

rabani-h@sci.sku.ac.ir :

(دریافت مقاله: ۱۳۹۱/۵/۸ ؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۱/۱۰/۲۷)

از دیدگاه نظری، مطالعه رابطه پاشندگی، چگالی مدها و خواص ترابرد فونونی نانوسامانه‌ها نقش اصلی برای محاسبه کمیت‌های ترمودینامیکی از جمله رسانندگی گرمایی [۷ و ۱۳]، گرمای ویژه [۱۴]، انرژی درونی، آنتروپی و غیره دارد [۱۵]. از روش‌های متداول و پرکاربرد در این مطالعات می‌توان به روش‌های تابع گرین و ماتریس انتقال اشاره کرد [۹ و ۱۱]، که در این میان روش تابع گرین بسیار قدرتمند و مورد توجه است. در سامانه‌های فلزی به خاطر وجود الکترون‌های آزاد، برهم‌کنش فونونی بین هسته‌ها بلند برد است که در بعضی از موارد می‌تواند به ناهنجاری کوهن منجر شود [۱۶]. ناهنجاری کوهن وقوع ناپیوستگی در مشتق رابطه پاشندگی فونونی در بعضی بسامدهای فونونی است که از استتار ارتعاشات شبکه یونی توسط الکترون‌های رسانشی ناشی می‌شود [۱۷]. معمولاً

خواص الکتریکی نانو ساختارها در دو دهه اخیر بسیار مورد مطالعه و آزمایش قرار گرفته‌اند [۱-۳]. با توجه به پیشرفت‌های چشمگیر در ساخت ادوات اندازه‌گیری و آزمایشگاهی، خواص حرارتی و رسانندگی گرمایی، آنها به یکی از مسائل مهم در عرصه تحقیقات تجربی و نظری تبدیل شده است [۴-۶]. هدف اصلی این پژوهش‌ها بهبود کارایی قطعات ترموالکترونیک، اپتوالکترونیک و نانوالکترونیک است [۷-۹]. نانوسیم‌ها سامانه‌های نانومقیاس شبه یک بعدی هستند که تا کنون مطالعات گسترده‌ای روی خواص الکتریکی و گرمایی آنها صورت گرفته است. از نانوسیم‌ها در ساخت قطعات الکترونیک، ابزارهای ترمودینامیکی، حس‌گرهای شیمیایی و زیستی و اتصالات داخلی در نانوالکترونیک استفاده می‌شود [۱۰-۱۲].

$$C_p = A \frac{\sin pk_0 a}{pa}, \quad (1)$$

که در آن  $A$  و  $k_0$  مقادیر ثابت هستند. به این شکل از برهم‌کنش بین جرم‌ها یا صفحات اتمی الگوی کوهن گفته می‌شود. با توجه به ماهیت برهم‌کنش کوهن ثابت‌های فنر به صورت متوالی می‌توانند مثبت یا منفی شوند و این اثر اصطلاحاً باعث نرم شدن مدهای فونونی می‌گردد. انرژی پتانسیل این سامانه در تقریب هماهنگ به این شکل است

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i,p} C_p [(u_{i+p} - u_i)^2 + (u_{i-p} - u_i)^2], \quad (2)$$

که در آن  $u_i$  جابه‌جایی جرم  $i$ ام و  $u_{i+p}$  و  $u_{i-p}$  جابه‌جایی  $p$ امین همسایه‌های جرم  $i$  از مکان ترازمندی و  $C_p$  ثابت نیروی برهم‌کنشی بین جرم‌های  $i$ ام و  $p$ امین همسایگان‌اش در سمت چپ و راست  $i$  است. با استفاده از رابطه بین انرژی پتانسیل و نیروی وارده بر جرم  $i$ ام:

$$F_i = -\frac{\partial U}{\partial u_i}, \quad (3)$$

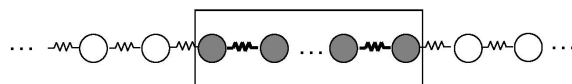
و رابطه (۲)، و همچنین با تفکیک قسمت زمانی (  $u_i = \tilde{u}_i e^{-i\omega t}$  که بسامد فونون ورودی)، معادلات حرکت را برای این زنجیره جرم-فنر با در نظر گرفتن برهم‌کنش کوهن می‌نویسیم

$$\begin{aligned} (-M\omega^2 + \sum_{j=1}^{i-1} C_j + \sum_{j=1}^{N-i} C_j) u_i - \sum_{j=1}^{i-1} C_j u_{i-j} \\ + \sum_{j=1}^{N-i} C_j u_{i+j} = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

