<del>ٚۅ</del>ٙۿۺ؋ۑڔڹۑڬ

مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۹، شمارهٔ ۱، بهار ۱۳۹۸

# بررسی رسانش الکترونی یک نانونوار با ساختار مربعی شامل چند ناخالصی

# مرضیه جمشیدی فارسانی، حسن ربانی و محمد مردانی

گروه فیزیک، دانشکدهٔ علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

يست الكترونيكي: rabani-h@ sku.ac.ir

(دريافت مقاله: ١٣٩٥/١١/٥۶ ؛ دريافت نسخهٔ نهايي: ١٣٩٧/٠٧/١٣)

#### چکیدہ

در این مقاله با بهره گیری از روش تابع گرین و در رهیافت تنگابست، تأثیر حضور و چگونگی توزیع ناخالصیهای الکتریکی را بـر روی رسانش الکترونی یک نانونوار با ساختار مربعی مطالعه میکنیم. بدین منظور با به کار بردن یک تبدیل یکانی مناسب، مـدهای رسانش را در قسـمتهای ایده آل جدا نموده و خود انرژیهای مربوطه را به صورت تحلیلی به دست می آوریم. سپس با به کار گیری رابطهٔ فیشـرلی رسانش سامانه را بـه صورت الگوریتمی که سریعاً توسط رایانه قابل محاسبه است، ارائه میکنیم. نتایج عددی نشان می دهر که توزیع ناخالصیهای الکتریکی با انرژیهای جایگاهی متفاوت، منجر به مقادیر متفاوتی از رسانش الکترونی در سامانه شده و به طور کلی باعث کاهش رسانش الکتریکی می شود.

**واژههای کلیدی**: رسانش الکترونی، نانونوار، ناخالصی الکتریکی، تابع گرین

#### ۱. مقدمه

نانوبلورها، ابرشبکهها و ساختارهای نانومقیاس به دلیل دارا بودن ویژگیهای منحصر به فرد الکترونیکی، نوری و شیمیایی که به اندازه ساختار وابسته است، در قطعات الکترونیکی و ذخیرهسازی اطلاعات، کاربردهای فراوان دارند [1-ع]؛ از اینرو در بسیاری از کاربردها رسانندگی الکتریکی یکی از مهمترین مشخصههای آنها است [۷ و ۸]. اضافه کردن و یا جایگزینی ناخالصیهای الکتریکی یکی از عواملی است که تأثیر به سزایی بر روی رسانش الکتریکی نانوساختارها دارد. همچنین با آلایش نانو ساختارها به ویژه ساختارهای دوبعدی توسط ناخالصیهای

الکتریکی و تغییر مکان آنها می توان رسانش الکتریکی را کنتـرل نمود [۹–۱۲].

در این مقاله با بهره گیری از روش تابع گرین در رهیافت تنگابست، تأثیر حضور و چگونگی توزیع ناخالصیهای الکتریکی را بر روی مقدار رسانش الکتریکی یک نانونوار با ساختار مربعی مطالعه میکنیم. لازم به ذکر است که بر اساس رهیافت لاندائور ضریب عبور الکتریکی نانوساختار مورد نظر را همارز رسانش الکتریکی در نظر می گیریم [۱۳]. همچنین چگالی حالتهای موضعی را روی محل توزیع ناخالصیهای الکتریکی بررسی میکنیم. برای این منظور در بخش بعد به در رهیافت تنگابست به صورت زیر نوشته میشود

$$\begin{split} H_{L(R)} &= \sum_{n,i} \varepsilon_{n,L(R)} d_{n,i}^{\dagger} d_{n,i} \\ &+ \sum_{n,\langle ij \rangle} \beta_{L(R)} (d_{n,i}^{\dagger} d_{n,j} + d_{n,j}^{\dagger} d_{n,i}), \end{split} \tag{(7)}$$

$$\varepsilon_{n,L(R)} = \varepsilon_{L(R)} + \gamma \beta_{L(R)} \cos(n\pi / (N_y + 1)), \qquad (\texttt{f})$$

