

رسانش الکترونی یک نانوسیم شامل اتم‌های مرتعش سطحی

عصمت اسمعیلی^{۱*}، محمد مردانی^{۱،۲}، حسن ربانی^{۱،۲}

^۱ گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران

^۲ مرکز پژوهشی فناوری نانو، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران

چکیده

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت تنگ‌بست و رژیم پاسخ خطی، به مطالعه رسانش الکترونی یک نانوسیم شامل اتم‌های سطحی مرتعش که بین دو هادی صلب ساده قرار گرفته است، پرداخته‌ایم. با بهره‌گیری از فضای فوک، اثر برهم‌کنش الکترون-فونون را در ضریب عبور الکترونی مورد بررسی قرار داده‌ایم. نتایج نشان می‌دهد که مکان قله‌های تشدید رسانش با افزایش قدرت برهم‌کنش الکترون-فونون به سمت انرژی‌های پایین‌تر جابه‌جا شده و قله‌های جدیدی نیز در طیف رسانش پدیدار می‌شود. همچنین برای یک مقدار ثابت قدرت برهم‌کنش، با کاهش مقدار انرژی پرش الکترون در اتصال‌ها، قله‌های تشدید تیزتر و دره‌ها عمیق‌تر می‌شوند.

کلیدواژگان: تابع گرین، اتم‌های سطحی مرتعش، فضای فوک، تنگ‌بست.

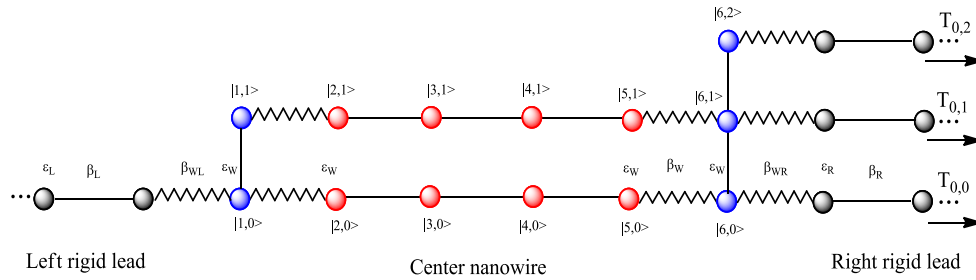
مقدمه

آزادی فونونی به هامیلتونی الکترونی اضافه کرده [۵] و مسأله تک کاناله بس‌ذره را به یک مسأله چندکاناله تک-ذره تبدیل می‌کند. یکی از مزایای استفاده از فضای فوک، تفکیک سهم‌های مختلف کانال‌های کشسان و ناکشسان در رسانش است که با جذب یا گسیل فونون توسط الکترون به دلیل وجود برهم‌کنش الکترون-فونون رخ می‌دهند. معمولاً اتم‌های ابتدایی و انتهایی یک نانوسیم متصل به دو هادی، نسبت به سایر اتم‌های آن آزادانه‌تر حرکت می‌کنند و می‌توان آنها را مرتعش در نظر گرفت. در اثر ارتعاش این اتم‌ها، فونون تولید شده و باعث ورود برهم‌کنش الکترون-فونون به مسأله می‌شود. در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت تنگ‌بست و با به‌کار بردن روش فضای فوک، به بررسی رسانش الکترونی یک نانوسیم یک بعدی شامل اتم‌های مرتعش سطحی می‌پردازیم. برای این منظور یک زنجیره اتمی را بین دو هادی صلب قرار

بررسی ترابرد الکترونی در ادوات مزوسکوپی، حوزه علمی بسیار جذاب و پرکاربردی به‌خصوص در صنعت میکروالکترونیک است. با مطالعات رتنر و آویرام در سال ۱۹۷۴ روی رسانش الکترونی در گروه‌های پذیرنده و بخشنده متصل به پل مولکولی همیوگ [۱] و ساخت اولین ترانزیستور توسط پارک و همکاران در سال ۲۰۰۰ [۲]، مطالعات نظری بسیاری در زمینه رسانش سامانه‌های مولکولی صورت پذیرفته است [۳]. یکی از مهم‌ترین مسائل مربوط به ترابرد بار در قطعات الکترونیک مولکولی، نقش برهم‌کنش الکترون-فونون است که بررسی این موضوع هم به‌طور تجربی [۴] و هم به‌طور نظری [۶-۵] مورد توجه محققان قرار گرفته است. روش‌های نظری متفاوتی برای بررسی مسأله بس‌ذره‌ای الکترون-فونون در این سامانه‌ها به‌کار رفته است. یکی از این روش‌ها استفاده از فضای فوک است که بُعد جدیدی مربوط به درجات

داده و با در نظر گرفتن مقادیرهای مختلف برای قدرت برهم‌کنش الکترون-فونون و انرژی پرش الکترون در اتصال‌ها، به محاسبه ضریب عبور الکترونی می‌پردازیم.

