمی و ولتاژ دریچه قابل کنترل است. مشاهده می‌شود که اگر طول ناحیه عادی از حدی بزرگ‌تر باشد قطبش دره‌ای کامل رخ می‌دهد. با توجه به نتایج بدست آمده، این سامانه می‌تواند در وسایل الکترونیکی و اسپینترونیکی بر پایه بوروفین به کار رود. بررسی مقاومت مغناطیسی کار دیگری است که انجام شده و حاکی از قابلیت بالقوه این ماده در ساخت حافظه‌های اسپینی است.

واژه‌های کلیدی: تک لایه بوروفین، ترابرد کوانتومی، وسایل نانوالکترونیک، صافی اسپینی و دره‌ای، مقاومت مغناطیسی

۱. مقدمه

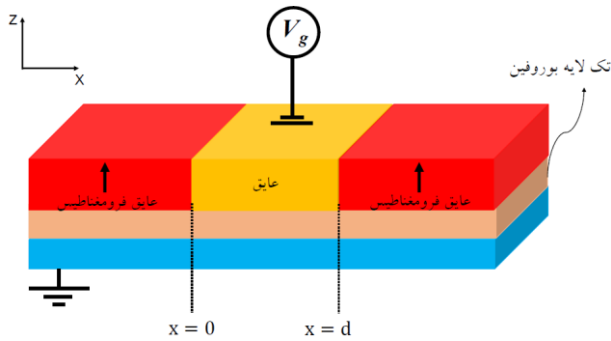
با کشف گرافین، ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی مواد تک لایه‌ای مانند سیلیسین، ژرمانین، فسفرین و بوروفین از لحاظ نظری و تجربی مورد بررسی قرار گرفتند. همچنین کاربرد این مواد در وسایل نانو الکترونیک، ذخیره انرژی، انتقال اطلاعات و کامپیوترهای کوانتومی پیش‌بینی شد [۱-۳].

فازهای مختلفی از بوروفین نظیر $1-pmmn$ ، $2-pmmn$ و $3-pmmn$ از دیدگاه نظری و تجربی مورد مطالعه قرار گرفته‌اند و ویژگی‌هایی شامل فلزی بودن، انعطاف‌پذیری مکانیکی، شفافیت و ابررسانایی در آنها شناخته شده است. بررسی رسانایی طولی و رسانندگی هال نشان‌دهنده وجود مخروط‌های دیراک کج و ناهمسانگرد در بوروفین است [۴]. به علت این ناهمسانگردی، ساختار نواری بوروفین در جهت دسته‌سندلی، خاصیت فلزی و در جهت زیگزاگ، دارای گاف است. بررسی ویژگی‌های اپتیکی، مکانیکی و تراپردی این ماده چشم‌انداز وسیعی را در زمینه‌های پزشکی، نظامی، اپتوالکترونیک و نانو الکترونیک به روی پژوهشگران گشوده است [۳ و ۵ و ۶]. بوروفین در باتری‌های یون-فلزی به عنوان ماده آند به کار رفته و در واکنش‌های تکامل هیدروژن و کاهش اکسیژن دارای عملکرد کاتالیزوری بالا است. ویژگی‌هایی نظیر ابرخازن، آشکارساز نوری، ذخیره‌ساز هیدروژن (به دلیل جرم سبک عنصر بور)، حسگر گازی برای شناسایی و تشخیص مولکول‌های گاز CO ، NO ، NO_2 و NH_3 از دیگر کاربردهای بالقوه بوروفین هستند [۳ و ۷-۱۰].

اثر هال القایی در تک لایه بوروفین تحت تابش نور قطبیده نشان می‌دهد که تغییر شدت نور منجر به باز شدن گاف در تحریکات تک ذره‌ای و دو ذره‌ای شده و گذار از حالت فلزی به حالت عایق رخ می‌دهد [۱۱]. با استفاده از تنش برشی خارجی، امکان تبدیل بوروفین فلزی $1-pmmn$ به یک نیمه‌هادی با شکاف نواری غیرمستقیم وجود دارد [۱۲]. صافی قابل تنظیم برای بردار موج در اتصالات بر پایه بوروفان و همچنین وابستگی تراپرد الکترونی به طول ناحیه سد پتانسیل و انرژی فرودی در این اتصال مطالعه شده‌اند که در وسایل نانو

الکترونیک مبتنی بر بوروفان مفید است [۱۳]. مطالعات بر روی ویژگی‌های مغناطیسی بوروفین $1-pmmn$ در حضور میدان الکتریکی و ناخالصی باردار، نشان دهنده تغییر فاز از فلز به نیمه‌فلز و فلز به نیمه‌رسانا است [۱۴]. محاسبه جریان اسپینی در اتصال عادی-فرومغناطیس-عادی (N-F-N) مواد شبیه گرافین نشان می‌دهد که کج‌شدگی مخروط‌های دیراک به شدت بر ویژگی‌های تراپرد و در نتیجه رسانایی اسپین تأثیرگذار است [۱۵] و نقش این مخروط‌ها در تونل‌زنی غیرعادی کلاین در اتصالات n-p و n-p-n بر پایه بوروفین مطالعه شده است [۱۶] و [۱۷]. قطبش دره‌ای در بوروفین $1-pmmn$ در حضور سد مغناطیسی-الکتریکی به جهت‌گیری سد بستگی دارد. به طوری که، اگر جهت سد در امتداد جهت کج‌شدگی مخروط‌های دیراک باشد قطبش صفر و اگر جهت‌گیری سد، عمود بر جهت کج‌شدگی باشد قطبش نزدیک به صفر در صد است [۱۸]. نظریه تابعی چگالی در نانو نوارهای بوروفین $1-pmmn$ نشان می‌دهد که ویژگی‌های مغناطیسی نوارها به شدت به جهت برش و مشخصات لبه بستگی دارند. به طوری که، یک نوار با عرض مشخص می‌تواند مانند یک فلز معمولی یا یک فرومغناطیس رفتار نماید [۱۹]. تراپرد اسپینی در نانونوارهای بوروفین زیگزاگ با استفاده از روش تابع گرین غیرتعدالی نشان می‌دهد که تراپرد به پهنای نوار حساس است [۲۰]. ویژگی‌های تراپرد اسپینی در یک اتصال n-p-n بر پایه بوروفین $1-pmmn$ نشان می‌دهد که قابلیت پالایشی اسپینی را می‌توان با تغییر ولتاژ دریچه تنظیم کرد [۲۱]. در ترانزیستور اثر میدان اسپینی بر پایه نانونوار بوروفین $1-pmmn$ ، بزرگی جریان، و نسبت I_{on}/I_{off} چندین برابر بزرگتر از ترانزیستورهای مشابه در گرافین و سیلیسین است [۲۲].

