رسانش الکترونی نانو نوارهای گرافینی در حضور اثر آهارانوف ـ بوهم

محمد مردانی*، حسن ربانی؛ دانشگاه شهرکرد، دانشکدهٔ علوم پایه، گروه فیزیک
دانشگاه شهرکرد، مرکز پژوهشی فناوری نانو
محمود برزویی؛ دانشگاه شهرکرد، دانشکدهٔ علوم پایه، گروه فیزیک

دریافت ۹۳/۱/۱۷ پذیرش ۹۴/۴/۳۰

چکیده

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت بستگی قوی و هم‌چنین تقریب نزدیک‌ترین همسایهٔ رسانش الکترونی نانو نوارهای گرافینی دستهٔ صندلی و زیگزاگ متصل به دو هادی فلزی در حضور میدان مغناطیسی موضعی را بررسی می‌کنیم. نتایج نشان می‌دهد که وجود شار مغناطیسی در یک نانو نوار دسته صندلی، باعث کوچک‌تر شدن گاف ذاتی نانو نوار و ایجاد دو ضدتشدید در طیف رسانش می‌شود. در موردی که تمام حلقه‌ها حاوی شار مغناطیسی یک‌نواخت باشند، قسمتی از ناحیهٔ تشدیدی به ناحیهٔ تونل‌زنی تبدیل شده که نشان‌دهندهٔ گاف انرژی جدیدی در طیف رسانش است. هم‌چنین در یک نانو نوار زیگزاگ که به‌طور ترانس به دو هادی ساده متصل است، در غیاب میدان مغناطیسی چند تشدید فانو در طیف رسانش آن قابل مشاهده است. شار مغناطیسی می‌تواند آن‌ها را از بین برده و ضدتشدیدهای جدیدی ایجاد کند.

واژه‌های کلیدی: تابع گرین، بستگی قوی، نانو نوارهای گرافین، آهارانوف ـ بوهم

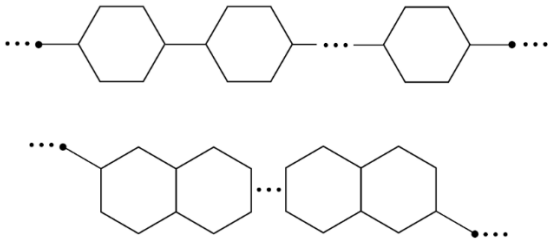
مقدمه

سامانه‌های به‌ظاهر ساده نانو مقیاس در مینیاتوری شدن و بهبود کارایی ادوات الکترونیک بسیار تأثیرگذار است [۱]. این سامانه‌ها ویژگی‌های جالبی را نیز در بروز پدیده‌هایی مبتنی بر تداخل کوانتومی از خود نشان می‌دهند. به‌خصوص در مورد نانو ساختارهای حلقوی می‌توان از اثرهای آهارانوف-بوهم [۲]، فانو [۳] و فیلتر اسپینی [۴] نام برد. یکی از مهم‌ترین سامانه‌های حلقوی گرافین است که در مادهٔ چگال نخستین ساختار دوبعدی پایدار شناخته می‌شود. پیدایش گرافین تأثیر زیادی در پیشرفت الکترونیک مولکولی داشته است [۵] و پیش‌بینی می‌شود که در آیندهٔ نزدیک جانشین سیلیکون در قطعات الکترونیکی شود [۶]. با این حال به‌دلیل فقدان گاف در طیف انرژی آن، کنترل دقیق رفتار رسانشی آن با مشکل مواجه است [۷]. راه حل ممکن برای رهایی از این تنگنا، محدود کردن گرافین در یک بعد و ایجاد نانو نوارهای گرافینی است که یک گاف در طیف انرژی ایجاد می‌کند. اندازهٔ این گاف با عرض و دست‌گردی ساختار قابل کنترل خواهد بود [۸] و [۹]. با توجه به ساختار نانو نوارها که از حلقه‌های بنزنی تشکیل شده‌اند، می‌توان اثر آهارانوف-بوهم را در این سامانه‌ها تحقیق کرد و رسانش الکتریکی آن‌ها را با شار مغناطیسی گذرنده از حلقه‌های بنزنی کنترل کرد [۱۰].