مدل نظری و فرمولبندی



شکل ۱. طرح‌واره فضای فوک برای یک نانوسیم (در اینجا ۶ اتمی) واقع بین دو هادی صلب نیم‌متناهی ایده‌ال.

مطابق شکل ۱، یک زنجیره N اتمی متصل به دو هادی ساده و ایده‌ال نیم‌متناهی را در نظر می‌گیریم. فرض می‌کنیم تنها اتم‌های ابتدایی و انتهایی زنجیره که به هادی‌ها متصل‌اند، ارتعاش می‌کنند و بقیه اتم‌ها در جایگاه خود ثابت هستند. همچنین با بهره‌گیری از مدل هولشتاین، فرض می‌شود که برهم‌کنش الکترون-فونون تنها انرژی‌های جایگاهی اتم‌های مرتعش را تغییر می‌دهد و اثری بر انرژی‌های پرش ندارد [۷]. هامیلتونی کل از جمع هامیلتونی‌های الکترونی، فونونی و الکترون-فونون به دست می‌آید. هامیلتونی الکترونی را می‌توان با در نظر گرفتن برهم‌کنش نزدیک‌ترین همسایه‌ها در تقریب تنگ‌بست به صورت زیر نوشت

[۸و۳]:

$$H_{ph} = \hbar\omega_0 \sum_j b_j^\dagger b_j (\delta_{j,1} + \delta_{j,N}), \quad (2)$$

که در آن $b_j^\dagger b_j$ عملگر خلق (فنا) فونونی برای ارتعاشات موضعی با بسامد ω_0 در اتم j ام است. نیز نشان دهنده دلتای کرونکر است. هامیلتونی برهم‌کنش الکترون-فونون نیز با استفاده از مدل هولشتاین با در نظر گرفتن اتم‌های سطحی مرتعش به صورت زیر است [۸و۵]

مطابق شکل ۱، یک زنجیره N اتمی متصل به دو هادی ساده و ایده‌ال نیم‌متناهی را در نظر می‌گیریم. فرض می‌کنیم تنها اتم‌های ابتدایی و انتهایی زنجیره که به هادی‌ها متصل‌اند، ارتعاش می‌کنند و بقیه اتم‌ها در جایگاه خود ثابت هستند. همچنین با بهره‌گیری از مدل هولشتاین، فرض می‌شود که برهم‌کنش الکترون-فونون تنها انرژی‌های جایگاهی اتم‌های مرتعش را تغییر می‌دهد و اثری بر انرژی‌های پرش ندارد [۷]. هامیلتونی کل از جمع هامیلتونی‌های الکترونی، فونونی و الکترون-فونون به دست می‌آید. هامیلتونی الکترونی را می‌توان با در نظر گرفتن برهم‌کنش نزدیک‌ترین همسایه‌ها در تقریب تنگ‌بست به صورت زیر نوشت

$$H_e = \sum_{j=-\infty}^{\infty} (\epsilon_j c_j^\dagger c_j + \beta_{j,j+1} (c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j)),$$

که در آن $c_j^\dagger c_j$ عملگر خلق (فنا) الکترون در اتم j ام و ϵ_j انرژی جایگاهی آن است. در این مقاله فرض می‌کنیم که برای هادی سمت چپ $\epsilon_j = \epsilon_L$ با $j = -\infty, \dots, 0$ برای هادی سمت راست $\epsilon_j = \epsilon_R$

۴

$$H_{eff} = \sum_{j=1}^N \sum_{m=0}^1 \{ (\varepsilon_W + m\hbar\omega_0 + \sum_L^{(m)} \delta_{j,1} \delta_{m,0} + \sum_R^{(m)} \delta_{j,N}) |j, m\rangle \langle j, m| + (\beta_{j,j+1} |j, m\rangle \langle j+1, m| - V_g |j, m+1\rangle \langle j, m| [\delta_{m,0} (\delta_{j,1} + \delta_{j,N}) + \delta_{j,N} \delta_{m,1}] + h.c.) \} + (\varepsilon_W + 2\hbar\omega_0 + \sum_R^{(2)}) |N, 2\rangle \langle N, 2|,$$

