

mohammad-m@sci.sku.ac.ir :

(دریافت مقاله: ۱۳۹۱/۶/۱۹؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۲/۴/۱۷)

مقطع آن پرداخته و اثر تغییر مکان آنها را در سطح مقطع نانو بلور مورد بررسی قرار می‌دهیم. با فرض برقرار بودن شرایط رژیم پاسخ خطی و ترابرد هم‌دوس، در رهیافت لاندائور-بوتیکر رسانش الکتریکی نانو ساختار متناسب با ضریب عبور الکترونی آن در سطح انرژی فرمی است [۸ و ۹]. بنابراین به محاسبه ضریب عبور الکترونی اکتفا کرده و آن را با رسانش الکتریکی هم‌ارز می‌گیریم. در بخش بعد به ارائه فرمول‌بندی مقاله بر پایه روش تابع گرین پرداخته و روابط مورد نیاز را برای محاسبات عددی به دست می‌آوریم. سپس در بخش بعد از آن، نتایج را با رسم چند نمودار برای ضریب عبور الکترونی و چگالی حالت‌ها ارائه داده و سپس به بحث و تحلیل آنها می‌پردازیم. در پایان نیز مقاله را با بخش نتیجه‌گیری به پایان می‌رسانیم.

نانو بلورها متشکل از یک یا چند ماده و به صورت لایه لایه در شکل‌ها و اندازه‌های گوناگون در ابعاد کمتر از یک میکرومتر هستند [۱-۵]. در سال‌های اخیر رشد قابل توجهی در بررسی رسانندگی الکتریکی نانو بلورها وجود داشته است [۶ و ۷]. بررسی‌ها نشان می‌دهد که اضافه کردن حتی یک ناخالصی الکتریکی درون ترکیبات نانو بلورها روی خواص الکتریکی و اپتیکی آنها اثر می‌گذارد [۱، ۳ و ۷]. این مطالعات خواص جالبی پیشنهاد می‌کند که در آینده کاربرد نانو بلورها مهم است.

در این مقاله در نگرش تنگابست به بررسی خواص ترابرد الکترونی یک نانو بلور نامتناهی با ساختار مکعبی ساده در حضور یک بار و یک دوقطبی الکتریکی در سطح

زیر داده می شود

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

که در آن  $\beta_{L(R)z}$  انرژی پرش هادی چپ (راست) در راستای محور  $z$  و  $\varepsilon_{L(R),mn}$  انرژی جایگاهی زنجیره چپ (راست) در مد  $(m, n)$  است. انرژی مجاز الکترونی که از هادی ها وارد زنجیره مرکزی می شود با رابطه زیر بیان می شود

$$\varepsilon = \varepsilon_{L(R)mn} + \beta_{L(R)z} \cos(k_z a), \quad (3)$$

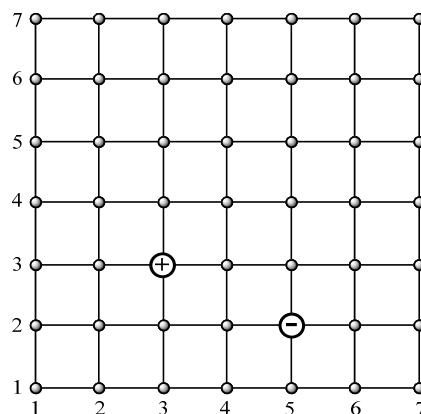
که در آن

$$\varepsilon_{L(R)mn} = \varepsilon_{L(R)0} + \beta_{L(R)x} \cos\left(\frac{m\pi}{N_x + 1}\right) + \beta_{L(R)y} \cos\left(\frac{n\pi}{N_y + 1}\right),$$

