

Yarıiletken Yapay Grafen Nanosistemlerde Nagaoka Ferromanyetizması

A. Devrim Güçlü

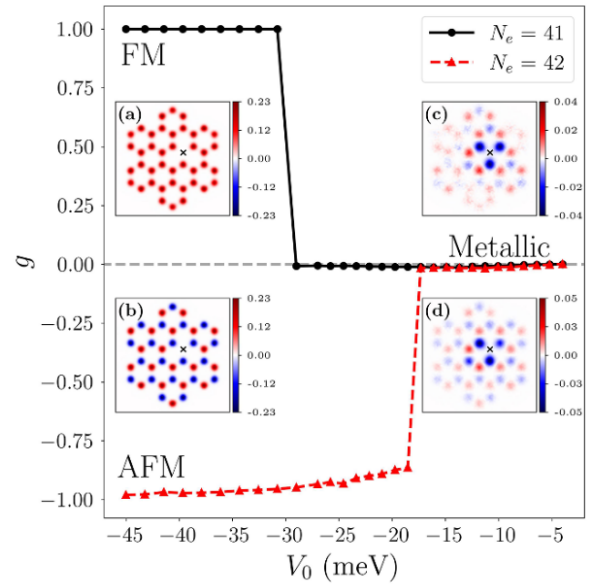
İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü Fizik Bölümü, 35430 İzmir

Bu çalışmada, GaAs/AlGaAs kuantum kuyuları üzerine nanoyapılandırılmış yarıiletken yapay grafen sistemlerinde Nagaoka ferromanyetizmasının ortaya çıkışını, yüksek hassasiyetli Varyasyonel Monte Carlo (VMC) ve Difüzyon Monte Carlo (DMC) yöntemleriyle gösteriyoruz. 42 noktalı hegzagonal örgü geometrisinde, elektron sayısının yarı doluluk seviyesinden ± 1 değiştirilmesiyle AFM \rightarrow FM faz geçişi gözlemlenmekte ve bu geçişin gerçekleşmesi için Hubbard parametresi $U/t \approx 60$ kritik eşik olarak belirlenmektedir. Coulomb saçılma terimlerinin FM fazı kararlı kıldığı, Tam Köşegenleştirme (ED) hesaplarıyla da doğrulanmaktadır.

Nagaoka ferromanyetizması, yarı dolu bir kafeste tek bir boşluğun tam spin polarizasyonuna yol açtığını öngören, Hubbard modeli çerçevesinde matematiksel olarak kanıtlanmış bir olgudur. Ancak bu fenomen, büyük ölçekli ve gerçekçi sistemlerde bugüne kadar gözlemlenememiştir. Mevcut çalışmalar yalnızca 2×2 boyutundaki elektrostatik kuantum nokta dizileriyle ve optik kafeslerle sınırlı kalmış; Coulomb etkileşiminin tam katkısını içeren gerçekçi modeller incelenmemiştir.[1]

Diğer yandan, yapay grafen (YG), AlGaAs/GaAs kuantum kuyuları üzerine nanoyapılandırılmış kuantum nokta dizileriyle oluşturulan ve ayarlanabilir Dirac fiziğine olanak tanıyan güçlü bir kuantum simülasyonu platformudur. Bu sistemlerde $U/t \sim 100$ mertebesinde Hubbard parametresi öngörülmekte olup bu değer, güçlü korelasyon rejiminin incelenmesine imkân tanımaktadır [2,3].

Şekil 1’de 42 noktalı hegzagonal örgü geometrisinde yaptığımız VMC ve DMC hesaplamalarından elden ettiğimiz spin-spin korelasyon fonksiyonunun kuyu potansiyeli derinliğine göre değişimini gösteriyoruz. Kuyu potansiyel derinliği $|V_0|$ arttıkça U/t değeri de artar. 42 elektronlu yarı-dolu örgüde metalik fazdan antiferromanyetik faza geçiş görülürken, 41 elektron için, yani örgüye bir boşluk eklendiğinde ferromanyetik faza bir geçiş olduğu, yani Nagaoka ferromanyetizmasının tetiklendiği görülmektedir.



Şekil 1: Spin-spin korelasyon fonksiyonunun kuyu potansiyeli derinliğine göre değişimi

Kuantum Monte Carlo sonuçlarımızı desteklemek için yaptığımız tam köşegenleştirme hesaplamalarımız da benzer sonuçlar vermekte ve Coulomb saçılma terimlerinin FM fazı kararlı kıldığı gözlenmektedir. Bu çalışmamız, uzun-menzilli ve saçılma etkileşimlerini tam olarak hesaba katan gerçekçi Hamiltoniyen modeli çerçevesinde, tek elektron eklenmesi/çıkarılmasıyla tetiklenen Nagaoka ferromanyetizmasının büyük ölçekli katı hal sisteminde var olduğunu ilk kez ortaya koymaktadır.

Teşekkür: Bu çalışma 119F119 nolu 1001 projesi ile TÜBİTAK tarafından desteklenmiştir.

Kaynakça:

1. Dehollain JP, Mukhopadhyay U, Michal VP, Wang Y, Wunsch B, Reichl C, Wegscheider W, Rudner MS, Demler E and Vandersypen LMK, Nature 579 528 (2020).
2. Öztarhan G, Potasz P, Güçlü AD, 2D Materials 13, 015012 (2026).
3. Kul EB, Öztarhan G, Çınar MN, Güçlü AD, Physical Review B 112 155101 (2025).