با استفاده از رابطه ۴ و تعریف تابع گرین [۸] خواهیم داشت:

$$G = \frac{1}{\varepsilon I - H_{eff}}, \quad 6$$

که در آن I ماتریس واحد است. در نهایت ضریب عبور الکترونی در نگرش پاسخ خطی [۸]، چنین است:

$$T(\varepsilon) = 4 \text{Im} \sum_L^{(0)} \sum_m (\text{Im} \sum_R^{(m)} |G_{1,m+2N-1}|^2), \quad 7$$

که در آن $G_{1,m+2N-1}$ عنصر سطر اول و ستون $m+2N-1$ ام تابع گرین است.

نتایج و بحث

در این بخش ضریب عبور الکترونی را برحسب انرژی برای یک نانوسیم ۶ اتمی که تنها اتم‌های متصل به هادی‌ها ارتعاش می‌کنند، محاسبه کرده و اثر قدرت برهم‌کنش الکترون-فونون را بر آن بررسی می‌کنیم. معمولاً در کارهای مدل‌سازی، استفاده از مقادیر نوعی به جای مقادیر دقیق تجربی و یا محاسباتی مرسوم است. نمونه‌های زیادی از این قبیل را می‌توان در مقالات یافت (مراجع [۳ و ۶]). لازم به ذکر است که این مقادیر معمولاً با مقادیر واقعی هم‌خوانی داشته و در کلیت فیزیک مسأله و نتیجه‌گیری‌های آن خللی وارد نمی‌کند. در اینجا پارامترهای مورد نیاز مسأله را به صورت $\hbar\omega_0 = 0.6 \text{ eV}$ ، $\beta_{W(L=1)} = e$ و

$$H_{e-ph} = -V_g \sum_j c_j^\dagger c_j (b_j^\dagger + b_j) (\delta_{j,1} + \delta_{j,N}), \quad 3$$

که در آن V_g ضریب قدرت برهم‌کنش الکترون-فونون است. می‌توان اثرات هادی‌های سمت چپ و راست را در خودانرژی‌ها وارد کرده و هامیلتونی مؤثر را با به‌کارگیری عملگرهای الکترونی و فونونی در فضای فوک:

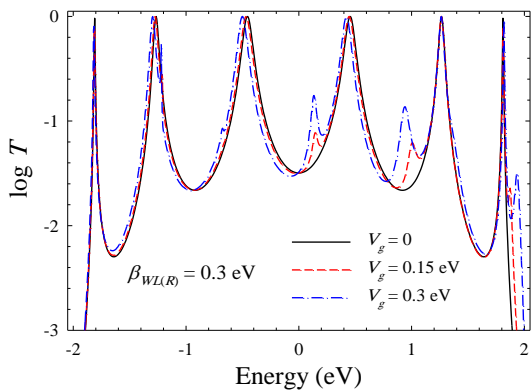
$$|j, m\rangle = c_j^\dagger (b^\dagger)^m / \sqrt{m!} |0\rangle$$

که در آن j شماره اتم، m مد فونونی و $|0\rangle$ نشان دهنده حالت خلأ این فضا است، به صورت زیر به دست آورد: که در آن $\sum_{L(R)}^{(m)}$ خودانرژی سامانه مرکزی به خاطر وجود هادی چپ (راست) در مد فونونی m است و به صورت زیر بیان می‌شود [۳ و ۵]:

$$\sum_{L(R)}^{(m)}(\varepsilon) = \frac{\beta_{WL(R)}^2}{2\beta_{L(R)}^2} (\varepsilon - \varepsilon_{L(R)} - m\hbar\omega_0 + \sqrt{(\varepsilon - \varepsilon_{L(R)} - m\hbar\omega_0)^2 - 4\beta_{L(R)}^2}). \quad 5$$

