

بررسی اثر آهارانوف-بوهم بر رسانش الکترونی یک سیم پلی استیلنی در حضور حلقه‌ی بنزنی

مردانی، محمد؛ ربانی، حسن؛ برزویی، محمود

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

چکیده

در این مقاله، با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت بستگی قوی، ترابرد الکترونی یک نانوسیم پلی استیلنی در حضور یک حلقه‌ی بنزنی واقع در میدان مغناطیسی بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد رسانش الکترونی سامانه علاوه بر شار مغناطیسی گذرنده از حلقه‌ی بنزنی به موقعیت حلقه در مولکول پلی استیلن وابسته است و در موردی که حلقه‌ی بنزنی در وسط نانوسیم قرار دارد، مقدار رسانش بیشینه است. نتایج این بررسی می‌تواند به طراحی یک کلید مغناطیسی منجر شود.

Study of Aharonov-Bohm Effect on the Electronic Conductance of a Polyacetylene Wire in the Presence of a Benzene Ring

Mardaani, Mohammad; Rabani, Hassan; Borzouei, Mahmood

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

Abstract

In this paper, we investigate the electronic transport of a polyacetylene nanowire in the presence of a benzene ring located in the magnetic field by Green's function method within the tight-binding approach. The results show that the conductance of the system depends on magnetic flux treated from benzene ring and its position on the polyacetylene molecule. Indeed, the conductance takes its maximum value when the benzene ring is located at the middle of the nanowire. The results can lead us to design a magnetic switch.

PACS No.

ترابرد الکترونی در این سامانه‌ها معمولاً به اثر تداخل کوانتومی وابسته است و این اثر برای سامانه‌های با ابعاد خیلی کوچک حفظ می‌شود، درحالی‌که برای سامانه‌های بزرگ‌تر قابل توجه نیست [۶ و ۷].

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین و رهیافت بستگی قوی و همچنین بهره‌گیری از روش بازبهنجارش، به بررسی ترابرد الکترونی یک سیم مولکولی پلی استیلن شامل یک حلقه‌ی بنزن واقع بین دو الکتروود ساده‌ی یک بعدی در حضور میدان مغناطیسی می‌پردازیم. سپس وابستگی رسانش الکترونی را به انرژی الکترون ورودی و شار مغناطیسی نشان می‌دهیم. از پدیده‌هایی مانند پراکندگی ناکشسان و برهم‌کنش الکترون-الکترون چشم‌پوشی می‌کنیم.

مقدمه

مطالعه‌ی ترابرد الکترونی از یک سامانه‌ی مولکولی متصل به الکتروودهای فلزی به عنوان یکی از زمینه‌های تحقیقاتی امیدبخش در فیزیک و نانو فن‌آوری نگریسته می‌شود [۱]. با کشف روش‌های اندازه‌گیری پیشرفته در مقیاس مولکولی مانند میکروسکوپ الکتروشیمیایی، میکروسکوپ روبشی و میکروسکوپ نیروی اتمی اندازه‌گیری جریان الکتریکی گذرنده از سامانه‌های مولکولی ممکن شده است [۲]. از دهه‌ی هفتاد میلادی به بعد، محاسبات نظری بسیاری جهت تحقیق ترابرد الکترونی انجام شده است [۳-۵]. ولی تحقیقات تجربی به مدت زمان بیشتری برای عملی شدن نیاز داشته‌اند. گرچه مطالعات نظری و تجربی بسیاری با مولکول‌های متفاوت انجام شده است، ولی مسائل حل نشده‌ی زیادی برای پیشرفت بیشتر الکترونیک مولکولی وجود دارد. ویژگی‌های اساسی

$$H_{ele} = \sum_{\alpha=R,L} (\varepsilon_{\alpha} \sum_i d_i^{\dagger} d_i + \beta_{\alpha} \sum_{\langle ij \rangle} (d_i^{\dagger} d_j + h.c.)), \quad (4)$$

$$H_{con} = \beta_{WL} [c_1^{\dagger} d_0 + h.c.] + \beta_{WR} [c_N^{\dagger} d_0 + h.c.], \quad (5)$$

