بررسی رسانش الکترونی یک نانوسیم سه پایانه‌ای

آرزو تارخ*، محمد مردانی، حسن ربانی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران

چکیده

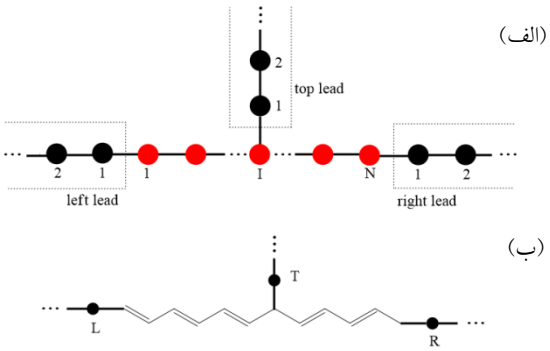
در این مقاله رسانش الکترونی یک زنجیرهٔ ساده و یک چند پار پلی استیلنی که هر یک به سه هادی ساده متصل می‌شود، بررسی می‌شود. محاسبات براساس رهیافت تنگابست و به‌روش تابع گرین در تقریب نزدیک‌ترین همسایه انجام شده است. دو نوع رسانش یکی آنچه بین هادی‌های چپ و راست و دیگری آنچه بین هادی‌های چپ و بالا وجود دارد، به‌صورت تابعی از انرژی محاسبه شده و رفتار آنها نسبت به مکان اتصال هادی بالا مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که وجود و محل اتصال هادی سوم در سیم مرکزی، تأثیر زیادی بر مقدار و رفتار رسانش‌های ذکر شده دارد. مقدار هر رسانش در انرژی صفر در مورد پلی استیلن با تغییر مکان هادی سوم قابل کنترل است.

کلیدواژگان: رسانش الکترونی، سه پایانه‌ای، تنگابست، تابع گرین، پلی‌استیلن.

مقدمه

نانوسیم‌ها سامانه‌های نانو مقیاس شبه یک بعدی هستند که تاکنون مطالعات گسترده‌ای روی خواص الکتریکی و گرمایی آنها صورت گرفته است. از نانوسیم‌ها در ساخت قطعات الکترونیکی، ترمودینامیکی در نانو الکترونیک استفاده می‌شود [۱]. پیشرفت سریع در فن‌آوری ساخت قطعات نانو، بشر را قادر به اندازه‌گیری‌های دقیق توسط سیم‌های مولکولی ساخته است. به‌گونه‌ای که در طول چند دهه گذشته امکان بررسی تجربی و نظری ترابرد الکترونی در سامانه‌های کوانتومی کم بعد فراهم شده است [۱و۲]. نخستین ساختارهایی که رسانش آنها توسط رابطه لانداؤر در رژیم خطی مورد مطالعه قرار گرفت، نانوساختارهایی بود که بین دو الکترود قرار دارند [۱]. اما اتصال‌های دو پایانه‌ای در مدارات الکترونیکی کمتر استفاده می‌شود. علاوه بر این ابزارهای اصلاح شده دو پایانه‌ای تنوع ابزارهای سه پایانه‌ای را ندارند به این علت که در ادوات سه پایانه‌ای، پایانهٔ سوم برای کنترل کلیدزنی دستگاه، تقویت جریان یا کاربردهای ترانزیستوری دیگر استفاده می‌شود. بنابراین اتصال‌های سه پایانه‌ای که در ابزارهای نانو مانند ترانزیستور یا عامل همسوسازی عمل می‌کند، بسیار مورد توجه هستند [۵-۳]. اولین نظریه‌پردازی که ترابرد الکترونی نانوساختارهای چند پایانه‌ای را با استفاده از رابطه رسانایی دو پایانه لانداؤر دنبال کرد، بوتیکر بود [۱]. اخیراً نیز از نانو لولهٔ کربنی و اتصال‌های Y شکل در ادوات الکترونیکی مولکولی سه پایانه‌ای در مقیاس نانو استفاده شده است [۳]. همچنین در قطعات سه پایه‌ای همانند ترانزیستور دوقطبی ساختار همبافتی تولید می‌شود و پیوندگاه‌های سه پایانه‌ای را می‌توان توسط ساختارهای کوانتومی متصل به سه هادی مدل‌سازی کرد [۶و۷].

*نویسنده مسئول: arezootarokh@yahoo.com



شکل ۱. طرح وارهٔ (الف) یک زنجیرهٔ اتمی ساده متصل به سه هادی. (ب) یک پلی استیلن متصل به سه هادی.