که در آن ε انرژی الکترون ورودی است. در اینجا به خاطر وجود فونون‌ها، جمله $m\hbar\omega$ به انرژی جایگاهی الکترون اضافه می‌شود. از آنجایی که سامانه در دمای صفر و بایاس صفر بررسی می‌شود، الکترون می‌تواند در اثر برهم‌کنش الکترون-فونون، یک یا دو فونون را جذب یا گسیل کند. از این رو برای الکترون در هنگام خروج از سامانه مرکزی به علت حضور دو اتم مرتعش در سامانه، دو کانال خروجی مربوط به رسانش ناهمدوس اضافه می‌شود و با احتساب کانال مربوط به رسانش همدوس، در کل سه کانال خواهیم داشت. همچنین با فرض اینکه الکترون بازتاب نمی‌شود و به هادی سمت چپ باز نمی‌گردد، الکترونی که از هادی سمت چپ وارد نانوسیم می‌شود، با داشتن عدد فونونی متفاوت از هادی سمت راست خارج می‌گردد.

شده و اندکی ارتفاع این قله‌ها کاهش می‌یابد. علت این کاهش به دور شدن فیزیک سامانه مرکزی از فیزیک هادی‌های متصل برمی‌گردد. از سوی دیگر قله‌هایی نیز با ارتفاع کمتر از قله‌های تشدیدی در شکل دیده می‌شوند. ارتفاع و تعداد این قله‌ها که به قله‌های پیرو مشهورند، با افزایش قدرت برهم‌کنش الکترون-فونون افزایش می‌یابد. این قله‌ها که ناشی از فرآیند جذب یا گسیل فونون هستند در انرژی‌های $\varepsilon \pm m\hbar\omega_0$ ظاهر می‌شوند و امکان عبور الکترون از کانال‌های جدید را نشان می‌دهند. واضح است که با افزایش قدرت برهم‌کنش الکترون-فونون، الکترون با احتمال بیشتری از کانال‌های جدید عبور می‌کند. بنابراین ارتفاع قله‌های تشدیدی کاهش و ارتفاع قله‌های پیرو افزایش می‌یابد [۹و۵].



شکل ۲. نمودار تغییرات لگاریتم ضریب عبور الکترونی برحسب انرژی الکترون ورودی برای چند مقدار متفاوت V_g .

به‌منظور بررسی اثر قدرت اتصال‌ها، نمودار ضریب عبور را به‌صورت تابعی از انرژی در $V_g = 0.15 \text{ eV}$ و برای چند مقدار متفاوت $\beta_{WL(R)}$ ، در شکل ۳ رسم کرده‌ایم. مشاهده می‌شود که ضریب عبور الکترونی با کاهش مقدار انرژی پرش الکترون در اتصال‌ها، کمتر شده و دره‌ها عمیق‌تر و قله‌ها تیزتر می‌شوند. در واقع در مقادیر کوچک این انرژی، تأثیر برهم‌کنش الکترون-فونون در رسانش که باعث ظهور قله‌های پیرو در نمودار شده،

$\varepsilon_{W(L,R)} = 0$ انتخاب می‌کنیم. در ادامه با مقادیر عددی پارامترهای دیگر نیز به همین شکل رفتار خواهد شد.

در مدل تنگ‌بست، اثرات برهم‌کنش الکترون-فونون را می‌توان در انرژی‌های جایگاهی و پرش الکترون وارد کرد که به‌ترتیب به مدل‌های هولشتاین و پایرلز مشهور هستند. بدیهی است قدرت پارامتری که برای این منظور در این انرژی‌ها وارد می‌شود، نباید آنقدر بزرگ انتخاب شود که این انرژی‌ها را از مقادیر اولیه خود بسیار دور کند. بنابراین برای مقادیر نوعی انرژی‌های جایگاهی و پرش که از مرتبه یک الکترون ولت است، نباید تغییرات پارامترهای تنگ‌بست در حضور برهم‌کنش از چند دهم الکترون ولت تجاوز کند. البته با توجه به اینکه اثرات این برهم‌کنش بسیار ناچیز است، برای فهم و مشاهده واضح‌تر اثرات در نظر گرفتن مقادیر بزرگتر در روش‌های نظری معمولاً مرسوم است و از کلیت مسأله نمی‌کاهد. در واقع در نظر گرفتن مقادیر کمتر و معقول‌تر، نمودارها را به‌هم نزدیک می‌کند و منحنی مربوطه در مقادیر بزرگ همانند مقادیر کوچک رفتار می‌کند.

