

«مقاله پژوهشی»

خواص ترابرد اسپینی در نانوساختارهای نامتجانس مولکولی

سیدحسین باقری^{1*}، علی اصغرشکری²، نادیا سلامی³

1. گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

2. گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

3. گروه فیزیک، واحد یاسوج، دانشگاه آزاد اسلامی، یاسوج، ایران

تاریخ دریافت: 1400/06/08 تاریخ پذیرش: 1400/07/25

Spin Transport Properties in Molecular Heterojunction Nanostructures

S.H. Bagheri^{*1}, A.A. Shokri², N. Salami³

1. Department of Physics, Payame Noor University, Tehran, Iran

2. Department of Physics, Payame Noor University, Tehran, Iran

3. Department of Physics, Yasuj Branch, Islamic Azad University, Yasuj, Iran

Received: 2021/08/30

Accepted: 2021/10/17

Abstract

In this research, we investigated the properties of spin-dependent electrical transport in molecular nanostructures through a heterojunction molecular bridge of fullerene and pentacene molecule as electron acceptor and donor, coupled with two semi-funnel copper electrodes. For this purpose, the spin-dependent Hamiltonian is determined for the single strip and by using the Green's function approach in the framework of strong correlation, we obtain the dependence of the electric transport properties of the spin-orbit Rashba interaction, as well as the applied voltage on this structure. The results obtained from the calculations show that the spin polarization is up to 70% effective in controlling the spin of incident electrons. This molecular in homogeneous nanostructure may be useful in the design of spintronic devices.

Keywords

Green's Function, Rash Ba, Spin Polarization, Spintronics

چکیده

در این تحقیق خواص ترابرد الکتریکی وابسته به اسپین در نانو ساختار مولکولی از طریق یک پل مولکولی نامتجانس فولرن و مولکول پنتاسن به عنوان پذیرنده و دهنده الکترون، جفت شده با دو الکتروود نیمه نهایی مس، مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور، هامیلتونی وابسته به اسپین، برای تک نوار تعیین شده و با استفاده از رهیافت تابع گرین در چارچوب بستگی قوی، وابستگی خواص ترابرد الکتریکی برهم کنش اسپین - مدار راشبا و همچنین ولتاژ اعمالی را بر روی این ساختار به دست می آوریم. نتایج مستخرج از محاسبات نشان می دهد که قطبش اسپینی بیش از 70% در کنترل اسپین الکترون ها فرودی، مؤثر است. این نانو ساختار نامتجانس مولکولی ممکن است در طراحی ادوات اسپینترونیکی مفید باشد.

واژه های کلیدی

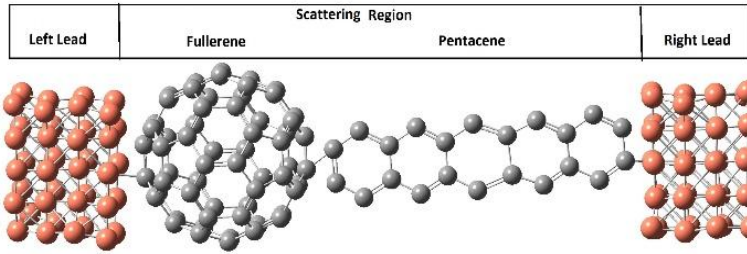
تابع گرین، راشبا، قطبش اسپینی، اسپینترونیک

مقدمه

پیشرفت‌های اخیر در کاهش ابعاد مؤثر نانو مواد از مدل سه بعدی سیستم‌ها و چاه کوانتومی شبه دو بعدی و همچنین نقاط کوانتومی شبه صفر بعدی در این دهه فراهم شده است.

فیلتر شدن دو جهتی جریان اسپینی [3]، شکافتگی اسپینی را نشان می‌دهد.

ما در این پژوهش قصد داریم ترابرد اسپینی را (شامل احتمال عبوردهی الکتریکی، قطبش اسپینی و...) در ساختارهای نامتجانس مولکولی که مولکول فولرن و



شکل 1. تصویر شماتیک، نمای اتصال مولکول نامتجانس فولرن-پنتاسن به الکترودهای مس را نشان می‌دهد

مولکول پنتاسن متصل به الکترودهای مس را شامل می‌شود، شکل (1) در رژیم همدوس مورد بررسی قرار دهیم.

محاسباتمان مبتنی بر روش تابع گرین در چارچوب تقریب بستگی قوی (تنگ‌بست) با نزدیک‌ترین همسایه است. در مدل ما، با در نظر گرفتن روش تابع گرین، ضرایب عبوردهی الکترون فرودی را محاسبه کرده، سپس اثر برهم‌کنش اسپین-مدار راشبا را که به علت انحنای سطح مولکول فولرن حاصل می‌شود، به هامیلتونی کل به عنوان یک تصحیح اضافه می‌کنیم و با محاسبات عددی، اثرات اتصال‌های مختلف، پهنای مولکول، ولتاژ بایاس را روی ساختار مورد نظر بررسی می‌کنیم [4].

