

رسانش تونل زنی یک زنجیره ای اتمی متناوب در حضور یک ناخالصی شاخه ای

ربانی، حسن؛ مردانی، محمد؛ طالبی، مرضیه

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

چکیده

در این مقاله به مطالعه ای رسانش تونل زنی یک زنجیره ای متناوب سامانه متصل به دو الکتروود فلزی در حضور یک ناخالصی خارجی که با سه اتم آن برهم کنش دارد، می پردازیم. محاسبات انجام شده مبتنی بر رهیافت بستگی قوی و با استفاده از روش تابع گرین صورت گرفته است. نتایج نشان می دهد که برهم کنش ناخالصی با زنجیره باعث ظهور قله ی تشدید و دره ی ضد تشدید در ناحیه ی گاف سامانه ی مرکزی می شود و از این خاصیت می توان برای کنترل رسانش استفاده نمود.

Tunneling conductance of an alternative atomic chain in the presence of one branched impurity

Rabani, Hassan; Mardaani, Mohammad; Talebi, Marziyeh

Department of Physics, Faculty of Science, Shahrekord University, Shahrekord

Abstract

In this paper we study the tunneling conductance of an alternative atomic chain embedded between two metallic electrodes in the presence of an external impurity which interacts with three middle atoms of the chain. The calculations are performed at tight-binding approach by using Green's function method. The results show that interaction between impurity and center chain atoms creates resonance peak and anti-resonance dip in the gap region of the center system. This property may be useful to control of the system conductance.

PACS No. 68

دهه های اخیر است. در نظر گرفتن برهم کنش های همسایه ای اول در این تقریب برای سامانه های دارای الکترون های جایگزیده قابل قبول است، اما برای سامانه های شامل الکترون های غیر جایگزیده خیلی مناسب نیست [۵]. در نظر گرفتن برهم کنش همسایه های دوم می تواند اختلاف چشمگیری در خواص تراپردی سامانه نسبت به حالتی که فقط برهم کنش همسایه های اول وجود دارد، ظاهر کند. این اختلاف به آثار همپوشانی توابع موج الکترون ها با اتم های دورتر مربوط می شود [۶-۷]. از آنجا که بررسی فیزیک حاکم با جزئیات بیشتر می تواند ما را به بهبود قطعات الکترونیکی هدایت کند، در نظر گرفتن همسایه های دوم در محاسبات ضروری به نظر می رسد.

مقدمه

امروزه در ساخت قطعات الکترونیکی توجه و تعمق ویژه ای بر روند تحقیقات تجربی و نظری در زمینه بررسی تراپرد الکترونی نانوساختارها متمرکز شده است. ناخالصی ها، نقص ها و اختلالات توپولوژیک می تواند تأثیرات قابل توجهی بر رسانندگی این سامانه ها داشته باشند. با دقت در این ویژگی می توان کنترل خواص تراپردی سامانه از جمله رسانش را در اختیار گرفت و به پیشرفت های چشمگیری در عرصه نانوالکترونیک و نانو الکترومکانیک دست یافت [۱-۴]. خواص تراپردی نانوساختارها در حضور ناخالصی های گوناگون با تقریب بستگی قوی موضوع مورد توجه



شکل ۱: یک زنجیره متناوب N اتمی در حضور یک ناخالصی خارجی که با اتم-های میانی آن برهمکنش دارد. این زنجیره بین دو الکتروود فلزی نیمه متناهی واقع است.