*نویسنده مسئول: mohammad-m@sci.sku.ac.ir

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2024-10-12]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.71]

در این مقاله، ترابرد الکترونی نانو نوارهای دسته صندلی و زیگزاگ را با در نظر گرفتن اثر آهارانوف-بوهم بررسی می‌کنیم. این سامانه‌ها را بین دو الکترود فلزی ساده قرار داده و رسانش الکترونی را با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت بستگی قوی و تقریب نزدیک‌ترین همسایه‌ها بررسی می‌کنیم. برای این منظور فرض می‌کنیم که شرایط رژیم پاسخ خطی برقرار است. بدین‌معنی که اختلاف پتانسیل بین الکترودها کوچک است و طبق این نظریه رسانش متناسب با ضریب عبور است [۱۱].



(الف)

(ب)

شکل ۱ : یک نانو نوار گرافینی الف) دسته صندلی و ب) زیگزاگ، که از طرفین به دو هادی فلزی ساده متصل است.

مدل و فرمول‌بندی

شکل ۱ سامانه‌های بررسی شده را که بین دو الکترود فلزی سادهٔ نیمه‌متناهی قرار گرفته‌اند، نشان می‌دهد. فرض می‌کنیم که شار مغناطیسی ثابت و بدون بعد ϕ می‌تواند از هر یک از حلقه‌های بنزنی عبور کند. در این‌جا $\phi = \Phi_B / \Phi_0$ است که در آن Φ_B شار مغناطیسی گذرنده از هر حلقه بنزن و $\Phi_0 = \hbar / |e|$ کوانتای شار است. در رهیافت بستگی قوی می‌توان هامیلتونی سامانه‌های بررسی شده را مطابق رابطهٔ (۱) نوشت [۱۱]:

$$H = H_{system} + H_{leads} + H_{contacts}, \qquad (۱)$$

که در آن H_{system}، H_{leads} و $H_{contacts}$ به‌ترتیب هامیلتونی‌های سامانهٔ مجزا، هادی‌ها و اتصال بین سامانه و هادی‌ها هستند. هامیلتونی سامانهٔ منزوی بدین‌صورت است:

$$H_{system} = \varepsilon_s \sum_j |j\rangle\langle j| + \beta_s \sum_j |j\rangle\langle j+1| + h.c., \qquad (۲)$$

که در آن ε_s و β_s به‌ترتیب انرژی‌های جای‌گاهی و پرش الکترون در سامانه هستند. در این‌جا فرض شده است که حلقه‌های بنزنی در نانو نوار از نوع تشدیدی هستند و انرژی‌های پرش بین اتم‌های همسایه با هم برابرند. اگر فرض کنیم که سامانه از N اتم تشکیل شده باشد، j از ۱ تا N تغییر خواهد کرد. شار مغناطیسی گذرنده از حلقه‌های بنزن را می‌توان به راحتی با تقریب پیرلز در معادلات وارد کرد [۱۲]. این تقریب بدین گونه است که در حضور یک میدان مغناطیسی یک‌نواخت، اگر شار مغناطیسی ϕ از یک حلقهٔ بنزن عبور کند، انرژی‌های پرش در حلقهٔ بنزن هنگام وجود شار مغناطیسی از β_s به $\beta_s \exp(\pm i\phi)$ تغییر می‌کنند که علامت مثبت برای پرش الکترون در جهت ساعت‌گرد و علامت منفی برای پرش آن در عکس جهت ساعت‌گرد در حلقه است. هامیلتونی مربوط به هادی‌های فلزی که مشابه و غیرمغناطیسی فرض می‌شوند، به شکل رابطهٔ (۲) نوشته می‌شود با این تفاوت که انرژی‌های جایگاهی و پرش آن

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2024-10-12]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.71]

به‌ترتیب ε_0 و β_0 استو جمع‌زنی روی j از $-\infty$ تا صفر برای هادی چپ و از $N+1$ تا $+\infty$ برای هادی راست انجام می‌شود. در نهایت برای هامیلتونی اتصال داریم:

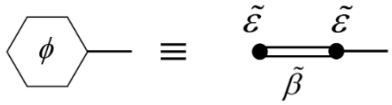
$$H_{contacts} = \beta_{contact}\left(|0\rangle\langle 1| + |N\rangle\langle N+1|\right) + h.c. \qquad (۳)$$