جزئیات روش محاسبات

هامیلتونی کل سیستم را در این تقریب مؤثر می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$H = H_{electrodes} + H_{MD} + H_{Contact} + H_{SOC} \quad (1)$$

$$H_i = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{\langle ii' \rangle} t_{ii'} (c_i^\dagger c_{i'} + hc.c.)$$

$$H_i = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{\langle ii' \rangle} t_{ii'} (c_i^\dagger c_{i'} + hc.c.) \quad (2)$$

در رابطه (2) H_i اشاره به هامیلتونی ساختار نامتجانس مولکولی و هامیلتونی الکترودهای مس دارد. در ضمن در همین رابطه $c_i^\dagger c_i$ عملگرهای خلق و فنا و ε_i انرژی

محدودشدگی‌های نانو ساختاری ضرورتاً رفتار کوانتومی از خود نشان می‌دهند. بنابراین اثرات محدودیت کوانتومی در سیستم‌های نیمه رسانا همراه با ابعاد فضایی کاهش یافته (حد طول موج دوبروی الکترون) و تبدیل آن به نانو ساختار توجه زیادی را به خود جلب کرده است. به خصوص خواص اپتیکی و الکترونیکی این سیستم‌ها که با تغییر در طراحی ساختار آنها قابل کنترل است و به همین علت نیمه رساناهای محدودشده کوانتومی در زمینه‌هایی مانند میکروالکترونیک، اپتیک غیرخطی، کاربرد دارند [1]. مشخص است که در این زمینه‌ها بررسی رفتار اسپین الکترون و برهم‌کنش آن با نانو ساختار نامتجانس مولکولی از اهمیت بالایی برخوردار است.

هر گونه شناخت از رفتار اسپین الکترون که علاوه بر بار آن خاصیتی ذاتی است، می‌تواند در زمینه‌های مرتبط با اسپینترونیک (الکترونیک اسپینی) به کار رود. مزیت اسپین الکترون نسبت به بار الکتریکی آن در این نکته نهفته است که اسپین الکترون با یک میدان مغناطیسی خارجی قابل کنترل و دستکاری است. باید خاطر نشان ساخت که این ویژگی پیش‌تر در مورد فناوری حافظه‌های مغناطیسی به کار گرفته شده است. در میدان مغناطیسی بالا و دمای پایین، اثرات اسپینی [2] و وجود اثرات اسپینی مختلفی مانند

اتمی استفاده می‌کنیم. ما همچنین اثرات انحناى سطح فولرن را که به صورت برهم کنش اسپین - مدار راشبا در محاسبات خود ظاهر می‌شود، در نظر می‌گیریم [8]. عبارات تحلیلی و برآوردهای عددی در جدول (1) آورده شده است.

جدول 1. پارمترهای اسپین-مدار ذاتی و راشبا مولکول فولرن-پنتاسن [9]

Δ_R	Δ_{int} (ذاتی)
$5.55 \times 10^{-3} eV$	$1.40 \times 10^{-5} eV$

و در جدول (2) t_1 انرژی پرش بین دو اتم کربن با پیوند یگانه و برای پیوند دوگانه $t_2 = 1.1t_1$ بوده و همچنین t_c انرژی پرش بین مولکول فولرن و پنتاسن و ϵ_0 انرژی جایگاهی اتم کربن است [10].

جدول 2. انرژی پرش و انرژی جایگاهی مولکول فولرن و مولکول پنتاسن بر حسب (eV) [11]

Hopping Energy	ϵ_0	t_2	t_1	t_c
C ₆₀	0.00	2.50	2.75	1.25
C ₂₂ H ₁₄	0.00	2.25	2.50	1.25

در چارچوب مرجع ثابت برای پایه‌های اتمی وابسته به اسپین $\{|A \uparrow\rangle |A \downarrow\rangle |B \uparrow\rangle |B \downarrow\rangle\}$ عناصر ماتریس هامیلتونی اسپین-مدار برای نقطه K اولین منطقه بریلون به صورت زیر به دست می‌آید:

$$H_{soc} = \begin{pmatrix} A \uparrow A \downarrow & A \uparrow B \downarrow \\ B \uparrow A \downarrow & B \uparrow B \downarrow \end{pmatrix} \quad (7)$$

در اینجا ماتریس تابع گرین مسئله به صورت تابع گرین ساختار مولکولی $G_0^{-1}M$ (بدون در نظر گرفتن اتصالات) و تصحیح‌های خودانرژی به علت حضور الکترودهای چپ (Σ_L) و راست (Σ_R) نوشته می‌شود [12]:

$$G_{0,M}^{-1} = (E + i\theta^+)I + H \quad (8)$$

$$G_M^{-1} = G_0^{-1}M - \Sigma_L - \Sigma_R \quad (9)$$

به طوری که در آن [10]

$$G_M^{-1} = (E + i\theta^+)I + H - \Sigma_L - \Sigma_R \quad (10)$$

علاوه بر این، در فضای اسپین، ضریب عبوردهی الکترون فرودی را با احتساب اسپین می‌توان برای این ساختار به صورت زیر نوشت [13]

