

## تأثیر برهمکنش بلندبرد کولنی بر ترابرد فونونی یک زنجیره جرم - فنر یونیده

حسن ربانی\*، محمد مردانی، خدیجه زارع‌پور، فاطمه قمی؛

دانشگاه شهرکرد، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک

پذیرش: ۹۵/۷/۲۰

دریافت: ۹۴/۵/۲۵

### چکیده

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین و در تقریب نوسانگر هماهنگ به بررسی ضریب عبور فونونی یک زنجیره جرم- فنر شامل دو یا چند بار الکتریکی پرداخته‌ایم. فرض شده است که زنجیره بین دو هادی فونونی ساده قرار گرفته است. برای این منظور اثر برهمکنش کولنی بین بارها را در ثابت نیروی بین آنها وارد کرده‌ایم. نتایج نشان می‌دهد که در موردی که فقط یک دو قطبی در سامانه موجود است، افزایش فاصله‌ی بارهای آن باعث کاهش ضریب عبور فونونی می‌شود. همچنین افزایش تعداد یون‌ها در سامانه‌ی مرکزی موجب کاهش شدید ضریب عبور فونونی بخصوص در بسامدهای پایین و میانی می‌شود.

**واژگان کلیدی:** ترابرد فونونی، دو قطبی الکتریکی، تقریب هماهنگ، تابع گرین

### مقدمه

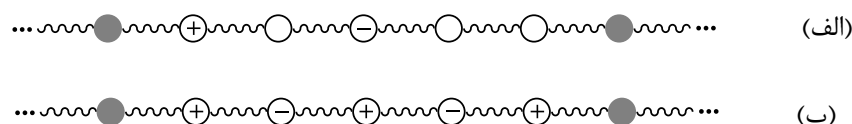
امروزه یکی از موضوعات قابل توجه در فناوری نانو، تولید و کاربرد نانوساختارهای یک بعدی از جمله نانوسیم‌ها و نانولوله‌ها است که خواص فیزیکی آن‌ها با توجه به هندسه و ابعادشان بررسی می‌شود [۱-۲]. نانوسیم‌ها ساختارهایی با قطر حداکثر ده نانومتر هستند که نسبت طول به قطر زیاد آن‌ها منجر به بروز خواص منحصر به فرد الکتریکی، ترموالکتریکی، شیمیایی و غیره می‌شود و این خواص در مواد کپه‌ای دیده نمی‌شود. از این‌رو از آن‌ها در ساخت قطعات الکترونیکی مانند دیودها و ترانزیستورها، ادوات ترمودینامیکی، اتصالات داخلی در نانوالکترونیک، حسگرهای شیمیایی و زیستی استفاده می‌شود [۳ و ۹]. یکی از مسائل اصلی در بررسی خواص فیزیک نانوساختارها محاسبه رسانندگی الکتریکی و گرمایی آن‌ها است [۴]. در عایق‌ها و نیمه‌رساناها، بخش عمده‌ای از گرما توسط ارتعاشات شبکه یا همان فونون‌ها منتقل می‌شود [۵-۱۰]. بنابراین بسیاری از خواص این مواد مانند رسانندگی گرمایی ناشی از وجود همین حامل‌ها است [۶]. از دیدگاه نظری، فیزیک حاکم بر این حامل‌ها و محاسبه خواص ترابردی مربوط به آن‌ها، توسط روش‌های متداول تابع گرین و ماتریس انتقال صورت می‌گیرد [۱۱-۱۲].

\*نویسنده مسئول: rabani-h@sci.sku.ac.ir

در بررسی ترابرد فونونی از یک نانو سیم (یا ابرشبکه) که متشکل از ساختارهایی متناوب است، معمولاً از مدل زنجیره جرم-فنر استفاده می‌شود [۷]. به طوریکه برای انتشار موج طولی در یک جهت خاص آن، هر جرم در مدل زنجیره جرم - فنر، معادل مجموع جرم اتم‌های واقع در سطح مقطع عمود بر راستای انتشار آن موج فرض شده و همچنین ثابت فنر معادل بین این جرم‌ها را بصورت مجموع ثابت فنر پیوندهای واقع بین هر دو سطح مقطع شامل اتم‌ها دانست. در این پژوهش با استفاده از روش تابع گرین و تقریب نوسانگر هماهنگ به بررسی رسانش فونونی یک زنجیره جرم - فنر متصل به دو هادی فونونی ساده در حضور برهمکنش کولنی بلندبرد می‌پردازیم و سپس نتایج حاصل را بررسی می‌کنیم.