که در آن  $\beta_{L(R)x}$  و  $\beta_{L(R)y}$  به ترتیب انرژی پرش هادی چپ (راست) در راستای  $x$  و  $y$  بوده و  $\varepsilon_{L(R)0}$  نیز انرژی جایگاهی اتم ها در هادی های سامانه اصلی هستند. در سامانه مرکزی اصلی که شامل بارهای الکتریکی با قدرت پتانسیل  $U_{IJK}$  واقع در مکان های  $\vec{R}_{IJK}$  است، پتانسیل الکتریکی در مکان  $\vec{R}_{ijk}$  به صورت زیر احساس می شود [۸]

$$V_{ijk} = \sum_{IJK} \frac{U_{IJK}}{|\vec{R}_{ijk} - \vec{R}_{IJK}|} \quad (4)$$

بردار بدون بعد  $\vec{R}_{ijk}$  به صورت  $\vec{R}_{ijk} = i\hat{i} + j\hat{j} + k\hat{k}$  و  $1 \leq i \leq N_x$ ،  $1 \leq j \leq N_y$ ،  $1 \leq k \leq N_z$  است. در اینجا فرض می کنیم که نانو بلور صلب بوده و در دمای صفر واقع است. به طوری که بتوان از ارتعاش های شبکه که باعث پراکندگی ناکشسان می شوند، صرف نظر کرد. این موضوع به این معنی است که پراکندگی الکترون از پتانسیل بار الکتریکی یک فرآیند بی دررو است و الکترون واقع در حالت  $(m, n)$  در همان حالت باقی مانده و به حالت دیگری منتقل نمی شود. بنابراین، با استفاده از رابطه (۴) انرژی های جایگاهی زنجیره مرکزی در مد  $(m, n)$  و لایه  $k$ ام نانو بلور چنین بیان می شود [۸]



شکل ۱. سطح مقطعی از یک نانو بلور که به عنوان مثال شامل دو بار (یک دوقطبی) الکتریکی است. در این شکل  $N_x = N_y = 7$  انتخاب شده است. با توجه به فرض ایده آل بودن نانو بلور و توزیع مکان بارها در یک سطح عمود بر آن، می توان مکان هر بار را با یک زوج مرتب، بدون نیاز به مختصه در راستای بلور، مشخص کرد. مثلاً در شکل مکان بار مثبت به صورت  $(3, 3)$  مشخص می شود.

فرض می کنیم که سامانه مورد مطالعه از سه بخش مجزا تشکیل شده است: بخش مرکزی  $(C)$  شامل یک نانو بلور با ساختار مکعبی ساده که با انرژی های پرش اتصال  $\beta_{CL}$  از طرف چپ و  $\beta_{CR}$  از طرف راست به دو بخش دیگر یعنی هادی سمت چپ  $(L)$  و هادی سمت راست  $(R)$  متصل است. نانو بلور مرکزی دارای طول متناهی متشکل از  $N_z$  لایه در راستای  $z$  است که هر لایه شامل  $N_x \times N_y$  اتم است. در رهیافت تنگابست، می توان با پیدا کردن یک تبدیل یکانی مدهای مختلف رسانش را از هم جدا کرد [۱۰]. بنابراین هامیلتونی این سامانه متصل با هامیلتونی های  $N_x \times N_y$  عدد زنجیره اتمی بدون برهمکنش جایگزین می شود که هر زنجیره در مد  $(m, n)$  دارای انرژی جایگاهی  $\varepsilon_{mn}$  است. در اینجا اعداد صحیح  $m$  و  $n$  معرف هر مد از مدهای سطح مقطع هستند. وارون ماتریس تابع گرین زنجیره متعلق به مد  $(m, n)$  از رابطه زیر به دست می آید

