

اثر برهمکنش الکترون-فونون بر ضریب عبور فونونی یک نانوساختار اتمی

تقی اکبری چالستری، حسن ربانی، و محمد مردانی

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

پست الکترونیکی: rabani-h@sku.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۲/۰۳/۲۴؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۲/۰۴/۳۱)

چکیده:

در این مقاله، ضریب عبور فونونی یک زنجیره اتمی بی‌نهایت که در قسمت کوچکی از آن برهمکنش الکترون-فونون وجود دارد، مورد بررسی قرار می‌گیرد. از دیدگاه الکترونی، سامانه در رهیافت تنگابست و در تقریب نزدیک‌ترین همسایه و برای فونون‌ها در قسمت برهمکنشی تا همسایه دوم در تقریب هماهنگ مد نظر است. در مدل پیشنهادی، فرض می‌شود که تغییرات ابر الکترونی مربوط به اربیتال‌های اتمی جایگزیده، باعث تغییر در ثابت نیروی بین اتم‌های مجاور قسمت برهمکنشی زنجیره می‌شود که به نوبه خود باعث تغییر عناصر ماتریس دینامیکی سامانه شده و در نتیجه ضریب عبور فونونی دستخوش تغییر می‌شود. بنابراین فرمول‌بندی حاضر، ضریب عبور فونونی را به صورت تابعی از پارامترهای الکترونی و فونونی سامانه و همچنین قدرت برهمکنش الکترون-فونون ارائه می‌کند. در پایان سعی شده است که با ارائه برخی نتایج عددی، به فیزیک مسئله نیز پرداخته شود.

واژه‌های کلیدی: ترابرد فونونی، تابع گرین، تقریب هماهنگ، برهمکنش الکترون-فونون، تنگابست

۱. مقدمه

ترابرد حامل‌ها نیز تأثیر می‌گذارد. معمولاً خواص فونونی مواد از قبیل چگالی مدهای فونونی، ضریب ترابرد فونونی، ویژگی‌های گرمایی مثل هدایت گرمایی، آثار ترموالکتریک، انرژی درونی و آنتروپی به کمک روش‌هایی مانند ماتریس انتقال و معادله ترابرد بولتزمن بررسی می‌شوند [۵-۸]. از بین روش‌های نظری بعضی روش‌ها مانند معادله نیمه-کلاسیکی بولتزمن، توصیف مناسبی از دینامیک شبکه و حامل‌ها در مقیاس اتمی ارائه نمی‌دهند؛ در صورتی که رهیافت کوانتومی کوبو نتایج نسبتاً خوبی را ارائه می‌دهد. با این حال روش کوبو بیشتر برای پاسخ خطی ارائه شده و بهتر است جهت بررسی اثر برهمکنش الکترون-فونون بر ترابرد حامل‌ها، روش دیگری مانند روش تابع گرین را به کار بست [۱]. روش تابع گرین به عنوان یک روش قدرتمند برای مطالعه اثر برهمکنش الکترون-فونون در ترابرد الکترونی در یک سد کوانتومی تونل‌زنی [۹]، یک سد

برهمکنش الکترون-فونون منشأ بسیاری از پدیده‌های مهم فیزیکی مانند ابرسانایی، گذار فاز ساختاری و ناپایداری شبکه است و بر بسیاری از خواص فیزیکی مانند الکتریکی، نورشناختی، مغناطیسی و ترموالکتریک اثر بسزایی دارد [۱]. از طرفی با پیشرفت‌های شگرف در حوزه فناوری نانو و الکترونیک مولکولی در جهت کوچک‌سازی و بهینه‌سازی قطعات الکتریکی، بحث هدایت گرمایی و الکتریکی در نانوساختارها جایگاه خاصی پیدا کرده است [۲ و ۳]. در بسیاری از کارهای نظری، ترابردهای الکترونی و فونونی در نانوساختارها در حضور عوامل مختلفی مورد مطالعه قرار گرفته است [۴]. بدیهی است که در آنها، برهمکنش‌هایی بین حامل‌های انرژی و ارتعاشات شبکه وجود دارد که طبیعتاً بر