و $\beta_{L(R)}$ انرژی پرش الکترون بین جایگاه‌های اتم‌های متوالی در الکتروود چپ (راست)، $\beta_{L(R)C}$ انرژی پرش اتصال بین سامانه و الکتروود چپ (راست) است. با در نظر گرفتن $\varepsilon_A = -\varepsilon_B$ و موقعیت اتم ناخالصی به صورت $(N+1)/2$ می‌توان هامیلتونی سامانه مرکزی منزوی را به شکل زیر نوشت

$$H_C = \varepsilon_A \sum_{j=1}^N (-1)^{j+1} |j\rangle \langle j| + \beta_C \sum_{j=1}^{N-1} |j\rangle \langle j+1| + \varepsilon_I |I\rangle \langle I| + \beta_1 |I\rangle \langle (N+1)/2| + \beta_2 (|I\rangle \langle (N+3)/2| + |I\rangle \langle (N-1)/2|) + h.c. \quad (6)$$

که در آن ε_I ، انرژی جایگاهی اتم ناخالصی و β_1 و β_2 به ترتیب انرژی‌های پرش الکترون بین اتم ناخالصی و نزدیکترین اتم همسایه و همسایه دوم در زنجیره هستند. تابع گرین سامانه در حضور الکتروودها بصورت زیر محاسبه می‌شود

$$G = (\varepsilon - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R)^{-1} \quad (7)$$

که در آن $\Sigma_{L(R)}$ خودانرژی سامانه مرکزی به دلیل وجود الکتروود چپ (راست) و ε انرژی الکترون ورودی است که توسط رابطه زیر محاسبه می‌شود [۸].

$$\Sigma_{L(R)} = \frac{\beta_{LC(RC)}^2}{\beta_{L(R)}} e^{-ik_{L(R)} a_{L(R)}} \quad (8)$$

که در آن $k_{L(R)}$ عدد موج الکترون در الکتروود چپ (راست) است و در رابطه $\varepsilon - \varepsilon_{L(R)} = 2\beta_{L(R)} \cos k_{L(R)} a_{L(R)}$ صدق می‌کند. $a_{L(R)}$ ثابت شبکه الکتروود چپ (راست) است [۹]. در نهایت می‌توان ضریب عبور را برحسب عنصر سطر اول و ستون آخر ماتریس تابع گرین سامانه، توسط رابطه زیر بیان کرد [۱۰].

$$T(\varepsilon) = 4 \text{Im} \Sigma_L \text{Im} \Sigma_R |G_{1N}|^2 \quad (9)$$

لازم به ذکر است که رسانش الکترونی در رژیم پاسخ خطی و دمایی صفر طبق فرمولبندی لانداور متناسب با ضریب عبور است.

در این مقاله به بررسی رسانش تونل‌زنی یک زنجیره‌ی متناوب در حضور یک ناخالصی خارجی که با سه اتم آن برهمکنش دارد، می‌پردازیم.

شرح مدل و فرمولبندی

همانند شکل ۱ زنجیره‌ای متناوب شامل N اتم A و B را که از دو طرف به دو هادی فلزی ساده متصل شده، در نظر بگیرید. فرض می‌شود که یک ناخالصی خارجی در میانه زنجیره با سه اتم آن برهمکنش دارد. تعداد اتم‌های زنجیره خطی را به علت وجود تقارن فرد در نظر گرفته‌ایم به گونه‌ای که از نظر هندسی ناخالصی روی اتم B مرکزی واقع شود. تابع موج الکترون در ناخالصی با توابع موج سه اتم میانی زنجیره همپوشانی دارد که می‌توان از آن به اثر برهمکنش ناخالصی با زنجیره تا همسایه‌های دوم یاد کرد. سایر برهمکنش‌ها در سامانه‌ی مرکزی و الکتروودهای متصل تا برهمکنش همسایه‌های اول تقریب زده شده است. همان‌طور که می‌دانیم نوار انرژی زنجیره متناوب ایده‌آل دارای گاف انرژی است. وجود ناخالصی باعث ایجاد ترازهایی در ناحیه گاف می‌شود که بر خواص تراپردی آن تأثیر می‌گذارد. هامیلتونی کل سامانه شامل سامانه مرکزی واقع بین دو الکتروود نیمه متناهی به صورت زیر است

$$H = H_L + H_{LC} + H_C + H_{RC} + H_R \quad (1)$$

که در آن H_C و $H_{L(R)}$ و $H_{L(R)C}$ به ترتیب هامیلتونی زنجیره متناوب منزوی، هامیلتونی الکتروود منزوی چپ (راست) و هامیلتونی برهمکنش بین زنجیره متناوب و الکتروود چپ (راست) است. این هامیلتونی‌ها در تقریب بستگی قوی چپینند