### چارچوب نظری

مطابق با شکل ۱، یک زنجیره‌ی متناهی جرم - فنر را در نظر می‌گیریم که از دو طرف به دو هادی فونونی نیمه‌نامتناهی متصل شده است. همه و یا بعضی از جرم‌های این زنجیره مرکزی دارای بارهای الکتریکی هستند.



شکل ۱. یک زنجیره جرم-فنر پنج جرمی در حضور برهمکنش کولنی (الف) شامل یک دو قطبی الکتریکی و (ب) شامل پنج یون که به دو هادی فونونی متصل شده است.

برای بررسی خواص ترابرد فونونی سامانه ابتدا باید تابع گرین سامانه را محاسبه کرد. تابع گرین فونونی این سامانه جرم - فنر در حضور هادی‌های چپ و راست،  $G$ ، از رابطه زیر به دست می‌آید

$$G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma_L - \Sigma_R \quad (1)$$

که در آن  $G_0$  تابع گرین فونونی زنجیره منزوی مرکزی و  $\Sigma_{L(R)}$  خود انرژی سامانه‌ی مرکزی در حضور هادی چپ (راست) است که با رابطه زیر محاسبه می‌شود

$$\Sigma_{L(R)} = \frac{C_{WL(R)}^2}{C_{L(R)}} \exp(i\theta_{L(R)}), \quad (2)$$

که در آن  $C_{WL(R)}$  ثابت نیروی کشسانی اتصال هادی چپ (راست) با سامانه مرکزی،  $C_{L(R)}$  ثابت نیروی کشسانی بین جرم‌های متوالی در هادی‌های چپ (راست) است. همچنین  $\theta_{L(R)}$  با استفاده از رابطه‌ی پاشندگی فونونی هادی چپ (راست) به دست می‌آید که برای هادی‌های فونونی ساده برای موردی که فقط جرم‌های همسایه اول در تقریب هماهنگ با هم برهمکنش دارند، به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\theta_{L(R)} = \cos^{-1}(1 - \omega^2 / 2\omega_{L(R)}^2), \quad (3)$$

که در آن  $\omega$  بسامد ویژه فونونی و  $\omega_{L(R)} = \sqrt{C_{L(R)} / m_{L(R)}}$  بسامد نوعی هادی است که در این جا  $m_{L(R)}$  جرم اتمها در هادی چپ (راست) است. حال به بررسی مورد شکل ۱ (الف) که در سامانه مرکزی آن دو تا از جرمها دارای بار الکتریکی  $\pm q$  هستند، می‌پردازیم. انرژی پتانسیل چنین ساختاری در تقریب هماهنگ با دو بخش زیر بیان می‌شود: (۱) برهمکنش کوتاه‌برد با ثابت نیروی فنر  $C_0$  که فقط بین همسایه‌های اول عمل می‌کند. (۲) برهمکنش کولنی بلندبرد که بین دو بار الکتریکی وجود دارد. با فرض این که  $i$  و  $i+p$  شماره جرمهای باردار سامانه مرکزی هستند، انرژی پتانسیل کولنی بین دو بار مثبت و منفی چنین است

$$U_C = \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{-q^2}{pa + u_i - u_{i+p}}, \quad (۴)$$

که در آن  $\epsilon$  ضریب گذردهی محیط،  $u_i$  و  $u_j$  جابه‌جایی هر کدام از بارها از مکان ترازمندی،  $a$  ثابت شبکه،  $pa$  فاصله بین دو بار الکتریکی است. با استفاده از بسط تیلور و تقریب  $|u_i - u_{i+p}| \ll pa$  و نگه داشتن جملات تا مرتبه دوم، رابطه (۴) به صورت زیر نوشته می‌شود

$$U_C = \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{-q^2}{pa} + \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{q^2}{pa} \frac{u_i - u_{i+p}}{pa} - \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{q^2}{pa} \left( \frac{u_i - u_{i+p}}{pa} \right)^2. \quad (۵)$$

