

## رسانش الکترونی یک زنجیره‌ی اتمی در حضور یک دو قطبی الکتریکی در خارج از آن

مردانی، محمد؛ ربانی، حسن؛ آقابابایی، فاطمه

<sup>۱</sup>گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

### چکیده

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین و در رهیافت تنگابست به بررسی رسانش الکتریکی یک زنجیره‌ی اتمی با تعداد اتم‌های فرد در حضور یک دو قطبی الکتریکی در خارج از مرکز زنجیره می‌پردازیم. نتایج نشان می‌دهد که رسانش الکتریکی در انرژی فرمی و در جهت‌گیری موازی دو قطبی، مستقل از قدرت و فاصله-ی آن از مرکز زنجیره است. ولی با تغییر زاویه‌ی جهت‌گیری ضریب عبور در قله‌ها بیشتر می‌شود.

## Electronic Conductance of an Atomic Chain in the presence of an External Electrical Dipole

Mardaani, Mohammad; Rabani, Hassan; Aghababaei, Fatemeh

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

### Abstract

*In this paper, we study the electronic transmission coefficient of an atomic chain in the presence of an external electric dipole located at the center by using Green's function method at the tight-binding approach. The results show that the electronic conductance at Fermi energy and for a parallel dipole is independent of its distance and potential strength. The nonzero orientation angle increases the system transmission coefficient.*

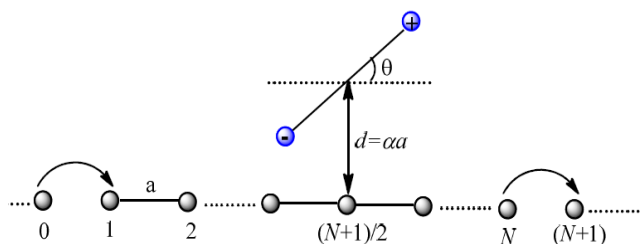
PACS No. 72

شده برای بررسی ترابرد الکترونی از روش تابع گرین استفاده می‌شود [۸]. در این مقاله به بررسی رسانش الکتریکی یک زنجیره‌ی اتمی در حضور یک دو قطبی الکتریکی در خارج آن پرداخته و اثر قدرت پتانسیل، فاصله و جهت‌گیری دو قطبی را روی رسانش الکتریکی زنجیره در حضور الکترودها مورد بررسی قرار می‌دهیم. برای این منظور ابتدا فرمول‌بندی مسئله را در رهیافت تنگابست و تقریب نزدیکترین همسایه بر پایه‌ی روش تابع گرین ارائه و سپس نتایج محاسبات مربوط به رسانش الکترونی را مورد بحث قرار می‌دهیم.

### مقدمه

با پیشرفت فن‌آوری ساخت قطعات در ابعاد مزوسکوپیکی، بررسی رسانش الکترونی در این سامانه‌ها نه تنها یک موضوع صرفاً نظری نیست، بلکه می‌تواند به بهبود طراحی و ساخت ابزارهای الکترونیکی پیشرفته منجر شود [۱]. همچنین در سال‌های اخیر بررسی رسانش الکتریکی سیم‌های کوانتومی و مولکولی موضوع اصلی مطالعه در فیزیک مزوسکوپیکی بوده‌اند [۲-۵]. مثال-های زیادی وجود دارد که نشان می‌دهد اضافه کردن حتی یک ناخالصی الکتریکی درون این ساختارها روی خواص الکتریکی و اپتیکی آنها اثر به‌سزایی دارد [۶-۷]. در اکثر مطالعات نظری انجام

## مدل و فرمول بندی



شکل ۱: طرح‌واره‌ی یک زنجیره‌ی اتمی ساده متصل به دو هادی فلزی در حضور یک دو قطبی الکتریکی به فاصله‌ی  $d$  بالای زنجیره که در آن به صورت ضربی ( $\alpha$ ) از ثابت شبکه است ( $d = \alpha a$ ).

$$T(\varepsilon) = 4 \text{Im} \Sigma_L \text{Im} \Sigma_R |G_{IN}|^2, \quad (5)$$

که در آن  $G_{IN}$  درایه‌ی سطر اول و ستون  $N$  ام ماتریس تابع گرین است. حال ابزار لازم برای محاسبه‌ی عددی ضریب عبور الکترونی که متناسب با رسانش در رژیم پاسخ خطی است، برای یک زنجیره‌ی اتمی در حضور یک دو قطبی الکتریکی فراهم شده است.