که در آن  $M$  جرم واقع در جایگاه  $i$ ام است. اگر این زنجیره جرم-فنر مطابق شکل ۱ به دو هادی فونونی که در آنها جرم‌ها فقط با همسایگان اول خود برهم‌کنش دارند، متصل شود خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \left( -\frac{M\omega^2}{m\omega_0^2} + 2 \sum_{j=1}^{i-1} \frac{C_j}{C_0} + \sum_{j=1}^{N-i} \frac{C_j}{C_0} - \sigma_L \delta_i - \sigma_R \delta_{Ni} \right) \\ - \sum_{i \neq j} \frac{C_{|i-j|}}{C_0} (G_{i,j} + G_{j,i}) = 0, \end{aligned} \quad (5)$$

که در آن  $C_0$  ثابت نیرو بین جرم‌های  $m$  در هادی فونونی،  $G$  ماتریس تابع گرین فونونی سامانه،  $\delta$  بیانگر تابع دلتای کروئکر

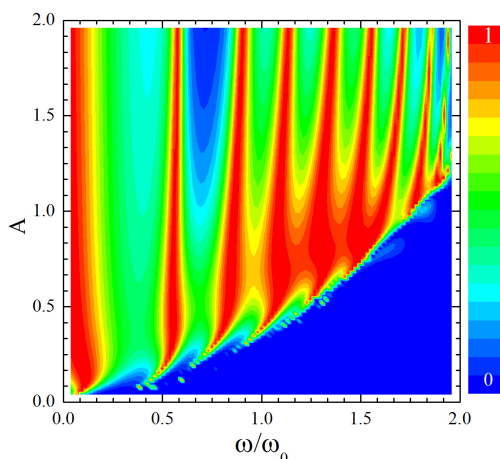


شکل ۱. یک زنجیره جرم-فنر همگن که به دو هادی فونونی نیمه متناهی متصل شده است. در زنجیره مرکزی هر جرم با همه همسایگان خود برهم‌کنش کوهن (کوهن و همسایگان اول) دارد. در صورتی که در هادی‌ها هر جرم با همسایه‌های اول خود برهم‌کنش دارد. ناحیه‌ای که در آن برهم‌کنش کوهن (کوهن و همسایگان اول) وجود دارد با مستطیل در شکل مشخص شده است.

شکل خاص سطح فرمی در بعضی فلزات به صورتی است که بعضی از نقاط خاص در منطقه بریلوئن دارای ارتعاشات خاصی می‌شوند، که باعث پیچ خوردگی منحنی پاشندگی فونونی در این نقاط می‌شود [۱۸]. محاسبات ابتدا به ساکن و نظریه تابعی چگالی روی خواص آکوستیکی بلورهای سه بعدی مانند پالادیم، سدیم با ساختار شبکه‌ای fcc نشان می‌دهد که ناهنجاری کوهن در این بلور در بعضی جهات وجود دارد، که این نتیجه توسط تجربه نیز مورد تأیید قرار گرفته است [۱۷-۲۰]. همچنین بررسی رابطه پاشندگی فونونی در یک سامانه دو بعدی مانند گرافن ناپیوستگی مشتق در شاخه اپتیکی بالایی را نشان می‌دهد [۲۰]. با کاهش ابعاد ناهنجاری‌های کوهن قوی‌تر می‌شوند به طوری که در سامانه‌های شبه یک بعدی مانند نانو لوله‌های کربنی فلزی ناهنجاری کوهن نسبت به گرافن قوی‌تر است [۲۰]. از این رو در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین و تقریب هماهنگ به بررسی رسانش فونونی یک زنجیره جرم-فنر متصل به دو هادی فونونی در حضور برهم‌کنش فونونی بلند برد (مدل کوهن) می‌پردازیم. یک زنجیره جرم-فنر را می‌توان مدلی برای توصیف ابرشبکه‌ها که شامل صفحات مرتعش هستند، به کار برد.