در این مقاله قصد داریم تراپرد اسپینی و دره‌ای را در اتصال فرومغناطیس-عادی-فرومغناطیس بوروفین تک لایه بررسی کنیم. بدین منظور دو میدان مغناطیسی متبادلی از طریق زیرلایه‌های فرومغناطیس به پایانه‌ها اعمال می‌شوند. این میدان‌ها باعث قطبش اسپینی در سامانه شده به طوری که با تغییر انرژی فرمی می‌توان صافی اسپینی کامل را مشاهده و آن را کنترل نمود. همچنین تغییر



شکل ۱. طرح‌واره‌ای از اتصال فرومغناطیس-عادی-فرومغناطیس تک لایه بوروفین. ولتاژ دریچه V_g به ناحیه عادی (کانال) به طول d و دو میدان مغناطیسی متبادلی، ناشی از اثر مجاورت یک عایق فرومغناطیسی، به پایانه‌ها اعمال می‌شوند. یک زیرلایه عایق (به رنگ آبی) برای حذف نفوذ جریان دریچه استفاده شده است.

با نوشتن هامیلتونی در نمایش ماتریسی، ویژه مقادیر آن به صورت زیر بدست می‌آیند:

$$E = \eta \hbar v_t k_y + eV_g + \sigma M \pm \hbar \sqrt{(v_x k_x)^2 + (v_y k_y)^2} \quad (2)$$

در رابطه بالا، علامت مثبت و منفی به ترتیب بیانگر نوارهای رسانش و ظرفیت هستند. سه ناحیه مشخص شده در شکل ۱ را به صورت پایانه چپ (L)، ناحیه کانال (C) و پایانه راست (R) نام‌گذاری می‌کنیم. اگر الکترون فرودی با k_y و انرژی فرمی E مشخص، از سمت چپ به ناحیه کانال برخورد کند با استفاده از رابطه (۲)، k_x به صورت زیر بدست می‌آید:

$$k_x = \pm \frac{1}{\hbar v_x} \sqrt{(E - \sigma M - \eta \hbar v_t k_y)^2 - (\hbar v_y k_y)^2} \quad (3)$$

که علامت مثبت نشان دهنده الکترون‌های فرودی (با بردار موج k_x^i) به پایانه چپ و الکترون‌های عبوری (با بردار موج k_x^f) در پایانه راست هستند. علامت منفی بیانگر الکترون‌های بازتابی با بردار موج k_x^r از پایانه چپ است. در تشابه با رابطه (۳)، بردار موج الکترون‌ها در ناحیه کانال به صورت زیر خواهد بود:

$$q_x = \pm \frac{1}{\hbar v_x} \sqrt{(E - eV_g - \eta \hbar v_t k_y)^2 - (\hbar v_y k_y)^2} \quad (4)$$

که علامت مثبت و منفی به ترتیب نشان دهنده الکترون‌های

جهت مغناطش باعث تغییر علامت قطبش می‌گردد. اعمال ولتاژ دریچه باعث قطبش دره‌ای شده که قابلیت پالایش دره‌ای کامل این اتصال را نشان می‌دهد. این از مزایای بوروفین نسبت به گرافین است، زیرا در گرافین برای دستیابی به قطبش دره‌ای نیاز به استفاده از روش‌های دشواری مانند اعمال کرنش است. این قطبش دره‌ای را می‌توان با انرژی فرمی کنترل نمود. علاوه بر آن، با تنظیم ولتاژ دریچه می‌توان هر دو قطبش اسپینی و قطبش دره‌ای را کنترل کرد. نشان می‌دهیم اگر طول ناحیه عادی در اتصال، بزرگتر از مقدار مشخصی (۷۷ نانومتر) انتخاب شود قطبش دره‌ای کامل رخ می‌دهد. بنابراین بوروفین می‌تواند یک ماده مناسب برای وسایل الکترونیکی و اسپیترونیکی پیشنهاد شود. همچنین مقاومت مغناطیسی را در این سامانه بررسی می‌کنیم که بیانگر قابلیت این ماده برای استفاده در حافظه‌های اسپینی است.

۲. الگو و محاسبات

سامانه مورد بحث در این مقاله، تک لایه بوروفین از نوع $1-pmmn$ است که یک اتصال فرومغناطیس-عادی-فرومغناطیس را مطابق شکل ۱ تشکیل می‌دهد. دو میدان مغناطیسی متبادلی در راستای z ، در اثر مجاورت عایق فرومغناطیسی، به پایانه‌های چپ و راست القا شده و یک ولتاژ دریچه به ناحیه عادی (کانال) به طول d اعمال می‌گردد. هامیلتونی موثر این اتصال را در الگوی تنگ‌بست می‌توان به صورت زیر نوشت [۱۷]:

$$H = \eta \hbar (v_x k_x \hat{\sigma}_x + v_y k_y \hat{\sigma}_y + v_t k_y I) + (eV_g + \sigma M) I, \quad (1)$$

که در رابطه بالا، $v_x = 0.186 v_F$ و $v_y = 0.697 v_F$ سرعت‌های ناهمسانگرد، $v_t = 0.327 v_F$ سرعت کج شدگی و $v_F = 1.0^6 m/s$ سرعت فرمی هستند. $\eta = \pm 1$ شاخص دره‌های K و K' ، σ و \hbar ثابت پلانک، I ماتریس واحد، σ_x و σ_y ماتریس‌های پائولی، $-e$ بار الکترون و k_x و k_y مولفه‌های x و y بردار موج برای موج فرودی به ناحیه عادی (و موج خروجی از ناحیه عادی) هستند. V_g ولتاژ دریچه و M شدت میدان مغناطیسی متبادلی است.

که در آن

$$A_{i(r)} = \eta \hbar \frac{v_x k_x^{i(r)} + i v_y k_y^{i(r)}}{E - \eta \hbar v_t k_y^{i(r)} - \sigma M},$$

$$B_{i(r)} = \eta \hbar \frac{v_x q_x^{i(r)} + i v_y q_y^{i(r)}}{E - \eta \hbar v_t q_y^{i(r)} - e V_g}. \quad (8)$$

با استفاده از رابطه (۷) احتمال عبور الکترون از این اتصال، به صورت $T_{\eta}^{\sigma} = |t_{\eta}^{\sigma}|^2$ است. همچنین احتمال عبور وابسته به اسپین برای اسپین‌های بالا و پایین برابر است با:

$$T^{\uparrow(\downarrow)} = T_{K(K')}^{\uparrow(\downarrow)} + T_{K(K')}^{\downarrow(\uparrow)}. \quad (9)$$

احتمال عبور وابسته به دره نیز برای دره‌های K و K' با رابطه زیر قابل محاسبه است:

$$T_{K(K')} = T_{K(K')}^{\uparrow} + T_{K(K')}^{\downarrow}. \quad (10)$$

با استفاده از روابط (۹) و (۱۰)، قطبش اسپین و قطبش دره با روابط زیر معرفی می‌شوند:

$$P_s = \frac{T^{\uparrow} - T^{\downarrow}}{T^{\uparrow} + T^{\downarrow}}, \quad (11)$$

$$P_v = \frac{T_K - T_{K'}}{T_K + T_{K'}}. \quad (12)$$

در روابط بالا، اگر $P_s = \pm 1$ باشد جریان اسپین (دره) کاملاً قطبیده خواهد داشت.