و  $(n_{n,i})$  عملگر خلق (فنا) الکترونی در یاختهٔ iام و در مد nام است. در این رابطه جمعزنی روی n از مقدار یک تا  $v_{N}$  است که همان تعداد اتمهای هر یاخته است. حال به ارائه شکل ماتریس خود انرژی چپ (راست)،  $\sigma_{L(R)}$ ، بر می گردیم. این ماتریس بعد از اعمال تبدیل متعامد به صورت ماتریس قطری  $\tilde{\sigma}_{L(R)}$  با عناصر  $(n_{L(R)})^{(N)}$  به دست می آید که این عناصر با استفاده از تابع گرین سطحی مربوط به هر مد به صورت زیر نوشته می شود

$$\begin{split} \tilde{\sigma}_{L(R)}^{(n)} &= \frac{\beta_{WL(R)}^{*}}{{}^{\mathsf{Y}}\beta_{W}\beta_{L(R)}^{\mathsf{Y}}} \\ & \left( \varepsilon - \varepsilon_{n,L(R)} - \sqrt{\left(\varepsilon - \varepsilon_{n,L(R)}\right)^{\mathsf{Y}} - {}^{\mathsf{Y}}\beta_{L(R)}^{\mathsf{Y}}} \right), \qquad (\Delta) \\ & n = 1, \dots, N_{y} \end{split}$$

که در آن  $eta_{WL(R)}$  انرژی پرش الکترون مربوط به پیونـدهای



**شکل ۱**. یک نانونوار نامتناهی با ساختار مربعی که قسمت کوچکی از آن (ساختار واقع در مستطیل خطچین) میتواند شامل یک یا چند ناخالصی باشد. این قسمت را به عنوان سامانهٔ مرکزی در نظر گرفته که از طرفین به هادیهای مشابه متصل است.

معرفی چارچوب نظری و فرمولبندی مقاله میپردازیم. سپس در بخش نتایج و بحث، برای چهار توزیع متفاوت از ناخالصی های الکتریکی به صورت دو دوقطبی و یا یک چهارقطبی در سطح مقطعی از نانونوار، رسانش الکتریکی را بر حسب انرژی محاسبه میکنیم. سرانجام در بخش پایانی نیز به جمعبندی نتایج و ارائه خلاصه مقاله میپردازیم.

# ۲. فرمولبندی

یک سامانهٔ دوبعدی با ساختار شبکهای مربعی را در نظر بگیرید که عرض آن محدود ولی دارای طول بی نهایت است. فرض کنید که قسمتی از این نانونوار با قسمتهای دیگر متفاوت بوده و شامل یک یا چند ناخالصی الکتریکی است. مطابق با شکل ۱ سامانهٔ مورد نظر را می توان به سه بخش تقسیم کرد؛ بخش مرکزی شامل تعداد N<sub>x</sub>N<sub>y</sub> اتم که از سمتهای چپ و راست به دو بخش دیگر که هادیهای مشابه هستند، متصل شده است. وارون ماتریس تابع گرین سامانهٔ مرکزی در حضور هادیها از رابطهٔ زیر پیروی میکند

$$G_W^{-1} = \varepsilon I - H_W - \beta_W (\mathbf{\sigma}_L + \mathbf{\sigma}_R), \tag{1}$$

که در آن  $\mathfrak{F}$  انرژی الکترون، I ماتریس یکه و  $\mathfrak{B}_W$  انرژی پرش الکترون بین نزدیکترین اتمهای سامانهٔ مرکزی است.  $\mathfrak{\sigma}_{L(R)}$ معرف ماتریس خودانرژی (بدون بعد) سامانهٔ مرکزی در حضور هادی چپ (راست) است. شکل صریح ایـن تـابع بعـداً ارائـه خواهد شد. همچنین  $H_W$  هامیلتونی سامانهٔ مرکزی است کـه



**شکل ۲**. حضور ناخالصیهای الکتریکی با انرژیهای جایگاهی متفاوت در یاختههای متفاوت از سامانهٔ مرکزی: (الـف) یاختـهٔ اول در راسـتای محور x. (ب) یاختهٔ دوم در راستای محور x. (ج) قطر سامانهٔ مرکزی، (د) یاختهٔ اول در راستای محور y .