که در آن‌ها N تعداد اتم‌های پلی‌استیلن، ε_i انرژی جایگاهی (بهنجار شده) هر اتم پلی‌استیلن، $\langle ij \rangle$ نمایانگر نزدیکترین همسایه‌ها و v_{ij} انرژی پرش بین جایگاه‌های نام و j نام است که برای پیوندهای یگانه و دوگانه کربن-کربن برابر β_s و β_d خواهد بود. $c_i^{\dagger} (c_i)$ عملگر خلق (فنا) در جایگاه اتم نام است. همچنین $\varepsilon_{R(L)}$ و $\beta_{R(L)}$ نیز به ترتیب انرژی جایگاهی و انرژی پرش مربوط به الکتروود راست (چپ) است که معمولاً این هادی-های متصل به مولکول را به صورت زنجیره‌های یک بعدی در نظر می‌گیرند [9]. و در نهایت $\beta_{WR(L)}$ قدرت جفت‌شدگی اتصال بین مولکول و الکتروود راست (چپ) است.

برای محاسبه‌ی ضریب عبور الکترونی از الکتروودها از درون مولکول از روش قدرتمند تابع گرین استفاده می‌کنیم که برای بررسی ترابرد همدوس روش مناسبی است. تابع گرین سامانه تحت بررسی به صورت زیر است [10]

$$G = (\varepsilon - H + i\eta)^{-1}, \quad \eta \rightarrow 0^+ \quad (6)$$

که در آن ε انرژی الکترون است. با توجه به روابط (1) تا (6) داریم

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

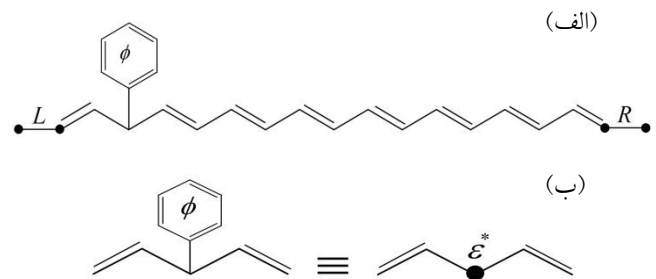
که در آن $\Sigma_{R(L)}$ خود انرژی سیم مرکزی به دلیل جفت‌شدگی آن با الکتروود راست (چپ) است و به صورت زیر قابل محاسبه است [9]

$$\Sigma_{R(L)} = \frac{\beta_{WR(L)}^2}{2\beta_{R(L)}^2} \left(\varepsilon - \varepsilon_{R(L)} + \sqrt{(\varepsilon - \varepsilon_{R(L)})^2 - 4\beta_{R(L)}^2} \right). \quad (8)$$

در نهایت ضریب عبور الکترونی مطابق زیر است

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

که در آن G_{1N} درایه‌ی سطر اول و ستون N ام ماتریس تابع گرین است. لازم به ذکر است در رهیافت بستگی قوی اثر آهارونوف-بوهم ضریب $e^{(\pm i\phi_{\alpha})}$ در انرژی‌های پرش مربوط به حلقه‌ی بنزن ضرب می‌شود که علامت‌های مثبت و منفی به ترتیب برای پرش در جهت‌های ساعتگرد و پاد ساعتگرد است [10]. در بخش بعد به بررسی ضریب عبور الکترونی در حضور اثر آهارونوف-بوهم



شکل ۱: (الف) یک مولکول پلی‌استیلن متصل به یک حلقه‌ی شامل شار مغناطیسی ϕ . این پلیمر از چپ (L) و راست (R) به دو الکتروود ساده وصل شده است. (ب) حلقه‌ی بنزی به همراه پیوندهای اطراف محل اتصالش به یک ناخالصی مؤثر با انرژی جایگاهی ε^* بهنجار شده است.

