

مقاله‌نامه بیست و سومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۰-۲۹ اردیبهشت ۱۳۹۵)

پذیرفتاری باری و پارامغناطیسی اسپینی ساختارهای شبه گرافن گافدار

حامد رضائیا، یوسف ناصری

گروه فیزیک دانشکده علوم، دانشگاه رازی کرمانشاه

چکیده

در این مقاله می‌خواهیم با استفاده از مدل تنگ بست، وابستگی قطبش اسپینی پذیرفتاری دینامیکی باری و اسپینی شبه گرافن های گافدار را بررسی نماییم. رفتار فرکانسی پذیرفتاری اسپینی طولی از طریق محاسبه تابع همبستگی عملگرهای چگالی اسپینی محاسبه می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که افزایش غلظت الکترونی متناظر با پتانسیل شیمیایی منجر به افزایش شدت تابع طیفی بار می‌شود. همچنین آثار مغناطش و گاف روی رفتار فرکانسی پذیرفتاری اسپینی طولی بررسی می‌شود.

واژه‌های کلیدی: عرضی، طولی، پذیرفتاری اسپینی

مقدمه

گرافن یک سیستم الکترونی دوبعدی است که علایق زیادی را بخاطر فیزیک جدید و بالقوه اش بعنوان یک ماده جدید برای فناوری های الکترونیکی جلب کرده است [1]. مشاهدات اولیه، اثر میدان تک قطبی [2] و اثر عدد صحیح فرد هال [3] تحریک زیادی روی تحقیق های ساختار الکترونیکی گرافن داشته است. عامل ساختار ایستایی در بردار موج فرمی که طول استتار توماس-فرمی را می‌دهد برای انتقال خواص گرافن دو بعدی اهمیت دارد [4,5]. قطبش دینامیکی بازبهنجارش تابع گرین فونونی می‌تواند فونون های نرم و پدیده ناهنجاری کوهن در نقطه Γ را توضیح دهد [6]. در مورد گرافن بدون ناخالصی در دمای صفر، قطبش پذیری توسط گزنالس و همکارانش کشف شده است [7]. تابع پاسخ باری برای گرافن گافدار و گرافن در حضور میدان مغناطیسی مطالعه شده است [8]. پذیرفتاری اسپینی پارامغناطیس نشان دهنده رفتاری مشابه تراکم بار که با کاهش موجب افزایش برهمکنش ها در دمای صفر می‌شود. به تازگی در یک کار نظری مطالعه هر دو بخش حقیقی و موهومی قطبش پذیری غیربرهمکنشی گرافن با روش تحلیلی را فراهم نموده است. در این کار قصد داریم محاسبات قبلی پذیرفتاری باری و اسپینی ساختار گرافن گافدار را ماورای تقریب پراکندگی خطی گسترش دهیم. به همین منظور می‌خواهیم کار است و بر را برای نتایج حاصل از تابع پاسخ، بخصوص پذیرفتاری اسپینی طولی و عرضی ساختار شبه گرافن گافدار گسترش دهیم. علاوه بر این به منظور استخراج نتایج پاسخ باری گرافن تک لایه که توسط استور و همکارانش انجام شده، ما نیز پاسخ اسپینی گرافن گافدار غیربرهمکنشی برای مقادیر مختلف مغناطش، غلظت و پارامتر گاف را بدست می‌آوریم. برانگیختگی های جمعی گاز الکترونی به ترتیب توسط انرژی هایی که رفتار تابع پاسخ باری و اسپینی بعنوان تابع دلتا است، یافت می‌شود. همچنین برانگیختگی های پلاسمونی الکترونها در ساختار گرافن گافدار برای حالت غیربرهمکنشی در دمای محدود را بررسی می‌کنیم. اثر پارامتر گاف و غلظت الکترون و همچنین مغناطش روی رفتار فرکانسی پذیرفتاری و تحریک جمعی الکترونها نیز نشان داده شده است.

