

رابطه‌ای تحلیلی برای محاسبه رسانش الکترونی یک نانوسیم سه پایانه‌ای در رهیافت تنگابست

جمشیدی فارسانی، مرضیه؛ ربانی، حسن؛ مردانی، محمد

گروه فیزیک، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

چکیده

در این پژوهش با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت تنگابست، ترابرد الکترونی یک نانوسیم متصل به سه هادی فلزی نیمه‌بی‌نهایت یکسان به‌طور کاملاً تحلیلی بررسی شده است. در سامانه مورد نظر عبور الکترون را در دو مسیر متفاوت، یکی از هادی چپ به هادی راست و دیگری از هادی چپ به هادی بالا، به صورت تابعی از جایگاه اتصال هادی سوم در سامانه مرکزی بررسی می‌کنیم. نتایج نشان می‌دهد که رسانش الکترونی در مسیر از هادی چپ به هادی بالا در مقایسه با مسیر از هادی چپ به هادی راست بیشتر تحت تأثیر جایگاه اتصال هادی سوم قرار می‌گیرد. برای مسیر چپ به راست در انرژی صفر، رسانش مستقل از جایگاه اتصال هادی بالا به سامانه مرکزی است که در انرژی‌های دیگر اینگونه نیست. با توجه به این نتایج می‌توان ابزاری نانومتری پیشنهاد کرد که رسانش چپ به راست را توسط تغییر مکان اتصال هادی بالایی کنترل کرد.

کلمات کلیدی: نانوسیم، رسانش الکترونی، سه پایانه‌ای، تابع گرین

An Analytical Formula for Calculating of Electronic Conductance of a Three-terminal nanowire at the tight-binding approach

Jamshidi Farsani, Marzieh; Rabani, Hassan ; Mardaani, Mohammad

Department of Physics, Shahrekord University, Shahrekord

Abstract

In this research, the electronic transport of one nanowire attached to three identical semi-infinite metallic leads has been analytically considered by the use of Greene's function method within the tight-binding approach. In this system, we consider two directions of electronic transmission, one between left and top leads and the other between left and right leads, as a function of contact position of third lead in the center system. The results show that the electronic left-to-top conductance is more affected by contact position of third lead with compared to the left-to-right one. At zero energy, the left-right conductance is independent of position of top lead contact. While for other energies it is not true. Based on these results, the nano-device for controlling of left-right conductance by changing the position of top lead contact can be suggested.

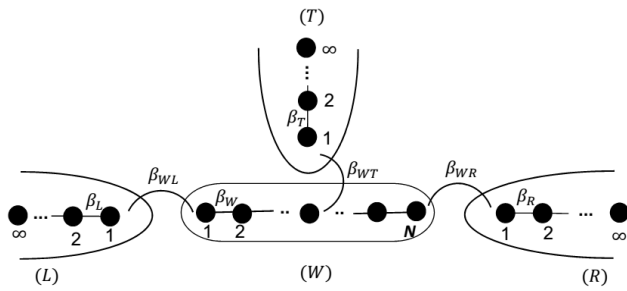
Key words: Nanowire, Electronic conductance, Three-terminal, Greenes function

PACS No. 73.21

به کار برد. همچنین امروزه گرایش مطالعات در زمینه‌های مختلف به سمت سامانه‌های چندپایانه‌ای است چرا که این سامانه‌ها می‌توانند به‌عنوان ترانزیستور استفاده شوند [۲]. پژوهشگران در سامانه‌های دو یا چندپایانه‌ای و نانوسیم‌ها روش‌های متفاوتی بر پایه روش تابع گرین و مدل تنگابست ارائه داده‌اند که می‌توان به مواردی از جمله قطعات گرافن دوپایانه‌ای [۳]، سامانه‌های دوپایانه‌ای شامل ناخالصی [۴]، پیوندگاه‌های ستاره‌ای سیم‌های

مقدمه

امروزه نانو ساختارها به‌عنوان سامانه‌های ایده‌آلی برای مطالعه ترابرد الکترونی شناخته شده‌اند [۱]؛ از این رو خواص الکترونیکی این دسته از مواد الهام‌بخش چالش‌های علمی جذابی در زمان حال و کاربردهای مفیدی در آینده است. نانوسیم‌های نیم‌رسانا نوع برجسته‌ای از نانو ساختارهای شبه یک‌بعدی هستند که می‌توان آنها را به‌عنوان بلوک‌های ساختاری برای طراحی قطعات نانو الکترونیک