که در آن $\beta_{contact}$ انرژی پرش جفت‌شدگی اتصال بین سامانه و هر هادی است. در روش تابع گرین در رهیافت بستگی قوی، ضریب عبور الکترونی طبق رابطهٔ فیشر ـ لی بدین‌صورت محاسبه می‌شود [۱۱]:

$$T(\varepsilon,\phi) = \left|2\,\mathrm{G}_{1,N}\,\mathrm{Im}\,\Sigma\right|^2. \qquad (۴)$$

که در آن Σ خود انرژی سامانه مرکزی به‌علت وجود هر هادی و $G_{1,N}$ درایه‌ی سطر اول و ستون Nام ماتریس تابع گرین سامانه‌ی مرکزی متصل به هادی‌ها است که از رابطهٔ (۵) به‌دست می‌آید [۱۳]:

$$G^{-1}_{i,j} = \delta_{i,j}\varepsilon - H_{i,j} - (\delta_{i,1} + \delta_{i,N})\Sigma. \qquad (۵)$$



شکل ۲ : تقلیل یکایاختهٔ سامانهٔ شکل ۱ الف) به دو انرژی جایگاهی و ب) پرش مؤثر با استفاده از روش بهنجارش.

که در آن $G^{-1}_{i,j}$ و $H_{i,j}$ به‌ترتیب عناصر ماتریس‌های وارون تابع گرین سامانهٔ متصل و هامیلتونی سامانهٔ منزوی هستند. هم‌چنین ε انرژی الکترون ورودی و $\delta_{i,j}$ تابع دلتای کرونکر هستند. برای زنجیره‌ای خطی در نقش هادی، تابع خود انرژی به‌صورت تابعی از انرژی چنین است [۱۳]:

$$\Sigma = \frac{\beta^2_{contact}}{2\beta_0^2}\left(\varepsilon - \varepsilon_0 + \sqrt{(\varepsilon-\varepsilon_0)^2 - 4\beta_0^2}\right). \qquad (۶)$$

بنابراین روابط لازم برای محاسبهٔ عددی ضریب عبور الکترونی که در رهیافت لانداؤر معادل رسانش فرض می‌شود، فراهم شده است. در روش بستگی قوی می‌توان با استفاده از روش باز به‌هنجارش، یعنی نوشتن معادلهٔ شرودینگر و حذف توابع موج حالت پایه برای اتم‌های بالایی و پایینی حلقهٔ بنزنی، هامیلتونی سامانهٔ بررسی شده را با هامیلتونی یک زنجیرهٔ اتمی با انرژی‌های پرش و جایگاهی به‌هنجار شده جای‌گزین کرد. این روش منجر به کاهش مرتبهٔ ماتریس‌ها گشته و سرعت محاسبات را به‌طور چشم‌گیر افزایش می‌دهد. در این مقاله، این روش را برای سامانهٔ شکل ۱(الف) به‌کار می‌بریم و آن را با توجه به شکل ۲، به زنجیره‌ای خطی از اتم‌ها، ساده می‌کنیم. می‌توان انرژی‌های جایگاهی و پرش به‌هنجار شدهٔ سامانهٔ شکل۱(الف) را به‌صورت معادلهٔ (۷) به‌دست آورد [۱۴]:

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_S + \frac{2\beta_S(\varepsilon-\varepsilon_S)}{(\varepsilon-\varepsilon_S)^2 - \beta_S^2}, \qquad (۷)$$