با استفاده از رابطه لاندائور-بوتیکر، رسانندگی یک سامانه به صورت زیر به دست می‌آید [۲۳]:

$$G_{\eta}^{\sigma}(E) = G \cdot d \int_{-k_y^{\max}}^{+k_y^{\max}} T_{\eta}^{\sigma}(E, k_y) dk_y, \quad (13)$$

که در آن $G = \frac{e^2}{h}$. بنابراین، رسانندگی اسپینی و دره‌ای به ترتیب با روابط زیر تعریف می‌شوند [۲۴]:

$$G^{\uparrow(\downarrow)} = (G_K^{\uparrow(\downarrow)} + G_{K'}^{\uparrow(\downarrow)}) / 2, \quad (14)$$

$$G_{K(K')} = (G_{K(K')}^{\uparrow} + G_{K(K')}^{\downarrow}) / 2. \quad (15)$$

در نهایت، قطبش اسپینی و دره‌ای رسانندگی به صورت زیر

فرودی و بازتابی با بردار موج q_x^r و q_x^i هستند. برای سهولت، ویژه توابع را به صورت $\Psi = (1, n)^T$ در نظر می‌گیریم که با حل معادله شرودینگر و استفاده از رابطه (۱) خواهیم داشت

$$n = \frac{\eta \hbar v_x k_x + i \eta \hbar v_y k_y}{E - \eta \hbar v_t k_y - e V_g - \sigma M}. \quad (5)$$

بر طبق اصول مکانیک کوانتوم، توابع موج در سه ناحیه به صورت زیر خواهند بود:

$$\Psi_L = \begin{pmatrix} 1 \\ \eta \frac{\hbar v_x k_x^i + i \hbar v_y k_y^i}{E - \eta \hbar v_t k_y^i - \sigma M} \end{pmatrix} e^{i(k_x^i x + k_y^i y)}$$

$$+ r_{\eta}^{\sigma} \begin{pmatrix} 1 \\ \eta \frac{\hbar v_x k_x^r + i \hbar v_y k_y^r}{E - \eta \hbar v_t k_y^r - \sigma M} \end{pmatrix} e^{i(k_x^r x + k_y^r y)} \quad x < 0. \quad (6)$$

$$\Psi_C = a \begin{pmatrix} 1 \\ \eta \frac{\hbar v_x q_x^i + i \hbar v_y q_y^i}{E - \eta \hbar v_t q_y^i - e V_g} \end{pmatrix} e^{i(q_x^i x + k_y^i y)}$$

$$+ b \begin{pmatrix} 1 \\ \eta \frac{\hbar v_x q_x^r + i \hbar v_y q_y^r}{E - \eta \hbar v_t q_y^r - e V_g} \end{pmatrix} e^{i(q_x^r x + k_y^r y)} \quad \cdot < x < d$$

$$\Psi_R = t_{\eta}^{\sigma} \begin{pmatrix} 1 \\ \eta \frac{\hbar v_x k_x^i + i \hbar v_y k_y^i}{E - \eta \hbar v_t k_y^i - \sigma M} \end{pmatrix} e^{i(k_x^i x + k_y^i y)}. \quad x > d$$

در معادلات بالا، r_{η}^{σ} و t_{η}^{σ} به ترتیب ضرایب عبور و بازتاب هستند که به زیرنویس اسپین و دره وابسته‌اند. ضرایب a و b دامنه‌های پراکندگی در ناحیه عادی هستند. به علت تقارن در جهت y ، k_y در سه ناحیه یکسان است. لذا با استفاده از توابع موج بالا و اعمال شرایط مرزی در $x = 0$ و $x = d$ ، ضریب عبور به صورت زیر به دست می‌آید:

$$t_{\eta}^{\sigma} = \frac{(A_i - A_r)(B_i - B_r) e^{i(q_x^i + q_x^r - k_x^i)d}}{(A_r - B_r)(A_i - B_i) e^{iq_x^i d} + (B_i - A_r)(A_i - B_r) e^{iq_x^r d}} \quad (7)$$

بیان می‌شود:

$$P_{G_s} = \frac{G^\uparrow - G^\downarrow}{G^\uparrow + G^\downarrow}, \quad (16)$$

$$P_{G_v} = \frac{G_k - G_{k'}}{G_k + G_{k'}}. \quad (17)$$

از مقدار ۰/۱ به ۰/۲ بازه انرژی مربوط به قطبش کامل بزرگتر می‌شود. علت این است که با توجه به معادله (۳)، k_x باید حقیقی باشد. بنابراین،

$$(E - \sigma M)^2 - 2\eta\hbar v_t k_y (E - \sigma M) + (v_t^2 - v_y^2)(\hbar k_y)^2 > 0. \quad (18)$$

پس در نتیجه

$$E > \sigma M + \hbar k_y (\eta v_t + v_y), \quad (19)$$

$$E < \sigma M + \hbar k_y (\eta v_t - v_y).$$

با استفاده از روابط بالا، ناحیه گاف برابر است با $\delta E = 2\hbar v_y k_y$. بنابراین با افزایش k_y می‌توانیم بازه انرژی مربوط به قطبش کامل را بزرگتر کنیم.

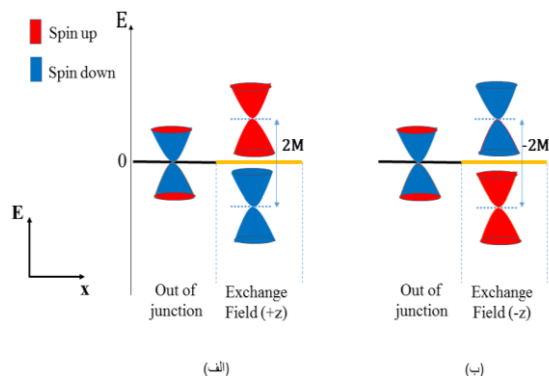
شکل ۳ مشابه شکل‌های ۲ الف و ۲ ب رسم شده است، با این تفاوت که جهت مغناطش‌ها در راستای z- است. مشاهده می‌شود که در بازه $275 < E < 325 \text{ meV}$ احتمال عبور اسپین پایین صفر و احتمال عبور اسپین بالا، یک است. یعنی با تغییر جهت مغناطش از +z به -z علامت قطبش اسپینی از -۱ به +۱ تغییر می‌کند. این ویژگی بیانگر کنترل قابلیت پالایشی با تغییر جهت مغناطش است. البته می‌دانیم که تغییر جهت مغناطش به سادگی تغییر دادن انرژی فرمی نیست.

برای توصیف بهتر نتایج شکل‌های ۲ و ۳، طرح‌واره‌ای از نوارهای رسانش و ظرفیت بوروفین تک لایه را در شکل ۴ رسم کرده‌ایم. با اعمال میدان تبدلی (M)، نوارها به اندازه M جابه‌جا می‌شوند. علاوه بر آن، تبهگنی اسپینی شکسته شده و اسپین بالا و پایین از هم جدا می‌شوند. در شکل ۴ الف، مغناطش در راستای +z اعمال شده است. لذا در بازه انرژی مربوط به قطبش کامل، میدان تبدلی برای حامل‌ها با اسپین بالا، به عنوان سدّ و برای اسپین‌های پایین به عنوان چاه عمل می‌کند. اما در شکل ۴ ب، در بازه انرژی مربوط به قطبش کامل که مغناطش در راستای z- اعمال می‌شود، میدان تبدلی برای حامل‌ها با اسپین پایین به عنوان سدّ و برای اسپین‌های بالا به عنوان چاه رفتار می‌کند.