نیروهای مؤثر فرنگونه بین هسته‌ها در فلزات می‌توانند کاملاً بلند برد باشند و از طریق دریای الکترون‌های رسانشی از یک یون به یون دیگر منتقل شوند. یک زنجیره جرم-فنر متناهی شامل  $N$  جرم را در نظر می‌گیریم و فرض می‌کنیم که ثابت نیروی  $C_p$  بین جرم‌های  $i$  و  $i \pm p$  به صورت زیر است [۱۶]

حال به کمک رابطه‌های (۸) و (۹) می‌توان ضریب عبور فونونی را برای یک سامانه جرم- فنر همگن متصل به دو هادی فونونی ساده در حضور برهم‌کنش کوهن و همچنین برهم‌کنش‌های کوهن و همسایه اول در زنجیره مرکزی به صورت تابعی از بسامد فونون ورودی محاسبه کرد.



شکل ۲. ضریب عبور فونونی بر حسب بسامد فونون ورودی و قدرت برهم‌کنش کوهن برای یک زنجیره جرم- فنر شامل ده جرم (و در غیاب برهم‌کنش همسایه اول) که به دو زنجیره جرم- فنر ساده نیمه متناهی متصل است. در اینجا مقدار همه جرم‌ها در کل سامانه با هم برابر در نظر گرفته شده است.

در این بخش به کمک روابط به دست آمده در بخش قبل به بررسی ضریب عبور فونونی یک زنجیره جرم- فنر همگن در حضور برهم‌کنش کوهن و در غیاب برهم‌کنش همسایه اول در سامانه مرکزی می‌پردازیم. ابتدا مطابق شکل ۱ یک زنجیره جرم- فنر ساده را شامل  $N$  اتم در نظر می‌گیریم که در آن هر جرم با همه همسایگان خود فقط طبق رابطه (۱) برهم‌کنش دارد و از هر طرف به یک هادی فونونی نیمه متناهی ساده متصل شده که در هادی‌ها جرم‌ها فقط با همسایه‌های اول خود با ثابت نیروی  $C_0$  برهم‌کنش دارند. در ادامه بدون از دست دادن کلیت مسئله مقدار  $C_0$  را برابر با یک در نظر می‌گیریم. بنابراین می‌توان همه ثابت‌های فنر از جمله قدرت برهم‌کنش کوهن را بر حسب  $C_0$  و با یک عدد مشخص کرد. شکل ۲ ضریب عبور فونونی این ساختار را به صورت تابعی از بسامد فونون ورودی و همچنین قدرت برهم‌کنش کوهن ( $A$ ) برای مورد  $M = m$  و برای  $N = 10$  نشان می‌دهد. در این شکل رنگ آبی و قرمز به ترتیب نمایانگر ضریب عبور صفر و یک هستند. در بسامدهای خیلی پایین به جز برای  $A$ ‌های بسیار کوچک ضریب عبور فونونی برابر با یک است. همچنین برای  $A$ ‌های بسیار کوچک در تمام بسامدها ضریب عبور فونونی دارای مقدار صفر است. به ازای مقادیر میانی  $A \approx 1/2 - 1/5$  در تمام بسامدها ضریب عبور تقریباً غیر صفر است. نکته دیگر این است که تعداد قله‌ها (رنگ قرمز) با افزایش قدرت برهم‌کنش کوهن افزایش یافته که حداکثر تعداد قله‌ها به تعداد اتم‌های سامانه مرکزی یعنی ده می‌رسد.

اکنون فرض می‌کنیم که هر جرم در زنجیره مرکزی برابر است با

و  $\omega_0 = \sqrt{C_0/m}$  از مرتبه  $10^{12} - 10^{13}$  Hz است [۲۱ و ۲۲]. همچنین  $C_j$  و  $C_{|i-j|}$  از رابطه (۱) محاسبه می‌شود و  $\sigma_L(R)$  خود انرژی بدون بعد سامانه مرکزی به دلیل وجود هادی سمت چپ (راست) به صورت زیر است [۱۱]