$\mathcal{E}_{L(R)}$ و $\beta_{L(R)}$ انتخاب می‌شوند. برای این که بتوانیم ترابرد فونونی را در حضور برهمکنش الکترون-فونون بررسی کنیم، ابتدا باید تابع گرین الکترونی سامانه مرکزی را در حضور هادی‌ها از رابطه زیر محاسبه کنیم [۱]:

$$(\mathcal{E} - \mathcal{E}_W - \sum_L^e \delta_{L,p} - \sum_R^e \delta_{N,p})(G_e^{-1})_{p,p} - \beta_W (G_e^{-1})_{p,p+1} - \beta_W (G_e^{-1})_{p,p-1} = 1,$$

که در آن \mathcal{E} انرژی الکترون، $\delta_{p,q}$ نشان دهنده دلتای کرونکر، $(G_e^{-1})_{p,q}$ درایه واقع در سطر p ام و ستون q ام ماتریس وارون تابع گرین الکترونی و $\sum_{L(R)}^e$ خود انرژی الکترونی سامانه مرکزی به دلیل وجود هادی چپ (راست) و به شکل زیر است [۱۱]:

$$\sum_{L(R)}^e = \frac{\beta_{WL(R)}^\dagger}{\beta_{L(R)}^\dagger} (\mathcal{E} - \mathcal{E}_L - \sqrt{\beta_{L(R)}^\dagger (\mathcal{E} - \mathcal{E}_L)^\dagger}). \quad (1)$$

همچنین می‌توان سامانه را معادل با یک زنجیره جرم-فنر دانست که اتم‌هایی با جرم m توسط فنرهایی با ثابت $C_{p,q}$ به هم متصل شده‌اند. در مورد هادی‌های (در اینجا فونونی) چپ (راست) و اتصال‌ها، ثابت فنرها به ترتیب $C_{L(R)}$ و $C_{WL(R)}$ علامت‌گذاری می‌شوند. از معادله حرکت زیر (تا تقریب همسایه دوم) برای قسمت برهمکنشی شروع می‌کنیم:

$$m\ddot{u}_p + \sum_{q=p-2}^{p+2} C_{p,q}(u_p - u_q) = 0, \quad (2)$$

که در آن p از اولین تا N امین اتم را در زنجیره مرکزی شمارش می‌کند. در جمله دوم، q برای مقادیر مرزی ۱ و N به ترتیب مقادیر کوچک‌تر از یک و بزرگ‌تر از N را اختیار نمی‌کند.

u_p جابه‌جایی اتم p از موقعیت ترازمندی‌اش بوده و همچنین مشتق دوم آن نسبت به زمان با \ddot{u}_p نمایش داده شده است. اگر فرض شود که نوع برهمکنش الکترون-فونون محلی باشد، آنگاه خواهیم داشت $C_{p,p\pm 1} = C_p$ و $C_{p,p\pm 2} = C'_p$ بنابراین با استفاده از $u_p = \tilde{u}_p e^{-i\omega t}$ برای تفکیک بخش زمانی و مکانی دامنه جابه‌جایی داریم

$$-m\omega^2 \tilde{u}_p + C_p (\tilde{u}_p - \tilde{u}_{p+1} - \tilde{u}_{p-1}) + C'_p (\tilde{u}_p - \tilde{u}_{p+2} - \tilde{u}_{p-2}) = 0, \quad (3)$$

تونل‌زنی-تشدیدی [۱۰]، یک زنجیره اتمی [۱۱] و همچنین ترازنیستور تک مولکولی به کار گرفته شده است [۱۲]. این که اثر برهمکنش الکترون-فونون چه نقشی در ترابرد فونونی بازی می‌کند نیز از نگاه محققان دور نمانده است [۱۳ و ۱۴]، اما نسبت به موردی که ترابرد الکترونی مد نظر است [۱۱] بسیار کمتر کار شده است.