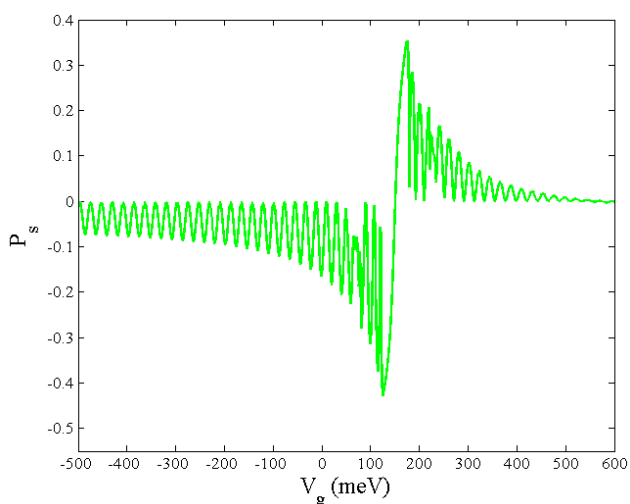
۳. بحث و نتایج:

اتصال فرومغناطیس - عادی - فرومغناطیس معرفی شده در شکل ۱ را در نظر می‌گیریم و به بررسی اثرات شدت مغناطش، ولتاژ دریچه، طول ناحیه عادی و اندازه بردار موج عرضی بر نمودارهای احتمال عبور و قطبش اسپینی و دره‌ای می‌پردازیم.

در شکل ۲، احتمال عبور وابسته به اسپین و قطبش اسپینی برحسب انرژی فرمی به ازای شدت مغناطش $M = 300 \text{ meV}$ (در جهت +z) در غیاب ولتاژ دریچه رسم شده است. رفتار نوسانی احتمال عبور در شکل ۲ الف، ناشی از اثر تداخل بین امواج الکترونی فرودی و بازتابی از سدهای پتانسیل موجود در اتصال است. مشاهده می‌شود که اعمال میدان تبدلی باعث جدا شدن اسپین‌های بالا و پایین شده و در نتیجه الکترون‌ها اسپین - قطبیده می‌شوند. لازم به توضیح است که با توجه به معادله (۹)، احتمال عبور اسپینی حاصل جمع احتمال عبور دره بالا و پایین است که مقدار بیشینه هر کدام، برابر با یک است. لذا حداکثر مقدار احتمال عبور در شکل، برابر ۲ می‌شود. با توجه به شکل ۲ ب، قطبش اسپینی در بازه انرژی $275 < E < 325 \text{ meV}$ برابر با -۱ است که نشان دهنده قطبش کامل است. یعنی در این بازه انرژی، سامانه مانند یک صافی اسپین پایین عمل می‌کند. البته در شکل ۲ الف نیز می‌بینیم که احتمال عبور اسپین بالا در این بازه انرژی، صفر است. به ازای انرژی‌های $E > 500 \text{ meV}$ مقدار قطبش اسپینی صفر شده که نشان دهنده جریان الکترونی غیرقطبیده در سامانه است. با توجه به این شکل، می‌توان با تنظیم انرژی فرمی (از طریق یک ولتاژ پستی^{۱)}، قطبش اسپینی را کنترل کرد. شکل ۲ ج، اثر k_y روی قطبش اسپینی را نشان می‌دهد. با افزایش k_y

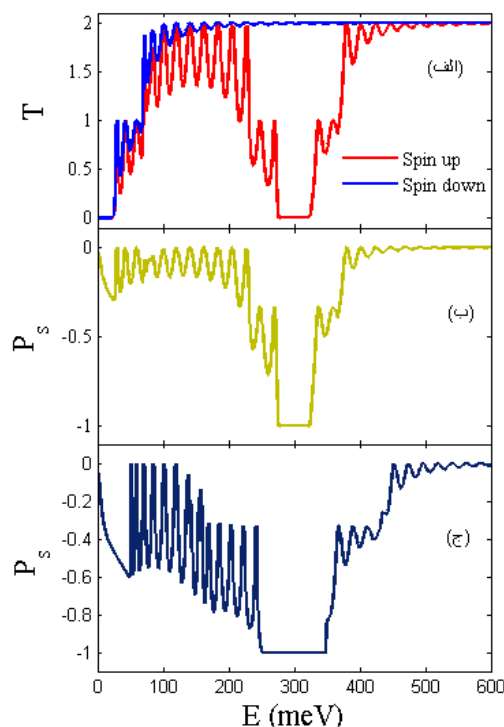


شکل ۴. نمایی از ساختار نواری تک لایه بوروفین در حضور میدان مغناطیسی تبادلی. الف. میدان تبادلی در راستای $+z$ علاوه بر جابه‌جا کردن نوارهای رسانش و ظرفیت به اندازه M ، باعث شکسته شدن تبهگنی اسپینی و جابه‌جایی نوارهای اسپین بالا (اسپین پایین) به اندازه $M (-M)$ می‌شود. ب. میدان تبادلی در راستای $-z$ اعمال می‌گردد.

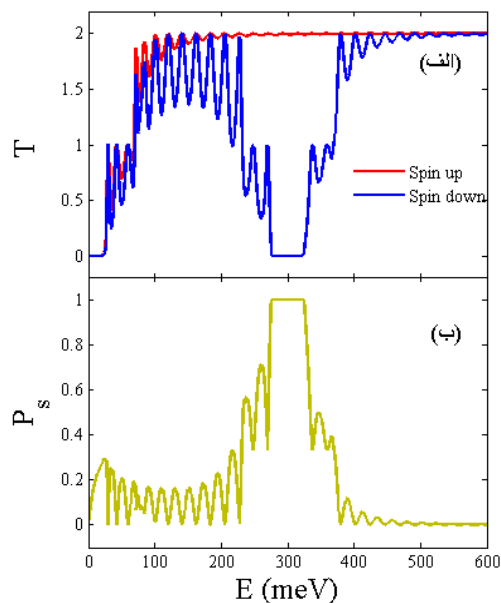


شکل ۵. قطبش اسپینی برحسب ولتاژ دریاچه به ازای $E = 150$ meV. سایر پارامترها برابر هستند با $k_y = 0/1 \text{ nm}^{-1}$ و $d = 80 \text{ nm}$ ، $M = 300$ meV.