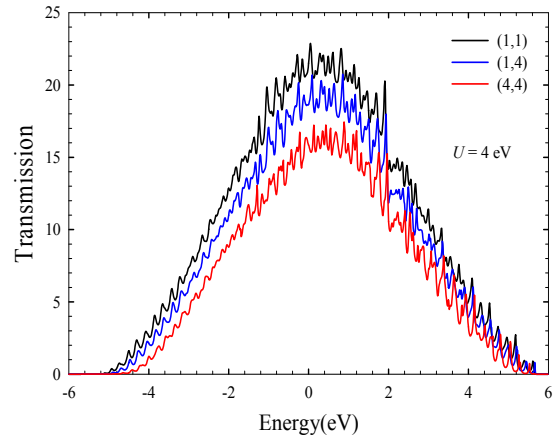
$$G_{mn}^{-1} = G_{o,mn}^{-1} - \Sigma_{L,mn} - \Sigma_{R,mn}, \quad (1)$$

که در آن  $G_{o,mn}^{-1}$  وارون تابع گرین زنجیره مد  $(m, n)$  در حالت منزوی است. همچنین  $\Sigma_{L(R),mn}$  خود انرژی این زنجیره به دلیل وجود هادی چپ (راست) است و با رابطه

در بخش بعد با استفاده از روابط بالا به محاسبه عددی رسانش و چگالی حالت‌های الکترونی یک نانو بلور با ساختار مکعبی ساده در حضور یک بار و یا یک دو قطبی الکتریکی که در مکان‌های مختلف سطح مقطع نانو بلور قرار دارد، خواهیم پرداخت.

حال می‌توان به بررسی تراورد الکترونی یک نانو بلور نامتناهی با ساختار مکعبی ساده شامل یک بار و یا یک دو قطبی الکتریکی در مکان‌های مختلف سطح مقطع آن پرداخت. برای سادگی تمام انرژی‌های جایگاهی و پرش حالت پایه اتم‌های سامانه را به ترتیب برابر با صفر و یک الکترون ولت اختیار می‌کنیم. با توجه به این اعداد بازه مجاز انرژی الکترون در هادی‌ها از  $-6$  تا  $6$  الکترون ولت است. سطح مقطع نانو بلور را  $7 \times 7$  یعنی شامل  $49$  اتم در نظر می‌گیریم. ابتدا در شکل ۲ ضریب عبور الکترونی سامانه را به ازای سه مکان متفاوت یک بار الکتریکی با قدرت پتانسیل  $U_{IJK} = U = 4 \text{ eV}$  واقع در سطح مقطع نانو بلور مورد بررسی قرار می‌دهیم. همان‌طور که دیده می‌شود با قرار دادن بار الکتریکی در مرکز سطح مقطع، کمترین رسانش را در تمام انرژی‌ها نسبت به سایر موقعیت‌ها مشاهده می‌کنیم، که دلیل این امر پراکنندگی بیشتر الکترون ورودی از پتانسیل بار الکتریکی است [۱].

در شکل ۳، نمودار ضریب عبور برای یک مورد ایده‌آل و دو مورد شامل بارهایی با پتانسیل مثبت و منفی واقع در مرکز نانو بلور به صورت تابعی از انرژی رسم شده است. از نمودار مربوط به مورد ایده‌آل مشاهده می‌شود که در ابتدا و انتهای پنجره انرژی تعداد کانال‌های رسانش و همپوشانی آنها کمینه و در انرژی صفر همپوشانی آنها بیشینه است. در موارد شامل بار الکتریکی، نمودارها از شکل پله‌ای خارج شده و رسانش نسبت به مورد ایده‌آل کمتر می‌شود. همچنین نمودارهای مربوط به پتانسیل بارهای مثبت و منفی نسبت به انرژی صفر تصویر آینه‌ای یکدیگرند. به طوری که برای بار مثبت ( $U > 0$ )، در ابتدا و برای بار منفی ( $U < 0$ ) در انتهای پنجره مجاز انرژی، سازوکار رسانش تونل‌زنی است.



شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی برای یک نانو بلور با سطح مقطع  $7 \times 7$  شامل یک بار مثبت الکتریکی در سه جایگاه متفاوت در سطح مقطع. نانو بلور در راستای طول نامتناهی فرض شده است.

$$\varepsilon_{Cmn}(k) = \varepsilon_{C_0} + \gamma \beta_{Cx} \cos\left(\frac{m\pi}{N_x + 1}\right) + \gamma \beta_{Cy} \cos\left(\frac{n\pi}{N_y + 1}\right) + \langle m, n | V_{ijk} | m, n \rangle. \quad (5)$$

که  $\varepsilon_{C_0}$  انرژی جایگاهی اتم‌ها در قسمت مرکزی سامانه اصلی است. بنابراین ضریب عبور در مد  $(m, n)$  چنین است [۸-۱۲]

$$T_{mn}(\varepsilon) = 4 \text{Im} \Sigma_{L,mn} \text{Im} \Sigma_{R,mn} |G_{N_z, mn}|^2, \quad (6)$$

که در آن  $G_{N_z, mn}$  درایه سطر اول و ستون  $N_z$  ام ماتریس تابع گرین زنجیره مرکزی در حضور هادی‌ها و تحت تأثیر پتانسیل بار الکتریکی برای مد  $(m, n)$  است. همچنین چگالی حالت‌های کل برای هر زنجیره مد  $(m, n)$  توسط رابطه زیر به دست می‌آید

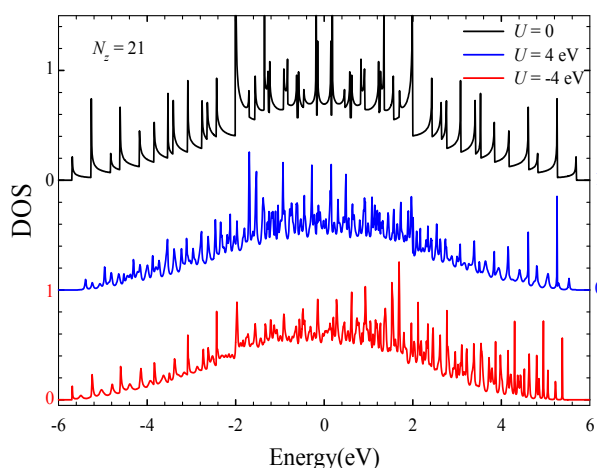
$$\text{DOS}_{mn}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\text{tr} G_{mn}). \quad (7)$$

اکنون می‌توان با جمع زدن روی تمام مدها، رسانش الکتریکی و چگالی حالت‌ها را برای نانو بلور مرکزی به ترتیب از روابط زیر محاسبه نمود

$$T(\varepsilon) = \sum_{m=1}^{N_x} \sum_{n=1}^{N_y} T_{mn}(\varepsilon), \quad (8)$$

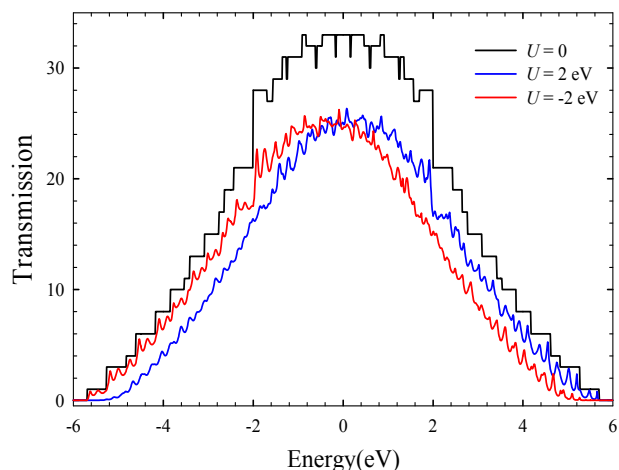
و

$$\text{DOS}(\varepsilon) = \sum_{m=1}^{N_x} \sum_{n=1}^{N_y} \text{DOS}_{mn}(\varepsilon). \quad (9)$$



شکل ۴. (نسخه الکترونیکی رنگی) نمودار چگالی حالت‌های الکترونی برحسب انرژی برای یک نانو بلور با سطح مقطع  $7 \times 7$  در سه مورد ایده‌آل ( $U=0$ )، شامل یک بار مثبت ( $U=4 \text{ eV}$ ) و یک بار منفی ( $U=-4 \text{ eV}$ ) واقع در مرکز سطح مقطع. نانو بلور در راستای طول نامتناهی فرض شده است و چگالی حالت‌ها برای ۲۱ لایه در همسایگی لایه شامل بار محاسبه شده است.