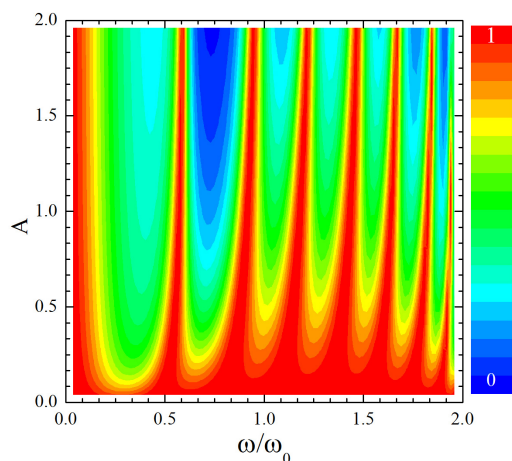
$$\sigma_L(R) = \exp(i\theta), \quad (6)$$

که در آن  $\theta = \cos^{-1}(1 - \omega^2 / 2\omega_0^2)$ . پس از محاسبه تابع گرین از روابط بالا، ضریب عبور فونونی از رابطه زیر به دست می‌آید [۱۵]

$$T(\omega) = 4 \operatorname{Im} \sigma_L \operatorname{Im} \sigma_R \left| G_{1,N} \right|^2, \quad (8)$$

که در آن  $G_{1,N}$  درایه سطر اول و ستون آخر ماتریس  $G$  است. با تعمیم این سامانه به سامانه‌ای که در آن جرم‌های زنجیره مرکزی علاوه بر برهم‌کنش کوهن با همسایگان اول خود نیز با ثابت نیروی  $C_0$  برهم‌کنش دارد، رابطه (۵) به این شکل بازنویسی می‌شود

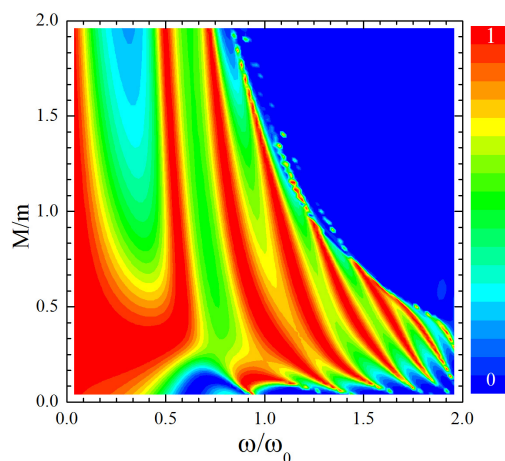
$$\begin{aligned} & \left( -\frac{M\omega^2}{m\omega_0^2} + 2 + 2 \sum_{j=1}^{i-1} \frac{C_j}{C_0} + \sum_{j=i}^{N-i} \frac{C_j}{C_0} - \sigma_L \delta_{\lambda, i} - \sigma_R \delta_{N, i} \right) \\ & - \left( 1 + \frac{C_1}{C_0} \right) G_{i, i+1} - \left( 1 + \frac{C_1}{C_0} \right) G_{i, i+1} \quad (9) \\ & - \sum_{\substack{i \neq j \\ j \neq i+1}} \frac{C_{|i-j|}}{C_0} (G_{i, j} + G_{j, i}) = 0. \end{aligned}$$



**شکل ۴.** ضریب عبور فونونی بر حسب بسامد فونون ورودی و قدرت برهم‌کنش کوهن برای یک زنجیره جرم-فنر شامل ده جرم که به دو زنجیره جرم و فنر ساده نیمه‌متناهی متصل است. در اینجا برهم‌کنش نزدیکترین همسایه‌ها نیز در سامانه مرکزی وجود دارد. همچنین مقدار همه جرم‌ها در کل سامانه با هم برابر در نظر گرفته شده است.

می‌دهد. در این‌جا نیز زنجیره جرم و فنر مرکزی به دو هادی ساده نیمه‌متناهی شامل جرم‌های یکسان  $m$  و ثابت فنر  $C_0 = 1$  متصل است و جرم‌ها همانند قسمت قبل فقط با همسایه‌های اول خود برهم‌کنش دارند. در غیاب برهم‌کنش کوهن سامانه به یک سامانه ایده‌آل تبدیل شده و ضریب عبور فونونی در تمام بسامدهای مجاز دارای مقدار یک خواهد بود. همان‌طور که در نمودار مشخص است در همه بسامدهای مجاز با افزایش مقدار  $A$  اثر برهم‌کنش کوهن رفته رفته بیشتر می‌شود، که منجر به پیدایش قله‌ها و دره‌ها می‌گردد که علت تفاوت ماهیت فیزیکی و طیف بسامد سامانه مرکزی با هادی‌ها است.