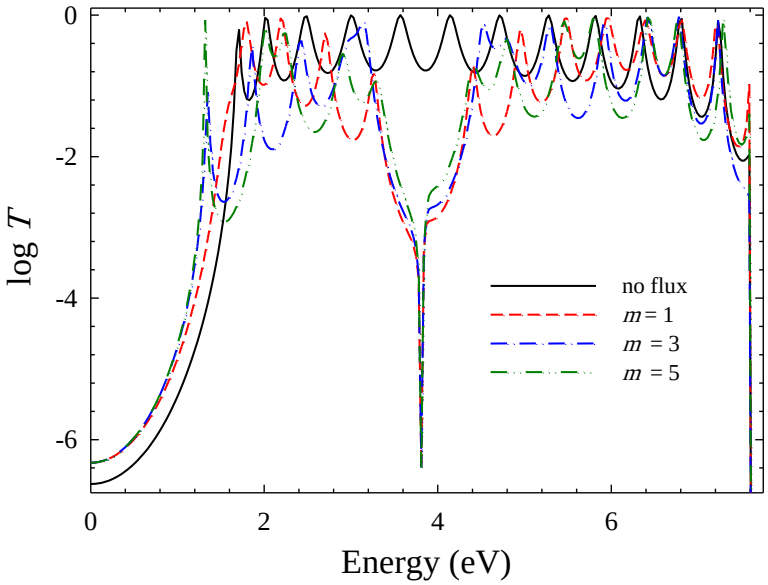
$$\tilde{\beta} = \frac{2\beta_S^3\cos(3\varphi)}{(\varepsilon-\varepsilon_S)^2 - \beta_S^2}, \qquad (۸)$$

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2024-10-12]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.71]

در ادامهٔ در همهٔ محاسبه‌های خود، انرژی‌های جایگاهی کل اتم‌های سامانه را صفر در نظر می‌گیریم. هم‌چنین انرژی‌های پرش الکترون در پیوندهای کربن ـ کربن را $\beta_S = -3.29\,\mathrm{eV}$ و انرژی‌های پرش الکترون در اتصال سامانه هادی $\beta_{contacts} = -1.9\,\mathrm{eV}$ و در هادی‌ها را $\beta_0 = -3.81\mathrm{eV}$ در نظر می‌گیریم [۱۵].

نتایج محاسبات عددی

مطابق شکل ۱(الف)، یک نانو نوار گرافین دستهٔ صندلی شامل ده حلقهٔ بنزن را در نظر می‌گیریم. در شکل ۳ لگاریتم ضریب عبور الکترونی این سامانه را بر حسب انرژی الکترون ورودی رسم کرده‌ایم. در این شکل m نشان‌دهندهٔ شمارهٔ حلقهٔ بنزنی واقع در نانو نوار است که از سمت چپ شماره‌گذاری می‌شود و شار مغناطیسی $\phi = \pi/۴$ از آن می‌گذرد. با توجه به تقارن نمودارها نسبت به انرژی صفر، آن‌ها را فقط در ناحیهٔ مثبت رسم کرده‌ایم. مشاهده می‌شود که ایجاد شار مغناطیسی باعث کم شدن اندازهٔ گاف سامانهٔ مرکزی شده و هم‌چنین تونل‌زنی الکترون در آن راحت‌تر صورت می‌گیرد. هم‌چنین برای همهٔ موارد، در انرژی‌های حدود $\varepsilon = \pm 3.8\mathrm{eV}$ پدیده‌ای ضدتشدیدی دیده می‌شود. این بدان‌معنی است که مکان این ضدتشدید در نوار انرژی به فیزیک حلقهٔ بنزنی شامل شار مغناطیسی مربوط می‌شود. در واقع اعمال میدان مغناطیسی بر حلقهٔ بنزن باعث ایجاد اختلاف راه برای توابع موج الکترونی به‌دلیل تفاوت در فیزیک مسیرهای بالا و پایین شده که سرانجام به تداخل ویران‌گر در این انرژی‌ها منجر می‌شود.