با استفاده از رابطه  $C_p = \frac{\partial^2 U_C}{\partial u_i^2}$  می‌توان یک ثابت نیرو به صورت زیر به این پتانسیل نسبت داد

$$C_p = \frac{C_C}{p^3} \quad (۶)$$

که در آن  $C_C = -\frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{2q^2}{a^3}$ ، ثابت فنر منتسب به یک دوقطبی  $qa$  است. مورد دیگر موردی است که در شکل ۱ (ب) نشان داده شده است و جرمهای سامانه مرکزی آن به طور یک در میان دارای بار مثبت و منفی هستند. به طریق مشابه سهم برهمکنش کولنی بلند برد در ثابت نیرو بین جرمهای  $i$  و  $i+p$ ، به صورت زیر به دست می‌آید

$$C_p = \frac{1}{4\pi\epsilon} 2(-1)^{p+1} \frac{q^2}{p^3 a^3} = (-1)^p \frac{C_C}{p^3}. \quad (۷)$$

پتانسیل‌های ثابت و خطی به ترتیب منشأ نیروهای صفر و ثابت (غیر صفر) دارند. همان‌طور که می‌دانیم نیروهای ثابت تنها باعث جابه‌جایی نقاط تعادل اولیه اتمها می‌شود و اثری بر فیزیک انتقال فونون در سامانه ندارد. بنابراین در رابطه (۵) نگه داشتن فقط جمله مرتبه دوم کافی است و از کلیت مسأله نخواهد کاست و انرژی پتانسیل این ساختار در حضور برهمکنش کولنی و ارتعاشی میان تمام همسایه‌ها به این صورت است

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i,p} (C_0 + C_p) [(u_i - u_{i+p})^2 + (u_i - u_{i-p})^2], \quad (8)$$

که در آن  $C_0$  ثابت فنر بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها در غیاب نیروی کولنی در سامانه مرکزی است. در ادامه فرض می‌کنیم که  $C_L = C_R = C_0$ . با استفاده از رابطه بین انرژی پتانسیل کل و نیروی وارد بر جرم  $i$  ام به صورت  $F_i = -\frac{\partial U}{\partial u_i}$  و با جداسازی متغیرهای زمانی و مکانی جابه‌جایی‌ها ( $u_i = \tilde{u}_i e^{-i\omega t}$ ) می‌توان معادله حرکت را برای یون  $i$  ام به صورت زیر نوشت

$$(2C_0 - m\omega^2) \tilde{u}_i - C_0 (\tilde{u}_{i+1} + \tilde{u}_{i-1}) - \sum_{j=1}^{i-1} C_{j-i} \tilde{u}_{j-i} + \sum_{j=1}^{N-i} C_{j-i} \tilde{u}_{i+j} = 0, \quad (9)$$

که در آن  $m$  جرم هر یون در سامانه مرکزی و  $N$  تعداد اتم‌های آن است. اگر این ساختار به دو هادی فونونی شامل اتم‌هایی به جرم  $m$  با فنرهایی با ثابت نیروی  $C_0$  بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها متصل شود، عناصر ماتریسی وارون تابع گرین سامانه متصل به دو هادی فونونی مشابه از رابطه زیر به دست می‌آید

$$\left[ 2 - \frac{\omega^2}{\omega_0^2} - \frac{\Sigma_L}{C_0} \delta_{ii} - \frac{\Sigma_R}{C_0} \delta_{Ni} \right] G_{i,i}^{-1} - (G_{i,i+1}^{-1} + G_{i,i-1}^{-1}) - \sum_{i \neq j} \frac{C_p}{C_0} (G_{i,j}^{-1} + G_{j,i}^{-1}) = 0, \quad (10)$$

که در آن  $G_{i,j}^{-1}$  درایه سطر  $i$  ام و ستون  $j$  ام ماتریس تابع گرین وارون سامانه است،  $\delta_{ij}$  نشانگر تابع دلتای کرونکر و  $\omega_0 = \sqrt{C_0/m}$  از مرتبه  $10^{12} - 10^{13}$  Hz است [۸]. پس از تعیین عناصر ماتریسی وارون تابع گرین توسط رابطه (۱۰) سرانجام ضریب عبور فونونی از رابطه زیر به دست می‌آید [۴]

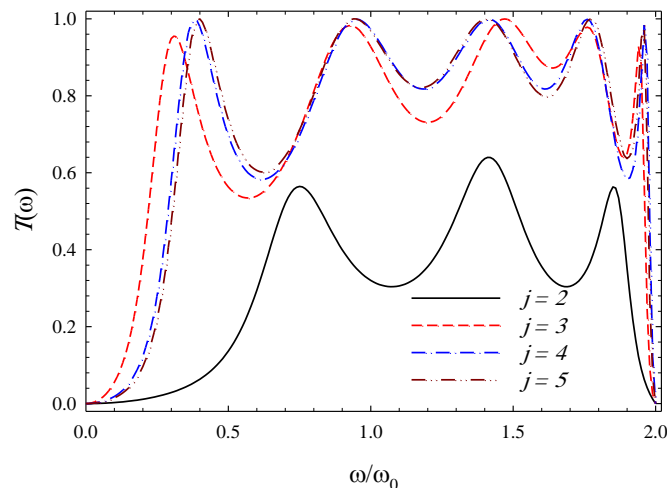
$$T(\omega) = \frac{4}{C_0^2} \text{Im} \Sigma_L \text{Im} \Sigma_R |G_{1,N}|^2, \quad (11)$$