$$T^{\alpha\alpha'} = Tr(T^{\alpha\alpha'}) \quad (11)$$

جایگاهی است. در رابطه (1) H_{MD} هامیلتونی مولکول ساختار نامتجانس است و از این رو، برهم کنش بین اتم‌های سطح مقطع الکترودها و اتم‌های انتهایی ساختار نامتجانس مولکولی را می‌توان با هامیلتونی تماس $H_{Contact}$ به صورت زیر نوشت:

$$H_{Contact} = \sum_{\langle i_L i_C \rangle}^{\uparrow\downarrow} t_{i_L i_C} (C_{i_L}^T C_{i_C} + hc) + \sum_{\langle i_R i_M \rangle}^{\uparrow\downarrow} t_{i_R i_M} (C_{i_R}^T C_{i_M} + hc) \quad (3)$$

در این رابطه $\langle i_L i_C \rangle$ به جایگاه اتصال اتم‌های الکترودها در تماس با نانو ساختار نامتجانس مولکولی و $\langle i_R i_M \rangle$ جایگاه اتصال اتم‌های الکترودها راست در تماس با ساختار نامتجانس اشاره دارد [5]. همچنین هامیلتونی برهم کنش اسپین -مدار H_{soc} را می‌توان به صورت زیر در نظر گرفت:

$$H_{soc} = -\frac{1}{2} \vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{1}{2} \left(\vec{\mu} \cdot \left(\frac{\vec{v}}{c} \times \vec{E} \right) \right) \quad (4)$$

$$= \frac{1}{2m^2 c^2} (\vec{S} \cdot (\vec{p} \times (-\nabla V_{eff})))$$

$$H_{soc} = \frac{1}{2m^2 c^2} (\vec{S} \cdot (\nabla V_{eff} \times \vec{p})) \quad (5)$$

بنابراین داریم:

$$H_{soc} = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{\vec{r}}{r} \frac{dV_{eff}}{dr} (\vec{S} \cdot (\vec{r} \times \vec{p})) = \gamma(r) \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (6)$$

در اینجا هامیلتونی H_{soc} شامل برهم کنش درون اتمی اسپین-مدار ذاتی و برهم کنش اسپین-مدار راشبا است. جفت‌شدگی اسپین-مدار در مولکول نامتجانس دارای یک بخش ذاتی است که به طور کامل از ویژگی‌های تقارن شبکه تعیین می‌شود [6]. پیش‌بینی شده که این برهم کنش اسپین-مدار انرژی کافی را در هنگام پراکندگی الکترون‌های عبوری ایفا می‌کند. با این حال، قدرت این جفت شدن اسپین-مدار ذاتی هنوز موضوع بحث است، اگرچه اعتقاد بر این است که نسبتاً کوچک است و به ضعف کوپلینگ اسپین-مدار درون اتمی برمی‌گردد [7]. در این مقاله ما از اثر برهم کنش اسپین-مدار ذاتی به علت کوچک بودن مقادیر آن صرف نظر کرده‌ایم. جفت شدن بین الکترون‌ها با اسپین موازی بین اولین و نزدیک‌ترین همسایه را می‌توان در فضای قطبی کروی در نظر گرفت. با استفاده از مدل تنگ بست و مطابق با نتایج به دست آمده ما از هامیلتونی پیوند باندهای σ و π و اثر برهم کنش اسپین-مدار درون

این امر باعث می‌شود که حالت‌های عرضی با ویژه مقادیر زیر حاصل شود.

$$\varepsilon(k_x, k_y) = 2t_x \cos(k_x a) + 2t_y \cos(k_y a) \quad (19)$$

a پارامتر شبکه بوده و تابع موج طولی در راستای محور z همانند یک زنجیره اتمی یک بعدی است [18].

$$|K_z\rangle = \sqrt{\frac{2\sqrt{2}}{(-N_x + N_y + N_z + \sqrt{2})}} \times \sin(an_z k_z) |n_z\rangle \quad (20)$$

با ویژه حالت زیر

$$\varepsilon(K_z) = 2t_z \cos(k_z a) + \varepsilon_0 \quad (21)$$

بنابراین تابع گرین سطحی الکترودها از رابطه زیر قابل محاسبه است [16].

$$\langle m_B | (g_\alpha) n_\alpha n'_\alpha | n_B \rangle = \sum_k \frac{\langle m_B | K \rangle \langle K | n_B \rangle}{E + i\theta^+ - 2t_z \cos(k_z a) - \varepsilon_0 - \varepsilon(k_x, k_y)} \quad (22)$$

بنابراین ضریب عبوردهی الکترونیکی برای اسپین بالا و پایین از رابطه (10) و همچنین قطبش اسپینی را پس از انجام محاسبات از رابطه زیر به دست می‌آوریم [19].

$$SP = \frac{T^{\uparrow\uparrow} + T^{\downarrow\downarrow} - T^{\uparrow\downarrow} - T^{\downarrow\uparrow}}{T^{\uparrow\uparrow} + T^{\downarrow\downarrow} + T^{\uparrow\downarrow} + T^{\downarrow\uparrow}} \times 100 \quad (23)$$

