محاسبه ناهمسانگردی مقاومت مغناطیسی(AMR) در گاز الکترونی

عزیزی،جعفر ؛ فیروزنیا،آرش

دانشگاه شهید مدنی آذربایجان

دانشکده علوم پایه

چکیده

در این مقاله ابتدا با در نظر گرفتن ترم راشبا و دراسلهاوس در گاز الکترونی ویژه توابع آن معرفی خواهد شد ،سپس با اعمال اپراتور پراکنده ساز در آن و به کمک حل دقیق معادله نیمه کلاسیکی بولتزمن به روش بسط ضرایب نامعین زاویه ای، توابع توزیع سیستم محاسبه خواهد شد و نهایتا به کمک توابع توزیع به دست آمده ،رسانندگی سیستم در راستای محورهای مختصات به دست خواهد آمد و از روی آن مقاومت مغناطیسی (MR) در سیستم و AMR محاسبه خواهد شد در کل این محاسبات هیچگونه تقریبی به کار گرفته نخواهد شد و در انجام محاسبات از برنامه نویسی عددی هم استفاده خواهد شد.

مقدمه

در سالهای اخیر رشدچشمگیری در ساخت ادوات الکترونیکی بر مبنای اسپین الکترونها[1] صورت گرفته است و با توجه به اینکه اسپین الکترونها نسبت به ممتوم آنها دردر حالت کلی وبخصوص در ترابرد که برای ما حایز اهمیت است، در بازه زمانی نسبتا طولانی حالت خود را حفظ میکند گذشته از این با توجه به نحوه ذخیره سازی و انتقال اطلاعات ,اسپین ترونیک دارای مزیت بیشتری نسبت به الکترونیک میباشد چون به راحتی با اعمال میدانهای خارجی [2,3] قابل کنترل میباشد یا از طریق تزریق اسپین درسیستم می توان در نحوه ذخیره و انتقال اطلاعات دخالت کرد .گذشته از آن در سیستمهایی که تحت عنوان اسپین ترونیک مطالعه میشوند با توجه به ذخیره سازی اطلاعات در اسپین الکترونها میتوان ابعاد ادوات مورد نظر در صنعت را نیز بسیار کوچک کرد..در این زمینه اگر توجه شود در بسیار ی از موارد یا در بسیاری از مواد اسپین الکترونها میتوانند مسافتهای طولانی تا حد μm 100 بدون تاثیر پذیری از محیط بپیمایند که در واقع اینها میتوانند امیدهایی در ساخت ادوات جدید ونانو سیستم ها باشند .در این مقالعه ما با در نظر گرفتن یک گاز الکترونی و اعمال ترم راشبا [4,5] , و ترم دراسلهاوس [6,7] تابع موج سیستم را محاسبه خواهیم کرد وبا حل دقیق معادله بولتزمن به روش بسط ضرایب نامعین وبه کمک برنامه نویسی عددی به محاسبه AMRوMR در سیستم خواهیم پرداخت.

مدل ریاضی : با توجه به معادله نیمه کلاسیکی بولتزمن[8] بصورت $-e\varepsilon v(k)(-\partial_\varepsilon f_0)=\int \frac{d^2k'}{(2\pi)^2}\omega(k,k')[f(k,\varepsilon)-f(k',\varepsilon')]$ اگر این معادله بر حسب ضرایب نامعینی از ϕ حل شود نهایتا خواهیم داشت

$$\cos(\theta-\phi)=[\varpi(\phi)a(\phi)-\int d\phi'\omega(\phi,\phi')a(\phi')]\cos(\theta)+[\varpi(\phi)b(\phi)-\int d\phi'\omega(\phi,\phi')b(\phi')]\sin(\theta) \quad (1)$$

که در آن داریم

$$\varpi(\phi)=\int d\phi'\omega(\phi,\phi')$$
$$\omega(\phi)=(2\pi)^{-2}\int k'dk'\omega(k,k')$$

حال معادله 1 را می توان بر حسب زوایای ϕ وϴ به صورت دو معادله جداگانه بر حسب sinϕ و cosϕ نوشت .همچنین در رابطه 1 برای ضرایب a داریم، $a(\phi)=a_\circ+a_{c1}Cos\phi+a_{c2}Cos2\phi+\ldots+\frac{1}{2}a_{21}Sin\phi+a_{s2}Sin2\phi+\ldots$ که برای bهم مشابه a می توان همین رابطه را نوشت .که با معلوم بودن این ضرایب تابع توزیع سیستم به صورت زیر مشخص خواهد شد.