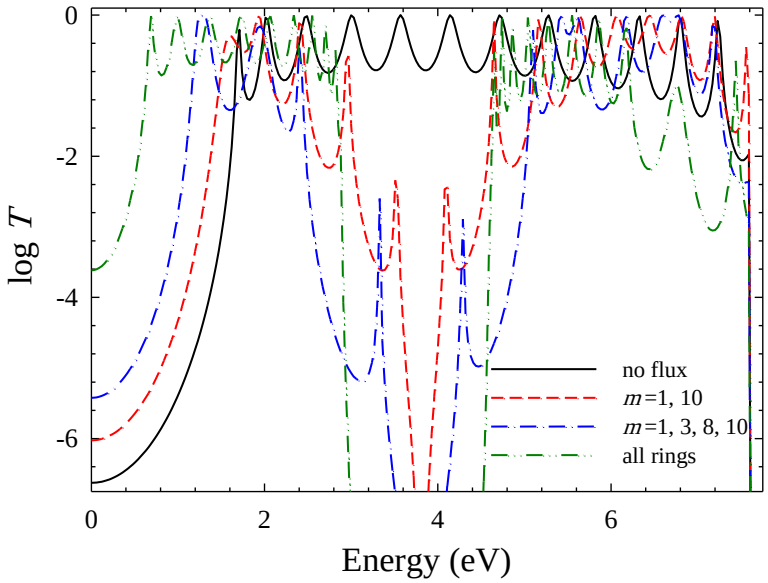


شکل ۳ : لگاریتم ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی الکترون ورودی برای یک نانو نوار گرافین دستهٔ صندلی شامل ۱۰ حلقهٔ بنزنی که به دو هادی ساده فلزی متصل شده است. شار مغناطیسی بدون بعد $\phi = \pi / ۴$ از حلقهٔ بنزنی mام عبور داده شده است.

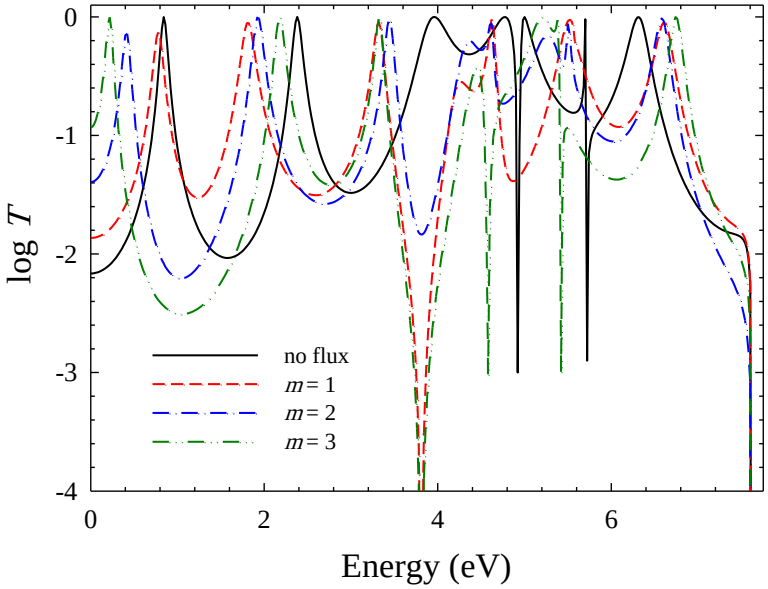
حال در شکل ۴ لگاریتم ضریب عبور الکترونی را با فرض این‌که شار مغناطیسی از چند حلقهٔ بنزنی عبور کند، رسم می‌کنیم. این شکل مواردی را که در آن‌ها شار مغناطیسی از هیچ بنزنی، از بنزن‌های ۱ و ۱۰، از بنزن‌های ۱ و ۳ و ۸ و ۱۰؛

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2024-10-12]
[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.71]

و از تمام آن‌ها عبور کند، مقایسه می‌کند. ملاحظه می‌شود با افزایش تعداد بنزن‌هایی که شار مغناطیسی از آن‌ها عبور می‌کند، تونل‌زنی الکترونی در گاف انرژی مرکزی بهبود یافته و پهنای ضدتشدیدهای واقع در انرژی‌های $\varepsilon = \pm 3.8\,\mathrm{eV}$ نیز زیاد شده و درنهایت به گاف انرژی تبدیل می‌شوند.



شکل ۴: لگاریتم ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی برای یک نانو نوار گرافین دستهٔ صندلی شامل ۱۰ حلقهٔ بنزنی که به دو هادی ساده فلزی متصل شده است. شار مغناطیسی $\phi = \pi / ۴$ از حلقه‌های بنزنی شمارهٔ m عبور داده شده است.



شکل ۵ : لگاریتم ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی برای یک نانو نوار گرافین زیگزاگ شامل ۵ حلقهٔ بنزنی که به صورت اتصال ترانس به دو هادی فلزی ساده متصل شده است. شار مغناطیسی $\phi = \pi / ۴$ از بنزن mام عبور می‌کند.