پایستگی تکانه زاوی‌های یک ویژگی فیزیکی یک سیستم چرخش است. به طوری که اسپین آن ثابت می‌ماند؛ مگر اینکه توسط یک گشتاور خارجی بر آن اثر بگذارد. به عبارت دیگر، تا زمانی که گشتاور خالص صفر باشد، سرعت چرخش ثابت است. از این رو با استفاده از رابطه (10)، رابطه زیر را می‌توان برای بقای جهت‌گیری اسپین‌های خروجی در نظر گرفت [20]:

$$T_{SC} = T^{\uparrow\uparrow} + T^{\downarrow\downarrow} \quad (24)$$

در این رابطه T_{SC} (اسپین کانسرو) ماتریس مجموع احتمال ضریب عبوردهی الکترون‌ها با اسپین بالا و پایین است [12]. یکی از چالش‌های فیزیک الکترونیک مبتنی بر اسپین یا اسپین‌ترونیک، مطالعه پراکندگی (چرخش اسپینی) و تأثیر آن بر انتقال مغناطیسی، به‌ویژه، بر تزریق و تجمع اسپین است [22]. تکانه زاوی‌های کل (مدار به علاوه اسپین) به دلیل تقارن کریستالی حفظ می‌شود. بنابراین اسپین الکترون‌ها را هنگامی که با حالت چرخش رو به بالا وارد سیستم شده و با حالت چرخش اسپین رو به پایین از

$$T^{\alpha\alpha'}(E, V_a) = \Gamma_L(E + \frac{eV_a}{2}) G_{11}^{\alpha\alpha'} \quad (12)$$

$$(E, V_a) \Gamma_R(E + \frac{eV_a}{2}) (G_{11}^{\alpha\alpha'})^\tau(E, eV_a)$$

که در اینجا:

$$\Gamma_{L,R}(E) = i\Sigma_{L,R}(E) - \Sigma_{L,R}^\tau(E) \quad (13)$$

$T^{\alpha\alpha'}$ نشان دهنده عناصر ماتریس ضریب احتمال عبوردهی الکترون فرودی با اسپین α وارد ساختار مورد نظر شده و با اسپین α' از منطقه مرکزی خارج می‌شود. همچنین $\Gamma_{L,R}(E)$ عناصر ماتریس پراکندگی است. در حضور هر دو فرآیند چرخش اسپینی و بقای اسپین، می‌توان آن را در فضای اسپین بازنویسی کرد و $G_{11}^{\alpha\alpha'}$ در حالت کلی ماتریس تابع گرین کل مسئله را در این فضا می‌توان به صورت زیر به دست آورد [14]:

$$\begin{bmatrix} G_{11}^{\uparrow\uparrow} & G_{11}^{\uparrow\downarrow} \\ G_{11}^{\downarrow\uparrow} & G_{11}^{\downarrow\downarrow} \end{bmatrix} \quad (14)$$

$$= ((E + i\theta^+)I - \begin{bmatrix} H_{11}^{\uparrow\uparrow} & H_{11}^{\uparrow\downarrow} \\ H_{11}^{\downarrow\uparrow} & H_{11}^{\downarrow\downarrow} \end{bmatrix} - \left[\begin{matrix} \Sigma_L^{\uparrow\uparrow} & 0 \\ 0 & \Sigma_L^{\downarrow\downarrow} \end{matrix} \right] - \left[\begin{matrix} \Sigma_R^{\uparrow\uparrow} & \\ & \Sigma_R^{\downarrow\downarrow} \end{matrix} \right])^{-1}$$

چگالی حالت‌ها مطابق با فرمول بالا از حالت‌های پر شده الکترون چپ با پتانسیل شیمیایی μ_L و حالت‌های پر شده الکترون راست با پتانسیل شیمیایی μ_R را می‌توان به فرم تابع گرین زیر نوشت [15].

$$DOS(E) = -\frac{1}{\pi} \text{ImTr}[G_M(E)] \quad (15)$$

$$\Sigma_\alpha = \sum_{n_\alpha n'_\alpha} t'_{n_\alpha} t_{n'_\alpha}^* (g_\alpha) n_\alpha n'_\alpha \quad (16)$$

در رابطه (16) Σ_α خود انرژی سیستم به دلیل تماس الکترودهای چپ و راست با ساختار مولکولی و $t'_{n_\alpha} t_{n'_\alpha}^*$ انرژی پرش بین اتم‌های کربن و اتم‌های الکترون مس و همچنین $(g_\alpha) n_\alpha n'_\alpha$ تابع گرین سطحی است [16].