شکل ۱: یک نانوسیم شامل N اتم متصل به سه هادی بی‌نهایت.

$$\sigma_{\alpha}(\varepsilon) = \frac{\beta_{\alpha W}^2}{\beta_W \beta_{\alpha}} \exp(i\theta_{\alpha}(\varepsilon)), \quad \alpha = (L, T, R) \quad (3)$$

که در آن $\beta_{\alpha W}$ انرژی پرش بین اتم‌های هادی‌ها و سامانه مرکزی و β_{α} انرژی پرش بین اتم‌های هادی‌ها است. همچنین $\theta_{\alpha}(\varepsilon)$ عبارت است از

$$\theta_{\alpha}(\varepsilon) = \cos^{-1}\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_{\alpha}}{2\beta_{\alpha}}\right), \quad (4)$$

برای محاسبه ضریب عبور الکترونی در حالتی که الکترون از هادی چپ وارد سامانه مرکزی شده و از هادی بالا یا راست خارج می‌شود، از رابطه زیر استفاده می‌کنیم [۱۰]

$$T_{LT(R)}(\varepsilon) = 4 \text{Im} \sigma_L(\varepsilon) \text{Im} \sigma_{T(R)}(\varepsilon) |G_{1,J(N)}|^2. \quad (5)$$

در رابطه بالا J شماره جایگاهی از سامانه مرکزی است که هادی سوم به آن متصل شده است. عناصر ماتریس تابع گرین از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند

$$G_{1,J}(\varepsilon) = \frac{\tilde{D}_{N-1}(\varepsilon; 0, \sigma_R)}{\tilde{D}_N^J(\varepsilon; \sigma_L, \sigma_R, \sigma_T)}, \quad (6)$$

$$G_{1,N}(\varepsilon) = \frac{1}{\tilde{D}_N^J(\varepsilon; \sigma_L, \sigma_R, \sigma_T)}, \quad (7)$$

برای به دست آوردن این رابطه‌ها ابتدا جمله خودانرژی در حضور هادی بالا را در یک جایگاه دلخواه از سامانه مرکزی وارد می‌کنیم، سپس برای وارون ماتریس تابع گرین در حضور هادی‌های چپ، راست و بالا از رابطه زیر استفاده می‌کنیم [۴]:

$$\begin{aligned} \tilde{D}_N^J(\varepsilon; \sigma_L, \sigma_R, \sigma_T) = & (2\xi_w - \sigma_T) \tilde{D}_{J-1}(\varepsilon; \sigma_L, 0) \tilde{D}_{N-J}(\varepsilon; 0, \sigma_R) \\ & - \tilde{D}_{J-2}(\varepsilon; \sigma_L, 0) \tilde{D}_{N-J}(\varepsilon; 0, \sigma_R) \\ & - \tilde{D}_{J-1}(\varepsilon; \sigma_L, 0) \tilde{D}_{N-J-1}(\varepsilon; 0, \sigma_R), \end{aligned}$$

مولکولی [۵]، نقطه کوانتومی سه‌پایانه‌ای [۶]، نانوسیم‌های دوپایانه‌ای [۷] و نانوسیم‌های سیلیکانی [۸] اشاره کرد.

در این پژوهش بر اساس نظریه لاندائور، که بیان می‌کند رسانش الکترونی متناسب با ضریب عبور الکترونی است، با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت تنگابست ترابرد الکترونی یک نانوسیم ساده را که به سه هادی چپ، راست و بالا متصل شده است، به صورت کاملاً تحلیلی بررسی می‌کنیم. گفتنی است که نتایج به دست آمده در این مقاله با نتایج مستخرج از روش عددی رسانش الکترونی نانوسیم سه‌پایانه‌ای مطابقت دارد [۹].