فرمالیسم نظری

قطبش اسپینی سیستم گرافن گافدار که با وابستگی اسپینی پتانسیل شیمیایی مشخص می‌شود را در نظر می‌گیریم $\mu_{\sigma} = \mu_{\uparrow}(\downarrow)$ ، بعنوان مثال توسط الکترونها فرومغناطیس در بالای صفحه گرافن چنین قطبشی را می‌توان تزیق کرد. الکترون های غیربرهمکنشی دینامیکی روی شبکه لانه زنبوری ساختار گرافن گاف دار می‌تواند توسط مدل تنگ بست با پارامتر گاف Δ توصیف شود.

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{i,\sigma}^{\dagger} b_{j,\sigma} + b_{i,\sigma}^{\dagger} a_{j,\sigma}) + \epsilon_a \sum_{i,\sigma} a_{i,\sigma}^{\dagger} a_{i,\sigma} + \epsilon_b \sum_{i,\sigma} b_{i,\sigma}^{\dagger} b_{i,\sigma} - \sum_{i,\sigma} \mu_{\sigma} (a_{i,\sigma}^{\dagger} a_{i,\sigma} + b_{i,\sigma}^{\dagger} b_{i,\sigma})$$

$$\epsilon_a = -\epsilon_b = \Delta \quad (1)$$

در اینجا $\mathbf{a}_{i,\sigma}$ ($\mathbf{b}_{j,\sigma}$) نشان دهنده نابودی الکترون با اسپین σ روی زیرشبکه A(B) در سلول واحد \mathbf{i} و \mathbf{j} به انتگرال جهش نزدیکترین همسایه اشاره دارد. جمع روی $\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle$ در معادله ۱ روی همه همسایه های نزدیک متمایز انجام می‌شود. همچنین ϵ_a (ϵ_b) انرژی درون سایتی الکترون روی زیرشبکه A(B) است. با تبدیلات فوریه عملگرهای الکترونی هامیلتونی در معادله ۱ در تقریب نزدیکترین همسایه به صورت زیر است.

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

$$\text{که } \epsilon_k = 1 + \cos(ak_x/2) \exp(-\frac{ia_k_y \sqrt{3}}{2}) \quad (3)$$

که در اینجا k_x و k_y متعلق به ناحیه اول بریلوئن شبکه لانه زنبوری است. علاوه بر این محاسبه، تحریکات مغناطیسی یا

مقاله‌نامه بیست و سومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۰-۲۹ اردیبهشت ۱۳۹۵)

پارامغناطیسی نیازمند بدست آوردن اجزای پذیرفتاری اسپینی دینامیکی است. نظریه پاسخ خطی تابع پاسخ باری غیربرهمکنشی (χ^0) را براساس تصحیح تابع از عملگرهای چگالی-چگالی (ρ) بصورت زیر می دهد.

$$\chi^0(q, i\omega_n) = -\frac{1}{A} \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T(\rho^{\sigma}(q, \tau) \rho^{\sigma}(-q, 0)) \rangle, \rho^{\sigma}(q) = \frac{1}{N} \sum_k (a_{k+q, \sigma}^{\dagger} a_{k, \sigma} + b_{k+q, \sigma}^{\dagger} b_{k, \sigma}) \quad (4)$$

N تعداد سلول واحد در شبکه لانه زنبوری می باشد. پس از جایگزینی عملگر چگالی الکترونی درون تصحیحات تابع همبستگی عبارت زیر را برای χ^0 بدست می آوریم.

$$\chi_{\alpha\beta}^{(0)}(q, i\omega_n) = \sum_{\sigma} \frac{1}{N\beta} \sum_{k,m} G_{\alpha\beta, \sigma}^{(0)}(k+q, i\omega_m) G_{\beta\alpha, \sigma}^{(0)}(k, i\omega_n + i\omega_m) \quad (5)$$

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 ماتسوبارای بوزونی که در آن β وارون دمای تعادلی است. پس از برخی محاسبات ریاضی، عبارت زیر برای تبدیلات فوریه تابع گرین ماتسوبارای غیربرهمکنشی در بیان فوریه بدست می آید.