که در آن  $G_{1,N}$  درایه سطر اول و ستون آخر ماتریس تابع گرین سامانه متصل است. در پایان متذکر می‌شویم که ثابت  $C_C$  که در رابطه (۶) معرفی شد، برای یک زنجیره جرم - فنر نوعی هم مرتبه با ثابت فنر بین پیوندها ( $C_0$ ) تخمین زده می‌شود. البته این تخمین به شرایط فیزیکی محیط (مقدار  $\varepsilon$ )، به مقدار بار  $q$  و ثابت شبکه بستگی دارد. در بخش بعد با توجه به فرمول‌بندی ارائه شده به محاسبه ضریب عبور فونونی ساختارهای نشان داده در شکل ۱ می‌پردازیم.

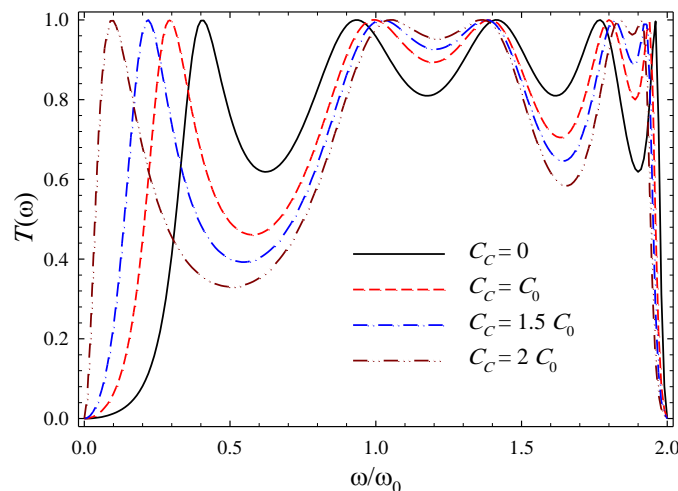
### یک زنجیره جرم - فنر شامل یک دو قطبی الکتریکی

حال به بررسی نتایج مربوط به ضریب عبور فونونی یک زنجیره جرم - فنر همگن شامل یک دو قطبی الکتریکی می‌پردازیم. در ابتدا فرض می‌کنیم که سامانه مرکزی شامل پنج جرم است و برای سادگی مقدار هر جرم آن را با هر جرم در هادی‌ها برابر قرار می‌دهیم و همان طور که در بخش قبل گفته شد، همه‌ی ثابت فنرها را به غیر از پیوندهای اتصال یکسان در نظر می‌گیریم. شکل ۲ ضریب عبور فونونی را به صورت تابعی از بسامد فونون ورودی برای موردی که بار مثبت در جایگاه  $i=1$  ثابت شده و جایگاه بار منفی ( $j$ ) تغییر می-

کند، نشان می‌دهد. در اینجا  $C_C = C_0$  و  $C_{WL(R)} = 0.8 C_0$  فرض شده است. همان طور که در شکل مشاهده می‌شود با کاهش فاصله بین دو قطبی الکتریکی ضریب عبور فونونی کاهش یافته و با قرار دادن بار منفی در موقعیت  $j=2$  در بسامدهای پایین یک ناحیه تونل‌زنی ایجاد می‌شود و تعداد شبه‌مدهای ویژه سامانه کم می‌شود.



شکل ۲. ضریب عبور فونونی یک زنجیره جرم - فنر ساده پنج جرمی شامل یک دو قطبی الکتریکی بر حسب بسامد فونون ورودی برای چند جایگاه مختلف بار منفی. جایگاه بار مثبت بر روی جرم اول ثابت شده است. در اینجا  $C_{WL(R)} = 0.8 C_0$  و  $C_C = 0.8 C_0$  فرض شده است.