فرمول‌بندی

مطابق شکل ۱، یک زنجیره اتمی (نانوسیم) شامل N اتم یکسان متصل به سه هادی نیمه‌بی‌نهایت یکسان را در نظر می‌گیریم و ترابرد الکترونی را به صورت کاملاً تحلیلی بررسی می‌کنیم. تابع گرین سامانه مرکزی را در حضور سه هادی چپ، راست و بالا به صورت زیر می‌نویسیم

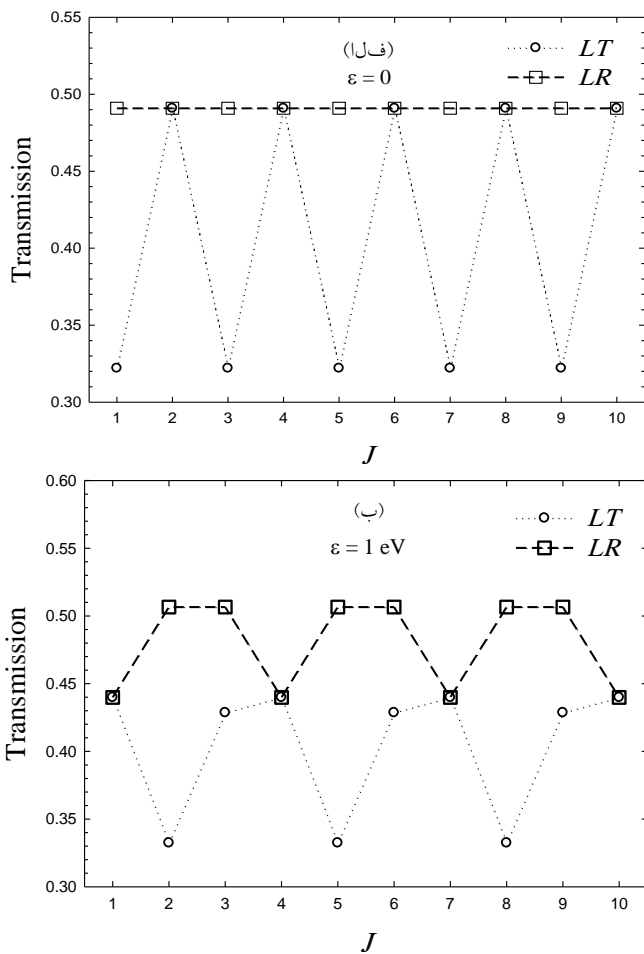
$$G_W(\varepsilon) = \left(\varepsilon I - H_W - \beta_W \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}(\varepsilon) \right)^{-1}, \quad \alpha = (L, T, R) \quad (1)$$

که در آن ε انرژی الکترون ورودی، I ماتریس یکه و H_W هامیلتونی سامانه مرکزی است که با استفاده از رهیافت تنگابست در نظر گرفتن فقط اثر همسایه‌های اول به این صورت نوشته می‌شود

$$H_W = \sum_{i=1}^N \varepsilon_w c_i^{\dagger} c_i + \sum_{\langle ij \rangle} \beta_w (c_i^{\dagger} c_j + c_i c_j^{\dagger}), \quad (2)$$

که در آن i و j شماره جایگاه اتم‌ها، ε_w انرژی جایگاهی اتم‌ها در سامانه مرکزی، $c_i^{\dagger} (c_i)$ عملگر خلق (نابودی) الکترون در جایگاه i ام و β_w انرژی پرش الکترون بین نزدیکترین جایگاه‌ها در سامانه مرکزی است؛ هامیلتونی هادی‌ها نیز با دو مشخصه ε_{α} و β_{α} از رابطه (۲) پیروی می‌کند، با این تفاوت که جمع‌بندی روی i برای آنها از ۱ تا ∞ است. همچنین $\sigma_{\alpha}(\varepsilon)$ در رابطه (۱) خودانرژی (بدون بعد) سامانه مرکزی در حضور هادی‌هاست که از رابطه زیر به دست می‌آید

پرش الکترون بین هادی‌ها و سامانه مرکزی ($\beta_{WL(R,T)}$) را 0.9 eV قرار داده‌ایم. شکل ۲ (الف) نمودارهای T_{LR} و T_{LT} را به صورت تابعی از جایگاه اتصال هادی سوم به سامانه مرکزی، در انرژی صفر نشان می‌دهد. مقدار رسانش T_{LT} برای وقتی که هادی سوم به جایگاه‌های زوج متصل است، به بیشترین مقدار، و هنگامی که به جایگاه‌های فرد متصل است به کمترین مقدار خود می‌رسد. مقدار رسانش از هادی چپ به هادی راست (T_{LR})، به جایگاه اتصال هادی بالا ارتباطی ندارد، و در تمام جایگاه‌ها در انرژی صفر مقدار ثابتی دارد.