برای محاسبه تابع گرین سطحی ابتدا ویژه حالت‌های دقیق الکترون را از ضرب تانسوری زیر به دست می‌آوریم [17].

$$|K\rangle = |K'_z\rangle \otimes |K'_x\rangle \otimes |K'_y\rangle \quad (17)$$

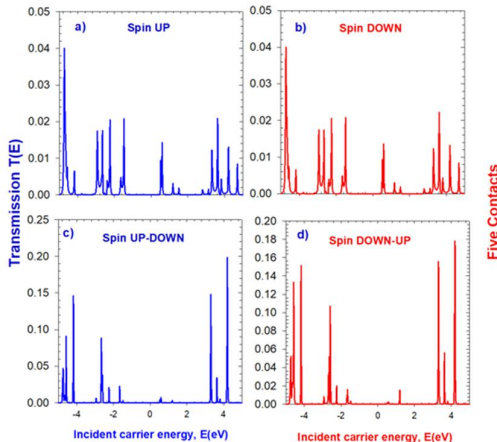
ویژه حالت عرضی $|K'_x\rangle$ و $|K'_y\rangle$ طبق روابط زیر به دست می‌آید [13]:

$$|K'_x\rangle \text{ و } |K'_y\rangle = \quad (18)$$

$$\sqrt{\frac{2\sqrt{2}}{(N_x - N_y + N_z + \sqrt{2})}} \sqrt{\frac{2\sqrt{2}}{(N_x + N_y - N_z + \sqrt{2})}} \times \sin(an_x k_x) \times \sin(an_y k_y) |n_x n_y\rangle$$

احتمال ضریب عبور الکترون‌های فرودی برای اسپین بالا وارد سیستم و با همان جهت خارج شده است و برای الکترون‌های فرودی در نمودار (b) که با اسپین پایین وارد ساختار نامتجانس و با همان اسپین از سیستم خارج می‌شود. ملاحظه می‌کنیم که با توجه به پیک‌های رزنانشی و گاف‌های انرژی هر کدام بسته به انرژی که الکترون دارد، می‌تواند از این ساختار عبور کند و پیک تشدید، در حدود $0/16$ eV را برای اسپین بالا و اسپین پایین در نزدیکی انرژی فرمی نشان می‌دهد. اما در همین نمودار شکل 2 هنگامی که الکترون با اسپین بالا از الکتروود سمت چپ وارد ساختار میانی می‌شود و با اسپین پایین از آن خارج می‌شود، در اثر برهم کنش اسپین-مدار راشبا در مولکول فولرن پیک ضریب عبوردهی الکترون در ولتاژ حدود 4 ولت به $0/5$ eV می‌رسد و در حالت برعکس نیز، به چنین نتیجه‌ای می‌رسیم. بنابراین، جفت‌شدگی اسپینی خوبی را نشان می‌دهد. در واقع رسانش اسپینی با فرض آن که در فرآیند تونل‌زنی، اسپین الکترون‌ها بقا داشته باشد، به چگالی حالات هر کانال و به تعداد تماس اتم‌های مولکول فولرن به الکتروودها بستگی دارد.

همچنین برای شکل 3، نمودارهای (a) و (b) برای الکترون‌های فرودی با اسپین بالا و پایین وارد سیستم شده و با همان اسپین خارج می‌شوند. در حالت اتصال پنج تایی، مشاهده می‌کنیم که گاف انرژی تغییر چندانی نداشته ولی پیک‌های تشدید کاهش پیدا کرده و انرژی الکترون‌های خروجی به حدود $0/04$ eV می‌رسد.



شکل 3. نمودارهای ضرایب عبوردهی اتصال پنج تایی (a) اسپین بالا-بالا (b) اسپین پایین-پایین (c) اسپین بالا-پایین (d) اسپین پایین-پایین

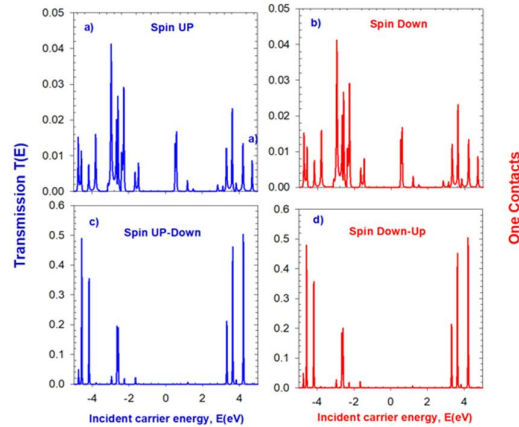
ساختار مورد نظر خارج می‌شود و بلعکس، می‌توان مطابق با ترابرد چرخش اسپینی به صورت زیر به دست آورد [23]:

$$T_{SF} = T^{\uparrow\downarrow} + T^{\downarrow\uparrow} \quad (25)$$

T_{SF} عناصر ماتریس مجموع احتمال ضریب عبوردهی الکترون‌های با اسپین بالا-پایین است [24].