در این مقاله، با استفاده از روش تابع گرین به مطالعه ضریب عبور فونونی یک زنجیره اتمی نامتناهی که در قسمت کوچکی از آن برهمکنش الکترون-فونون وجود دارد، پرداخته‌ایم. هامیلتونی‌های تنگابست الکترونی و هماهنگ فونونی زنجیره را به ترتیب تا تقریب همسایه اول و دوم فرض می‌کنیم. ایده اصلی چنین است که تغییرات ابر الکترونی اتم متأثر از برهمکنش الکترون-فونون در تقریب اول یک نیروی خطی بین اتم‌های مجاور ایجاد می‌کند که به نوبه خود ماتریس دینامیکی زنجیره را تغییر می‌دهد. معمولاً مدل زنجیره جرم-فنر را می‌توان برای بلورها نیز به کار برد. یعنی می‌توان صفحات موازی را به عنوان جرم‌ها و نیروهای بین آنها را با نیروی هوک تقریب زد [۱۵] و یا این که برای برخی بلورها با ساختارهای شبکه‌ای ساده می‌توان تبدیل متعامدی پیدا کرد که هامیلتونی فونونی آن را به مجموعه‌ای از هامیلتونی‌های مربوط به زنجیره‌های جرم-فنر تبدیل کند [۵].

در بخش بعد، با ارائه چارچوب نظری ساز و کار محاسبه ضریب عبور فونونی زنجیره را در حضور برهمکنش الکترون-فونون فرمول‌بندی می‌کنیم. سپس در بخش بعد از آن، برای زنجیره‌ای که ده اتم آن برهمکنش را احساس می‌کنند، نتایج عددی خود را می‌آوریم. بخش آخر را نیز به جمع‌بندی نتایج اختصاص داده‌ایم.

۲. فرمول‌بندی

ساختار الکترونی یک زنجیره اتمی شامل N اتم یکسان را در تقریب تنگابست مطابق شکل ۱ در نظر می‌گیریم. این ساختار شامل انرژی‌های جایگاهی و پرش الکترونی بین اتم‌های متوالی سامانه مرکزی به ترتیب \mathcal{E}_W و β_W است. انرژی پرش الکترون در اتصال‌ها را $\beta_{WL(R)}$ در نظر می‌گیریم. همچنین در هادی الکترونی چپ (راست)، مقادیر پارامترهای تنگابست به صورت

که در آن λ ضریب همپوشانی اربیتال‌های الکترونی بوده که مقدار آن از مرتبه $e^{\gamma} / (\kappa \epsilon_0 A a C_W)$ است. در اینجا e بار الکترون، ϵ_0 ثابت گذردهی خلأ، κ ثابت دی‌الکتریک محیط، A سطح مقطع اتمی و a ثابت شبکه است. به طور مثال مقدار λ برای موردی که $\kappa \sim 10$ ، $a \sim 1 \text{ nm}$ و $C_W = m\omega_0^2 \sim 10^{-26} \times 10^{26} \sim 1 \text{ N/m}$ [۱] برای سطح مقطع $A \sim 1 \text{ nm}^2$ عبارت است از: $\lambda \sim 0.1$. اگر مقادیر دیگری را برای سطح مقطع و ثابت دی‌الکتریک قرار دهیم مقدار آن از چند صدم تا یک مرتبه بزرگی تغییر می‌کند. برای به‌دست آوردن ضریب عبور فونونی نیاز به محاسبه عناصر ماتریس تابع گرین فونونی داریم که می‌بایست آنها را با نوشتن معادلات دینامیکی زنجیره مرکزی به‌دست آورد. در حضور برهمکنش الکترون-فونون (جملات شامل f_p در جملات شامل $\sigma_{L(R)}^{ph}$)، معادله p که بدون بعد شده، چنین است [۱۵ و ۱۶]:

$$\begin{aligned} & \left((1 + 2f_p) \left(1 + \frac{C'_W}{C_W} \right) - \frac{\omega_0^{\gamma}}{\omega_0^{\gamma}} - \sigma_L^{ph} \delta_{\gamma,p} - \sigma_R^{ph} \delta_{N,p} \right) \\ & \times (G_{ph}^{-1})_{p,p} - (1 + f_p) \left((G_{ph}^{-1})_{p,p+1} + (G_{ph}^{-1})_{p,p-1} \right) \quad (۶) \\ & - \frac{C'_W}{C_W} (1 + f_p) \left((G_{ph}^{-1})_{p,p+2} + (G_{ph}^{-1})_{p,p-2} \right) = 1, \end{aligned}$$

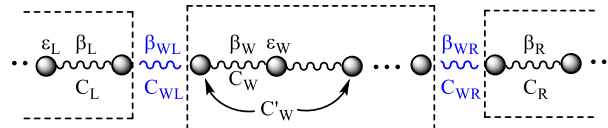
که در آن از $\omega_0 = \sqrt{C_W/m}$ استفاده شده است و $(G_{ph}^{-1})_{p,q}$ درایه واقع در سطر p ام و ستون q ام ماتریس وارون تابع گرین فونونی و $\sigma_{L(R)}^{ph}$ خود انرژی فونونی و بدون بعد سامانه مرکزی به دلیل وجود هادی چپ (راست) بوده و برابر است با [۱۶]:

$$\begin{aligned} \sigma_{L(R)}^{ph} = & \frac{C_{WL(R)}}{C_{L(R)} C_W} \left(1 - \frac{\omega_0^{\gamma}}{2\omega_0^{\gamma}} \frac{C_W}{C_{L(R)}} \right. \\ & \left. - \frac{\omega_0}{\omega_0} \sqrt{\frac{C_W}{C_{L(R)}}} \sqrt{1 - \frac{\omega_0^{\gamma}}{4\omega_0^{\gamma}} \frac{C_W}{C_{L(R)}}} \right), \quad (۷) \end{aligned}$$

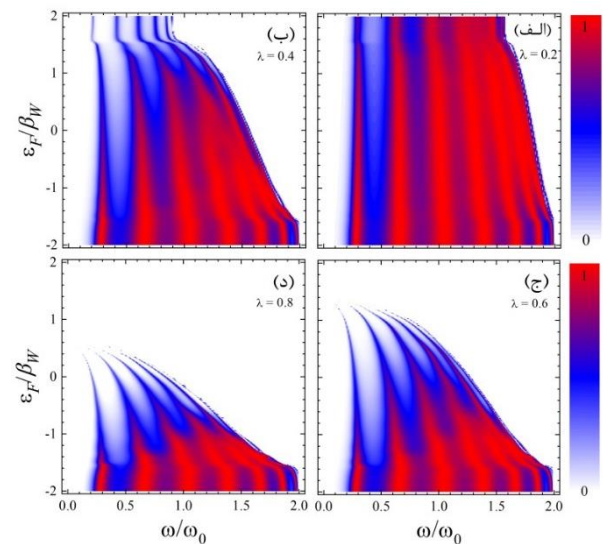
بنابراین ضریب عبور فونونی از رابطه

$$T_{ph}(\omega, \epsilon) = 4 \text{Im} \sigma_L^{ph} \text{Im} \sigma_R^{ph} |(G_{ph})_{1,N}|^2, \quad (۸)$$

محاسبه می‌شود [۱۶] که در آن $(G_{ph})_{1,N}$ درایه واقع در سطر اول و ستون N ام ماتریس بدون بعد تابع گرین فونونی است.



شکل ۱. طرحواره یک زنجیر جرم-فنر نامتناهی که در قسمت کوچکی در میان آن برهمکنش الکترون-فونون وجود دارد. در این شکل، پارامترهای تنگابست الکترونی و فونونی قسمت‌های مرکزی، هادی‌ها و اتصال‌ها نشان داده شده‌اند.