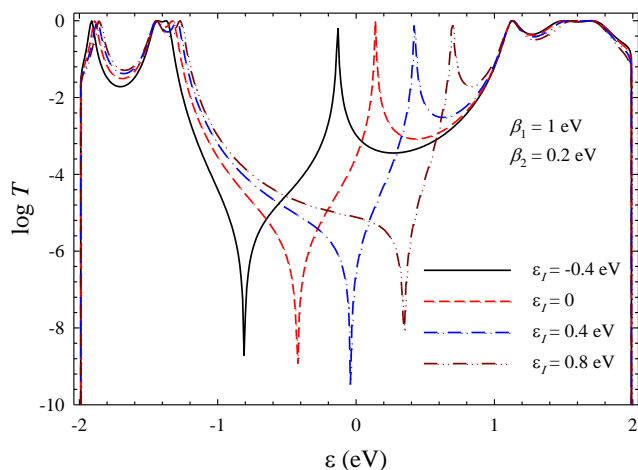
$$H_L = \varepsilon_L \sum_{j=-\infty}^0 |j\rangle \langle j| + \beta_L \sum_{j=-\infty}^{-1} (|j\rangle \langle j+1| + |j+1\rangle \langle j|) \quad (2)$$

$$H_R = \varepsilon_R \sum_{j=N+1}^{\infty} |j\rangle \langle j| + \beta_R \sum_{j=N+1}^{\infty} (|j\rangle \langle j+1| + |j+1\rangle \langle j|) \quad (3)$$

$$H_{LC} = \beta_{LC} (|0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0|) \quad (4)$$

$$H_{RC} = \beta_{RC} (|N\rangle \langle N+1| + |N+1\rangle \langle N|) \quad (5)$$

که در آن $\varepsilon_{L(R)}$ انرژی جایگاهی اتم‌ها در الکتروود چپ (راست)

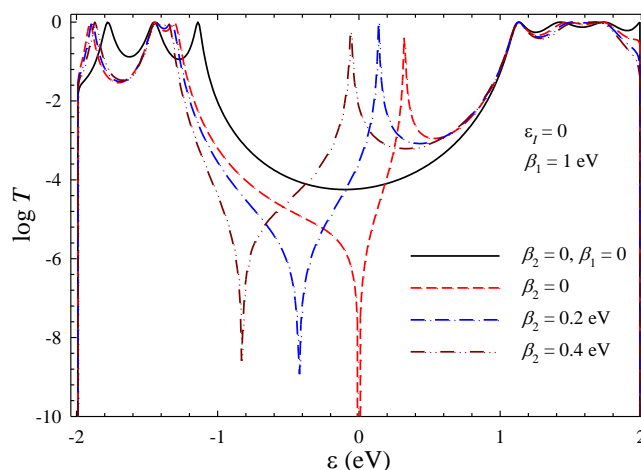


شکل ۳: لگاریتم ضریب عبور الکترونی سامانه به صورت تابعی از انرژی الکترون ورودی برای چند مقدار متفاوت انرژی جایگاهی اتم ناخالصی. زنجیره متناوب شامل ۱۱ اتم است.