$$G_{\alpha\beta, \sigma}^{(0)}(k, i\omega_n) = \sum_{j=\pm} \frac{c_j^{\alpha\beta}(k)}{i\omega_n - E_j(k) + \mu_{\sigma}}, \quad E_{j=\pm}(k) = \pm \sqrt{\Delta^2 + |\phi(k)|^2} \quad (6)$$

که در اینجا $\omega_m = \frac{(2m+1)\pi}{\beta}$ فرکانس ماتسوبارای فرمیونی می باشد. α, β مربوط به هر کدام از پایه های اتمی شبکه لانه زنبوری و $E_j(k)$ ساختار نواری شبه گرافن گافدار است. 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.

$$\chi_{\alpha\beta}^{(0)}(q, \tau) = -\frac{1}{N} \sum_k G_{\alpha\beta}^{(0)}(k+q, -\tau) G_{\beta\alpha}^{(0)}(k, \tau) \quad (7)$$

با جایگزینی معادله 6 در معادله 5 و با انجام جمع فرکانسی ماتسوبارا روی انرژی ماتسوبارای فرمیونی ω_m عبارت زیر برای عناصر تانسور پذیرفتاری دینامیکی بدست می آید.

$$\chi_{\alpha\beta}^{(0)}(q, i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_{k, l, j=\pm} \left(c_j^{\alpha\beta}(k) c_l^{\beta\alpha}(k+q) \times \frac{n_F(\xi_{i, k+q}^{\sigma}) - n_F(\xi_{j, k}^{\sigma})}{i\omega_n + \xi_{i, k+q}^{\sigma} - \xi_{j, k}^{\sigma}} \right) \xi_{j, k}^{\sigma} \equiv E_j(k) - \mu^{\sigma} \quad (8)$$

در اینجا $n_F(x) = \frac{1}{e^{\beta(x)} + 1}$ تابع توزیع فرمی دیراک است. پاسخ باری الکترونها روی شبکه لانه زنبوری از جمع روی تمام عناصر پاسخ خطی در معادله 11 مطابق معادله 5 حاصل می شود. وابستگی اسپینی پتانسیل شیمیایی μ^{σ} توسط شرط بهنجارش زیر تعیین می شود.

$$n^{\sigma} = \frac{1}{2N} \sum_{k,j} \frac{1}{e^{\beta(E_j(k) - \mu^{\sigma})} + 1} \quad (9)$$

که در آن اشغال الکترون ها با اسپین σ است. بمنظور تعیین μ^{σ} درجه قطبش پذیری اسپین را تعریف می نمایم. یعنی مغناطش $m = |n^{\uparrow} - n^{\downarrow}|/n$ و $n = n^{\uparrow} - n^{\downarrow}$ اشغال کل الکترون هاست. با استفاده از مقدار غلظت الکترون ها و مغناطش m می توان پتانسیل شیمیایی غیربرهمکنشی وابسته به اسپین μ^{σ} را براساس معادله 12 تعیین کرد. نظریه پاسخ خطی تابع پذیرفتاری اسپینی غیربرهمکنشی (χ^0) را براساس تصحیح تابع بین عملگر چگالی اسپینی می دهد که بصورت زیر بیان می شوند.

$$\chi_{s_z^+ s_z^-}^{(0)}(q, i\omega_n) = -\int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T(s^+(q, \tau) s^-(q, 0)) \rangle, \quad \chi_{s_z^+ s_z^+}^{(0)}(q, i\omega_n) = -\int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T(s_z(q, \tau) s_z(-q, 0)) \rangle \quad (10)$$

تبدیلات فوریه عملگر چگالی اسپین به این صورت داده می شود.

$$s_z(q) = \sum_k (a_{k+q, \uparrow}^{\dagger} a_{k, \uparrow} + b_{k+q, \uparrow}^{\dagger} b_{k, \uparrow} - a_{k+q, \downarrow}^{\dagger} a_{k, \downarrow} - b_{k+q, \downarrow}^{\dagger} b_{k, \downarrow}), \quad s_+(q) = \sum_k (a_{k+q, \uparrow}^{\dagger} a_{k, \downarrow} + b_{k+q, \uparrow}^{\dagger} b_{k, \downarrow}) \quad (11)$$

پس از جایگزینی عملگرهای اسپینی در معادله 10 و استفاده از عبارت برای تابع گرین الکترونی وابسته به اسپین در معادله پذیرفتاری اسپینی طولی به این صورت بدست می آید.