در این مقاله، با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت تنگابست به بررسی رسانش الکترونی یک زنجیرهٔ سادهٔ اتمی و یک ساختار پلی استیلنی شکل که به سه هادی ساده متصل هستند، می‌پردازیم. برای این منظور در بخش بعد به معرفی مدل پرداخته و روابط مورد نیاز را برای محاسبات عددی به‌دست می‌آوریم. سپس در بخش نتایج و بحث به تحلیل نتایج پرداخته و در نهایت خلاصه‌ای از نتایج این مقاله را می‌آوریم.

مواد و روش‌ها

یک زنجیرهٔ اتمی متناهی را در نظر می‌گیریم که به سه هادی ساده متصل شده است. هامیلتونی کل سامانه شامل سامانه مرکزی واقع بین سه هادی به‌صورت زیر داده می‌شود

$$H = H_W + \sum_{\alpha} \left(H_{\alpha} + H_{\alpha W} \right). \qquad ۱$$

که در آن H_W هامیلتونی زنجیرهٔ مرکزی، α نشان‌دهندهٔ هادی چپ (L)، راست (R) یا بالا (T) و H_{α} هامیلتونی مربوط به آن است. همچنین $H_{\alpha W}$ هامیلتونی اتصال بین زنجیره مرکزی و هادی α است.

این هامیلتونی‌ها در تقریب تنگابست و تقریب نزدیکترین همسایه به‌شکل زیر هستند:

۲

$$H_W = \varepsilon_W \sum_{j=1}^{N} |j\rangle_W \langle j|_W + \sum_{j=1}^{N-1} \beta_{j,W} \left(|j\rangle_W \langle j+1|_W + |j+1\rangle_W \langle j|_W \right),$$

$$H_{\alpha} = \varepsilon_{\alpha} \sum_{j=1}^{\infty} |j\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha} + \beta_{\alpha} \sum_{j=1}^{\infty} \left(|j\rangle_{\alpha} \langle j+1|_{\alpha} + |j+1\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha} \right), \qquad \alpha = L,R,T$$

$$H_{\alpha W} = \beta_{\alpha W} \left(|1\rangle_{\alpha} \langle I|_W + |I\rangle_W \langle 1|_{\alpha} \right),$$

که در آن ε_W و $\beta_{j,W}$ به‌ترتیب انرژی‌های جایگاهی و پرش الکترون در سامانه مرکزی، ε_{α} و β_{α} به‌ترتیب انرژی‌های جایگاهی و پرش الکترون در هادی α و $\beta_{\alpha W}$ انرژی پرش الکترون بین سامانه مرکزی و هادی α است. همچنین در رابطهٔ آخر مقدار I برای هادی چپ ۱ و برای هادی راست N و برای هادی بالا I است که مقدار آن را از ۱ تا N تغییر داده‌ایم. تابع گرین سامانهٔ مرکزی در حضور هادی‌ها به‌صورت زیر است

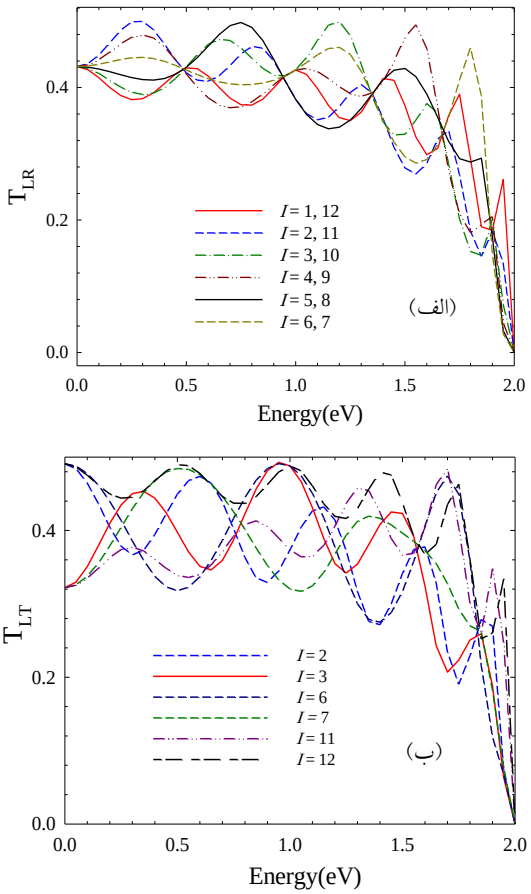
$$G = \frac{1}{\varepsilon I - H_W - \Sigma_L - \Sigma_R - \Sigma_T}. \qquad ۳$$