حال اثر تغییر مقدار هر جرم در سامانه مرکزی را نسبت به مقدار هر جرم در هادی‌ها را بر رسانش این سامانه بررسی می‌کنیم. شکل ۵ ضریب عبور فونونی را برای زنجیره‌ای شامل ده جرم متصل به دو هادی به صورت تابعی از بسامد فونون ورودی و نسبت جرم‌ها برای حالت  $A = 0.5$  نشان می‌دهد. برای  $m < M$ ، این تابع دارای قله‌های بیشتری است. با در نظر گرفتن برهم‌کنش نزدیکترین همسایه علاوه بر برهم‌کنش کوهن در سامانه مرکزی، فیزیک سامانه مرکزی به فیزیک هادی‌ها نزدیک‌تر شده و در نتیجه ناحیه رسانشی وسیع‌تر می‌شود. مقایسه

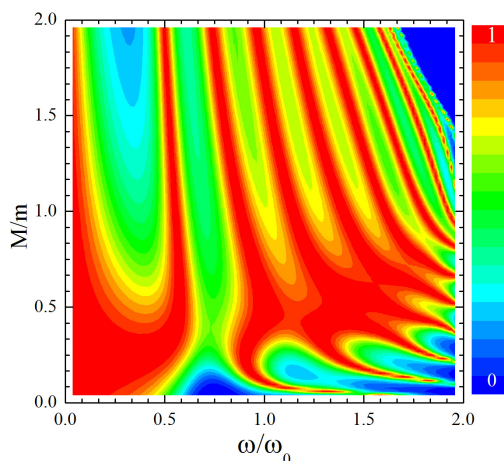


**شکل ۳.** ضریب عبور فونونی بر حسب بسامد فونون ورودی و نسبت هر جرم در سامانه مرکزی به هر جرم در هادی‌ها، برای یک زنجیره جرم-فنر شامل ده جرم (و در غیاب برهم‌کنش همسایه اول) که به دو زنجیره جرم و فنر ساده نیمه‌متناهی متصل است. در اینجا مقدار قدرت برهم‌کنش کوهن برابر با نیم ( $A = 0.5$ ) در نظر گرفته شده است.

$M$  و مقدار هر جرم در هادی‌ها  $m$  است. حال اثر تغییر جرم در سامانه مرکزی نسبت به جرم در هادی‌ها را روی رسانش کل سامانه بررسی می‌کنیم. شکل ۳ ضریب عبور فونونی را تابع بسامد فرودی و نسبت جرم‌ها برای مورد  $N = 10$  و برای حالت  $A = 0.5$  نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که در بسامدهای بالا و برای  $M > m$  ضریب عبور فونونی برابر صفر و در بسامدهای پایین و برای  $M < m$  نیز برابر یک است. در واقع افزایش هر جرم در سامانه مرکزی نسبت به هر جرم در هادی‌ها باعث کاهش تراورد فونونی به خصوص در بسامدهای بالا می‌شود. دلیل این امر کوچکتر شدن بازه مجاز بسامد در رابطه پاشندگی سامانه مرکزی است [۵ و ۶].

به روش مشابه می‌توان ضریب عبور فونونی زنجیره را در حضور برهم‌کنش کوهن [طبق رابطه (۱)] و برهم‌کنش همسایگان اول (با ثابت نیروی  $C_0$ )، با استفاده از روابط (۸) و (۹) مورد مطالعه قرار داد. شکل ۴ ضریب عبور فونونی این سامانه را به صورت تابعی از  $\omega$  و  $A$  برای مورد  $N = 10$  و برای حالت  $M = m$  نشان