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2024-10-12]

[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.71]

در ادامه، محاسبه‌ها را برای نانو نوار گرافینی زیگزاگ که با اتصال ترانس به دو هادی سادهٔ فلزی متصل است، به‌کار می‌بریم. شکل ۵ لگاریتم ضریب عبور الکترونی برحسب انرژی را برای یک نانو نوار گرافینی زیگزاگ (شکل ۱- ب) شامل پنج حلقهٔ بنزن نشان می‌دهد. این شکل رسانش الکترونی مواردی را که شار مغناطیسی فقط از یک حلقهٔ بنزن عبور می‌کند، بررسی می‌کند. می‌توان گفت که در غیاب شار مغناطیسی، دو تشدید فانو ـ افت و خیز ناگهانی در نمودار ضریب عبور الکترونی ـ در انرژی‌های حدود $\varepsilon = \pm 5.7\,\mathrm{eV}$ رخ می‌دهد که مربوط به ساختار فیزیکی نانو نوار زیگزاگ در اتصال ترانس است. در حضور شار مغناطیسی (به‌استثنای مورد $m = 3$ که این پدیده به انرژی‌های حدود $\varepsilon = \pm 5.4\,\mathrm{eV}$ جابه‌جا می‌شود)، این تشدیدهای فانو از بین رفته ولی در عوض ضدتشدیدهایی در طیف رسانش پدیدار می‌شوند. لازم به ذکر است که این سامانه گاف ذاتی ندارد و اثر میدان مغناطیسی بر آن علاوه بر ظهور ضدتشدیدهای جدید، جابه‌جایی قله‌های تشدیدی در طیف رسانش است.

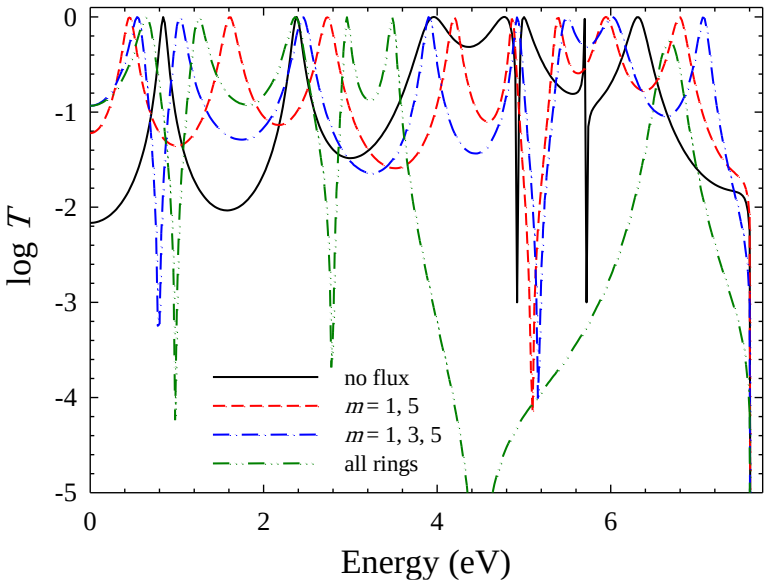
حال اجازه می‌دهیم که شار مغناطیسی از هیچ، چند و یا تمام حلقه‌های بنزنی نانو نوار زیگزاگ شامل ۵ بنزن عبور کند که این موارد در شکل ۶ با هم‌دیگر مقایسه شده‌اند. افزایش حلقه‌های شامل شار، باعث افزایش تعداد و پهنای ضدتشدیدها شده و به‌خصوص برای ضدتشدیدهای نزدیک به لبه‌های نوار انرژی، این پهن‌شدگی محسوس‌تر است. همانند مورد دستهٔ صندلی در موردی که کل سامانه تحت تأثیر میدان قرار می‌گیرد، ضدتشدیدها به گاف انرژی تبدیل می‌شوند.

نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت بستگی قوی و تقریب نزدیک‌ترین همسایه‌ها به بررسی اثر آهارانوف-بوهم بر رسانش الکترونی نانو نوارهای گرافین دستهٔ صندلی و زیگزاگ متصل به دو هادی فلزی ساده پرداختیم. نتایج نشان می‌دهند که در مورد نانو نوار دستهٔ صندلی، وجود شار مغناطیسی باعث کم شدن اندازهٔ گاف سامانهٔ مرکزی شده و هم‌چنین تونل‌زنی الکترون در آن راحت‌تر صورت گیرد. هم‌چنین دو ضدتشدید در نوار انرژی پدیدار می‌شود که به فیزیک حلقه‌های بنزنی شامل شار مغناطیسی مربوط می‌شود و مکان آن‌ها در طیف رسانش ثابت است. اما پهنای این ضدتشدیدها با اضافه شدن تعداد بنزن‌های درگیر با شار مغناطیسی افزایش می‌یابد که این امر منجر به ایجاد یک گاف جدید در سامانه می‌شود. در مورد نانو نوار زیگزاگ، در غیاب شار مغناطیسی، دو تشدید فانو در طیف رسانش رخ می‌دهد که به هندسهٔ ساختار نانو نوار زیگزاگ در اتصال ترانس برمی‌گردد. این تشدیدهای فانو در حضور شار مغناطیسی از بین رفته و به‌جای آن ضدتشدیدهایی در طیف رسانش ایجاد می‌شوند. افزایش حلقه‌های درگیر با شار مغناطیسی باعث افزایش تعداد و پهنای این ضدتشدیدها شده به‌طوری که برای موردی که کل سامانه تحت تأثیر میدان قرار می‌گیرد، به گاف انرژی تبدیل می‌شوند. شایان ذکر است که گاف انرژی برای مواردی قابل مشاهده است که طول سامانهٔ مرکزی به حد کافی بزرگ باشد.

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2024-10-12]

[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.71]



شکل ۶ : لگاریتم ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی برای یک نانو نوار گرافین زیگزاگ شامل ۱۰ حلقهٔ بنزنی که با اتصال ترانس به دو هادی سادهٔ فلزی متصل شده است. شار مغناطیسی ثابت $\phi = \pi / ۴$ از حلقه‌های بنزنی m ام عبور داده شده است.

منابع

1. Aharony A., Entin-Wohlman O., Tokura Y., and Katsumoto S., Phys. Rev. B 78, 125328 (2008).

2. B¨uttiker A. and M., Phys. Rev. B 52, R14360 (1995).

3. Fuhrer A., Brushein P., Ihn T., Sigrist M., Ensslin K., Wegscheider W. and Bichler M., Phys. Rev. B 73, 205326 (2006).

4. Popp M., Frustaglia D. and Richter K., Nanotechnology 14, 347 (2003).

5. Silvestrov P. G. and Efetov K. B., Phys. Rev. Lett. 98, 016802 (2007).

6. Geim A. K. and Novoselov K. S., Nature Materials 6, 183 (2007).

7. Abergel D. S. L., Apalkov V., Berashevich J., Ziegler K. and Chakraborty T., Adv. Phys. 59, (2010) 261.

8. Raza H. and Kan E. C., Phys. Rev. B 77, 245434 (2008).

۹. ربانی ح.، مظلوم شهرکی آ.، *نشریهٔ علوم خوارزمی*، جلد ۱۲، شماره ۴، (پاییز ۱۳۹۲) ۶۶۹.

10. de Guevara M. L. L., Lara G. A. and Orellana P.A., Microelectron. J. 39, 1304 (2008).

11. Datta S., Electronic Transport in Mesoscopic Systems, (Cambridge University Press, Cambridge (1998).

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2024-10-12]

[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.71]

12. 16. Ritter C., Makler S. S. and Latgé A., Phys. Rev. B 77, 195443 (2008); Phys. Rev. B 82, (2010) 089903.

13. Mardaani M., Rabani H. and Esmaeili A., Solid State Commun. 151 (2011) 928.

14. Mardaani M. and Rabani H., J. Mag. Mag. Mater. 28 (2013) 331.

15. Kohler B. E., Chem J., Phys. 93, 5838 (1990); J. L. Brédas, R. Silbey (Eds.), Conjugated Polymers, Kluwer, Dordrecht (1991).

[Downloaded from jmrph.khu.ac.ir on 2024-10-12]

[DOI: 10.52547/jmrph.1.1.71]