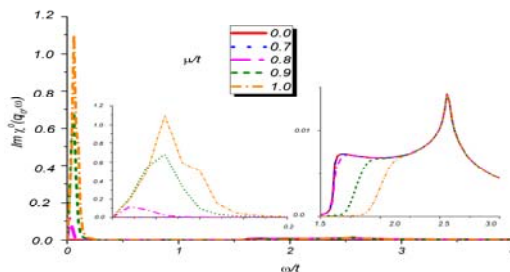
$$\chi_{s_z^+ s_z^+}^{(0)}(q, i\omega_n) = \sum_{\sigma, \alpha, \beta, A, B} \frac{1}{N\beta} \sum_{k,m} G_{\alpha\beta, \sigma}^{(0)}(k+q, i\omega_m) \times G_{\beta\alpha, \sigma}^{(0)}(k, i\omega_n + i\omega_m) = \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_{\alpha, \beta, A, B} \sum_{k, l, j=\pm} \left(c_j^{\alpha\beta}(k) c_l^{\beta\alpha}(k+q) \times \frac{n_F(\xi_{i, k+q}^{\sigma}) - n_F(\xi_{j, k}^{\sigma})}{i\omega_n + \xi_{i, k+q}^{\sigma} - \xi_{j, k}^{\sigma}} \right)$$

نتایج عددی و بحث

در این بخش نتایج عددی بدست آمده را برای پذیرفتاری باری و اسپینی ساختار شبه گرافن ارئه می دهیم. این پذیرفتاری ها مرتبط با بخش موهومی و دینامیکی تابع همبستگی بین عملگرهای جزئی اسپینی و باری است که در معادلات 9 و 10 و 17 معرفی شده اند. در زیر رفتار فرکانسی پذیرفتاری دینامیکی برای دو عدد موج ثابت $q = q_1$ و $q = q_0$ مورد مطالعه قرار گرفته است. موقعیت

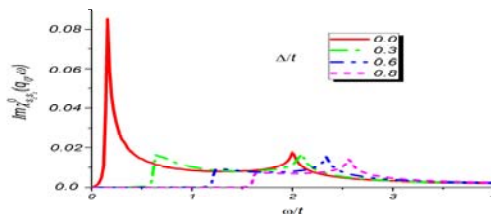
نقطه q_0 با دامنه $\frac{1}{10\sqrt{3}a}$ و زاویه قطبی $\frac{\pi}{6}$ در ناحیه بریلوئن میباشند. همچنین q_1 روی محور k_y با دامنه $\frac{2\pi}{3a}$ قرار دارد.

مقاله‌نامه بیست و سومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۰-۲۹ اردیبهشت ۱۳۹۵)

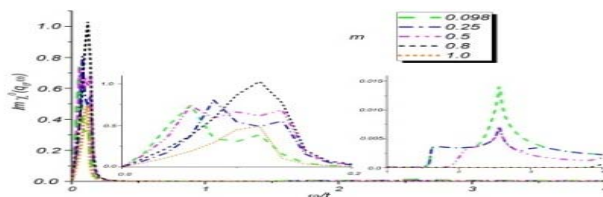


شکل 1. بخش موهومی پذیرفتاری یاری نانوصفحه برن نیتريد با عامل بهنجارش انرژی ω/t برای مقادير پتانسيل شیمیایی μ/t در بردار موج q_0 با دامنه $|q_0| = \frac{1}{10\sqrt{3}a}$ و زاویه $\frac{\pi}{6}$. دمای تعادلی $\frac{kT}{t} = 0.01$ فرض شده است.