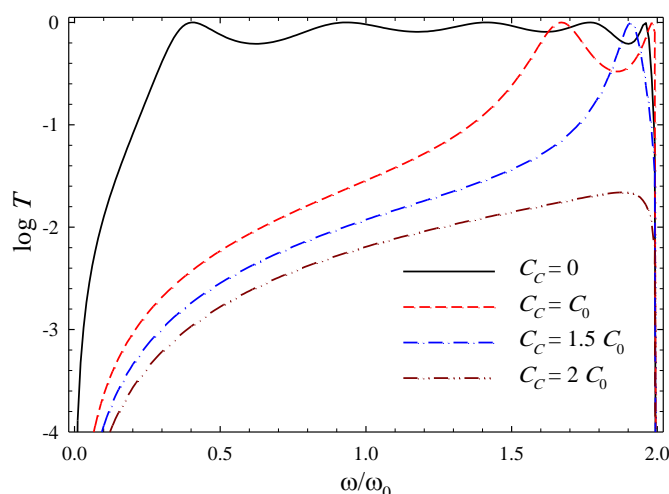


شکل ۳. ضریب عبور فونونی یک زنجیره جرم-فنر ساده پنج جرمی شامل یک دو قطبی الکتریکی که بار مثبت آن در موقعیت  $i=2$  و بار منفی آن در  $j=4$  قرار دارد، بر حسب بسامد فونون ورودی برای چند مقدار ثابت فنر متناسب به برهمکنش کولنی دو قطبی.

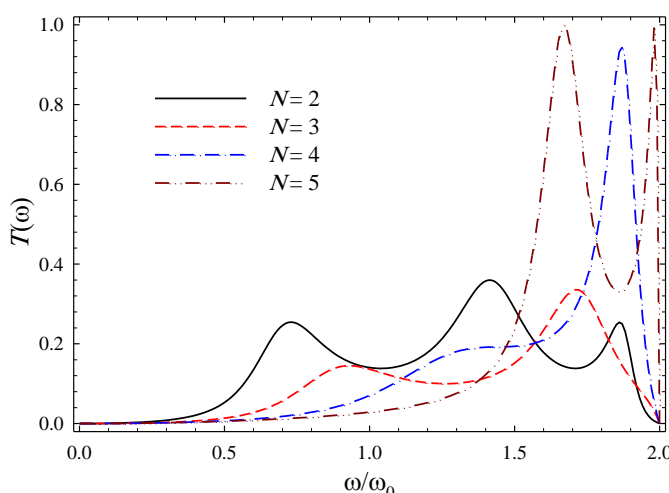
شکل ۳ ضریب عبور فونونی را به صورت تابعی از بسامد فونون ورودی  $(\omega)$  برای چند مقدار متفاوت  $C_C$  و برای موردی که بارهای مثبت و منفی به ترتیب در موقعیت‌های  $i=2$  و  $j=4$  نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌کنیم با افزایش مقدار  $C_C$ ، ضریب عبور فونونی کاهش می‌یابد و تعداد شبه‌مدهای ویژه سامانه

ثابت و بدون تغییر می‌ماند و مکان آن‌ها نیز به سمت بسامدهای پایین جابه‌جا می‌شود. در واقع افزایش این کمیت طبق رابطه (۸) باعث می‌شود که سهم ثابت نیرو از برهمکنش‌های بلندبرد کولنی تأثیرگذار شود و حتی بر الگوی ضریب عبور در فقدان دوقطبی غلبه کند. لازم به ذکر است که مقدار  $C_C$  را می‌توان با افزایش مقدار بار دو قطبی یا کاهش ثابت شبکه، افزایش داد.

### یک زنجیره قطبی در حضور برهمکنش کولنی



شکل ۴. ضریب عبور فونونی بر حسب بسامد فونون ورودی برای یک زنجیره جرم-فنر ساده شامل پنج یون متوالی مثبت و منفی که به دو هادی فونونی ساده متصل است، برای چند مقدار متفاوت  $C_C$ . در اینجا فرض شده است که جرم‌ها در کل سامانه با هم برابرند.



شکل ۵. ضریب عبور فونونی بر حسب بسامد فونون ورودی برای یک زنجیره جرم-فنر ساده پنج جرمی متصل به دو هادی فونونی ساده برای تعداد مختلف یون‌های مثبت و منفی متوالی در ابتدای سامانه مرکزی. در اینجا  $C_C = C_0$  و جرم‌های سامانه یکسان فرض شده است.