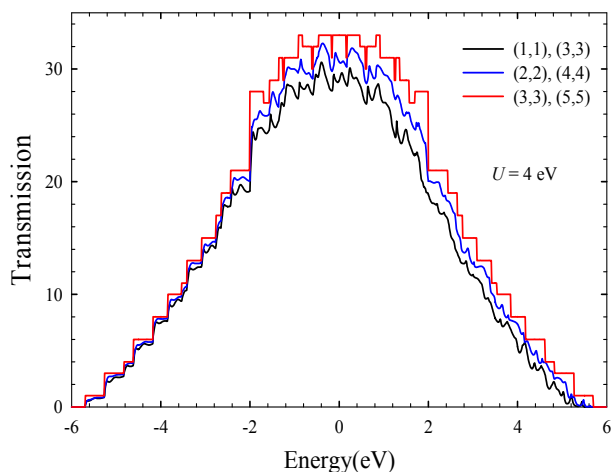
می‌دهیم. شکل ۵ این کمیت را برای سه مکان متفاوت مرکز دوقطبی برحسب انرژی نشان می‌دهد. در این شکل به منظور خلاصه‌نویسی مثلاً موردی را که مرکز دو قطبی در مرکز سطح مقطع قرار دارد با عبارت (۵ و ۵) (۳ و ۳) مشخص کرده‌ایم (شکل ۱). بدین معنی که بار مثبت دو قطبی در مکان (۳ و ۳) و بار منفی در مکان (۵ و ۵) قرار دارد. در این قسمت قدرت پتانسیل دو قطبی را ۴ الکترون ولت اختیار کرده‌ایم. نمودار خط قرمز رنگ که مانند مورد ایده‌آل است نشان می‌دهد وقتی مرکز دو قطبی در مرکز سطح مقطع قرار بگیرد، رسانش کامل است. در واقع در این حالت اثر پتانسیل‌های ناشی از بارهای مثبت و منفی روی جایگاه‌های نانو بلور به طور کامل خنثی می‌شود و مقدار انرژی جایگاهی اتم‌ها تغییری نکرده و بنابراین حالت ایده‌آل بازیابی می‌شود. با انتقال دوقطبی به گوشه سطح مقطع، رسانش کاهش می‌یابد و به دلیل عدم تقارن قرارگیری دوقطبی در سطح مقطع سامانه، رسانش از حالت ایده‌آل خارج می‌شود. بنابراین در مورد (۳ و ۳) (۱ و ۱)، ضریب عبور دارای کمترین مقدار است.



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار ضریب عبور الکترونی برحسب انرژی برای یک نانو بلور با سطح مقطع  $7 \times 7$  در سه مورد ایده‌آل ( $U=0$ )، شامل یک بار مثبت ( $U=2 \text{ eV}$ ) و یک بار منفی ( $U=-2 \text{ eV}$ ) واقع در مرکز سطح مقطع. نانو بلور در راستای طول نامتناهی فرض شده است.