شکل ۲. ضریب عبور فونونی یک زنجیره ده اتمی به صورت تابعی از بسامد فونونی و انرژی فرمی سامانه برای چند مقدار متفاوت ضریب قدرت برهمکنش الکترون-فونون.

که در آن

$$C_p = C_W(1 + f_p(\epsilon)), \quad C'_p = C'_W(1 + f_p(\epsilon)), \quad (۹)$$

که C_W و C'_W به ترتیب ثابت فنر برای پیوند بین جرم‌های همسایه اول و دوم، در غیاب برهمکنش الکترون-فونون بوده و $f_p C_W$ و $f_p C'_W$ به ترتیب مقدار تغییر ثابت فنر بین جرم‌های p ام و همسایه‌های اول و دوم به دلیل برهمکنش جرم p ام با نیروی الکترونی ناشی از ابر الکترونی است. با فرض این که ثابت فنر بین جرم‌ها به صورت نمایی با فاصله آنها کاهش یابد، می‌توان گفت که: $C'_W = C_W / \exp(1) \approx 0.37 C_W$ ، در تقریب اول و در دمای صفر با استفاده از قانون گوس می‌توان f_p را به صورت زیر به عنصر (p, p) ام ماتریس تابع گرین الکترونی ربط داد:

$$f_p = \frac{2\lambda}{\pi} \int_{\epsilon_W - \beta_W}^{\epsilon} d\epsilon \text{Im}(G_e)_{p,p}, \quad (۱۰)$$

فونونی کمتر خواهد شد. همچنین تعداد قله‌های ضریب عبور فونونی با افزایش مقدار ε_F کاهش می‌یابد. علت این پدیده را می‌توان به تغییر پنجره بسامد فونونی سامانه مرکزی با توجه به تغییر مقدار ثابت نیروی بین اتم‌ها (رابطه (۵)) مربوط دانست. به همین دلیل بدیهی است که افزایش مقدار λ نیز باعث کاهش هرچه سریع‌تر ضریب عبور فونونی در انرژی‌های فرمی کمتری می‌شود. نکته دیگر، نزدیک شدن قله‌های منحنی و متمایل شدنشان به سمت بسامدهای پایین است. بدین صورت که ساختار فونونی سامانه مرکزی تغییر پیدا کرده و شبه بسامدهای فونونی در پنجره انرژی سامانه مرکزی به سمت بسامدهای پایین‌تر جابه‌جا شده و به یکدیگر نزدیک شده‌اند. کم شدن پهنای قله‌ها نیز بدین معنا است که شبه بسامدهای فونونی به بسامدهای ویژه سامانه مرکزی نزدیک می‌شوند. باریک شدن پنجره عبور فونون در مقادیر بالای انرژی فرمی بسته به مقدار قدرت برهمکنش الکترون-فونون، کاربرد فیلتر فونونی در بسامدهای بالا و پایین را پیشنهاد می‌دهد.

در شکل ۳، ضریب عبور فونونی زنجیره به صورت تابعی از بسامد فونونی و انرژی فرمی سامانه، برای چند مقدار متفاوت ثابت فنر اتصال‌ها و برای وقتی که مقدار ضریب قدرت برهمکنش الکترون-فونون $\omega/4$ است، نمایش داده شده است. مشاهده می‌شود که در اینجا، جایگاه قله‌ها به مقدار C_{WL} بستگی ندارد؛ ولی پهنای آنها به شدت تحت تأثیر این کمیت است. در واقع طبق رابطه (۸)، افزایش مقدار ثابت نیرو در اتصال‌ها، قسمت موهومی خودانرژی را که تعیین کننده و متناسب با پهنای قله‌ها است، افزایش می‌دهد. اگر به نمودار مربوط به $C_{WL} = \omega/2 C_L$ نگاه کنیم تفکیک خوبی بین قله‌های ضریب عبور فونونی مشاهده می‌کنیم. در نمودارهای شکل ۲ و یا مورد $C_{WL} = \omega/8 C_L$ در همین شکل، بین قله‌های واقع در بسامدهای بالا همپوشانی وجود دارد و کمتر قابل تفکیک است.