در ادامه فرض می‌کنیم که سامانه مرکزی شامل تعداد بیش‌تری یون باشد و در ابتدا موردی را که تمامی جرم‌های سامانه به صورت متوالی دارای بارهای مثبت و منفی باشند، بررسی می‌کنیم. این سامانه شامل ۵ یون است و هر جرم آن با هر جرم هادی‌ها برابر فرض می‌شود. بنابراین علاوه بر نیروی کشسانی که بین جرم‌ها وجود دارد، بین تمام آن‌ها برهم‌کنش کولنی نیز وجود خواهد داشت. شکل ۴ ضریب عبور فونونی این ساختار را به ازاء مقادیر مختلف  $C_C$  به صورت تابعی از بسامد فونونی نشان می‌دهد. هر چه مقدار  $C_C$  افزایش یابد، تعداد قله‌ها و ضریب عبور فونونی کاهش یافته و مکان قله‌ها به سمت بسامدهای بالاتر جابه‌جا می‌شود. همچنین مطابق شکل به ازای بسامدهای بالاتر ضریب عبور با افزایش ثابت برهمکنش کولنی به سمت صفر میل می‌کند. دلیل این امر را می‌توان در بیش‌تر شدن اختلاف فیزیک سامانه مرکزی با هادی‌های متصل و دور شدن از سامانه از حالت ایده‌آل جستجو کرد که باعث می‌شود سامانه مرکزی همانند یک ناخالصی در کل سامانه رفتار کند. برای تکمیل بحث، اثر تعداد یون‌های موجود در سامانه مرکزی را در شکل ۵ آورده‌ایم. این شکل ضریب عبور فونونی را به صورت تابعی از بسامد فونونی برای تعداد متفاوت یون‌های مثبت و منفی که در ابتدای سامانه چیده می‌شوند، نشان می‌دهد. با توجه به شکل با افزایش تعداد یون‌ها ضریب عبور فونونی و تعداد شبه‌مدهای ویژه سامانه کاهش یافته و نیز پهنای ناحیه تونل‌زنی در ابتدای نوار بسامد افزایش می‌یابد. در واقع شکل رابطه پاشندگی سامانه مرکزی با افزایش تعداد یون‌ها از رابطه پاشندگی هادی‌های متصل دور می‌شود.

### نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین به مطالعه ضریب عبور فونونی یک زنجیره جرم-فنر شامل دو یا چند بار الکتریکی مثبت و منفی در حضور برهمکنش کولنی پرداختیم. ابتدا موردی که سامانه مرکزی شامل یک دو قطبی باشد، بررسی شد. هنگامی که مکان بار اول دو قطبی الکتریکی ثابت است، با تغییر مکان بار دوم مشاهده می‌شود با کاهش فاصله بین دو بار الکتریکی ضریب عبور فونونی نیز کاهش می‌یابد. افزایش تعداد یون‌ها باعث کاهش ضریب عبور می‌شود. برای موردی که یک زنجیره پنج یونی با جرم‌های برابر به دو هادی فونونی متصل است، کاهش چشم‌گیر ضریب عبور فونونی را در بسامدهای پایین شاهد هستیم.

### منابع

1. Y. Cui, X. Duan, J. Hu and C. M. Lieber, *J. Phys. Chem.*, **104** (2000) 5213.
2. M. S. Dresselhaus et. al., *Materials Science and Engineering: C*, **23** (2002) 129.
3. J. Sarkar, G. Gopal Khan and A. Basumallick, *Nanowires: Properties, Applications and Synthesis via Porous Anodic Aluminum Oxide Template*, (Indian Academy of Sciences, 2007).
4. M. Mardaani and H. Rabani, *Solid State Commun.*, **151** (2011) 311.

5. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, (California University, Berkeley, 1983).
  6. L. P. Shi, S. J. Xiong, *Phys. Lett. A*, **373** (2009) 563.
  7. M. Mardaani, H. Raban and M. Keshavarz, *Physica E* 44 (2012), 1342.
  8. A. Chaudhuri, *et. al.*, *Phys. Rev. B*, **81** (2010) 064301.
۹. ح. ربانی، م. مردانی و ف. سلیمانی فرد، مجله پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۳، شماره ۲، ۱۳۹۲
۱۰. ح. ربانی، م. مردانی و م. کشاورز، مجله پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۱، شماره ۴، زمستان ۱۳۹۰
۱۱. ح. ربانی، م. مردانی و ف. سلیمانی فرد، کنفرانس فیزیک ایران، یزد، ۱۳۹۱
۱۲. ح. ربانی، م. مردانی و م. کشاورز، مجله پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۱، شماره ۳، پاییز ۱۳۹۰