که در آن ε انرژی الکترون ورودی و $\Sigma_{L(R,T)}$ خود انرژی سامانه مرکزی به‌دلیل برهم‌کنش با هادی چپ (راست، بالا) است که از طریق رابطهٔ زیر محاسبه می‌گردد [۳]

$$\Sigma_{\alpha} = \frac{\beta_{\alpha W}^2}{\beta_{\alpha}} \exp(ik_{\alpha} a_{\alpha}), \qquad ٤$$

که در آن a_{α} ثابت شبکهٔ هادی‌ها و k_{α} عدد موج الکترونی است که در فرمول زیر صدق می‌کند.

$$\cos k_{\alpha} a_{\alpha} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\alpha}}{2\beta_{\alpha}}, \qquad ٥$$



شکل۲. (الف) T_{LR} و (ب) T_{LT} برحسب انرژی برای یک زنجیرهٔ ۱۲ اتمی متصل به سه هادی فلزی هنگامی که هادی سوم به جایگاه‌های مختلف متصل است.

و در نهایت می‌توان ضریب عبور الکترونی را وقتی الکترون از هادی چپ وارد سامانه مرکزی شده و از هادی $\alpha = R,T$ خارج می‌شود، توسط رابطهٔ زیر به‌دست آورد [۸ و ۳]:

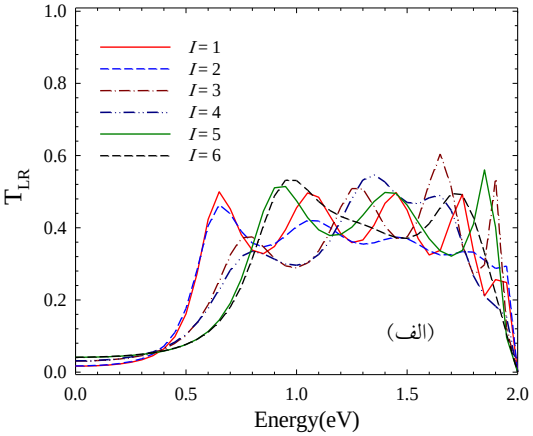
$$T_{L\alpha}(\varepsilon) = 4\,\mathrm{Im}\Sigma_L\,\mathrm{Im}\Sigma_\alpha \left|G_{1,I}\right|^2 . \qquad ٦$$

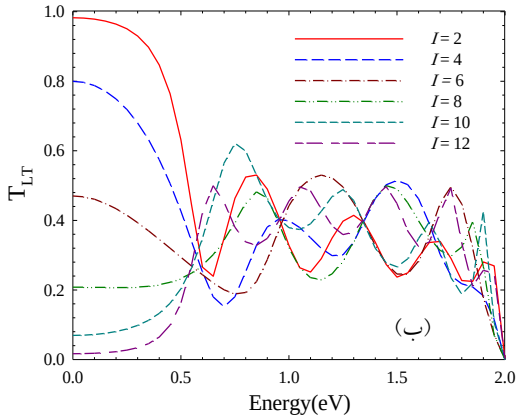
که در آن برای $I = N, \alpha = R$ است و برای $\alpha = T$، مقدار I می‌تواند از ۱ تا N تغییر کند.