شکل ۲: نمودار ضریب عبور الکترونی نانوسیم سه‌پایانه‌ای برحسب شماره جایگاه اتصال هادی سوم به سامانه مرکزی برای دو مسیر: هادی چپ به هادی بالا (T_{LT}) و هادی چپ به هادی راست (T_{LR}). (الف) انرژی صفر، (ب) انرژی 1 eV

شکل ۲ (ب) نمودارهای T_{LR} و T_{LT} را به صورت تابعی از جایگاه اتصال هادی سوم به سامانه مرکزی، در انرژی 1 eV نشان

که در آن \tilde{D}_n و $\xi_W = (\epsilon - \epsilon_W) / 2\beta_W$ وارون ماتریس تابع گرین یک سیم (شامل n جایگاه) در حضور هادی‌های چپ و راست است که از رابطه زیر به دست می‌آید [۱۱]

$$\tilde{D}_n(\epsilon; \sigma_L, \sigma_R) = D_n(\epsilon) - (\sigma_L(\epsilon) + \sigma_R(\epsilon))D_{n-1}(\epsilon) + \sigma_L(\epsilon)\sigma_R(\epsilon)D_{n-2}(\epsilon),$$

که در آن D_n دترمینان وارون ماتریس تابع گرین یک سیم ایزوله با n جایگاه است و از رابطه زیر به دست می‌آید

$$D_n(\epsilon) = \frac{\lambda^{n+1} - \lambda^{-n-1}}{\lambda - \lambda^{-1}},$$

که در آن $\lambda = \xi_W + \sqrt{\xi_W^2 - 1}$ است. اکنون با جایگذاری رابطه‌های (۶) و (۷) در رابطه (۵) داریم:

$$T_{LT}(\epsilon) = 4 \text{Im} \sigma_L(\epsilon) \text{Im} \sigma_T(\epsilon) \left| \frac{\tilde{D}_{N-1}(\epsilon; 0, \sigma_R)}{\tilde{D}'_N(\epsilon; \sigma_L, \sigma_R, \sigma_T)} \right|^2, \quad (۸)$$

$$T_{LR}(\epsilon) = 4 \text{Im} \sigma_L(\epsilon) \text{Im} \sigma_R(\epsilon) \left| \tilde{D}'_N(\epsilon; \sigma_L, \sigma_R, \sigma_T) \right|^{-2} \quad (۹)$$

بنابراین ضریب عبور الکترونی سامانه مورد نظر، برای حالتی که الکترون از هادی چپ وارد هادی بالا (T_{LT}) و از هادی چپ وارد هادی راست (T_{LR}) می‌شود به ترتیب از رابطه‌های (۸) و (۹) به دست می‌آید.

نتایج و بحث

در این بخش نتایج کاملاً تحلیلی تأثیر حضور و جایگاه اتصال هادی سوم (شکل ۱) را بر روی ترابرد الکترونی یک نانوسیم متصل به دو هادی چپ و راست بررسی می‌کنیم؛ بر اساس نظریه لاندائور ضریب عبور را هم‌ارز رسانش می‌گیریم. لازم به ذکر است همانگونه که در مقدمه نیز گفته شد، نتایج حاصل از روابط تحلیلی در این مقاله دقیقاً با نتایج عددی مرجع [۹] تطابق دارد. در ادامه به کمک روابط (۸) و (۹) رسانش یک زنجیره‌ی ۱۰ اتمی ساده را که به سه هادی متصل است، مورد مطالعه قرار خواهیم داد. در تمامی محاسبات برای اتم‌های کل سامانه انرژی جایگاهی را ($\epsilon_{L(R,T)} = \epsilon_W$) صفر، انرژی پرش الکترون بین نزدیک‌ترین جایگاه‌ها را در هر سه هادی ($\beta_{L(R,T)} = \beta_W$) 1 eV و انرژی