مدل و فرمول‌بندی

فرض می‌کنیم سامانه مولکولی مورد بررسی، مطابق شکل (الف)، شامل یک سیم پلی‌استیلن است که بین دو الکتروود فلزی ساده‌ی یک بعدی قرار دارد و یک حلقه‌ی بنزی روی آن قابل جابه‌جایی است. در این ساختار مولکولی انرژی جایگاهی اتم کربن ε_C در نظر گرفته شده و β_d و β_s به ترتیب انرژی‌های پرش مربوط به پیوندهای یگانه و دوگانه کربن-کربن هستند. در حضور میدان مغناطیسی و اثر آهارانوف-بوهم از حلقه‌ی بنزی شار مغناطیسی بدون بعد $\varphi = \varphi_B / \varphi_0$ عبور می‌کند که $\phi_0 = \hbar / |e|$ کوانتای شار مغناطیسی است. مطابق شکل (ب)، در روش بازهنجارش می‌توان اثر حلقه‌ی بنزی را روی اتم مقابل آن بر روی سیم پلی‌استیلن انداخت و این مجموعه را بعنوان یک ناخالصی مؤثر با انرژی جایگاهی مؤثر زیر در نظر گرفت

$$\varepsilon_C^* = \varepsilon_C + \beta_p^2 / (-\varepsilon + \varepsilon_C + \frac{\beta_s^2 (e^{i\phi} \beta_d^3 \beta_s + (\beta_s^2 - (\varepsilon - \varepsilon_C)(\beta_d + \varepsilon - \varepsilon_C))(\beta_s^2 + (\varepsilon - \varepsilon_C)(\beta_d - \varepsilon + \varepsilon_C)))}{(\beta_d^4 + \beta_d^2(\beta_s^2 - 2(\varepsilon - \varepsilon_C)^2) + (\beta_s^2 - (\varepsilon - \varepsilon_C)^2)^2)(\varepsilon - \varepsilon_C)} + \frac{e^{-i\phi} \beta_d^2 (\beta_d \beta_s^3 + e^{i\phi} (\beta_d^2 - (\varepsilon - \varepsilon_C)(\beta_s + \varepsilon - \varepsilon_C))(\beta_d^2 + (\varepsilon - \varepsilon_C)(\beta_s - \varepsilon + \varepsilon_C)))}{(\beta_d^4 + \beta_d^2(\beta_s^2 - 2(\varepsilon - \varepsilon_C)^2) + (\beta_s^2 - (\varepsilon - \varepsilon_C)^2)^2)(\varepsilon - \varepsilon_C)}) \quad (10)$$

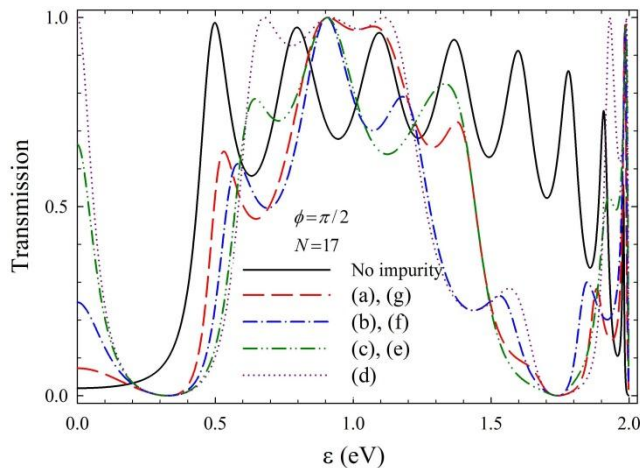
هامیلتونی تک ذره‌ای که برای توصیف سامانه مولکولی و