## نتایج و بحث

ابتدا در حالت ایده‌آل زنجیره‌ی اتمی شامل  $N$  اتم را در نظر می‌گیریم که دو قطبی الکتریکی در فاصله‌ی  $d$  خارج از زنجیره‌ی اتمی قرار دارد. قدرت پتانسیل دو قطبی را برابر  $1\text{eV}$ ، همه‌ی انرژی‌های پرش سامانه برابر یک الکترون ولت و همچنین تمام انرژی‌های جایگاهی سامانه در غیاب دو قطبی را برابر صفر انتخاب می‌کنیم.

در شکل ۲ ضریب عبور الکترونی این مورد به ازای سه فاصله‌ی مختلف و برای حالتی که زاویه‌ی جهت‌گیری دو قطبی با راستای محور آن صفر باشد ( $\theta = 0$ ) رسم شده است. با توجه به شکل هر سه نمودار نسبت به انرژی صفر متقارن هستند. با بیشتر شدن فاصله‌ی دو قطبی از مرکز زنجیره پهنای منحنی‌ها بیشتر شده و بازه‌ای از انرژی که به ازای آن رسانش به یک می‌رسد افزایش می‌یابد و همچنین در انرژی فرمی صفر ضریب عبور مستقل از فاصله‌ی دو قطبی تا مرکز زنجیره است. در مرحله‌ی بعد دو قطبی را در فاصله‌ی ثابت  $d = 2a$  قرار داده به طوریکه دو قطبی به موازات زنجیره‌ی قرار دارد. حال ضریب عبور را برای

مطابق با شکل ۱ یک زنجیره‌ی اتمی متناهی با تعداد اتم‌های فرد را در نظر می‌گیریم که از دو طرف به زنجیره‌های اتمی نیمه متناهی مشابه متصل است و یک دو قطبی الکتریکی در فاصله‌ی  $d$  بالاتر از مرکز زنجیره تحت زاویه‌ی  $\theta$  جهت‌گیری کرده است. وارون تابع گرین زنجیره‌ی اتمی در حضور هادی‌های چپ و راست  $G_C^{-1}$ ، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید

$$G_C^{-1} = G_{C0}^{-1} - \Sigma_L - \Sigma_R, \quad (1)$$

که در آن  $G_{C0}^{-1}$  وارون تابع گرین زنجیره‌ی مرکزی در حالت منزوی و  $\Sigma_{L(R)}$  خود انرژی سامانه‌ی مرکزی در حضور هادی چپ (راست) است که با رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود

$$\Sigma_{L(R)}(\varepsilon) = \frac{\beta_{CL(R)}^2}{\beta_{L(R)}} \left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_{L(R)}}{2\beta_{L(R)}} + \sqrt{\left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_{L(R)}}{2\beta_{L(R)}} \right)^2 - 1} \right), \quad (2)$$

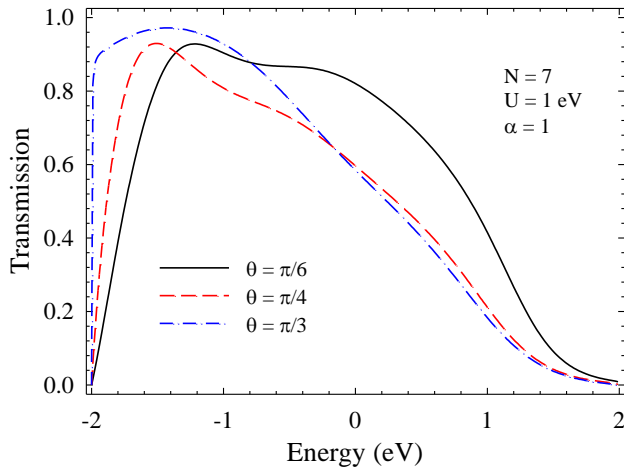
که در آن  $\beta_{L(R)}$  و  $\varepsilon_{L(R)}$  به ترتیب انرژی‌های پرش و جایگاهی هادی چپ (راست) هستند. با توجه به نوار انرژی هادی‌ها  $\varepsilon = \varepsilon_{L(R)} + 2\beta_{L(R)} \cos(ka)$  که در آن  $k$  عدد موج و  $a$  ثابت شبکه است می‌توان خود انرژی زنجیره‌ی مرکزی را در حضور هادی‌ها حساب کرد. با توجه به شکل ۱ سامانه‌ی مرکزی در حضور یک دو قطبی الکتریکی با قدرت پتانسیل  $U$  در مکان  $d = \alpha a$  قرار دارد ( $\alpha$  یک ثابت است) که می‌تواند تحت زوایای مختلف  $\theta$  حول محور خود جهت‌گیری کند. با توجه به اینکه سامانه‌ی مرکزی شامل ناخالصی‌هایی واقع در مکان  $\vec{R}_i$  است، هر اتم در مکان  $\vec{R}_i$  پتانسیل زیر را احساس می‌کند [۹]