بحث

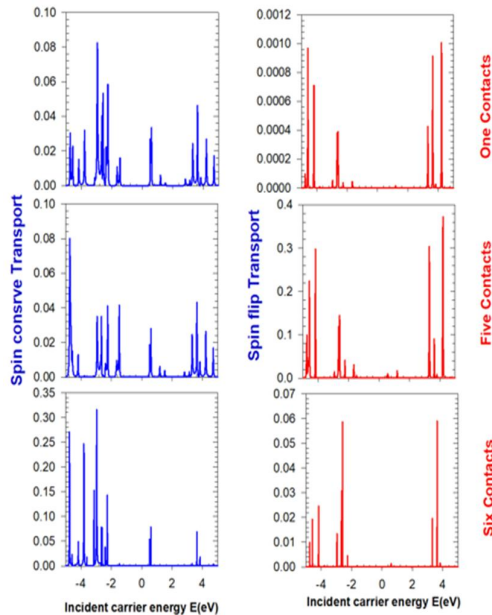
در این مقاله به مطالعه عددی، ترابرد اسپینی و قطبش اسپینی در نانو ساختار مولکول نامتجانس فولرن و پنتاسن متصل به الکتروودهای مس پرداخته می‌شود. اثر اتصالات با در نظر گرفتن اتصال‌های مختلف مولکول فولرن به الکتروودهای مس بررسی می‌شود و همچنین با تغییر انرژی الکترون‌های فرودی، می‌توان ضریب عبور وابسته به اسپین را کنترل کرد. در تقریب تنگ بست و فرمالیسم تابع گرین توانستیم عناصر ماتریس هامیلتونی کل را با احتساب برهم‌کنش اسپین-مدار راشبا به دست بیاوریم. جفت‌شدگی اسپین-مدار در مولکول نامتجانس دارای یک بخش ذاتی است که به طور کامل از ویژگی‌های تقارن شبکه تعیین می‌شود و در این مقاله به علت کوچک بودن مقادیر آن صرف نظر شده است. بخش دیگر آن مربوط به برهم‌کنش اسپین-مدار راشبا است که خود محصول اعمال میدان الکتریکی یا اتحنای ورقه اتمی است.



شکل 2. نمودارهای ضرایب عبوردهی اتصال تک‌تایی (a) اسپین بالا-بالا (b) اسپین پایین-پایین (c) اسپین بالا-پایین (d) اسپین پایین-پایین

مطابق با نمودار شکل 2 (a) در اتصال تک‌تایی اتم کربن مولکول فولرن با اتم‌های الکتروود مس، مشاهده می‌کنیم که

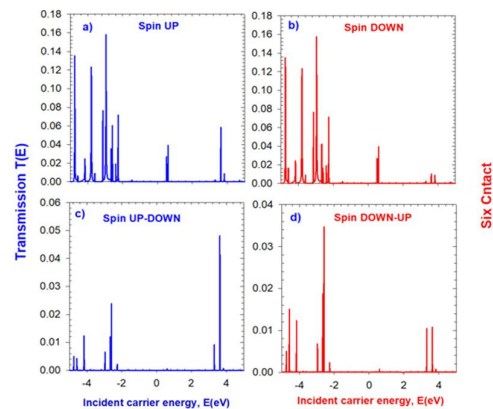
فرآیند تونل‌زنی، اسپین الکترون‌ها بقا داشته باشد، در مقایسه با ترابرد اتصال‌های متعدد، در اتصال شش تایی مقادیر به‌دست آمده به مراتب از اتصال‌های دیگر بیشتر بوده و این موضوع نشان می‌دهد که اتصال شش تایی، خواص الکترونیکی آنها را حفظ می‌کند.



شکل 5. مقایسه بقای ترابرد اسپینی برای اتصال تک‌تایی، پنج تایی، شش تایی و ترابرد اسپین فلیپ در تماس‌های متعدد ساختار نامتجانس

همچنین توجه می‌کنیم که اگرچه باند هدایت و ظرفیت فولرین با رزونانس‌های مشتق شده از $LUMO+1$ و $HOMO$ بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده (همپوشانی دارند، این وضعیت نزدیک به انرژی فرمی در پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده ($LUMO$) اتفاق می‌افتد. در نتیجه ضریب عبوردهی الکترون برای اسپین‌های بالا وارد این ساختار شده و با اسپین پایین از این ساختار خارج می‌شود، دارای بقا است و ترابرد خوبی را در حالت اتصال شش تایی نشان می‌دهد. همچنین در حالت اتصال پنج تایی، مقادیر چرخش اسپینی به‌دست آمده در ولتاژ 4 ولت در حدود و $0/4$ الکترون ولت را نشان می‌دهد.

در واقع اثر این برهم‌کنش بر روی این ساختار، قدرت پیک‌ها را برای اتصال پنج تایی در حالت اسپین بالا و اسپین پایین تغییر داده و ضریب عبور پایینی را مشاهده می‌کنیم و این امر نشانه‌ی این موضوع است که با افزایش تعداد تماس‌ها و کانال‌های اتم‌های مولکول فولرین به الکترودها، تداخل امواج الکترونی زیاد شده و کاهش ضریب عبوردهی الکترون را نتیجه می‌دهد. اما در حالتی که الکترون فرودی با اسپین بالا وارد ساختار شده و با اسپین پایین ساختار را ترک می‌کند، پیک تشدید آن در حدود $0/2$ eV می‌رسد که در مقایسه با اتصال تک‌تایی مقادیر کمتری دارد.



