





دانشگاه پیام نور

دانشکده علوم پایه

مرکز شرق تهران

پایان نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

رشته فیزیک

گروه علمی فیزیک

اثر برهم کنش الکترون - فونون بر ترابرد الکتریکی از یک تک مولکول

فائزه ایزدپناه

استاد راهنما:

دکتر علیرضا صفارزاده

تابستان ۱۳۹۰

تقدیم به

خدایی که آفرید

جهان را، انسان را، عقل را، معرفت را، عشق را و به کسانی که عشقشان را در وجودم دید.

تقدیم به

پدر و مادر عزیزم

که وجودم برایشان همه نبح بود و وجودشان برایم همه مهر و امید
تقدیم به آنها بابت آنچه که دارم و هستم و عذر تقصیر بابت آنچه که ندارم و نیستم.

تقدیم به

خواهر عزیزم شادروان

مهندس فرزانه اینرونا

ایمانوس بی کران عشق و فداکاری که با دعای خیرش مراد انجام این مهم تنها گذاشت.

و تقدیم به

تمام آزاد مردانی که نیک می اندیشند و عقل و منطق را پیشه خود نموده و جز رضای الهی و به شرف و سعادت جامع، هدفی ندارند.

مشکر و قدردانی

سپاس بی‌کران پروردگاری که ما را که هستی مان بخشید و به طریق علم و دانش را بنمونان شد و به بهمنشینی رحمان علم و دانش مفضلان نمود و خوشه‌چینی از علم و معرفت را روزی ما ساخت. سپاس مخصوص خداوند مهربان که به انسان توانایی و دانایی بخشید تا به بندگانش شفقت ورزد، مهربانی کند و در حل مشکلاتش یاری‌شان نماید. از راحت خویش بگذرد و آسایش بنمونان را مقدم دارد، با او معامله کند و در این خلوص انباز نکیر و خوش باشد که پروردگار سمیع و بصیر است. سپاس ایزدمنان که به من این فرصت را داد تا به این مرحله از علم رسیده و از بیچ محبتی دین نکرده و در تمام مراحل زندگیم مراقبت قلب بود.

در اینجا بر خود لازم می‌دانم که از همه اساتید محترم و بزرگوارم در گروه فنیکی دانشکده علوم پایه و کلیه عزیزان و سروران ذیل صمیمانه تشکر و قدردانی نموده و توفیق و سربلندی ایشان را از ایزدمنان طلب نمایم:

◆ استاذ بزرگوار و ارجمندم جناب آقای دکتر علیرضا صفارزاده که راهبانی این پیمان نامه را قبول فرمودند و باربانی‌های ارزنده و کوهبارشان مراد انجام این مهم

یاری نمودند و در تمام مراحل این مطالعه با صبر و حوصله و صمیمیت از حضورشان بهره‌مند شده‌ام و از بیچ تلاشی جهت انجام این تحقیق دین نوزیده‌اند.

◆ استاذ ارجمندم جناب آقای دکتر علی اصغر شکرلی که در طول دوران کارشناسی ارشد از محضرشان کسب علم نمودم.

◆ استاذ کرامتقدر جناب آقای دکتر افشین نمیرانیان که داوری این پیمان نامه را قبول فرمودند.

◆ سرکار خانم دکتر سیما نصری سرپرست محترم مرکز تهران شرق

◆ کارکنان محترم پیام نور به ویژه سرکار خانم مرادی، سرکار خانم بادل، سرکار خانم فری، جناب آقای فیضی، جناب آقای عزتی به خاطر زحمات بی‌دریغشان

◆ بهکلاسی‌ها و بهکاران و دوستان عزیزم به ویژه سرکار خانم مهندس سمانه نجفی دیستانی، سرکار خانم مهندس نیاز مهدی اصفهانی، سرکار خانم مهندس زکریا زارع دار

خداوند را به توفیق تلاش در سنگت، صبر در نوسیدی، رفیق بی‌بمراه، جهاد بی‌سلاح، کار بی‌پاداش، فدکاری در سکوت، دین بی‌دنیا، مذهب بی‌عوام، عظمت بی‌نام،

خدمت بی‌نان، ایمان بی‌ریا، خوبی بی‌نمود، کتاختی بی‌خامی، مناعت بی‌غرور، عشق بی‌هوس، تنهایی در انبوه جمعیت و دوست داشتن بی‌آنکه دوست بدانند، رعایت فرما