$$V_i = \sum_l \frac{U_l}{|\vec{R}_i - \vec{R}_l|}, \quad (3)$$

که در آن  $\vec{R}$  بردار بدون بعد است. به این ترتیب انرژی جایگاهی زنجیره‌ی مرکزی در حضور دو قطبی را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\varepsilon_C = \varepsilon_{C0} + V_i. \quad (4)$$

بنابراین می‌توان ضریب عبور الکترون ورودی را در تقریب نزدیکترین همسایه به صورت زیر بیان کرد [۱۰-۱۱]



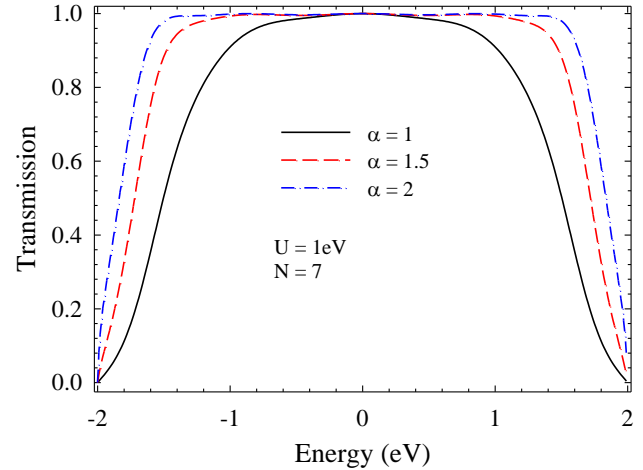
شکل ۱: نمودار ضریب عبور یک زنجیره‌ی اتمی ایده‌آل در حضور یک دو قطبی در فاصله‌ی  $d = a$  بالای زنجیره بر حسب انرژی برای چند جهت‌گیری متفاوت دو قطبی.

رسانش مقدار یک را دارد کمتر می‌شود.

اکنون در این قسمت دو قطبی الکتریکی را در فاصله‌ی  $d = a$  بالاتر از مرکز زنجیره‌ی اتمی قرار داده که می‌تواند تحت زوایای مختلف  $\theta$  قرار گیرد. قدرت پتانسیل دو قطبی را برابر  $1\text{ eV}$  انتخاب می‌کنیم. در شکل ۴ ضریب عبور این مورد برای سه جهت‌گیری متفاوت رسم شده است. با توجه به شکل ۴ در ابتدا و انتهای پنجره‌ی مجاز انرژی ضریب عبور به مقدار صفر می‌رسد ولی این کاهش ضریب عبور در سمت انرژی منفی سریع‌تر است. هر سه منحنی دارای قله‌ای با پهنای متفاوت هستند که با بزرگتر شدن زاویه‌ی دو قطبی ضریب عبور در قله‌ها بیشتر شده و قله‌ها به سمت انرژی منفی جابه‌جا می‌شوند.