نتایج و بحث

در این بخش رفتار رسانش الکترونی سامانه در حضور سه هادی را مطالعه کرده و به بررسی اثر مکان هادی سوم بر ضرایب عبور الکترونی T_{LR} و T_{LT} می‌پردازیم. شکل ۱ (الف)، طرح وارهٔ مربوط به یک زنجیرهٔ اتمی متصل به سه هادی را نشان می‌دهد که از جایگاه‌های ۱ و N به‌ترتیب به هادی‌های چپ و راست و از جایگاه Iام به هادی بالا متصل است. در اینجا زنجیره را شامل ۱۲ اتم در نظر گرفته و در تمامی محاسبات خود، انرژی جایگاهی اتم‌های سامانه مرکزی و هادی‌ها را برابر با $\varepsilon_{L(R/T)} = \varepsilon_W = 0$ و انرژی پرش الکترون در هادی‌ها و زنجیره را برابر با $\beta_W = \beta_{L(R/T)} = 1\mathrm{eV}$ و بالاخره انرژی پرش الکترون بین هادی‌ها و سامانه مرکزی را $\beta_{WL(R/T)} = 0.9\mathrm{eV}$ اختیار کرده‌ایم. محاسبات نشان می‌دهد که ضریب عبور الکترونی حول انرژی صفر متقارن است. از این رو نمودارها را فقط در قسمت مثبت انرژی ارائه می‌کنیم. شکل۲ (الف) و ۲(ب) به‌ترتیب T_{LR} و T_{LT} را به‌صورت تابعی از انرژی برای وقتی که هادی بالا در موقعیت‌های متفاوت قرار گرفته نشان می‌دهند. همان‌طور که شکل۲ (ب) نشان می‌دهد در انرژی صفر، وقتی هادی بالا به مکان‌های زوج متصل است، رسانش بین هادی‌های چپ و بالا به بیشترین مقدار (بیشینه) خود می‌رسد و زمانی‌که به مکان‌های فرد متصل می‌شود، این رسانش به کمترین مقدار خود (کمینه) می‌رسد. در حالیکه در مورد T_{LR} مقدار رسانش مستقل از مکان اتصال سیم بالا بوده و

دارای یک مقدار ثابت است.





شکل۳. (الف) T_{LR} و (ب) T_{LT} برحسب انرژی برای یک چندپار پلی‌استیلنی شامل ۱۲ اتم کربن متصل به سه هادی فلزی هنگامی که هادی سوم به جایگاه‌های مختلف متصل است.

شکل‌های۳ (الف و ب) به‌ترتیب T_{LR} و T_{LT} را به‌صورت تابعی از انرژی برای وقتی که هادی بالا در موقعیت‌های متفاوت قرار گرفته نشان می‌دهند. در اینجا پارامترهای تنگابست سامانه را همانند قبل انتخاب می‌کنیم و انرژی پرش پیوندهای یگانه و دوگانهٔ کربن-کربن را به‌ترتیب برابر با $\beta_s = 0.8\text{eV}$ و $\beta_d = 1.2\text{eV}$ در نظر می‌گیریم. مشاهده می‌شود که در قسمت گاف انرژی سامانهٔ مرکزی رفتار T_{LR} تونل‌زنی است. ولی رفتار T_{LT} بسته به اینکه فاصلهٔ هادی سوم از اتم متصل به هادی راست چقدر باشد، می‌تواند رفتار متفاوتی را تجربه کند و هر چه به این هادی نزدیک‌تر باشد، رفتار بیشتر به سمت تونل‌زنی میل کند و برعکس هر چه به هادی سمت چپ نزدیک‌تر شود، مقدار رسانش بیشتر شده به‌گونه‌ای که وقتی به اتم متصل به هادی چپ وصل می‌شود، مانند اتصال کوتاه رفتار می‌کند. در واقع این خاصیت منحصر به فرد می‌تواند در تنظیم مقدار رسانش در انرژی صفر با تغییر مکان هادی سوم کمک کند.

در مورد شکل۳ (ب) دیده می‌شود که تعداد قله‌ها به مکان هادی بالا بستگی دارد و بین عدد ۳ تا ٦ تغییر می‌کند. در حالی که در مورد شکل ۳ (الف) تعداد قله‌ها ثابت و برابر ٦ است (در کل طیف رسانش تعداد قله‌ها ۱۲ عدد است). لازم به ذکر است که هر قله در نمودار رسانش نشان دهندهٔ مکان شبه انرژی‌های سامانهٔ مرکزی در طیف انرژی در شکل ۱ (ب) طرح‌وارهٔ مربوط به یک چندپار پلی استیلن شامل ۱۲ اتم کربن که به سه هادی ساده متصل است، آمده است. توجه کنید که اتصال هادی سوم به اتم I ام باعث جابه‌جایی پیوندهای یگانه و دوگانه در چندپار شده است. تعداد اتم‌های واقع بین هادی اول و سوم نقش تعیین کننده‌ای در تعیین تعداد قله‌های رسانش بین این دو هادی را دارند. قله‌های رسانش معمولاً وقتی رخ می‌دهند که انرژی الکترون ورودی معادل با ویژه مقادیر انرژی سامانه مرکزی باشد. تعداد، مقدار و پهن‌شدگی این ویژه مقادیر که در مورد سامانه‌های غیر منزوی به‌دلیل وجود هادی‌ها به شبه انرژی مشهور هستند، علاوه بر هامیلتونی سامانه مرکزی منزوی به مکان و نوع هادی‌های متصل بستگی دارد. در حالتی که رسانش