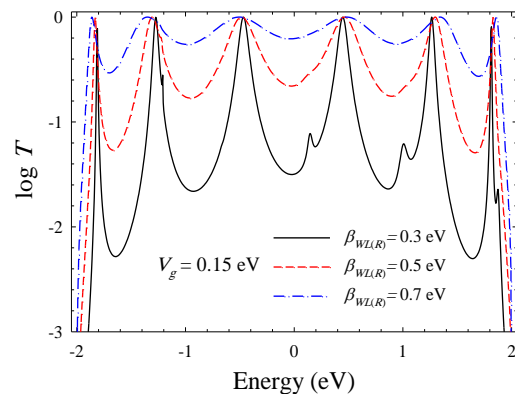
شکل ۲ لگاریتم ضریب عبور این سامانه را به‌صورت تابعی از انرژی الکترون برای چند مقدار متفاوت ضریب قدرت برهم‌کنش الکترون-فونون نشان می‌دهد. در اینجا مقدار انرژی پرش الکترون در اتصال‌ها را $\beta_{WL(R)} = 0.3 \text{ eV}$ در نظر گرفته‌ایم. همان‌طور که انتظار داریم در غیاب برهم‌کنش الکترون-فونون، نمودار نسبت به انرژی صفر متقارن است و در آن شش قله تشدیدی در انرژی‌هایی که انرژی الکترون ورودی با ویژه مقادیر انرژی سامانه مرکزی برابر شده، دیده می‌شود. در چنین حالتی تنها یک کانال رسانش خروجی (همدوس) برای الکترون وجود دارد. در حضور برهم‌کنش الکترون-فونون قله‌های تشدیدی به سمت انرژی‌های کمتر جابه‌جا

به‌ازای مقادیر مختلف قدرت برهم‌کنش بررسی کرده است، نشان می‌دهد که در بایاس صفر با افزایش قدرت برهم‌کنش الکترون-فونون، ارتفاع و تعداد قله‌های پیرو افزایش یافته است. این نکته در نتایج این مقاله نیز مورد تأیید قرار گرفته است. همچنین ارتفاع قله اصلی با افزایش قدرت برهم‌کنش الکترون-فونون کاهش یافته ولی مکان این قله بر خلاف کار حاضر جابه‌جا نشده است. بررسی اندکی متفاوت در مرجع [۱۰] بر روی یک زنجیره قطبیده با اعمال میدان الکتریکی خارجی در یک روش نیمه کلاسیک صورت گرفته است. در این مدل در یک بسامد ثابت و با افزایش قدرت برهم‌کنش الکترون-فونون، ارتفاع قله‌های اصلی کاهش یافته است که در توافق با پژوهش حاضر است ولی تغییر قدرت برهم‌کنش سبب ظهور قله‌های جدید پیرو نشده است.

نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت تنگ‌بست و با بکارگیری عملگرهای الکترونی و فونونی در فضای فوک، خواص ترابرد الکترونی یک زنجیره اتمی متصل به دو هادی ساده با اتصال‌های مرتعش در حضور برهم‌کنش الکترون-فونون بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که در حضور برهم‌کنش الکترون-فونون، قله‌های تشدید رسانی به سمت انرژی‌های کمتر جابه‌جا شده و اندکی ارتفاعشان کاهش می‌یابد. با افزایش قدرت برهم‌کنش، تعداد و ارتفاع قله‌های جدیدی که از وجود این برهم‌کنش ناشی می‌شوند، به‌علت جذب یا گسیل فونون(ها) افزایش می‌یابد. در یک مقدار ثابت قدرت برهم‌کنش و با کم شدن مقدار انرژی پرش الکترون در اتصال‌ها، ضریب عبور سامانه کاهش یافته و قله‌های تشدید

راحت‌تر مشاهده می‌شود. زیرا طبق رابطه ۵ پهن‌شدگی ترازهای انرژی سامانه مرکزی کمتر شده و بنابراین قله‌های تشدید مربوط به ترازهای سامانه مرکزی واضح‌تر دیده می‌شوند. در واقع هر چه اختلاف مقدار انرژی پرش الکترون در اتصال‌ها با مقدار آن بین اتم‌ها در سامانه مرکزی بیشتر گردد، نمودار رسانی در ترازهای انرژی خود قله‌های تشدید خواهد داشت.



شکل ۳. نمودار تغییرات لگاریتم ضریب عبور کل برحسب انرژی الکترون ورودی برای چند مقدار متفاوت انرژی اتصال هادی‌ها.