الکتروودها به کار می‌رود به این شکل است

$$H = H_{mol} + H_{ele} + H_{con}, \quad (11)$$

که در آن H_{mol} هامیلتونی مولکول بهنجار شده‌ی واقع بین الکتروودها، H_{ele} هامیلتونی الکتروودها و H_{con} هامیلتونی اتصال-های بین مولکول و الکتروودها هستند. در رهیافت بستگی قوی برای هر یک از هامیلتونی‌ها داریم [10]

$$H_{mol} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i c_i^{\dagger} c_i + \sum_{\langle ij \rangle} v_{ij} (c_i^{\dagger} c_j + h.c.), \quad (12)$$

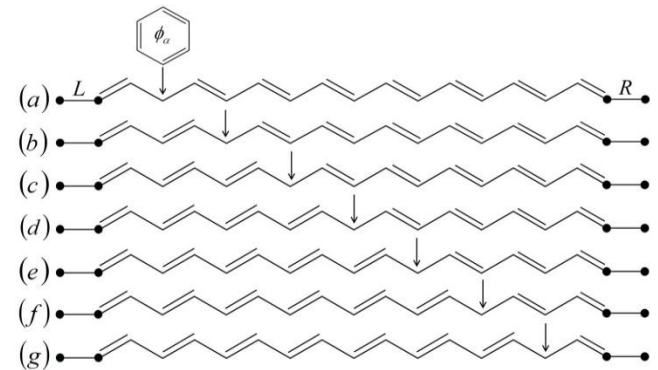


شکل ۳: ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی برای پیکربندی‌های نشان داده شده در شکل ۲ برای مورد $\phi = \pi/2$. خط پر مربوط به حالت سیم پلی-استیلن منزوی بدون حلقه‌ی بنزنی است.

تغییر جایگاه بنزن روی سیم پلی‌استیلن، هرچه به طرف مرکز نانوسیم حرکت کنیم، رسانش در انرژی فرمی بیشتر می‌شود. تفاوت مورد $\phi = \pi/2$ با مورد $\phi = 0$ در این است که پدیده‌ی ضد تشدید که به دلیل وجود حلقه‌ی بنزن در $\epsilon = \pm 1\text{eV}$ مشاهده شده بود، در حضور شار مغناطیسی به انرژی‌های حدود $\epsilon = \pm 1.75\text{eV}$ منتقل می‌شود.

در شکل‌های ۴(الف) تا (ج) ضریب عبور الکترونی به صورت تابعی از شار مغناطیسی ϕ در سه انرژی متفاوت الکترون ورودی و برای پیکربندی‌های شکل ۲ رسم شده است. تغییرات ضریب عبور الکترونی بر حسب ϕ دارای دوره تناوب $\pi/3$ است. بنابراین نمودارها برای یک دوره تناوب رسم شده‌اند. با توجه به این نمودارها می‌توان نتیجه گرفت که تغییر شار مغناطیسی گذرنده از حلقه‌ی بنزنی بر ضریب عبور الکترونی بخصوص در انرژی‌های غیر صفر بسیار مؤثر است. در هر دوره‌ی تناوب ضریب عبور دو مقدار کمینه و دو مقدار بیشینه دارد که با تغییر مقدار انرژی، موقعیت این کمینه و بیشینه‌ها بر روی محور ϕ تغییر می‌کند. علاوه بر این در انرژی $\epsilon = 0.5\text{eV}$ فقط برای مورد (d) بیشترین مقدار ضریب عبور الکترونی مشاهده می‌شود. در انرژی $\epsilon = 1.5\text{eV}$ تقریباً در تمامی حالت‌ها ضریب عبور الکترونی به بیشترین مقدار خود می‌رسد.

در حلقه بنزنی و مقایسه آن با حالت بدون میدان مغناطیسی می‌پردازیم.



شکل ۴: پیکربندی‌های متفاوت از مولکول پلی‌استیلن به همراه یک حلقه‌ی بنزنی که شار مغناطیسی ϕ از آن می‌گذرد.