بین هادی اول و سوم مطلوب است، هادی دوم و بخشی از سامانه مرکزی به‌عنوان یک ناخالصی در مکانی که هادی سوم قرار دارد عمل کرده و مانند یک خود انرژی جدید (که شامل ویژه‌حالت‌های بخش بیرونی سامانه مرکزی نیز هست) در تعیین ویژگی‌های شبه انرژی‌های سامانه مرکزی عمل کند.

نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین و در رهیافت تنگابست، رسانش الکترونی یک نانوسیم متصل به سه هادی را مورد بررسی قرار داده‌ایم. در ابتدا ضریب عبور یک زنجیره سه پایانه‌ای را بررسی کردیم و مشاهده نمودیم که مکان اتصال سوم بر رسانش تأثیر می‌گذارد که این تأثیر به‌خصوص برای رسانشی که از هادی‌های چپ و بالا اندازه‌گیری می‌شود، به اینکه هادی بالا به اتم زوج یا فرد متصل باشد، قابل ملاحظه و تأمل است. برای وقتی که یک چندپار پلی‌استیلنی را به سه هادی وصل کنیم، نتایج به‌دست آمده نشان می‌دهد که وجود اتصال سوم تغییرات قابل توجهی را بر روی مقدار رسانش سامانه به‌خصوص رسانشی که بین هادی‌های چپ و بالا وجود دارد، ایجاد می‌کند. به‌طوری‌که هر چه هادی بالا به‌سمت هادی چپ نزدیک می‌شود رفتار این رسانش به‌سمت تونل‌زنی می‌رود. بدیهی است وجود هادی سوم بر مقدار رسانشی که بین هادی‌های چپ و راست اندازه‌گیری می‌شود، نیز تأثیر گذار است، کما اینکه جایگاه بیشینه‌ها و کمینه‌های رسانش را چه در مورد زنجیره و چه در مورد پلی‌استیلن هم دست‌خوش تغییر می‌شود.

مراجع

[1] S. K. Maiti, Multi-terminal quantum transport through a single benzene molecule: Evidence of a molecular transistor, *Solid State Communication*, 150 (2010) 1269- 1274.

[2] P. Dutta, S. K. Maiti, S. N. Karmakar, Magneto-transport in a binary alloy ring, *Physics Letters A*, 376 (2010) 1567.

[3] S. Datta, *Quantum Transport Atom to Transistor*, Cambridge, Cambridge University Press, (2005).

[4] International technology roadmap for semiconductors: *http://public.itrs.net*, (2004).

[5] C. Joachim, J. K. Gimzewski, A. Aviram, A trans-Platinum (II) Complex as a Single-Molecule Insulator, *Nature*, 408 (2000) 541- 548.

[6] M. Kohda, T. Kita, Y. Ohno, Bias voltage dependence of the electron spin injection studied in a three-terminal device based on a (Ga,Mn)As/n+-GaAs Esaki diode, *Applied Physics Letters* 89 (2006) 012103.

[7] H. Q. Xu, Electrical properties of three-terminal ballistic junctions, *Applied Physics Letters* 78 (2001) 2064.

[8] D. S. Fisher, P. A. Lee, Relation between conductivity and transmission matrix, *Physical Review B* 23 (1981) 6851- 6854.

The study of electronic conductance of a three terminal nanowire

Arezoo Tarokh*, Mohammad Mardaani, Hassan Rabani

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

Abstract

In this paper, we study the electronic conductance of a simple chain -as well as a polyacetylene oligomer- which is connected to three one-dimensional metallic leads. The calculations are based on Green's function technique within the nearest neighbor tight-binding approach. Two types of conductances, one which is measured between left and right leads and another which is measured between left and top leads, are calculated as functions of energy; and their behaviors are investigated with respect to the position of the top lead connection in the center wire. The results show that the existence and the position of third lead in the center wire strongly affects on the values and behaviors of the above electronic types of conductances. For the polyacetylene case, the value of each conductance at zero energy can be tuned by variation of third lead position.

Keywords: electronic conductance, three terminals, tight-binding, Green's function, polyacetylene.

* Corresponding Author: arezootarokh@yahoo.com