اثر تزریق الکترون با تغییرات پتانسیل شیمیایی روی بخش موهومی پذیرفتاری یاری صفحه برن نیتريد در بردار موج q_0 برای $\frac{kT}{t} = 0.01$ در شکل 1 با رفتار فرکانسی بخش موهومی تابع در مقادير فرکانسی بالا و پایین نشان داده شده است. برانگیختگی‌های جمعی و سطح مقطع پراکندگی در فرکانس بالا مستقل از تغییر پتانسیل شیمیایی است همچنین تغییرات پتانسیل شیمیایی تا مقادير 0.7 الکترون ولت تاثیری روی پیک‌های تابع ندارد و مکان و سطح مقطع آنها را تغییر نمی‌دهد، اما با افزایش میزان پتانسیل شیمیایی تغییراتی روی پیک‌های تابع یا همان برانگیختگی‌های جمعی ایجاد می‌شود، افزایش پتانسیل شیمیایی یک پیک پلاسمونی را در فرکانس‌های پایین ایجاد می‌کند که ناشی از ظهور برانگیختگی‌های جمعی در مقادير بزرگتر پتانسیل شیمیایی می‌باشد. افزایش غلظت الکترون‌ها اثر قابل توجهی روی ارتفاع پیک‌های پلاسمونی ندارد و بنابراین شدت پراکندگی ذرات در این فرکانس مستقل از پتانسیل شیمیایی است.



شکل 2. بخش موهومی پذیرفتاری اسپینی طولی ساختار شبه گرافن گافدار با فرکانس تعادلی ω/t در $\frac{kT}{t} = 0.01$ برای مقادير مختلف پارامتر گاف در شرط نیمه پری $\frac{\mu}{t} = 0.0$ و بردار موج فرضی q_0 بر طبق شکل ۲ افزایش گاف روی قله‌های تیز اثر گذار است و مکان قله‌ها که همان برانگیختگی‌های جمعی الکترون‌ها هستند را به سمت فرکانس‌های بالاتر جابجا می‌کند. در واقع با افزایش گاف از شدت پراکندگی ذرات در صفحه برن نیتريد کاسته می‌شود. همچنین درحالتی که گاف صفر است دو پیک پلاسمونی به ازای هر دو بردار موج وجود دارد که با افزایش گاف رفته رفته یکی از پیک‌ها از بین می‌رود.



شکل 3. بخش موهومی پذیرفتاری اسپینی طولی ساختار شبه گرافن گاف دار با فرکانس تعادلی ω/t در $\frac{kT}{t} = 0.01$ برای مقادير مختلف مغناطش m با بردار موج فرضی q_0 در شکل 3 بخش موهومی پذیرفتاری اسپینی طولی صفحه برن نیتريد بعنوان یک تابع بهنجار شده فرکانسی برای مقادير مختلف مغناطش در دمای ثابت $\frac{kT}{t} = 0.01$ نشان داده شده است. طبق این شکل تیزی پذیرفتاری در قله‌های فرکانسی بالا با فرکانس پایین برای همه مغناطش‌ها مقایسه شده است. بدین گونه حالت‌های انرژی بالا در $\frac{\omega}{t} = 2.5$ تیز است درحالی که برای پیک‌های فرکانسی پایین پهن می‌باشد.

مقاله‌نامه بیست و سومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۰-۲۹ اردیبهشت ۱۳۹۵)

مراجع:

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(۲۰۰۵) .
4. S.A. Wolf, Science 294, 1488 (2001).
5. T. Stauber, J. Schliemann, and N.M. Peres, Phys. Rev. B 81, 085409 (2010).
6. H. Bruus and K. Flensberg, Introduction to Many BodyQuantum in Condensed Matter Physics (Copenhagen:Copenhag Press, 2003), p. 110.
7. V.K. Dugaev, V.I. Litvinov, and J. Barnas, Phys. Rev. B 74, 224438 (2006).
8. B. Uchoa et al., Phys. Rev. Lett. 101, 026805 (2008).