موج الکترونی در مسیرهای متفاوت مربوط دانست. همچنین یک قله‌ی تشدید در ناحیه‌ی گاف مشاهده می‌شود که علت ظهور آن اضافه شدن یک شبه حالت مجاز جایگزیده در ناحیه‌ی گاف از طرف ناخالصی است. در نظر گرفتن برهمکنش اتم ناخالصی با همسایه‌های دوم‌اش، باعث جابجایی قله‌ی تشدید به همراه دره‌ی ضد تشدید به سمت انرژی‌های کمتر می‌شود. که در این روند دره ضد تشدید با افزایش β_2 به سمت ناحیه تشدید پیش می‌رود و در مقادیر بزرگ آن می‌تواند حتی از ناحیه گاف نیز خارج گردد.

شکل ۳ تغییرات لگاریتم ضریب عبور الکترونی را برای چند مقدار متفاوت انرژی جایگاهی ناخالصی به تصویر کشیده است. در این شکل مقدار انرژی پرش ناخالصی و همسایه‌های دوم را برابر مقدار ثابت 0.2 eV در نظر گرفته‌ایم. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش انرژی جایگاهی اتم ناخالصی قله‌ی تشدید و دره‌ی ضد تشدید به سمت راست جابجا می‌شود.

شکل ۴ تغییرات لگاریتم ضریب عبور الکترونی را برحسب انرژی جایگاهی اتم ناخالصی به ازای چند مقدار متفاوت انرژی الکترون ورودی نشان می‌دهد. در اینجا نیز مقدار انرژی پرش ناخالصی و همسایه‌های دوم ثابت و برابر 0.2 eV در نظر گرفته شده است. مقادیر ϵ در لبه‌ها، داخل و خارج گاف را انتخاب کرده‌ایم. برای مورد خارج از گاف (1.5 eV)، منحنی



شکل ۴: لگاریتم ضریب عبور الکترونی سامانه به صورت تابعی از انرژی الکترون ورودی برای چند مقدار متفاوت انرژی پرش اتم ناخالصی و همسایه‌های دوم در زنجیره متناوب شامل ۱۱ اتم.

نتایج عددی

در این بخش رفتار رسانش الکترونی سامانه در حضور ناخالصی با انرژی پرش همسایه‌های دوم و انرژی‌های جایگاهی مختلف را مورد بررسی قرار می‌دهیم. ابتدا ضریب عبور سامانه مورد بحث را محاسبه کرده‌و اثرات تغییر انرژی پرش بین ناخالصی و زنجیره را در ناحیه تشدید و تونل‌زنی مورد مطالعه قرار می‌دهیم. برای ارائه‌ی نتایج مقدار عددی پارامترهای مورد نیاز را به صورت زیر در نظر می‌گیریم:

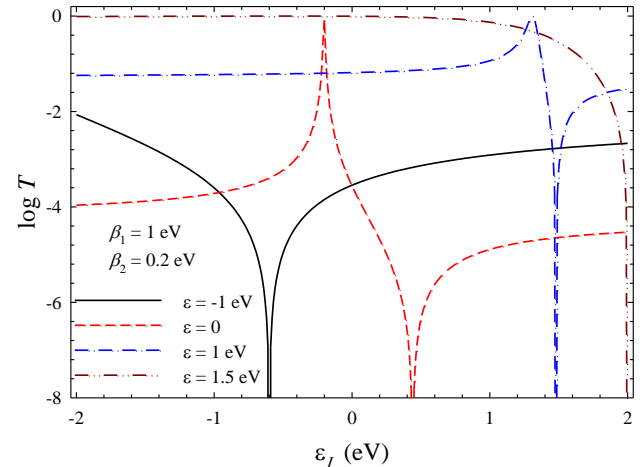
$$\epsilon_{L(R)} = 0, \quad \epsilon_A = -\epsilon_B = 1\text{ eV}$$