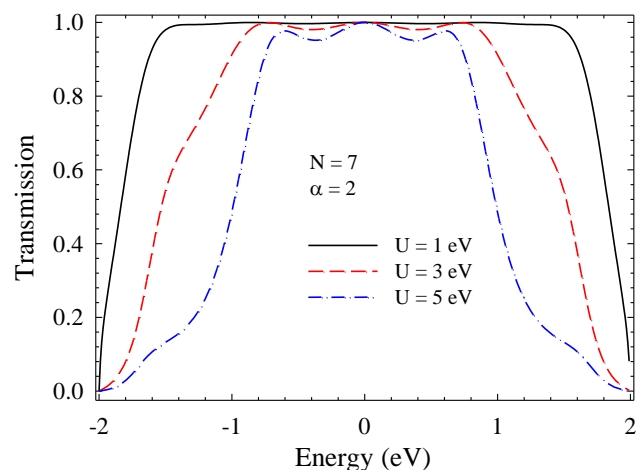
### نتیجه‌گیری

در این مقاله به کمک روش تابع گرین در رهیافت تنگابست به بررسی رسانش الکتریکی زنجیره‌ی اتمی در حضور یک دو قطبی الکتریکی که در فاصله‌ی  $d$  از مرکز زنجیره قرار گرفته است، پرداختیم. نتایج نشان می‌دهد برای حالتی که زاویه‌ی جهت‌گیری دو قطبی با راستای محور آن صفر باشد، رسانش الکتریکی در انرژی صفر مستقل از فاصله‌ی دو قطبی از مرکز زنجیره و قدرت پتانسیل دو قطبی الکتریکی است و در این انرژی مکان قله‌های



شکل ۲: نمودار ضریب عبور الکترونی زنجیره‌ی اتمی ایده‌آل با تعداد ۷ اتم بر حسب انرژی در حضور یک دو قطبی الکتریکی موازی زنجیره‌ی اتمی برای فواصل مختلف آن از زنجیره‌ی اتمی.

چند قدرت پتانسیل دو قطبی الکتریکی محاسبه کرده تمام انرژی‌های پرش و جایگاهی سامانه به ترتیب برابر با ۱ و که نمودار آن در شکل ۳ نشان داده شده است. در اینجا مانند قبل انرژی جایگاهی اتم‌ها صفر فرض شده است. با توجه به شکل هر سه نمودار حالتی کاملاً متقارن دارند. در انرژی فرمی صفر ضریب عبور مستقل از قدرت دو قطبی الکتریکی است و در این انرژی قله‌های هر سه منحنی بر هم منطبق و با افزایش قدرت دو قطبی الکتریکی پهنای قله‌ها کمتر شده و تعداد انرژی‌هایی که برای آنها



شکل ۳: نمودار ضریب عبور یک زنجیره‌ی اتمی ایده‌آل با تعداد ۷ اتم بر حسب انرژی در حضور یک دو قطبی در فاصله‌ی  $d = 2a$  و به موازات زنجیره بالای آن به ازای مقادیر متفاوت قدرت پتانسیل دو قطبی.

منحنی رسانش ثابت می ماند. همچنین با تغییر زاویه ی جهت گیری و بزرگتر شدن آن ضریب عبور در قله ها بیشتر می شود. از نتایج مهم این مقاله کنترل رسانش الکتریکی با استفاده از تغییر جهت-گیری و قدرت پتانسیل و فاصله ی یک دو قطبی الکتریکی در خارج و در بالای مرکز یک زنجیره خطی است.

## مرجع ها

- [1] D. P. Divincenzo, *Science* **270** (1995) 255.
- [2] D. K. Ferry, S. M. Goodnick; “*Transport in Nanostructures*”; Cambridge University Press. (1997).
- [3] T. Chakraborty, “*Quantum Dots*”, Elsevier, North-Holland, Amsterdam, (1999).
- [4] P. Harrison; “*Quantum Wells, Wires and Dots*”; Wiley, New York (2000).
- [5] R. Landauer, *Physics Letter A*, **85**, (1986).
- [6] S. Datta, “*Quantum Transport Atom to Transistor*”, Cambridge University Press (2005).
- [7] T. M. Tritt; “*Thermal Conductivity Theory, Properties and Applications*”; Clemson University (2003).
- [8] S. Datta, *Superlattices and Microstructures*, **28** (2000) 4.
- [9] M. Mardaani, H. Mardaani, *Physica E*, **33**, (2006) 147.
- [10] D. S. Fisher, P. A. Lee, *Physics Review B*, **23** (1981) 6851.
- [11] P. A. Lee, D. S. Fisher, *Physics Review Letter*, **47** (1981) 882.