شکل 4. نمودارهای ضرایب عبوردهی اتصال شش تایی (a) اسپین بالا-بالا (b) اسپین پایین-پایین (c) اسپین بالا-پایین (d) اسپین پایین - بالا

در شکل 4 نمودار (a) برای اتصال شش تایی مولکول فولرین به الکترودها، عبوردهی برای الکترون‌های فرودی با اسپین بالا و پایین وارد سیستم شده و با همان جهت اسپین از سیستم خارج می‌شوند. در انرژی حدود $2-$ الکترون ولت و نزدیک انرژی فرمی، پیک تشدید در حدود $0/16$ الکترون ولت را به خوبی نشان می‌دهد. در این حالت قدرت تماس‌های متعدد مولکول فولرین با الکترودها مس کمتر شده و تداخل امواج الکترونی باعث کاهش پیک‌های تشدید می‌شود.

در نمودار شکل 5 مقایسه بقای ترابرد اسپینی برای اتصال تک‌تایی، پنج تایی، شش تایی و همچنین ترابرد چرخش اسپینی در تماس‌های متعدد ساختار نامتجانس را مشاهده می‌کنیم. در واقع، رسانش اسپینی با فرض اینکه در

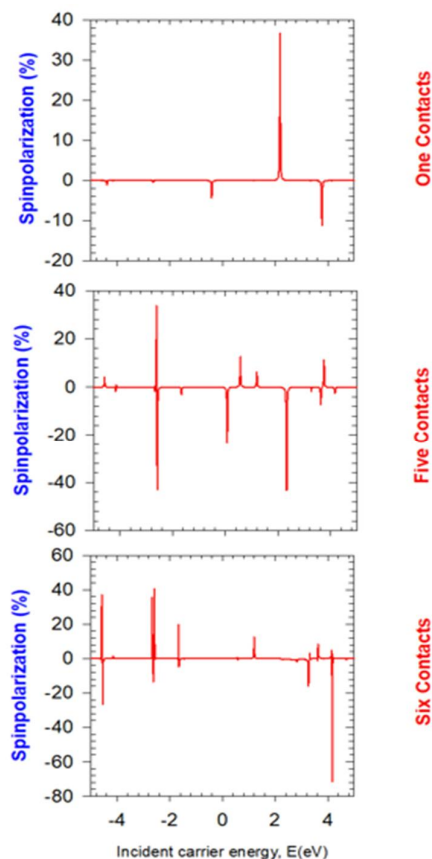
بحث و نتیجه گیری

در این تحقیق، ما خواص ترابرد الکتریکی وابسته به اسپین را در نانو ساختار مولکولی نامتجانس فولرن و مولکول پنتاسن به عنوان پذیرنده و دهنده الکترون، جفت شده با دو الکتروود نیمه نهایی مس، مورد بررسی قرار دادیم. با استفاده از رهیافت تابع گرین در چارچوب بستگی قوی، وابستگی خواص ترابرد الکتریکی برهم کنش اسپین-مدار راشبا و همچنین ولتاژ اعمالی را بر روی این ساختار به دست آوردیم. نتایج به دست آمده از محاسبات نشان می‌دهد که قطبش اسپینی بیش از 70% در کنترل اسپین الکترون‌ها فرودی، مؤثر است.

در مقایسه با سه حالت تماس مولکول فولرن با الکتروودهای مس، متوجه می‌شویم که در حالت اتصال شش تایی ساختار مورد نظر جهت‌گیری اسپین الکترون را به خوبی تغییر می‌دهد؛ زیرا با افزایش تعداد کانال‌های رسانشی و فرآیند تونل‌زنی احتمال عبور حامل‌های بار برای اسپین بالا و پایین نسبت به تماس چندگانه مخصوصاً نزدیک به سطح فرمی، متفاوت است. دلیل آن مربوط به تغییر فاز امواج الکترونی که از طریق ساختار نامتجانس مولکول فولرن پنتاسن منتشر و باعث می‌شوند که در تماس چندگانه، تداخل کوانتومی امواج الکترونی، سازنده یا ویرانگر رخ دهد. برای این منظور، با اعمال ولتاژ خاص، رفتار اسپین الکترون برای کنترل و قطبش‌پذیری ساختار مورد نظر را مورد ارزیابی قرار دادیم. برآوردها نشان می‌دهد که این ساختار نامتجانس مولکولی قابلیت جداسازی اسپین‌های بالا و پایین را دارد و ممکن است در طراحی ادوات اسپینترونیکی مفید باشد.

References

- [1] Deniz C. ak_r, Diana M. Ot_alvaro, G. Brocks2, Magnetoresistance in multilayer fullerene spin valves: a _rst-principles study PACS, 29, (2018) 1410.7344.
- [2] A.O. Slobodeniuk, D.M. Basko, Spin-flip processes and radiative decay of dark intravalley excitons in transition metal dichalcogenide monolayers. CNRS, 12 (2019) 1603.02572 .
- [3] J.A. Smerdon, N.C. Giebink, N.P. Guisinger, P. Darancet, J.R. Guest, Large



شکل 6. قطبش اسپینی اتصال تک‌تایی و پنج تایی، شش تایی مولکول فولرن-پنتاسن

مطابق با نمودارهای شکل 6 قطبش‌پذیری برای سه حالت اتصال تک‌تایی، پنج تایی، شش تایی مولکول فولرن رسم شده است. در اتصال پنج تایی و شش تایی قطبش اسپینی الکترون بیش از 70% حاصل شده است و این نتایج نشان می‌دهند که قطبش اسپینی در انرژی 3/5 الکترون ولت رخ می‌دهد.