نتایج و بحث

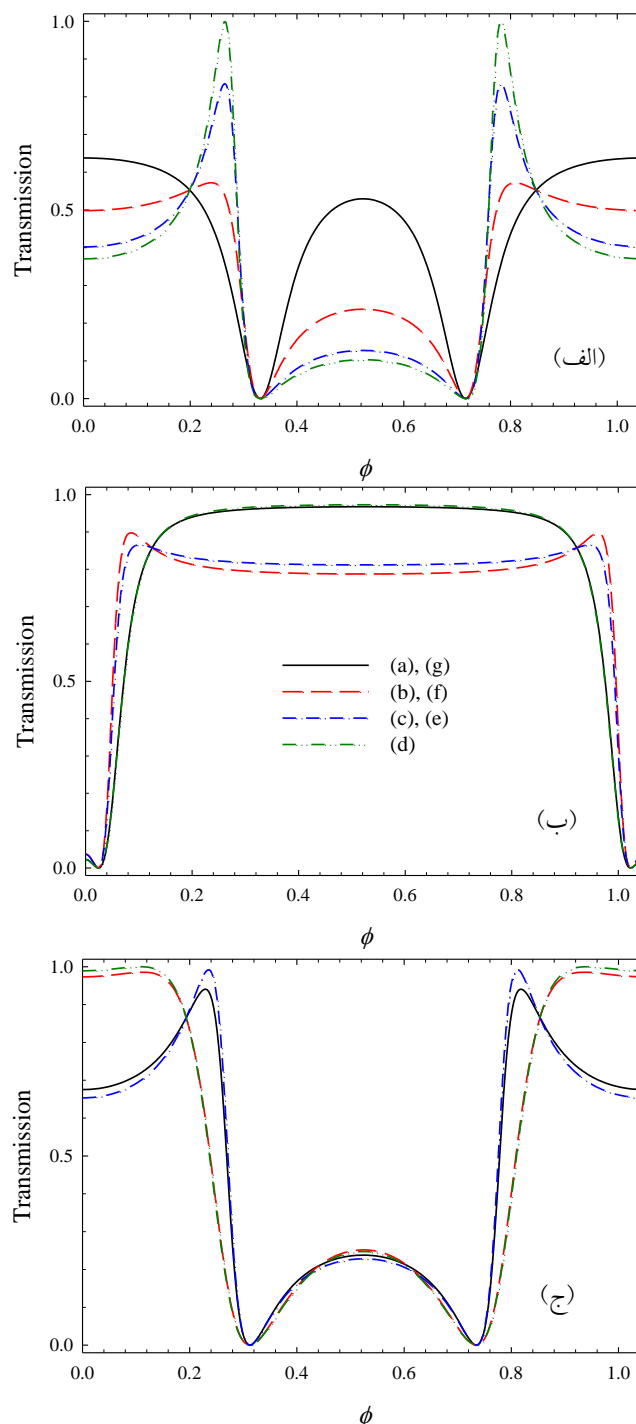
مطابق شکل ۲، یک سیم پلی‌استیلنی شامل ۱۷ اتم کربن را در نظر می‌گیریم که به دو الکتروود ساده‌ی یک بعدی متصل است و حلقه‌ی بنزنی در ۷ حالت متفاوت می‌تواند روی سیم جابه‌جا شود. انرژی پرش پیوندهای یگانه و دوگانه‌ی کربن-کربن به ترتیب $\beta_s = 0.826\text{eV}$ و $\beta_d = 1.164\text{eV}$ و انرژی پرش مولکول-الکتروود نیز $\beta_{WR(L)} = 0.8\text{eV}$ و انرژی پرش الکتروودهای راست و چپ $\beta_{R(L)} = 1\text{eV}$ در نظر گرفته می‌شود [۱۱]. جایگاهی اتم‌های کربن و اتم‌های الکتروودها نیز صفر اختیار می‌شود. لازم به ذکر است که رسانش این سامانه در غیاب میدان مغناطیسی قبلاً در مرجع [۱۲] بررسی شده است.