بین اتمهای هادی چپ (راست) و سامانهٔ مرکزی است (شکل ۱). سرانجام می توان ضریب عبور الکترونی سامانهٔ مرکزی را از رابطهٔ زیر به دست آورد [۱۵]  $T(\varepsilon) = \text{tr}(\tilde{\Gamma}_L \tilde{G}_W \tilde{\Gamma}_R \tilde{G}_W^T),$  (۶) که در آن W تبدیل یافته ماتریس تابع گرین در رابطهٔ (۱) بعد از اعمال تبدیل یکانی است و تابع  $(R)_L$  برای هادی چپ (راست) تر حسب ماتریس خود انرژی تبدیل یافته مربوطه چنین است  $\tilde{\Gamma}_{L(R)} = - \text{TIm} \tilde{\sigma}_{L(R)}.$  (۷) بنابراین می توان به کمک رابطهٔ (۶) به بررسی رسانش الکترونی نانوساختار مورد نظر در حضور ناخالصیهای الکتریکی زیرداخت که در بخش بعدی به این موضوع می پردازیم.

### ۳. نتايج و بحث

در اینجا به عنوان یک مثال به ارائه محاسبات عددی برای رسانش الکتریکی یک نانونوار با ساختار مربعی به عرض ۴ اتم و طول بینهایت که قسمتی از آن شامل ۱۶ اتم، شامل چهار ناخالصی الکتریکی است، میپردازیم. مطابق با شکل ۲، قسمت ۱۶ اتمی از نانوساختار مورد نظر که شامل چهار یاختهٔ چهار اتمی است، به عنوان سامانهٔ مرکزی شناخته شده که از طرفین با پیوندهایی به عنوان اتصال، به قسمت های چپ و راست

نانونوار یا همان هادیها متصل شدهاند. هدف بررسی رسانش الکتریکی این سامانه در چند پیکربندی خاص با توزیع تعداد مشخصی (۴ عدد) ناخالصی در قسمت مرکزی است. در واقع با این کار میتوان ارتباط بین چگونگی توزیع ناخالصی ها با رسانش الکترونی سامانه را فهمید. انرژی جایگاهی دو تا از چهار ناخالصی را Eimp و دوتای دیگر را -Eimp نشان مىدهيم. ابتدا توزيع ناخالصىها را بصورت خطى يكى در راستای طول نانونوار (شکلهای ۲ (الف) و ۲ (ب))، یکی در راستای قطر مرکزی (شکل ۲ (ج)) و دیگری در راستای عرض نانونوار (شکل ۲ (د)) در نظر می گیریم. شکلهای ۳ (الف) و ۳ (ب) ضریب عبور الکترونی چهار پیکربندی شکل ۲ را بر حسب انرژی الکترون به ترتیب برای ε<sub>imp</sub> = ۱ eV و نشان میدهند. برای مقایسه، در شکل ۳ (الف) نمودار ضریب عبور الكتروني سامانهٔ ايدهآل كه به شكل پلهاي است، رسم شده است. این نمودار بر این واقعیت تأکید میکند کے رسانش کے سامانه از مجموع سهمهای چهار کانال رسانشی حاصل میشود. همان طور که دیده میشود نوار انرژی این کانالها با هم دیگر همپوشانی داشته و ضریب عبور را به مقدار چهار نیـز رسـانده است. با وارد کردن ناخالصیها نمودار از حالت پلهای خارج شده و رسانش الکترونی کـاهش مـییابـد. مطـابق بـا شـکل ۳



**شکل ۳**. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) نمودار ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی برای چهار مورد متفاوت از توزیع ناخالصیهای الکتریکی در شکل ۲. برای انرژی جایگاهی ناخالصیهای الکتریکی (الف) Lev و (ب) rev±.