شکل ۴ نمودارهای مربوط به چگالی حالت‌های الکترونی را برای سه مورد ایده‌آل، شامل یک بار مثبت و یک بار منفی واقع در سطح مقطع نانو بلور نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که در حالت غیر ایده‌آل با توجه به عددی بودن محاسبات، چگالی حالت‌ها برای ۲۱ لایه در همسایگی لایه شامل بار به دست آمده است. مشاهده می‌شود که در مورد ایده‌آل نمودار نسبت به انرژی صفر متقارن بوده، و از مجموع نمودارهای  $U$  شکل مربوط به هر یک از مدهای رسانش به دست می‌آید. در حالی که وجود بار منفی یا مثبت باعث خارج شدن نمودارها از شکل منظم و متقارن و همچنین زیاد شدن تعداد قله‌های تشدید می‌شود. در واقع پتانسیل بار الکتریکی نتوانسته است که بیشینه چگالی حالت‌ها را در قسمت میانی جابه‌جا کند و تنها در کاهش مقدار آن به خصوص در دو لبه نوار انرژی اثر داشته است. محاسبات نشان می‌دهد که چگالی حالت‌های الکترونی تقریباً مستقل از مکان بار الکتریکی است در حالی که با توجه به شکل ۲، در مورد رسانش این مطلب صادق نیست. در ادامه بحث، یک دو قطبی الکتریکی را در سطح مقطع  $7 \times 7$  یک نانو بلور نامتناهی در نظر گرفته و اثر تغییر مکان مرکز دو قطبی الکتریکی را بر ضریب عبور مورد بررسی قرار

در این مقاله به کمک روش تابع گرین در رهیافت تنگابست به بررسی رسانش و چگالی الکترونی یک نانو بلور نامتناهی با ساختار مکعبی ساده شامل یک بار الکتریکی یا یک دو قطبی الکتریکی در سطح مقطع آن پرداخته و اثر تغییر مکان آنها را از مرکز به لبه سطح مقطع مورد بررسی قرار دادیم. نتایج نشان می‌دهد با جابه‌جا کردن مکان بار الکتریکی از مرکز به سمت لبه ضریب عبور کاهش می‌یابد در حالی که برای یک دوقطبی وضعیت کاملاً برعکس است. یعنی با قرار دادن دوقطبی در مرکز و گوشه سطح مقطع به ترتیب بیشترین و کمترین رسانش را در سامانه مشاهده می‌کنیم. از نظر کاربردی نتایج می‌تواند برای کنترل رسانش با تزریق بار الکتریکی سودمند واقع شود.



شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار ضریب عبور الکترونی برحسب انرژی برای یک نانو بلور با سطح مقطع  $7 \times 7$  شامل یک دو قطبی الکتریکی در سه جایگاه متفاوت در سطح مقطع. نانو بلور در راستای طول نامتناهی و قدر مطلق قدرت پتانسیل هر بار الکتریکی ۴ الکترون ولت فرض شده است.

(1997).

8. M Mardaani and H Mardaani, *Physica E* **33** (2006) 147.
9. D S Fisher and P A Lee, *Phys. Rev. B* **23** (1981) 6851; P A Lee and D S Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **47** (1981) 882.
10. M Mardaani and K Esfarjani, *Physica E* **25** (2004) 119.
11. M Mardaani, H Rabani, and M Keshavarz, *Physica E* **44** (2012) 1342.

۱۲. م. مردانی، ح. ربانی و آ. مظلوم شهرکی، مجله پژوهش

فیزیک ایران، ۱۲، ۱ (۱۳۹۱) ۴۳.

1. S Datta, "*Quantum Transport Atom to Transistor*", Cambridge University Press (2005).
2. D L Nika, S Ghosh, E P Pokatilov, and A A Balandin, *Appl. Phys. Lett.* **94** (2009) 203103.
3. T M Tritt, "*Thermal Conductivity Theory, Properties and Applications*", Clemson University (2003).
4. J Lan, J S Wang, C K Gan and S K Chin, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 115401.
5. W Zhang, N Mingo, and T S Fisher, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 195426.
6. B K Nikolic and P B Allen, *J. Phy. Cond. Matt.* **12** (2000).
7. D K Ferry and S M Goodnick, "*Transport in Nanostructures*", Cambridge University Press