Spatially Resolved Rectification in a Donor-AcceptorMolecular Heterojunction NanoLett. 16 (2016) 2603–2607.

- [4] R. Houca, E.B. azzaoui, C.A. Belouad, A. Kamal,M.E. Bouziani, Thermodynamic Properties of q-deformed massless Dirac fermions in graphene with Rashba coupling. Catal. Today 65 (2021) 65.80.
- [5] Z. Wenyong, J. Yunlong, S. Ralph, K. Parashu, L. Xingzhong, C. Tingyong,Z. Gejian, K. Dongrin, V. Shah and J.S. David, Spin-orbit coupling in curved gra-

- phene, fullerenes, nanotubes, and nanotube caps, *PHYSICAL REVIEW B*. 74 (2006) 155426.
- [6] A. Saffarzadeh, Electronic transport through a C60 molecular bridge: The role of single and multiple contacts. *Fundamental Sciences* 38 (2008) 0808.1352.
- [7] A. A. Shokri, M. Mardaani, The role of nano-contacts in electrical transport through a molecular wire, *Chem Phys*. 330 (2006) 287–294
- [8] N. Salami A.A. Shokri, Tunable spin polarization of MoS2 nanoribbons without time-reversal breaking. *Superlattices and Microstructures* 109 (2017) 605-618
- [9] C.Huan Wu, Tight-binding model and ab initio calculation of silicene with strong spin-orbit coupling in low-energy limit. *Key Lab of Atom Mole*. 51 (2018) 1804.01695.
- [10] B. Nikoli, Quantum Transport in Finite Disordered Electron Systems. *Stony Brook* 38 (2000) 228.
- [11] A.A. Shokri, S.M. Mirzani, Transport engineering design of AND and NOR gates with a 1,4-2-phenyl-dithiolate molecule, *Springer Mol Model*. 51 (2015) 1-7
- [12] A. A. Shokri, Sh. Nikzad, Topology effects of interface and gate voltage on electrical transport through the CNT/C60/CNT junction using the Green's function method. *J. Of Appl. Phys*, 110 (2011) 024303 .
- [13] A.A. Shokri, N. Salami, H. Bagheri, Electrical transport and rectification in a typical heterostructure based on fullerene-pentacene suspended to copper leads. *Appl. Phys. A* 51 (2021) 127-231
- [14] A. Corma and H. Garcia, Josephson Behavior In Small Normal One-Dimensional Rings. *Phys Let* 38 (1983) 10598.
- [15] A.A. Shokri, M. Mardaani, K. Esfarjani, Spin filtering and spin diode devices in quantumwire systems, *Physica E*. 27 (2004) 325–331
- [16] R. Roldán, M.P. López-Sancho, F. Guinea, E. Cappelluti, Effect of spin-orbit interaction in single-layer and multilayer transition metal dichalcogenides: a tight-binding approach. *Catal. Today* 1 (2014) 1401.5009.
- [17] A.N. Rudenko, M.I. Katsnelson, R. Rold, Electronic properties of single-layer antimony: Tight-binding model, spin-orbit coupling and the strength of effective Coulomb interactions, *Appl. Phys*. 51 (2017) 1702.06873.
- [18] H. Liu, J. Wang, M. Groesbeck, X. Pan, C. Zhang, Z. V. Vardeny, Studies of spin related processes in fullerene C60 devices, *J. Mater. Chem. C* 38 (2018) 17-24.
- [19] H. Rezaei, A. Phirouznia, Modified spin-orbit couplings in uniaxially strained graphene, *Appl. Phys*. 51 (2019) 255001
- [20] A. Ciattoni, C. Conti, A.V. Zayats, A. Marini, Electric control of spin orbit coupling in graphene-based nanostructures with broken rotational symmetry. *Catal. Today* 38 (2020) 2002.12058.
- [21] A.R. Saffarzadeh, G. Kirczenow, Voltage-controlled spin injection with an endohedral fullerene Co-C60 dimer, *Phys. Lett.* 51 (2013) 1304.7901.
- [22] M. Beens, R.A. Duine, B. Koopmans, Modeling ultrafast demagnetization and spin transport the interplay of spin-polarized electrons and thermal magnons. *Catal. Today* 38 (2021) 2111.11961.
- [23] A.A. Shokri, N. Salami, Thermoelectric properties in monolayer MoS2 nanoribbons with Rashba spin-orbit interaction, *J Mater Sci*. 51 (2018) 255001
- [24] E. Monino, P.F. Loos, Spin-Conserved and Spin-Flip Optical Excitations from the Bethe-Salpeter Equation Formalism. *J. Chem. Theory Comput*, 38 (2021) 2852–2867.

COPYRIGHTS



© 2022 by the authors Licensee PNU, Tehran, Iran This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0) (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0>)