اینجا به آن اشاره کرد این است که تغییرات رسانش در نیمهٔ راست بیشتر از نیمهٔ چپ است. این امر به دلیل انتخاب ترتیب قرار گرفتن بارهای مثبت و منفی است. اگر جای مثبت و منفی عوض شود، تغییرات در قسمت نیمه چپ بیشتر خواهد بود. لازم به ذکر است که بررسیهای قبلی ما نشان میدهد که برای یک تک ناخالصی با بار مثبت، تغییر اصلی در قسمت چپ رخ خواهد داد و برعکس. با این حال موضوع برای چند ناخالصی به این سادگی نیست و این که تغییر اصلی در سمت چپ باشد یا راست، توسط چگالی حالتهای سامانه مرکزی در حضور ناخالصی تعیین میشود.

لازم به ذکر است در مواردی که اربیتالهای s گونه به عنوان توابع پایه اتمی برای به دست آوردن پارامترهای تنگابست استفاده میشود، به ازای هر اتم یک الکترون شبه آزاد در سامانه وجود دارد. با این فرض سامانه خاصیت فلزی خواهد داشت و (الف)، برای توزیع های نشان داده شده در شکل های ۲ (الف) و ۲ (ب)، نمودارهای ضریب عبور الکترونی نسبت به مرکز نوار انرژی نامتقارن هستند در حالی که برای موارد نشان داده شده در شکل های ۲ (ج) و ۲ (د) منحنی های رسانش تقارن دارند. این بدان معنی است که برای ناخالصی های با انرژی های جایگاهی یک در میان مثبت و منفی، اگر در راستای طول نانونوار توزیع شده باشند، نمودار رسانش نسبت به انرژی حول انرژی جایگاهی اتمهای میزبان (در اینجا صفر) نامتقارن می شود. دره هایی در مرزهای همپوشانی کانال ها در منحنی رسانش دیده می شود. دلیل این امر از تداخل های ویرانگر توابع موج الکترونی از مسیرهای مختلف فیزیکی است که از وجود ناخالصی (ها) به وجود می آیند. لازم به ذکر است این اثر در یک زنجیره بدون شاخه و شامل ناخالصی دیده نمی شود که علت آن وجود فقط و فقط یک مسیر برای الکترون در آن است. نکتهٔ قابل تأمل دیگری که می توان در



شکل ۴. حضور چهار قطبی در جایگاههای مختلف از سامانهٔ مرکزی.

مطابق شکل ۳ (ب)، وقتی انرژی جایگاهی ناخالصیهای الکتریکی t eV است، برای پیکربندی های شکل t (الف) و t (ب)، رسانش الکترونی در مرکز نوار انرژی نسبت به حالتی که انرژی ناخالصی ها teV باشد (شکل ۳ (ب))، به مقدار ناچیزی کاهش می یابد. نتیجهٔ دیگری که شکل ۳ به ما می دهد، این است که ضریب عبور موردهای نشان داده شده در شکل های ۲ (الف) و ۲ (ب) در اکثر انرژیها نسبت به موارد شکل های ۲ (ج) و ۲ (د) برای وقتی که مقدار <sub>Eimp</sub> زیاد است، مقدار بیشتری دارند. بنابراین افزایش انرژی ناخالصی های الکتریکی تأثیر به سزایی بر روی رسانش الکترونی این پیکربندیها دارد. به گونهای که رسانش الکترونی سامانه وقتی که چیـنش ناخالصـیهـا در راسـتای طـول نانونوار است، نسبت به عرض آن، تأثیر کمتری می پذیرد. دلیل این امر پراکندگی کمتر تابع موج الکترونی برای چینش طولی نسبت به چینش عرضی است. تأثیرپذیری رسانش از توزیع ناخالصیها در عرض نسبت به طول آنقدر زیاد است که دیده می شود برای مورد ، پیکربندی شکل ۲ (ج) کمترین مقدار رسانش را  $\mathcal{E}_{imp} = \pm r \text{ eV}$ در انرژی فرمی اختیار میکند در حالی که برای مورد ، پیکربندی شکل ۲ (د) کمترین مقدار را داراست.  $\mathcal{E}_{\mathrm{imp}} = \pm 1 \, \mathrm{eV}$ حال با توجه به شکل ۴، مواردی را بررسی میکنیم که چهار ناخالصی الکتریکی با چینش یک در میان (مانند یک چهارقطبی) در مرکـز، گوشـه و يـا لبـههـاي سـامانهٔ مرکـزي قـرار گرفتـه