در شکل ۳ ضریب عبور الکترونی به صورت تابعی از انرژی برای حالت $\phi = \pi/2$ و پیکربندی‌های نشان داده شده در شکل ۲ رسم شده است. به دلیل یکسان بودن الکتروودها، پیکربندی‌های (a) و (b) و (c) به ترتیب با پیکربندی‌های (g) و (f) و (e) معادل هستند. با توجه به مقارن بودن ضریب عبور نسبت به متغیرها، نمودارها را فقط برای مقادیر مثبت متغیرها رسم کرده‌ایم. همچنین با توجه به یکسان بودن الکتروودها و این نکته که انرژی جایگاهی آنها صفر اختیار شده است، انرژی فرمی دستگاه در حالت تراز نیمه پر برابر صفر است. همانند مورد $\phi = 0$ [۱۲]، دو ناحیه‌ی تشدید و یک گاف انرژی حول انرژی فرمی دیده می‌شود و با

می دهند که در حضور میدان مغناطیسی نیز می توان از این سامانه به عنوان رتوستای مولکولی بهره جست و با نزدیک شدن حلقه ی بنزنی به وسط سیم پلی استیلن، رسانش الکترونی در انرژی فرمی صفر زیاد می شود. علاوه بر این، این سامانه را می توان برای کنترل رسانش توسط میدان مغناطیسی (کلید مغناطیسی) به کار گرفت. حضور میدان مغناطیسی باعث جابه جایی پدیده ضد تشدید نسبت به محور انرژی نیز می شود. علاوه بر این تغییر شار مغناطیسی گذرنده از حلقه ی بنزنی بر ضریب عبور را با دوره تناوب مشخصی تغییر می دهد.

مرجع ها:

- [1] A. Nitzan and M. A. Ratner, *Science* **300**, 1384 (2003).
- [2] F. Chen and N. J. Tao, *Acc. Chem. Res.* **42**, 429 (2009).
- [3] A. Aviram and M. Ratner, *Chem. Phys. Lett.* **29**, 277 (1974).
- [4] M. D. Ventra, S. T. Pentelides, and N. D. Lang, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 3448 (2000).
- [5] M. Dey, S. K. Maiti, and S. N. Karmakar, *Org. Electron.* **12**, 1017 (2011).
- [6] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Oxford University Press, Oxford, 2002.
- [7] Y. Imry, R. Landauer, *Rev. Modern Phys.* **71** (1999) S306
- [8] S. K. Maiti, *arXiv:1302.3944v1* [cond-mat.mes-hall] 16 Feb 2013
- [9] Mohammad Mardaani, Hassan Rabani, Azar Esmaeili, *Solid State Communications* **151** (2011).
- [10] S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*, Cambridge University Press, Cambridge (1997).
- [11] D. Nozaki, H. M. Pastawski and G. Cuniberti, *New J. Phys.* **12**, (2010).
- [12] مردانی، محمد؛ ربانی، حسن؛ انصاری، سونیا؛ «رسانش الکترونی یک پیوندگاه فلز-پلی استیلن-فلز در حضور یک حلقه ی بنزنی»؛ کنفرانس سالانه ی فیزیک ایران، ۱۳۹۰.



شکل ۴: ضریب عبور الکترونی بر حسب شار مغناطیسی برای حالت های مختلف اتصال حلقه ی بنزنی و برای انرژی های (الف) $\mathcal{E} = 0.5 eV$ ، (ب) $\mathcal{E} = 1 eV$ و (ج) $\mathcal{E} = 1.5 eV$

نتیجه گیری

در این مقاله، به بررسی تراپرد الکترونی سیم پلی استیلن در حضور یک حلقه ی بنزنی در میدان مغناطیسی پرداختیم و نتایج را با حالت بدون حضور میدان مغناطیسی مقایسه کردیم. نتایج نشان

Surf and download all data from SID.ir: www.SID.ir

Translate via STRS.ir: www.STRS.ir

Follow our scientific posts via our Blog: www.sid.ir/blog

Use our educational service (Courses, Workshops, Videos and etc.) via Workshop: www.sid.ir/workshop