که ضرایب آن را $f_{+}(\phi,\theta)-f_{\circ}=-e\varepsilon\vartheta+(-\partial_{\varepsilon}f_{\circ}+)[a_{+}Cos\,\theta+b_{+}(\phi)Sin\,\theta], f_{-}(\phi,\theta)-f_{\circ}=-e\varepsilon\vartheta-(-\partial_{\varepsilon}f_{\circ}-)[a_{-}(\phi)\,Cos\,\theta+b_{-}(\phi)Sin\,\theta]$
می توان با توجه به رابطه زیر به دست آورد در اینجا چهار معادله زیر به خاطر وجود دو باند ظاهر شده است

$$\cos(\phi)=\varpi_{+}(\phi)a_{+}(\phi)-\int d\phi'[\omega_{++}(\phi,\phi')a_{+}(\phi')+\omega_{+-}(\phi,\phi')a_{-}(\phi)]$$

(2) بدین ترتیب تابع توزیع برای هر دو باند کاملا مشخص

$$\cos(\phi)=\varpi_{-}(\phi)a_{-}(\phi)-\int d\phi'[\omega_{--}(\phi,\phi')a_{-}(\phi')+\omega_{-+}(\phi,\phi')a_{+}(\phi)]$$

$$\sin(\phi)=\varpi_{+}(\phi)b_{+}(\phi)-\int d\phi'[\omega_{++}(\phi,\phi')b_{+}(\phi')+\omega_{+-}(\phi,\phi')b_{-}(\phi)]$$

$$\sin(\phi)=\varpi_{-}(\phi)b_{-}(\phi)-\int d\phi'[\omega_{--}(\phi,\phi')b_{-}(\phi')+\omega_{-+}(\phi,\phi')b_{+}(\phi)]$$

خواهد شد.

بحث و توضیح:

در اینجا با توجه به اینکه حل دقیق مساله مورد نظر است بنابر این ما از حل دقیق معادله بولتزمن استفاده خواهیم کرد که با توجه به آن اگر ما ویژه توابع را برای مساله به صورت $I\Psi_{\pm}>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\exp(i\Phi)\\ n\end{pmatrix}$ معرفی کنیم . که در آن داریم

$n=\pm 1$. این توابع موج را می توان از هامیلتونی مساله که با به در نظر گرفتن ترم راشبا و دراسلهاوس به صورت زیر معرفی می شود $H_{r}=\frac{\alpha}{2}(\sigma\times s)_{z}$ و $H_{D}=\frac{\beta}{\hbar}\,(p_{x}\sigma_{x}\ -p_{y}\sigma_{y})$. که در آن میتوان نوشت $H_{tot}=H_{r}+H_{D}$ به دست می آید.حال با در نظر گرفت این دو ترم می توان آن را به صورت ماتریسی زیر نوشت $H_{r}+H_{D}=\begin{pmatrix}0 & (\alpha\kappa_{y}+\beta\kappa_{x})-i(\alpha\kappa_{y}+\beta\kappa_{x})\\ (\alpha\kappa_{y}+\beta\kappa_{x})-i(\alpha\kappa_{y}+\beta\kappa_{x}) & 0\end{pmatrix}$ همان طور که میدانیم رابطه ویژه مقداری و ویژه تابعی را در حالت کلی می توان به صورت زیر نوشت $(H_{r}+H_{D})\psi=\lambda\psi$ که در آن λ ویژه مقدارهامیلتونی می باشد حال با در نظر گرفتن $Z=|Z|\exp(i\,\phi_{k})$ برای ساده سازی ، می توان ویژه توابع وویژه مقادیر را با قطری کردن هامیلتونی حساب کرد.در ادامه برای اینکه ما بتوانیم مساله را در حالت کلی حل کنیم به طوری که مساله قابل تعمیم به موارد مشابه نیز باشد،(از جمله گرافین) بنابر این ما باید سرعت را برای توابع توزیع در دو ناحیه مورد نظر یا در دو باند مورد نظر که در اینجا مساله را به صورت دو باندی در نظر گرفتیم به صورت جداگانه حساب کنیم (در نظر گرفتن دوباندی در سیستم مشکلی را برای مساله ایجاد نخواهد کرد)[1].در ادامه اگر ثابتهای زیر به این صورت معرفی شوند که بعدا در مساله به آنها نیاز خواهد شد. $\alpha_{1}=-ev\,\varepsilon(-\partial_{\varepsilon}f_{0})$ که در آن v سرعت حامل هاست که میتوان در هر ناحیه(باندی) آن را براحتی حساب کرد .بنابر این در حالت کلی تابع توزیع را برای این مساله می توان به صورت زیر نوشت. $-e\,\varepsilon v\,(k)(-\partial_{\varepsilon}f_{0})=\int\frac{d^{2}k'}{(2\pi)^{2}}\omega(k,k')[f\,(k,\varepsilon)-f\,(k',\varepsilon')],\omega(\phi,\phi')=(\frac{1}{2\pi})^{2}\int k'dk'\omega(k,k')$