در بخش بعد با انجام محاسبات عددی اثر برهمکنش الکترون-فونون را بر روی خواص تراپردی فونونی یک زنجیره اتمی مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

۳. نتایج عددی

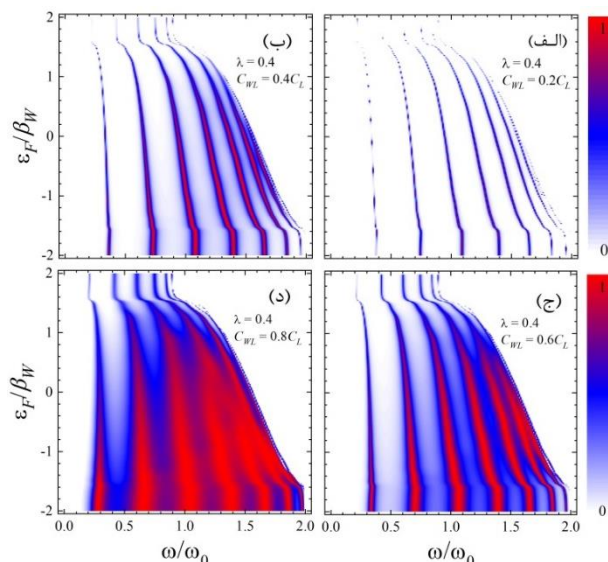
یک زنجیره نامتناهی از اتم‌های یکسان را در نظر بگیرید که در قسمتی از آن برهمکنش الکترون-فونون بر تراپرد فونونی زنجیره اثر بگذارد. در ابتدا طول این قسمت را که در تقریب هماهنگ، برهمکنش همسایه دوم نیز در آن در نظر گرفته می‌شود، $N=10$ فرض می‌کنیم. در بیشتر شکل‌های ارائه شده فرض می‌کنیم که: $\beta_{WL(R)} = \omega/8 \beta_W$ ، $\beta_{L(R)} = \beta_W$ ، $\varepsilon_{W(L,R)} = 0$ ، $C_{WL(R)} = \omega/8 C_L$ ، $C_{L(R)} = C_W$ و در مواردی که مقادیر بعضی پارامترها تغییر کند، مقدار آنها به وضوح مشخص می‌شود. همانطور که قبلاً هم اشاره شد مقدار C'_W نیز $\omega/37 C_W$ در نظر گرفته می‌شود. توجه داشته باشید که با توجه به مقادیر در نظر گرفته شده برای انرژی‌های جایگاهی و پرش الکترون در هادی‌ها، انرژی فرمی فقط می‌تواند مقداری در بازه $-2\beta_{L(R)}$ تا $2\beta_{L(R)}$ را اختیار کند. همچنین پنجره مجاز بسامد فونونی نیز بین صفر تا $2\omega\sqrt{C_L/C_W}$ است. ضریب عبور فونونی می‌تواند به صورت تابعی از انرژی فرمی سامانه، قدرت برهمکنش الکترون-فونون و بسامد فونون ورودی و مقدار ثابت فنرها بین همسایه‌های نزدیک، مورد بررسی قرار گیرد.

شکل ۲ ضریب عبور فونونی را برای سامانه‌ای که در بالا معرفی شد، به صورت تابعی از بسامد فونونی و انرژی فرمی سامانه برای چند مقدار متفاوت λ نشان می‌دهد. همانطور که دیده می‌شود تنها در مقادیر بالای قدرت برهمکنش و انرژی فرمی، ضریب عبور فونونی به صورت قابل توجهی تحت تأثیر قرار می‌گیرد. دلیل این امر را می‌توان چنین توضیح داد که افزایش مقادیر λ و ε_F موجب همپوشانی بیشتر ابر الکترونی بین همسایه‌ها و در نتیجه قوی‌تر شدن فنرها بین آنها می‌شود. در واقع هر چه اختلاف مقدار ثابت فنرها بین اتم‌ها در سامانه مرکزی و در هادی‌ها تفاوت بیشتری داشته باشد، پراکندگی فونونی بیشتر و در نتیجه ضریب عبور