بررسی‌های مشابهی در مراجع [۹ و ۵] بر روی یک تک مولکول نقطه کوانتومی انجام شده است. در مرجع [۵] به واسطه استفاده از فضای فوک، سهم‌های مجزای کشسان و ناکشسان نیز رسم شده است. در این مرجع مشاهده می‌شود که در حضور برهم‌کنش الکترون-فونون ضعیف، مکان قله اصلی اندکی به سمت انرژی‌های کمتر جابه‌جا شده و ارتفاع آن نیز کاهش یافته است این امر با مقاله حاضر در توافق است. همچنین به‌سبب گسیل و جذب دوباره فونون گسیل شده، تعدادی قله پیرو با ارتفاع کمتر ظاهر می‌شود. ظهور این قله‌های جدید نیز در توافق با پژوهش حاضر برای مورد چند اتمی است. نتایج مرجع [۹] که ضریب عبور الکترونی را با استفاده از روش ماتریس پراکندگی

- [10] M. Mardaani, H. Rabani, E. Esmaili and A. Shariati, The effect of driven electron-phonon coupling on the electronic conductance of a polar nanowire, *Journal of Applied Physics* 118 (2015) 054306.

تیزتر و دره‌ها عمیق‌تر می‌شوند. در واقع هر چه مقدار انرژی پُرش الکترون در اتصال‌ها با انرژی پُرش الکترون در سایر قسمت‌های سامانه متفاوت‌تر باشد، اثر برهم‌کنش الکترون-فونون در رسانش سامانه را می‌توان واضح‌تر مشاهده کرد.

مراجع

- [1] A. Aviram, M.A. Ratner, Molecular rectifiers, *Chemical Physics Letter* 29 (1974) 277-287.
- [2] H. Park, J. Park, A.K.L. Lim, E.H. Anderson, A.P. Alivisatos, P.L. McEuen, Nano-mechanical Oscillations in a Single-C60 Transistor, *Nature* 407 (2000) 57-60.
- [3] M. Mardaani, H. Rabani, A solvable model for electronic transport of a nanowire in the presence of effective impurities, *Superlattices and Microstructures* 59 (2013) 155-162.
- [4] V.J. Goldman, D.C. Tsui, J.E. Cunningham, Evidence for LO-phonon-emission-assisted tunneling in double-barrier heterostructures, *Physical Review B* 36 (1987) 7635-7637.
- [5] H.M. Pastawski, L.E.F. Foa Torres, E. Medina, Electron-Phonon interaction and electronic decoherence in molecular conductors. *Chemical Physics* 281 (2002) 257-278.
- [6] M. Mardaani, H. Rabani, Coherent electronic conductance of a nanowire in the presence of electron-phonon interaction, *Physica Status Solidi B* 251 (2014) 1001-1006.
- [7] T. Holstein, Studies of Polaron Motion: Part II. The "Small" Polaron", *Annals of Physics (New York)* 8 (1959) 343 -389.
- [8] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge, University Press, Cambridge, (1997).
- [9] J. Song, Q.F. Sun, H. Jiang, X.C. Xie, Transmission phase shift of phonon-assisted tunneling through a quantum dot, *Physical Review B* 77 (2008) 035309.

The electronic conductance of a nanowire including vibrating surface atoms

Esmat Esmaili^{1,*}, Mohammad Mardaani^{1,2}, Hassan Rabani^{1,2}

¹Department of Physics, Faculty of Science, University of Shahrekord, Shahrekord

²Nanotechnology Research Center, University of Shahrekord, Shahrekord

Abstract

In this paper, we study the electronic conductance of a nanowire, including vibrating surface atoms, which is embedded between two simple rigid chains by using Green's function technique at the tight-binding and linear response approaches. We use the Fock space to consider the effect of electron-phonon interaction on the electronic transmission coefficient. The results show that by increasing of the strength of electron-phonon interaction, the positions of resonance peaks of the conductance curve will be shifted to the lower energies. Some new peaks will be appeared in the conductance spectrum, too. It can be seen that at a fixed amount of the electron-phonon coupling strength, by decreasing of the electron hopping energies of contacts, the resonance peaks become sharper and the valleys become deeper.

Keywords: Green's function, vibrating surface atoms, Fock space, tight-binding

* Corresponding Author: esmaili.e2009@gmail.com