حال اگر رابطه بالا برای به دست آوردن تابع توزیع سیستم به دقت حل شود می توان تابع توزیع را به صورت زیر به دست آورد.

$f\ =\alpha_{1}[a_{0}\cos(\varphi)+a_{c1}\cos(\phi)\cos(\vartheta)+b_{c1}\sin(\phi)\sin(\vartheta)]$ که در آن a و b قبلا معرفی شده اند.ونیز توجه شود که در اینجا ضرایبی که در تابع توزیع وارد شده اند ما مقادیر آنها را با استفاده از بسط فوریه ،چون در اینجا علاوه بر ترم راشبا در سیستم ترم دراسلهاوس نیز وارد شده است به دست آوردیم.چون دراینجا جهت میدان و بردار موج دیگر مثل رابطه $\varepsilon=\varepsilon(\cos(\theta),\sin(\theta)), k\ =k\,(\cos(\phi),\sin(\phi))$ نخواهد (به خاطر وارد شدن ترم دراسلهاوس) در اینجا اگر ما زوایا را به صورت زیر در نظر بگیریم $\phi=\tan^{-1}(\frac{\mathrm{Im}H}{\mathrm{Re}H}),\phi'=\tan^{-1}(\frac{\mathrm{Im}H'}{\mathrm{Re}H'})$ که در آن ϕ و ϕ' متغیرهای رابطه 2 هستند .حال با در نظر گرفتن بسط فوریه بصورت زیر $g\,(\phi,\phi')=A_{0}+\sum A\cos(m\phi+n\phi')+\sum B\sin(m\phi+n\phi')$ که مقادیر ثابتهای A و B را در اینجا به راحتی بصورت عددی می توان محاسبه کرد که اگر اینها حل شوند با توجه به معلوم بودن این متغیرها(از حل عددی وبرنامه نویسی) و با توجه به رابطه2، واگر در رابطه 2 به انتگرالها توجه شود میتوان 4 معادله ظاهر شده در رابطه 2 را به

8 معادله جدا از هم تفکیک کرد که این 8 معادله هم با توجه به رابطه بسط فوریه میتواند به یک معادله $N \times N$ تبدیل شود که با هر دقتی میتوان آن را بصورت عددی حل کرد در اینجا معادله ای که در نظر گرفته شده است بصورت یک معادله 20×20 است که بصورت عددی تا 14 رقم اعشار حل شده است . معادله کلی برای مساله بصورت زیر است

$$\begin{pmatrix} y_1 A_{mn} + \gamma I & y_2 A_{mn} & y_2 B_{mn} & y_2 B_{mn} \\ y_2 B_{mn} & M_1 A_{mn} + \gamma I & y_2 B_{mn} & y_2 B_{mn} \\ M_1 A_{mn} & M_4 B_{mn} & -M_2 A_{mn} + \gamma I & -M_5 A_{mn} \\ -M_8 B_{mn} & M_7 A_{mn} & -M_9 B_{mn} & -M_6 B_{mn} + \gamma I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_c^+ \\ a_s^+ \\ a_c^- \\ a_s^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