$$\beta_C = \beta_{L(R)} = 1.25, \quad \beta_{L(R)C} = 1\text{ eV}$$

شکل ۲ لگاریتم ضریب عبور الکترونی سامانه را به صورت تابعی از انرژی الکترون ورودی برای چند مقدار متفاوت انرژی پرش بین اتم ناخالصی و همسایه‌هایش در زنجیره متناوب نشان می‌دهد. خط پر معرف موردی است که بین ناخالصی و زنجیره برهمکنشی وجود ندارد. همان‌طور که مشاهده می‌شود در بازه‌ی $[-1, 1]\text{ eV}$ ساز و کار رسانش تونل‌زنی و در خارج از آن تشدید است. هنگامی که ناخالصی فقط با همسایگان اول زنجیره متناوب برهمکنش دارد، در ناحیه گاف انرژی شاهد پدیده ضد تشدید چشمگیری حول انرژی صفر (یا انرژی جایگاهی اتم ناخالصی) هستیم. پدیده ضد تشدید را می‌توان به تداخل ویرانگر توابع

مرجع ها

- [۱] P. Sautet and C. Jochim, *Phys. Rev. B* **38** (1988) 12238.
 [۲] R. Gutierrez, S. Mandal and G. Cuniberti, *Nano Lett.* **5** (2005) 1093.
 [۳] H. Rabani and M. Mardaani, *Solid State Commun.* **152** (2012) 235.
 [۴] م. مردانی، ح. ربانی و ز. بهارلو، مقاله نامه کنفرانس فیزیک ایران، یزد، ۱۳۹۱.
 [۵] C. J. Mewton and Z. Ficek, *J. Phys. A:Math.Theor.* **41** (2008) 445201.
 [۶] J. E. Barrios-Vargas and Gerardo G. Naumis, *Philos. Maga.* **91** (2011) 3844.
 [۷] R. Kundu, *Mod. Phys. Lett. B* **25** (2009) 163.
 [۸] S. Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems" (Cambridge University Press, Cambridge 1997).
 [۹] M. Mardaani, H. Rabani and A. Esmaili, *Solid State Commun.* **151** (2011) 928.
 [۱۰] D. S. Fisher and P. A. Lee, *Phys. Rev. B* **23**, (1981) R6851.



شکل ۴: تغییرات لگاریتم ضریب عبور الکترونی را برحسب انرژی جایگاهی اتم ناخالصی به ازای چند مقدار متفاوت انرژی الکترون ورودی. زنجیره متناوب شامل ۱۱ اتم است.

رسانش برحسب انرژی جایگاهی دارای تغییرات شدیدی نیست. در حالیکه در موارد دیگر اینگونه نمی باشد. مثلاً برای مورد $\varepsilon = 0$ ، منحنی شامل یک قله و یک دره است. از این موضوع می توان برای کنترل جریان با انتخاب ولتاژ گیت و یا انرژی جایگاهی ناخالصی مناسب بهره جست.

نتیجه گیری

در این پژوهش با استفاده از روش تابع گرین درهیافت بستگی قوی رسانش الکترونی یک زنجیره ی متناوب در حضور یک اتم ناخالصی را با در نظر گرفتن برهمکنش آن با سه همسایه اش در زنجیره مورد بررسی قرار دادیم. نتایج بدست آمده نشان می دهد که وجود برهمکنش بین ناخالصی و همسایه های دوم آن، تغییرات قابل توجهی را بر رسانش سامانه بخصوص در ناحیه گاف انرژی ایجاد می کند. در واقع پرش الکترون بین اتم ناخالصی و اتم های همسایه اول باعث ظهور یک شبه حالت مجاز جایگزیده در ناحیه ی گاف انرژی از طرف ناخالصی می شود. در نظر گرفتن برهمکنش اتم ناخالصی با همسایه های دوم اش، باعث جابجایی قله ی تشدیدی به همراه دره ی ضد تشدیدی به سمت انرژی های کمتر می شود. تغییرات نمودار رسانش بر حسب انرژی جایگاهی در انرژی های مختلف، کنترل رسانش را توسط ولتاژ گیت و یا انرژی جایگاهی ناخالصی پیشنهاد می کند.