مرجع‌ها

- [۱] D. Ferry, S. Goodnick, and J. Bird; "Transport in Nanostructures"; 2th edition (2009).
- [۲] Adrian M. Ionescu; "Nanowire transistors made easy"; nature nanotechnology **5**, (2010) 178.
- [۳] L. Xiaotong, L. Yanwu and L. Dan; "Electron Transport Properties of Graphene Device with Au Electrodes: A First-principles Investigation"; *ICMMITA* (2015).
- [۴] M. Mardaani and H. Rabani; "A solvable model for electronic transport of a nanowire in the presence of effective impurities"; *Superlattices and Microstructures* **59**, (2013) 155-162.
- [۵] A. Onipko and L. Malysheva; "Electric current in star junctions of molecular wire"; *Physical Review B* **86**, (2012) 045457.
- [۶] D. S'anchez and R. L'opez; "Three-terminal transport through a quantum dot in the Kondo regime: Conductance, dephasing and current-current correlations"; *ArXiv: 0403485v2*, (2013).
- [۷] M. Mardaani, H. Rabani and A. Esmaili; "An analytically study on electronic density of states and conductance of typical nanowires"; *Solid State Communications* **151**, (2011) 928-932.
- [۸] Y. Wang et al.; "Structure evolution and electrical transport property of Si nanowire"; *Physica E* **66**, (2015) 48-51.
- [۹] تاریخ، آرزو؛ مردانی، محمد؛ ربانی، حسن؛ «بررسی رسانش الکترونی یک نانوسیم سه‌پایانه‌ای»؛ اولین کنفرانس ملی فیزیک نانو و فرامواد از شبیه سازی تا صنعت، دانشگاه فسا، (۱۳۹۴)، ۵۵۷-۵۵۲.
- [۱۰] S. Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems"; Cambridge University Press, 2th edition (1999).
- [۱۱] M. Mardaani, K. Esfarjani, "Some analytical results in phase coherent transport in quantum wire"; *Physica E* **25**, (2004) 119-130.

می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود با اتصال هادی بالا در هر یک از جایگاه‌های ۱، ۴، ۷ و ۱۰ از سامانه مرکزی، بیشینه مقدار رسانش از هادی چپ به هادی بالا (T_{LT}) بر کمینه مقدار رسانش از هادی چپ به هادی راست (T_{LR}) منطبق است. همچنین با اتصال هادی بالا در هر یک از جایگاه‌های ۲، ۵ و ۸ از سامانه مرکزی، رسانش از هادی چپ به هادی بالا (T_{LT}) به کمترین مقدار خود می‌رسد در حالیکه مقدار رسانش از هادی چپ به هادی راست (T_{LR}) بیشینه است. گفتنی است که نتایج مشاهده شده در نمودارها دقیقاً با نتایج عددی مرجع [۹] کاملاً تطابق دارد.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش با به کار بردن روش تابع گرین در رهیافت تنگابست، ضریب عبور الکترونی را برای یک نانوسیم متصل به سه هادی یکسان نیمه‌بی‌نهایت به‌دست آوردیم و بر اساس رهیافت لاندائور رسانش الکترونی را برای دو مسیر متفاوت، چپ به راست و چپ به بالا، و جایگاه‌های متفاوتی از اتصال هادی بالا به سامانه مرکزی بررسی کردیم. به‌طور کلی می‌توان گفت نتایج به دست آمده در تمامی مقادیر انرژی با نتایج عددی مرجع [۹] کاملاً تطابق دارد، به عنوان نمونه در این مقاله نتایج مربوط به دو مقدار انرژی صفر و 1eV را آورده‌ایم. نتایج نشان می‌دهد در انرژی صفر جایگاه اتصال هادی بالا بر روی رسانش از هادی چپ به هادی بالا تأثیر بسزایی دارد و نمودار رسانش برحسب جایگاه اتصال به صورت نوسانی تغییر می‌کند. همچنین برای مسیر هادی چپ به هادی راست، رسانش مستقل از جایگاه اتصال هادی بالا به سامانه مرکزی است و در انرژی صفر مقدار ثابتی دارد. در انرژی 1eV جایگاه اتصال هادی بالا بر روی رسانش از هادی چپ به هادی راست و از هادی چپ به هادی بالا تأثیر بسزایی دارد. نتایج نشان می‌دهد بیشینه‌های نمودار T_{LT} بر کمینه‌های نمودار T_{LR} منطبق هستند و در برخی از جایگاه‌های اتصال، مقدار رسانش T_{LT} کمینه اما مقدار رسانش T_{LR} بیشینه است.