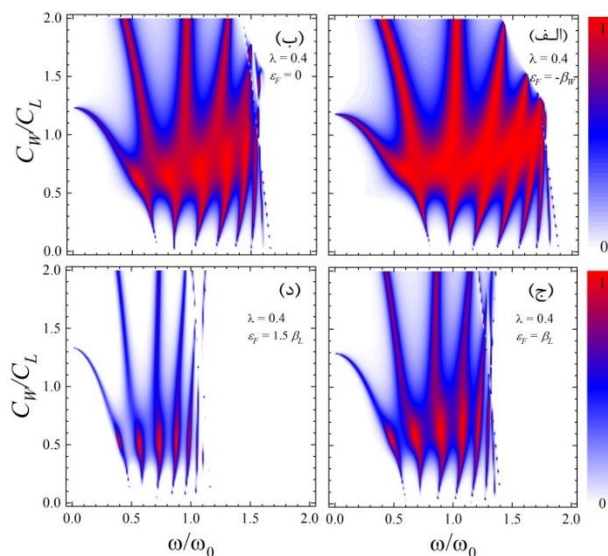
هادی‌ها در چند مقدار متفاوت انرژی فرمی، ترسیم شده است. در اینجا ضریب قدرت برهمکنش الکترون-فونون ثابت و برابر با مقدار $0/4$ اختیار شده است. مقدار پهنای پنجره عبوری برای فونون، بسته به مقدار ε_F با توجه به شکل‌های ۲ و ۳ قابل تشخیص است. بدیهی است که بیشترین احتمال عبور فونون برای موردی است که از نظر ساختار فونونی، فیزیک سامانه مرکزی با هادی‌ها جفت و جور است و هر چه از این تساوی دور شویم مقدار ضریب عبور فونونی کاهش می‌یابد. با این حال، این کاهش برای مقادیر $C_W < C_L$ بیشتر است. در واقع سازوکار عبور فونون در این مورد نسبت به مورد $C_W > C_L$ بیشتر تونل‌زنی است. نکته‌ای که در این نمودار می‌بایست توضیح داد، وجود قله‌های بزرگی است که نسبت به محور بسامد مشاهده می‌شوند که مقدار، پهنای و موقعیت آنها به نسبت C_W / C_L و مقدار λ بستگی دارد. این قله‌ها در نزدیکی ویژه-بسامدهای سامانه مرکزی رخ می‌دهند. بسته به مقادیر پارامترهای مسئله، پهنای و موقعیت دقیق آنها توسط ویژه-بسامدهای سامانه متصل یا همان شبه ویژه بسامدها تعیین می‌شود. با توجه به این که مقدار ضریب قدرت برهمکنش الکترون-فونون باعث تغییر ثابت نیروی پیوندهای ساختار مرکزی بر طبق روابط (۵) و (۶) می‌شود، بنابراین مقدار شبه-بسامدهای آن با تغییر این پارامتر تغییر می‌کند. همچنین مقدار C_W / C_L مستقیماً ماتریس دینامیکی سامانه مرکزی را تحت تأثیر قرار داده و این پارامتر نیز در تعیین مقادیر شبه-بسامدها نقش مهمی بازی می‌کند. پهنای قله‌ها توسط قسمت موهومی خودانرژی‌ها (رابطه (۸)) مشخص می‌شوند که بدیهی است با تغییر C_W / C_L می‌بایست تغییر پهنای قله‌ها را در نمودار شاهد باشیم.