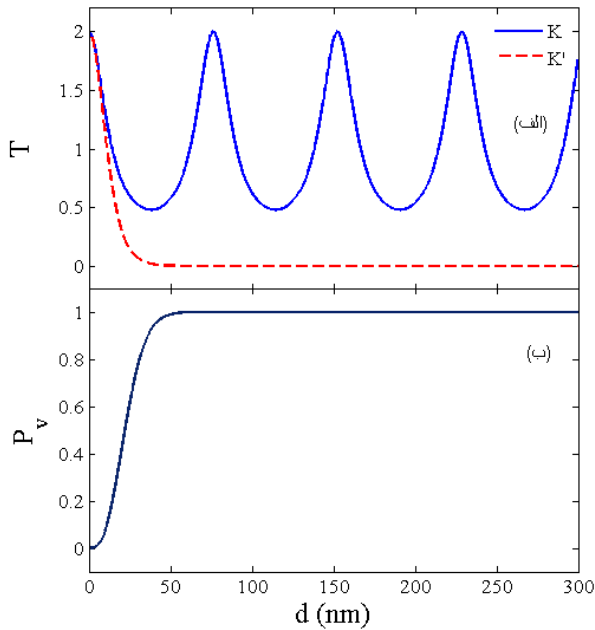
برای بررسی اثر ولتاژ دریاچه روی ترابرد، شکل ۵ نمودار قطبش اسپینی برحسب ولتاژ دریاچه را برای انرژی فرمی $E = 150$ meV نشان می‌دهد. قطبش اسپینی به ازای $V_g < 150$ meV مقدار منفی، به ازای $150 < V_g < 500$ meV مقدار مثبت و به ازای $V_g > 500$ meV مقدار صفر دارد. لذا می‌توان گفت که با تغییر ولتاژ دریاچه، قطبش اسپینی قابل تنظیم است.



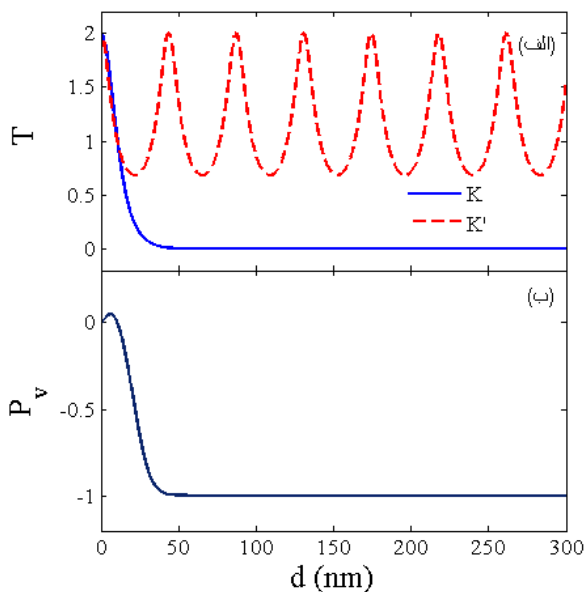
شکل ۲. الف. احتمال عبور وابسته به اسپین، و ب. قطبش اسپینی برحسب انرژی فرمی به ازای $d = 80 \text{ nm}$ ، $M = 300 \text{ meV}$ و $k_y = 0/1 \text{ nm}^{-1}$ در جهت $+z$ هستند. ج. همانند قسمت ب. به ازای $k_y = 0/2 \text{ nm}^{-1}$.



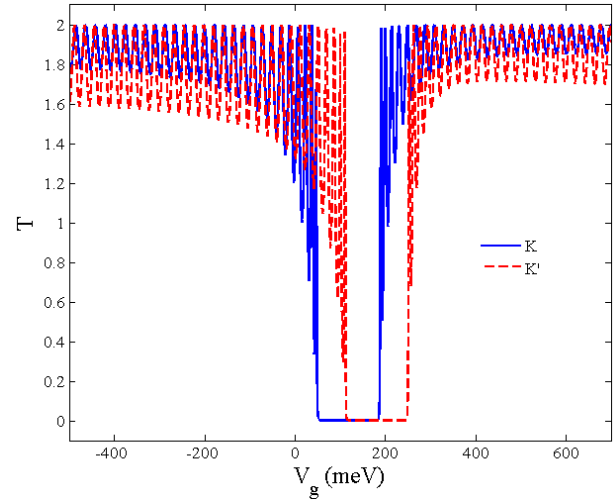
شکل ۳. الف. احتمال عبور وابسته به اسپین، و ب. قطبش اسپینی برحسب انرژی فرمی به ازای $d = 80 \text{ nm}$ ، $M = 300 \text{ meV}$ و $k_y = 0/1 \text{ nm}^{-1}$ در جهت $-z$ هستند.



شکل ۷. الف. احتمال عبور، و ب. قطبش دره‌ای بر حسب طول ناحیه عادی به ازای $E = 120 \text{ meV}$. منحنی آبی رنگ (قرمز خط چین) مربوط به احتمال عبور دره $K(K')$ است. سایر پارامترها برابر هستند با $V_g = 150 \text{ meV}$, $M = 300 \text{ meV}$ و $k_y = 0/1 \text{ nm}^{-1}$.



شکل ۸. الف. احتمال عبور، و ب. قطبش دره‌ای بر حسب طول ناحیه عادی به ازای $E = 190 \text{ meV}$. منحنی آبی رنگ (قرمز خط چین) مربوط به احتمال عبور دره $K(K')$ است. سایر پارامترها برابر هستند با $V_g = 150 \text{ meV}$, $M = 300 \text{ meV}$ و $k_y = 0/1 \text{ nm}^{-1}$.



شکل ۶. احتمال عبور وابسته به دره بر حسب ولتاژ دریاچه به ازای $E = 150 \text{ meV}$. سایر پارامترها برابر هستند با $k_y = 0/15 \text{ nm}^{-1}$ و $d = 80 \text{ nm}$, $M = 300 \text{ meV}$.

در شکل ۶، احتمال عبور وابسته به دره بر حسب ولتاژ دریاچه برای یک انرژی فرمی مشخص ($E = 150 \text{ meV}$) رسم شده است. در بازه $50/5 < V_g < 113/5 \text{ meV}$ فقط الکترون‌های با دره K' می‌توانند از سامانه عبور کنند. لذا سامانه به عنوان صافی دره‌ای کامل K' عمل می‌کند. در بازه $186 < V_g < 249 \text{ meV}$ تنها الکترون‌های با دره K از سامانه عبور خواهند کرد. لذا یک صافی دره‌ای کامل K خواهیم داشت. در بازه $113/5 < V_g < 186 \text{ meV}$ احتمال عبور برای هر دو دره صفر است. یعنی سامانه به صورت خاموش عمل می‌کند. لذا می‌توان نتیجه گرفت که با تغییر ولتاژ دریاچه، سامانه می‌تواند سه حالت از خود نشان دهد: الف. صافی دره‌ای K ، ب. صافی دره‌ای K' و ج. حالت خاموش. این نتایج حاکی از کنترل قطبش دره‌ای و قابلیت پالایش دره‌ای با اعمال ولتاژ دریاچه است.