ترازهای انرژی تا انرژی صفر (انرژی فرمی) پر خواهند شد. با توجه به این نکته در ادامه، بحث خود را بیشتر معطوف بـه رفتـار رسانندگی در انرژی صفر خواهیم کرد. با نگاهی دقیقتر به مقـدار رسانش در انرژی صفر، متوجه خواهیم شـد کـه ایـن پـارامتر بـا جابهجا شدن اتمها از روی لبه به داخل نانونوار (از شکل ۲ (الف) به ۲ (ب))، افزایش می یابد. مشابه این امر برای موردهای شکل ۲ (ج) و ۲ (د) نیز برقرار است. یعنی هر چـه ناخالصـیهـا به سمت مرکز نانونوار بروند، رسانندگی در انـرژی فرمـی بهتـر میشود. از آنجایی که رسانش در این انرژی با توجـه بـه نمـودار مربوط به مورد ایدهآل از سهمهای هر چهار کانال ایجاد می شود، بنابراین می توان گفت که رسانش این کانالها در انرژی فرمی به انرژی جایگاهی اتمهای سطحی (لبهای) سامانهٔ مرکزی حساسیت داشته و با قرار گرفتن ناخالصی در لبه مقدارشان کاهش می یابـد. برای پیکربندی (ج) در شکل ۲، مطابق با نمودار شکل ۳ (الـف)، رسانش الکترونی سامانه در مرکز نوار انرژی به بیشترین مقدار خود میرسد. چون توزیع ناخالصیها در این مورد باعث کاهش پراکندگی الکترون،ها و افزایش همپوشانی کانال،های رسانشی حول انرژی صفر، نسبت به موردهای دیگر میشود. همچنین دیده می شود که در انرژی صفر، پیکربندی شکل ۲ (د)، نسبت به سه توزیع دیگر نمایش داده شده در شکل ۲، منجر به کمترین مقدار رسانش در نانونوار میشود.



**شکل ۵**. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) نمودار ضریب عبور الکترونـی بر حسب انرژی برای سه پیکربندی نشان داده شده در شکل ۴، وقتی که انرژی جایگاهی ناخالصیهای الکتریکی ۱eV± است.

باشند. شکل ۵ ضریب عبور الکترونی را برای موارد (الف) تا (ج) در شکل ۴، برای وقتی که انرژی جایگاهی ناخالصیها Yelt است، نشان میدهد. دیده میشود که رسانش الکتریکی در انرژی صفر برای موردی که چهار قطبی در گوشه سامانه مرکزی قرار دارد (شکل ۴ (الف))، نسبت به موردی که ناخالصیها در مرکز قرار گرفتهاند (شکل ۴ (ب))، مقدار بیشتری دارد. همچنین برای موردی که در آن ناخالصیها در چهارگوشه سامانه قرار دارد (شکل ۴ (ج))، مقدار رسانش در انرژی فرمی بیشترین مقدار را اختیار میکند.