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله، با رویکردی جدید در رهیافت تنگابست نزدیک-ترین همسایه و تقریب هماهنگ تا همسایه دوم، به برهمکنش الکترون-فونون در یک زنجیره اتمی پرداخته‌ایم. در این نگرش فرض می‌شود که تغییر ابر الکترونی یک اربیتال اتمی جایگزیده، نیرویی متناسب با فاصله براتم وارد کرده و باعث می‌شود که



شکل ۳. ضریب عبور فونونی یک زنجیره ده اتمی به صورت تابعی از بسامد فونونی و انرژی فرمی سامانه برای چند مقدار متفاوت ثابت فنر اتصال‌ها. در اینجا ضریب قدرت برهمکنش الکترون-فونون $0/4$ اختیار شده است.



شکل ۴. ضریب عبور فونونی یک زنجیره ده اتمی به صورت تابعی از بسامد فونونی و نسبت ثابت‌فنرهای بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها در سامانه مرکزی و هادی‌ها برای چند مقدار متفاوت انرژی فرمی سامانه. در اینجا ضریب قدرت برهمکنش الکترون-فونون $0/4$ اختیار شده است.

در شکل ۴ سعی شده است اثر متفاوت بودن ثابت‌های نیرو بین جرم‌ها در زنجیره مرکزی با هادی‌ها در حضور برهمکنش الکترون-فونون مورد بررسی قرار گیرد. بدین منظور در این شکل، ضریب عبور فونونی به صورت تابعی از بسامد فونونی و نسبت ثابت‌های نیروی بین جرم‌ها در زنجیره مرکزی به

ثابت نیروی بین هر اتم با همسایه‌های اول و دومش تغییر کند که این تغییرات را به انرژی فرمی سامانه مربوط کرده‌ایم. فرمول‌بندی را با نوشتن معادلات دینامیکی سامانه بر اساس روش تابع گرین ساخته‌ایم که رابطه‌ای برای محاسبه ضریب عبور فونونی را بر حسب پارامترهای الکترونی و فونونی و همچنین ضریب قدرت برهمکنش الکترون-فونون ارائه

می‌دهد. نتیجه مهمی که بر اساس محاسبات عددی به دست آمده نشان می‌دهد که افزایش قدرت الکترون-فونون و همچنین انرژی فرمی سامانه، پنجره بسامدی عبور فونونی را کوچک‌تر می‌کند. یعنی، در بسامدهای میانی، ضریب عبور فونونی قابل توجه است ولی در بسامدهای پایین و بالا به سمت صفر می‌رود.

مراجع

1. G Grosso and G P Parravicini, "Solid State Physic", Academic press (2000).
2. W Martienssen and H Warlimont, "Mesoscopic and Nanostructured Materials", Springer Handbook of Condensed Matter and Materials Data (2005).
3. J J Ramsden, "Nanotechnology. An Introduction", Elsevier Inc. (2011).
4. J T Lü, H Zhou, J W Jiang and J S Wang, *AIP Advances* **5** (2015) 053204.
5. M Mardaani, H Rabani and M Keshavarz, *Physica E* **44** (2012) 1342.
6. D H Santamore and M C Cross, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001) 115502.
7. A Balandin and J Nanosci. *Nanotech.* **5** (2005) 1015.
8. J Wang and J S Wang, *J. Appl. Phys.* **111** (2012) 044304.
9. C Caroli, R Combescot, P Nozieres, and D Saint-James, *J. Phys. C.* **4** (1971) 916.
10. N S Wingreen, K W Jacobsen, and J W Wilkins, *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 1396.
11. M Mardaani and H Rabani, *Phys. Status Solidi (b)* **251** (2014) 1001.
12. K Flensberg, *Phys. Rev. B* **68** (2003) 205323.
13. K P Bohnen, R Heid, H J Liu, and C T Chan, *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004) 245501.
14. G Sangiovanni, M Capone, and C Castellani and M Grilli, *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 026401.
15. L Ghaderipoor, M Mardaani, E Amoozhorban, and H Rabani, *Phys. Rev. E* **104** (2021) 034121.
16. M Mardaani and H Rabani, *Solid State Commun.* **151** (2011) 311.