شکل‌های ۷ و ۸، احتمال عبور وابسته به دره و قطبش دره‌ای را بر حسب طول ناحیه عادی به ازای دو مقدار مشخص از انرژی فرمی یعنی $E = 120 \text{ meV}$ و $E = 190 \text{ meV}$ نشان می‌دهند. در شکل ۷، به ازای انرژی $E = 120 \text{ meV}$ احتمال عبور برای دره K رفتار نوسانی و مقدار غیر صفر دارد، اما احتمال عبور برای دره K' با افزایش d میرا شده و به سمت

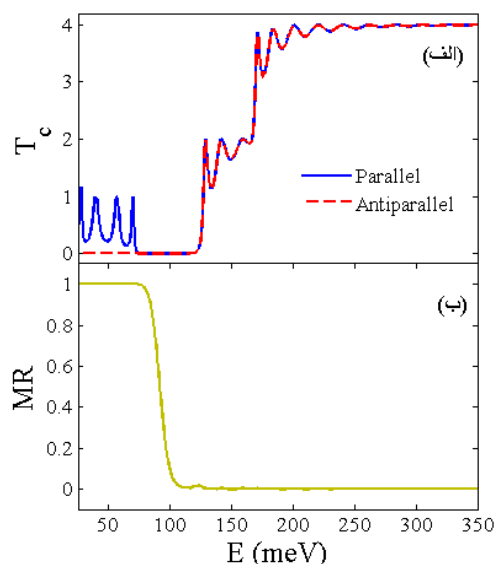
به طوری که $T_c^P (T_c^{Ap})$ احتمال عبور بار در پیکربندی موازی (پادموازی) هستند. در شکل ۹. الف، مشاهده می‌شود که احتمال عبور بار در بازه انرژی $25 < E < 75$ meV به ازای پیکربندی موازی، غیر صفر و به ازای پیکربندی پادموازی، صفر است. با توجه به شکل ۹. ب، در همین بازه انرژی، مقاومت مغناطیسی ۱۰۰ درصد و مثبت است. به ازای انرژی فرمی $E > 75$ meV، مقادیر احتمال عبور برای هر دو پیکربندی مساوی است. در نتیجه مقاومت مغناطیسی کاهش یافته و به صفر میرا می‌شود. اهمیت کاربردی این اثر در اسپینترونیک، به‌ویژه در حافظه‌های اسپینی است.

در ادامه، ویژگی‌های رسانندگی اسپینی و دره‌ای برای اتصال بوروفین مطالعه شده و نتایج آن در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ نشان داده شده‌اند. شکل ۱۰، نشان دهنده رسانندگی اسپین بالا و پایین به عنوان تابعی از ولتاژ دریاچه (V_g) است. همان‌طور که در این شکل دیده می‌شود، رسانندگی وابسته به اسپین است و قطبش اسپینی (P_{G_s}) از -0.65 تا $+0.25$ تغییر می‌کند. رسانندگی دره‌ای در شکل ۱۱ رسم شده که نشان دهنده عدم جداسازی دره‌ها در این حالت و قطبش دره‌ای صفر است. مقاومت مغناطیسی با استفاده از رسانش از رابطه زیر به دست می‌آید [۲۵]:

$$MR_G = \frac{G_c^P - G_c^{Ap}}{G_c^P + G_c^{Ap}}, \quad (22)$$

به طوری که $G_c^P (G_c^{Ap})$ رسانندگی باری در پیکربندی موازی (پادموازی) هستند. مقاومت مغناطیسی بر حسب انرژی فرمی در شکل ۱۲ رسم شده است. مشاهده می‌شود که با تغییر انرژی فرمی مقدار مقاومت نوسان کرده و بین دو مقدار مثبت و منفی تغییر علامت می‌دهد.

اگر سامانه را نسبت به دستگاه مختصات به اندازه θ بچرخانیم می‌توانیم به طور همزمان قطبش اسپینی و دره‌ای داشته باشیم. به عنوان نمونه، در شکل ۱۳ این دو قطبش برای $\theta = 45^\circ$ رسم شده که جداسازی دره‌ها را در بیشینه مقدار ۴ درصد نشان می‌دهد. در حالی که، در شکل ۱۱ قطبش دره‌ای برای زاویه صفر وجود نداشت. جزئیات بیشتر در مورد وابستگی تراپرد به زاویه سامانه، در مرجع [۱۷] وجود دارد.



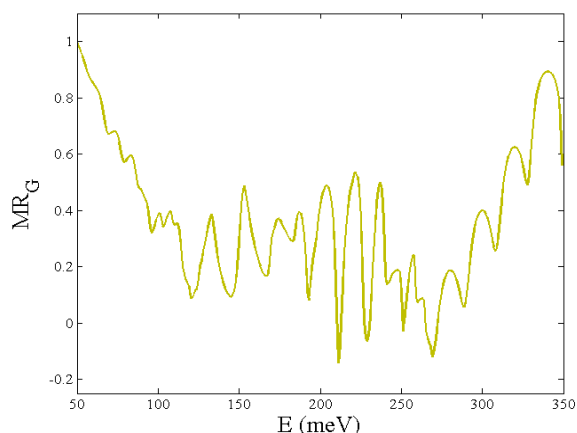
شکل ۹. الف. احتمال عبور بار به ازای دو پیکربندی مغناطش موازی و پادموازی، و ب. مقاومت مغناطیسی بر حسب انرژی فرمی. سایر پارامترها برابر هستند با $M = 50$ meV، $d = 80$ nm و $k_y = 0.1$ nm⁻¹، $V_g = 100$ meV

صفر می‌رود. با توجه به شکل ۷. ب، به ازای $d > 72$ nm، $P_v = +1$ و سامانه به عنوان صافی دره‌ای کامل رفتار می‌کند. برخلاف آن، با توجه به شکل ۸، به ازای انرژی $E = 190$ meV احتمال عبور برای دره K' رفتار نوسانی و غیر صفر داشته ولی احتمال عبور دره K با افزایش d به سمت صفر میرا می‌شود. در شکل ۸. ب، به ازای $d > 77$ nm و $P_v = -1$ ، سامانه به عنوان صافی دره‌ای کامل رفتار خواهد کرد. پس به ازای طول‌های $d > 77$ nm از ناحیه عادی، صافی دره‌ای برای هر دو دره کامل است. با توجه با این دو شکل می‌توان نتیجه گرفت که قابلیت پالایش دره‌ای از K به K' و بالعکس را می‌توان با تغییر طول ناحیه عادی و همچنین انرژی فرمی کنترل کرد.