فنر متناهی با در نظر گرفتن اثر برهم‌کنش کوهن و همچنین اثر برهم‌کنش‌های کوهن و نزدیکترین همسایه پرداختیم. فرض شده است که این سامانه از طرفین به دو زنجیره جرم- فنر که فقط شامل برهم‌کنش همسایه‌های اول در تقریب هماهنگ هستند و نقش منبع تزریق فونون را بر عهده دارند، متصل است. روشی که برای محاسبات برگزیده‌ایم روش قدرت‌مند تابع گرین است که با قیاس از کاربرد آن در بررسی ترابرد الکترونی نانو ساختارها در رهیافت تنگابست، برای مطالعه ترابرد فونونی در تقریب هماهنگ به کار گرفته شده است. نتایج نشان می‌دهد که برهم‌کنش کوهن باعث تغییر ماهیت فیزیکی سامانه مرکزی از ماهیت فیزیکی هادی‌ها شده و در نتیجه مقدار ضریب عبور را تحت تأثیر قرار می‌دهد که منجر به ایجاد قله‌ها و دره‌هایی در طیف ضریب عبور فونونی می‌شود، به خصوص در مواردی که قدرت این برهم‌کنش بزرگ است.



شکل ۵. ضریب عبور فونونی بر حسب بسامد فونون ورودی و نسبت هر جرم در سامانه مرکزی به هر جرم در هادی‌ها، برای یک زنجیره جرم- فنر شامل ده جرم که به دو زنجیره جرم و فنر ساده نیمه متناهی متصل است. در اینجا اثر برهم‌کنش‌های نزدیکترین همسایه‌ها نیز در سامانه مرکزی وجود دارد. همچنین مقدار قدرت برهم‌کنش کوهن برابر با نیم ( $A = 0.5$ ) در نظر گرفته شده است.

بین شکل‌های ۳ و ۵ و یا ۲ و ۴ این مطلب را تأیید می‌کند.

بدین وسیله از حمایت‌های مالی معاونت پژوهشی دانشگاه شهرکرد قدردانی می‌شود.

در این مقاله به بررسی ضریب عبور فونونی یک زنجیره جرم-

11. M Mardaani and H Rabani, *Solid State Commun.* **151** (2011) 311.
12. M Mardaani, H Rabani, and A Esmaeili, *Solid State Commun.* **151** (2011) 928.
13. L P Shi and S J Xiong, *Phys. Lett. A* **373** (2009) 563.
14. A N Cleland, "Foundations of Nanomechanics: From Solid-State Theory to Device Applications", Springer-Verlag, New York (2003).
15. A K Kushwaha, *Physica B* **405** (2010) 1638.
16. C Kittel, "Introduction to Solid State Physics", California University, Berkeley (2005).
17. D A Stewart, *New Journal of Physics* **10** (2008) 043025.
18. R Bruno, E Ion, and B Aitor, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **10** (2010) 3697.
19. P Aynajian *et al.*, *Science* **319** (2008) 5869.
20. S Piscanec *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004) 185503; S Piscanec *et al.*, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **858E** (2005) HH7.4.1.
21. A Chaudhuri, A Kundu, D Roy, A Dhar, J L Lebowitz, and H Spohn, *Phys. Rev. B* **81** (2010) 064301.
22. M S Rabia, *J Mol. Struct-THEOCHEM* **777** (2006) 131.

1. D K Ferry and S M Goodnick, "Transport in Nanostructures", Cambridge University Press (1997).
2. J S Wang, J Wang and J T Lu, *Eur. Phys. J. B* **62** (2008) 381.
3. B T Wong and M P Menguc, "Thermal Transport for Application Micro/Nanomachining", Lexington, KY, USA (2008)
4. Y Sungtaek, *Appl. Phys. Lett.* **87** (2005) 153106.
۵. ح ربانی، م مردانی، م کشاورز، *مجله پژوهش فیزیک ایران*، **۱۱**، ۳ (۱۳۹۰) ۲۸۷.
۶. ح ربانی، م مردانی، م کشاورز، *مجله پژوهش فیزیک ایران*، **۱۱**، ۴ (۱۳۹۰) ۳۷۱.
7. T Markussen, A P Jauho, M Brandbyge, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 035415.
8. F Giazotto, T T Heikkila, A Luukanen, A M Savin, and J P Pekola, *Rev. Mod. Phys.* **78** (2006) 217.
9. M Mardaani, H Rabani, and M Keshavarz, *Physica E* **44** (2012) 1342.
10. K Q Chen, W X Li and W Daun, *Phys. Rev. B* **72** (2005) 045422.