و

$$\begin{pmatrix} -M_2 A_{mn} + \gamma I & -M_5 A_{mn} & M_3 B_{mn} & M_4 B_{mn} \\ -M_9 B_{mn} & -M_6 A_{mn} + \gamma I & -M_8 B_{mn} & M_7 B_{mn} \\ y_3 A_{mn} & y_2 B_{mn} & y_1 A_{mn} + \gamma I & y_2 A_{mn} \\ y_2 B_{mn} & y_3 A_{mn} & y_2 B_{mn} & M_1 B_{mn} + \gamma I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_s^+ \\ b_s^- \\ b_c^+ \\ b_c^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

که در آن خود A_{mn} و B_{mn} یک ماتریس $N \times N$ و در اینجا یک ماتریس 5×5 هستند .و همچنین

$$\gamma = 2\pi(\alpha^2 + 1), \gamma_2 = 2\pi(\alpha^2 + 1 - 2\alpha\cos(\varphi)), M_1 = 2\pi(\alpha^2 + 1 + \frac{1}{2}\pi(\alpha^2 + 1)), M_2 = \gamma - \frac{1}{2}\pi(\alpha^2 - 1)$$

$$M_3 = \frac{1}{2}\pi(\alpha^2 - 1), M_4 = \frac{1}{2}\pi(-\alpha^2 + 1), M_5 = M_4 = M_8 = M_9, M_6 = \gamma_2 - \frac{1}{2}\pi(\alpha^2 - 1), M_7 = \frac{1}{2}\pi(\alpha^2 - 1)$$

$$y_{1=}\, y_3 = \frac{1}{2}\pi(\alpha^2 + 1), y_2 = \frac{1}{2}\pi(-\alpha^2 - 1)$$

حال اگر اپراتور پراکنده ساز را برای این مساله به صورت زیر در نظر بگیریم $\begin{pmatrix} \alpha & 1 \\ 1 & \alpha \end{pmatrix}$ که در آن α قدرت برهمکنش بین میدان الکتریکی ومغناطیسی در سیستم است.و با توجه $-\delta_\varepsilon f_0 = \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$ که در محاسبات انتگرالها ظاهر می شود، نهایتا می توان روابط زیر را برای محاسبه AMR در نظر گرفت. $j(\theta) = \int d\phi f(\phi, \theta) v \cos(\phi - \theta)$.داریم. که در آن $\sigma_{xx} = j(\theta = 0)/\varepsilon, \sigma_{yy} = j(\theta = \pi/2)/\varepsilon$ بنابر این با حل معادله بالا و با توجه به $AMR = -\frac{\sigma_x - \sigma_y}{\sigma_x + \sigma_y}$ مقدار AMR در اینجا برای گاز الکترونی برابر خواهد بود با 0.99 به راحتی میتوان با تعریف زیر MR را نیز از آن برای سیستم به دست آورد $MR = \frac{1}{\sigma}$

نتیجه: در این مساله نشان داده شد که در یک گاز الکترونی با توجه به اپراتور پراکنده سازی که برای سیستم نوشته می شود و نیز با توجه به هامیلتونی مساله و وارد شدن تر راشبا و دراسلهاوس در سیستم مقدار جریان در سیستم در جهت های مختلف انتخابی است(در جهت محور های مختصات متفاوت است) ونیز MR و AMR نیز در مساله غیر صفر بوده (بر خلاف حالتی که ترم دراسلهاوس وارد نمی شود) و دارای مقدار مشخصی بر حسب متغییر های موجود در مساله هستند.

مرجع ها

[1] E. W. Hill, A. K. Geim, K. S. Novoselov, F. Schedin, and P. Blake, IEEE Trans. Magn. 42, 2694 (2006)

[3] D.S´anchez and Ll. Serra, Phys. Rev. B 74,153313 (2006). [2] A.K. Geim, Science 324 (2009) 1530

[4] E.I. Rashba, Sov. Phys. Solid State 2, 1109 (1960)

[5] Y.A. Bychkov and E.I. Rashba, JETP Lett. 39, 78(1978)

[6]S.Giglberger, et al., Phys. Rev. B **75**, 035327 (2007).

[7] N. S. Averkiev, et al., Phys. Rev. B **74**, 033305 (2006).

[5] Karel , vyborny , Alexey A .kovalev , jairo Sinova,jungwirth, 26th,(2008)