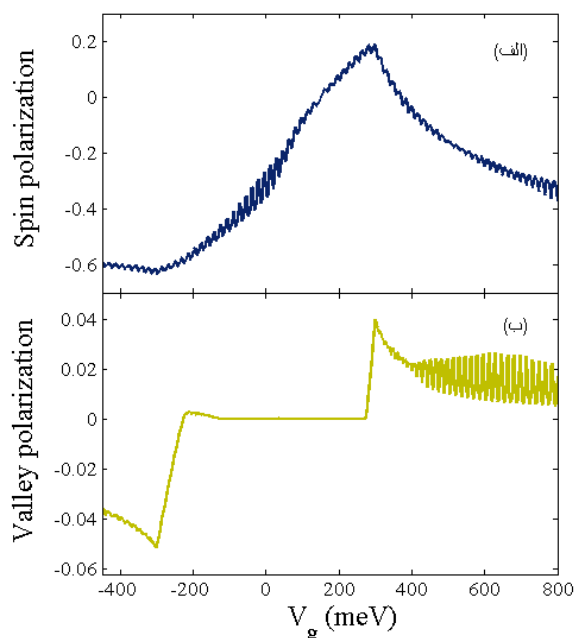
برای بررسی مقاومت مغناطیسی، شکل ۹ احتمال عبور بار (T_c) را به ازای دو پیکربندی مغناطش (موازی و پادموازی) و مقاومت مغناطیسی (MR) را بر حسب انرژی فرمی نشان می‌دهد. این دو کمیت از روابط زیر بدست می‌آیند [۲۵]:

$$T_c = T^\uparrow + T^\downarrow \quad (20)$$

$$MR = \frac{T_c^P - T_c^{Ap}}{T_c^P + T_c^{Ap}} \quad (21)$$

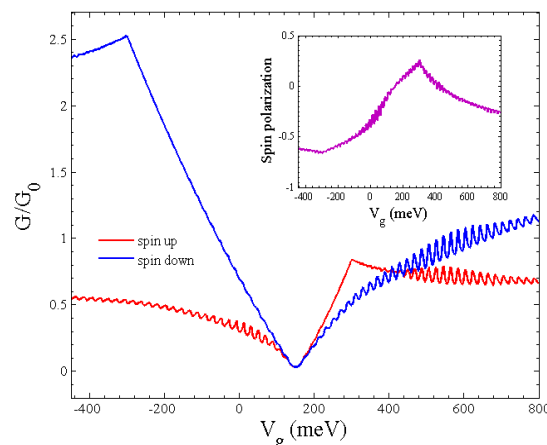


شکل ۱۲. مقاومت مغناطیسی بر حسب انرژی فرمی به ازای $d = 80 \text{ nm}$ و $V_g = 350 \text{ meV}$ ، $M = 50 \text{ meV}$

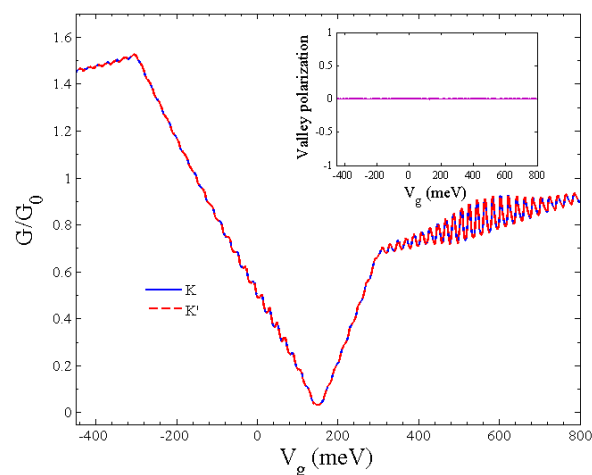


شکل ۱۳. الف. قطبش اسپینی، و ب. قطبش دره‌ای بر حسب ولتاژ دریاچه برای زاویه ۴۵ درجه سامانه. سایر پارامترها برابر هستند با $d = 80 \text{ nm}$ و $M = 300 \text{ meV}$ ، $E = 150 \text{ meV}$

در انتها مقایسه‌ای بین بوروفین با مواد دوبعدی دیگر مانند TMDC^۱ ها که به طور همزمان جریان‌های اسپین-قطبیده و دره-قطبیده دارند [۲۶ و ۲۷]، انجام می‌شود. با توجه به نتایج این مقاله، برای ایجاد قطبش اسپینی و دره‌ای به طور همزمان باید سامانه را نسبت به دستگاه مختصات بچرخانیم اما در مواد دوبعدی دیگر مانند MoS₂ نیازی به چرخش سامانه نیست. در MoS₂ تغییر قطبش در اثر تغییر جهت مغناطش رخ می‌دهد



شکل ۱۰. رسانندگی اسپینی بر حسب ولتاژ دریاچه به ازای $E = 150 \text{ meV}$. شکل کوچک نشان دهنده قطبش اسپینی است. سایر پارامترها برابر هستند با $M = 300 \text{ meV}$ و $d = 80 \text{ nm}$



شکل ۱۱. رسانندگی دره‌ای بر حسب ولتاژ دریاچه به ازای $E = 150 \text{ meV}$. شکل کوچک نشان دهنده قطبش دره‌ای است. سایر پارامترها برابر هستند با $M = 300 \text{ meV}$ و $d = 80 \text{ nm}$

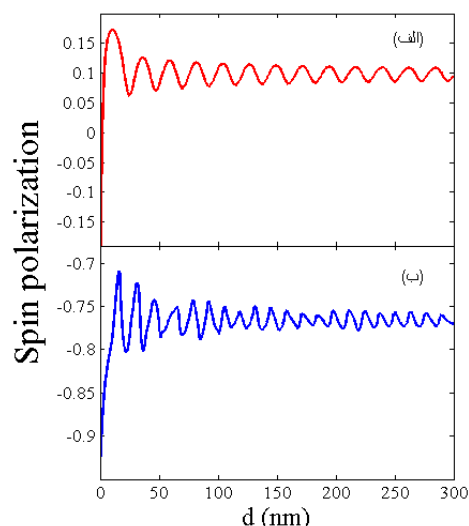
شکل ۱۴، قطبش اسپینی را بر حسب طول ناحیه عادی به ازای دو مقدار مشخص از انرژی فرمی یعنی $E = 80 \text{ meV}$ و $E = 280 \text{ meV}$ نشان می‌دهد. رفتار قطبش با افزایش طول ناحیه عادی، به صورت نوسانی بوده اما در شکل ۱۴. الف مقدار قطبش مثبت و در شکل ۱۴. ب قطبش منفی داریم. بنابراین، می‌توان نتیجه گرفت که قابلیت پالایش اسپینی را می‌توان با تغییر انرژی فرمی کنترل کرد.

^۱ Transition metal dichalcogenide

نقص، می‌توان خاصیت فرومغناطیسی ایجاد کرد. از مزایای آنها داشتن گاف انرژی مناسب و قابلیت استفاده در ترانزیستورهاست. اما در مقایسه با گرافین تحرک پذیری پایین‌تر و طول همدوسی اسپینی کوتاه‌تری دارند [۳۰ و ۳۱]. اما بوروفین در برخی فازها (مثل β_{12}) دارای خاصیت مغناطیسی ذاتی است و با تغییر فاز، می‌توان ویژگی‌های الکترونی و مغناطیسی را تنظیم کرد. این ماده به دلیل ناهمسانگردی ساختاری، پاسخ مغناطیسی وابسته به جهت از خود نشان می‌دهد و در کل مقاومت مغناطیسی در بوروفین به صورت بالقوه نسبت به گرافین و TMD ها بالاست. البته در بوروفین محدودیت‌هایی وجود دارد از جمله: پایداری شیمیایی پایین، ساخت آزمایشگاهی دشوار، عدم امکان جداسازی آسان از زیرلایه (برخلاف گرافین). همچنین داده‌های تجربی محدودی در زمینه بوروفین وجود دارد و بیشتر مطالعات بر پایه محاسبات DFT است [۳۲-۳۴].