به عنوان نمونه، در شکل ۶، نمودار مجموع چگالی حالتهای موضعی روی جایگاههای شامل ناخالصی در پیکربندیهای نشان داده شده در شکل ۲ برای وقتی که انرژی جایگاهی ناخالصیها Ve 1± است، رسم شده است. همان طور که میدانیم نمودار چگالی حالتهای یک سامانهٔ ایدهآل از مجموع نمودارهای U شکل که از مدهای رسانش نشأت می گیرد، به دست می آید. از اینرو در شکل ۶، در بیشتر نمودارها شکل U بین قلهها مشاهده میشود و در بعضی موارد این شکل بین پلههای رسانش حفظ نمی شود. به طور کلی می توان گفت که وقتی انرژی جایگاهی ناخالصیها با انرژی جایگاهی سایر اتمهای میزبان متفاوت است، حالتهای الکترونی روی جایگاههای شامل ناخالصی از حالت ایدهآل فاصله می گیرد. به طور مثال در نمودار مربوط به شکل ۲



**شکل ۶** (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) مجموع چگالی حالتهای موضعی روی جایگاههای شامل ناخالصی بر حسب انرژی بـرای پیکربنـدیهـای نشان داده شده در شکل ۲ که در واحد اختیاری ترسیم شده است.

(ج)، حالتهای انرژی در انرژیهای بالاتر کمتر از حالتها در انرژیهای پایینتر است و یا در نمودار مربوط به شکل ۲ (الف) تقریباً این مورد برعکس است. در واقع وجود ناخالصیها دلیل انحراف چگالی حالتها از حالت ایدهآل است که منجر به افزایش پراکندگی الکترون ورودی می شود.

## ۴. نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین و در رهیافت تنگابست به بررسی تحلیلی رسانش الکتریکی یک نانونوار با ساختار مربعی در حضور چند ناخالصی الکتریکی پرداختیم. ابتدا برای یک مورد نانونوار به عرض چهار اتم، توزیع ناخالصیها (چهار عدد) را در سامانه به صورت خطی در طول، عرض و یا قطر سامانه در نظر گرفتیم و نشان دادیم که در مقادیر بالای انرژی جایگاهی ناخالصیها، رسانش الکترونی در انرژی فرمی سامانه، برای موردی که توزیع در طول نانونوار باشد، بهتر از سایر توزیعها است. همچنین مواردی که در آنها یکی در مرکز، یکی در گوشه و دیگری با حداکثر فاصله از یکدیگر بررسی شد. نتایج مربوط به رسانش این موارد نشان داد مورد آخر بهترین رسانش را در انرژی صفر از خود نشان میدهد. همچنین حضور ناخالصی الکتریکی باعث میشود که

مقدار چگالی حالتهای کل در اکثر انرژیهای الکترون ورودی، از مقدار ایـدهآل خـود دور شـده و باعـث افـزایش پراکنـدگی

مراجع

- 8. A Shabaev, A L Efros, and A L Efros *Nano Lett.***13** (2013) 5454.
- 9. A Sahu et al., Nano Lett. 12 (2012) 2587.
- 10. M Mardaani and H Rabani, Superlattices and Microstructures 59 (2013) 155.
- 11. M Mardaani and H Mardaani, Physica E 33 (2006) 147.

- 12. M Mardaani, H Rabani, and F Aghababaei, *Iranian Journal of Physics Research* **13**, 3 (2013) 303.
- 13. R Landauer, IBM J. Res. Dev. 1 (1957) 223.
- 14. M Mardaani and K Esfarjani, Physica E 25 (2004) 119.
- 15. S Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems", Cambridge University Press, Cambridge (1997).

- 1. V I Klimov, "Semiconductor and Metal Nanocrystals Synthesis and Electronic and Optical Properties", CRC Press (2003).
- H Fan, A Wright, J Gabaldon, A Rodriguez, C J Brinke, and Y B Jiang, *Adv. Funct. Mater* 16 (2006) 891.
- S Coh, S G Louie, and M L Cohen, *Phys. Rev.* B 88 (2013) 045424.
- M V Kovalenko et al., American Chemical Society Nano 9, 2 (2015) 1012.
- 5. M G Panthani and B A Korgel, Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng. 3 (2012) 287.
- T Chen, K V Reich, N J Kramer, H F U R Kortshagen, and B I Shklovskii, *Nature Materials* 15 (2016) 299.
- 7. I Kriegel and F Scotognella *Thin Solid Films* **612** (2016) 327.