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله ویژگی‌های ترابرد دره‌ای و اسپینی را در اتصال فرومغناطیس-عادی-فرومغناطیس بوروفین تک لایه بررسی کردیم. با اعمال میدان تبدالی از طریق زیرلایه مغناطیسی، قطبش اسپینی در سامانه رخ می‌دهد که علامت قطبش را می‌توان با تغییر جهت میدان، عوض کرد. مقادیر قطبش +۱ و -۱ بیانگر قطبش کامل یا پالایش اسپینی کامل است. به طوری که، با در نظر گرفتن k_y بزرگ‌تر، می‌توان بازه انرژی که در آن قطبش کامل رخ می‌دهد را افزایش داد. با اعمال ولتاژ دریچه می‌توان قطبش دره‌ای کامل را به دست آورد، درحالی که در گرافین برای داشتن چنین ویژگی، نیاز به اعمال کرنش است. این خاصیت را می‌توان به عنوان مزیت بوروفین نسبت به گرافین بیان کرد. نشان دادیم که صافی اسپینی و دره‌ای را می‌توان با تنظیم ولتاژ دریچه و انرژی فرمی کنترل کرد. این نتایج نویدبخش قابلیت بوروفین در ساخت ترانزیستورهای اثر میدان و صافی‌های دره‌ای و اسپینی است. به ازای طول ناحیه عادی بزرگتر از ۷۷ نانومتر صافی دره‌ای کامل اتفاق می‌افتد. با بررسی مقاومت



شکل ۱۴. قطبش اسپینی بر حسب طول ناحیه عادی به ازای الف. $E = 80 \text{ meV}$ ، و ب. $E = 280 \text{ meV}$. سایر پارامترها برابر هستند با $M = 300 \text{ meV}$ و $V_g = 150 \text{ meV}$.

که روشی سخت است اما در بوروفین می‌توان با تغییر ولتاژ دریچه و یا انرژی فرمی به عنوان روشهای آسان‌تر، قطبش را تغییر داد. در بوروفین می‌توان کنترل مستقلی روی اسپین و دره داشت، به طوری که امکان کنترل قطبش اسپینی فقط با میدان مغناطیسی و قطبش دره‌ای فقط با ولتاژ دریچه صورت می‌گیرد. اما در TMDC ها، دو درجه آزادی اسپین و دره به هم گره خورده‌اند. در بوروفین، فقط یک ولتاژ دریچه کافی است تا قطبش دره‌ای ایجاد شود [۲۱]. درحالی که، در موادی مانند گرافین یا حتی TMDC ها، ایجاد قطبش دره‌ای قوی معمولاً نیاز به روش‌های پیچیده‌تری مانند اعمال کرنش یا میدان‌های مغناطیسی ناهمگن دارد. البته TMDC هایمانند MoS_2 به دلیل پایداری بالا و خاصیت نیمه‌رسانایی، گزینه‌ای آرمانی برای ترانزیستورهای نیمه‌رسانای پایدار و دستگاه‌هایی هستند که نیاز به کنترل روشن/خاموش دارند. اما وابستگی ذاتی اسپین و دره کنترل مستقل این دو درجه آزادی را بسیار دشوار می‌کند.

از نظر مقاومت مغناطیسی نیز می‌توان مزایا و معایب بوروفین را با سایر مواد دوبعدی مقایسه کرد. به عنوان مثال، در گرافین مقاومت مغناطیسی خطی بالا در دماهای پایین رخ می‌دهد اما به دلیل نداشتن گاف انرژی و خاصیت فرومغناطیسی ذاتی، کاربرد محدودی در اسپینترونیک پیدا می‌کند [۲۸ و ۲۹]. TMD هایمانند MoS_2 و WSe_2 به طور ذاتی غیرمغناطیسی هستند، اما با آلیش مغناطیسی مثل جایگزینی Mo با Fe یا V و یا ایجاد

مغناطیسی مشاهده شد که این اتصال در بازه خاصی از انرژی اسپینی مبتنی بر بوروفین سودمند است. فرمی، مقاومت صد درصد دارد که برای استفاده در حافظه‌های

مراجع

1. H Nikoofard, et al., *Phys. Rev. B* **102** (2020) 035435.
2. H Khani, M Esmailzadeh, and F Kanjouri, *Nanotechnol.* **27** (2016) 495202.
3. A J Mannix, et al., *Nat. Nanotechnol.* **13** (2018) 444.
4. S F Islam, *J. Phys.: Condens. Matter* **30** (2018) 275301.
5. M Rezaei Roknabadi, G F Matal Al-Mahmoud, MSc thesis, Ferdowsi University of Mashhad (1396) (persian).
6. L Adamska, et al., *J. Phys. Chem. C* **122** (2018) 4037.
7. G Maity, et al., *Nanoscale* **16** (2024) 18295.
8. G J Adekoya, et al., *Small* **20** (2024) 2403656.
9. K Hareesh, *J. Energy Storage* **84** (2024) 110857.
10. Y Tian, et al., *Front. Phys.* **17** (2022) 1.
11. B D Napitu, *J. Appl. Phys.* **127** (2020) 034303.
12. A Lopez-Bezanilla and P B Littlewood, *Phys. Rev. B* **93** (2016) 241405.
13. P Das, S De Sarkar, and A K Ghosh, *J. Phys.: Condens. Matter* **32** (2020) 235301.
14. K D Pham, et al., *Physica E* **120** (2020) 114074.
15. D Sinha, *Eur. Phys. J. B* **92** (2019) 1.
16. Z Kong, et al., *Nanomater.* **11** (2021) 1462.
17. X Zhou, *Phys. Rev. B* **100** (2019) 195139.
18. J Zheng, J Lu, and F Zhai, *Nanotechnol.* **32** (2020) 025205.
19. J Jin, et al., *J. Supercond. Novel Magn.* **32** (2019) 3893.
20. F Norouzi, et al., *Phys. Rev. B* **104** (2021) 245431.
21. F Imanian Mofrad Bidgoli, et al., *J. Phys. Chem. Solids* **188** (2024) 111933.
22. F Ghasemzadeh, M Farokhnezhad, and M Esmailzadeh, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26** (2024) 13061.
23. R Landauer, *J. Phys.: Condens. Matter* **1** (1989) 8099.
24. V Vargiamidis, P Vasilopoulos, *Appl. Phys. Lett.* **105** (2014) 223105.
25. H Cheraghchi and F Adinehvand, *J. Phys.: Condens. Matter* **24** (2012) 045303.
26. L Majidi, M Zare, and R Asgari, *Solid State Commun.* **199** (2014) 52.
27. L Majidi and R Asgari, *Phys. Rev. B* **90** (2014) 165440.
28. K S Novoselov, et al., *Science* **306** (2004) 666.
29. J Guo, X Dai, and C Wang, *Thin Solid Films* **690** (2019) 137527.
30. K F Mak, et al., *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010) 136805.
31. K Zollner, et al., *Phys. Rev. B* **100** (2019) 195126.
32. M Xu, et al., *Chem. Rev.* **113** (2013) 3766.
33. A J Mannix, et al., *Science* **350** (2015) 1513.
34. X Zuo, et al., *Phys. Rev. B* **100** (2019) 115423.