فائزه ایزدناه

تابستان ۱۳۹۰

چکیده:

در این پایان نامه تأثیر ارتعاشات مولکولی روی ترابرد الکترونی از یک زنجیره اتمی از طلا که بین دو الکتروود فلزی ساندویچ شده به روش تابع گرین غیرتعادلی کلدیش (روشی قدرتمند برای تحلیل ترابرد ناکشسان در حضور برهمکنش الکترون- فونون) مورد تحقیق قرار گرفته است. اخیراً روش NEGF به طور موفقیت آمیزی برای ترابردهای ناکشسان در نانو ساختارهای مختلف به کار برده شده است از جمله سیم‌های اتمی و اتصالات مولکولی.

برای بدست آوردن مدهای فونونی از مدل کلاسیکی گلوله و فنر و برای جفت شدگی الکترون- فونون از مدل Su-Shrieffer-Heeger استفاده می‌شود. اثر نفوذ متقابل بین فونون و الکترون در فرآیند تونل زنی الکترون در یک تقریب کلی و جامع خودسازگار بورن در نظر گرفته شده است. نتایج نشان می‌دهد هنگامیکه ولتاژ بایاس با انرژی ارتعاشی خاصی جفت می‌شود، پله‌هایی در مشتق اول جریان نسبت به ولتاژ ظاهر می‌شوند. این رفتار در مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ، خود را بصورت تابع دلتا نشان می‌دهد. جریان ناکشسان در دماهای پایین صورت می‌پذیرد و در دماهای بالا الکترون نمی‌تواند فونونی را برانگیخته کند. هنگامیکه ولتاژ بایاس بزرگتر از انرژی برانگیختگی فونون است، الکترون بخشی از انرژی خود را از دست می‌دهد (گسیل) و یا بدست می‌آورد (جذب). رخ دادن جذب یا گسیل فونون به انرژی جفت شدگی الکترون- مولکول و انرژی جایگاهی اتمها در مولکول بستگی دارد. در محاسبات جریان ناکشسان، ما برهمکنش الکترون- فونون ضعیف را به کار برده‌ایم. در انتهای نتایج در مورد مولکول بنزن نیز شکلهایی آورده شده است.

کلید واژه: برهمکنش الکترون- فونون، رسانش الکتریکی، تابع گرین غیرتعادلی، تقریب خودسازگار

بورن

فهرست مطالب

فصل اول: ترابرد کوانتومی براساس فرمول بندی تابع گرین غیرتعادلی

۱-۱	مقدمه	۲
۲-۱	چگونگی شارش جریان	۳
۳-۱	جنبه کوانتومی رسانش	۶
۴-۱	سیستم‌های باز	۱۰
۵-۱	تابع گرین و طول عمر	۱۸
۱-۵-۱	مفهوم فیزیکی خود انرژی	۲۱

فصل دوم: به سوی الکترونیک مولکولی

۱-۲	مقدمه	۲۵
۲-۲	رسانایی در مولکول‌های منفرد	۲۸
۱-۲-۲	میکروسکوپ تونلی روبشی	۲۸
۲-۲-۲	STM	۳۰
۱-۲-۲-۲	نگاهی اجمالی به اصول کلی عملکرد STM	۳۲
۲-۲-۲-۲	روش‌های مبتنی بر استفاده مستقیم از STM در تعیین مشخصات سطوح	۳۴
۳-۲-۲-۲	مد جریان ثابت	۳۴
۴-۲-۲-۲	مد ارتفاع ثابت	۳۶
۵-۲-۲-۲	مد نقشه برداری از تابع کار سطح	۳۷
۶-۲-۲-۲	تعیین نقشه "چگالی حالات انرژی الکترون‌ها" در نقاط مختلف سطح	۳۷
۷-۲-۲-۲	مد سنجش نقشه "ترازهای انرژی ارتعاشی الکترون‌ها" در نقاط مختلف سطح	۳۸
۳-۲-۲	STM-IETS	۳۹
۳-۲	سیم‌های اتمی	۴۰
۴-۲	ترابرد ناکشسان	۴۱
۵-۲	انگیزه و طرح کلی پایان نامه	۴۲

فصل سوم: فرآیندهای عبور

- ۳-۱ تأثیر برخی مقیاس‌های طولی در فرآیند عبور..... ۴۵
- ۳-۱-۱ طول موج دو بروی..... ۴۵
- ۳-۱-۲ مسافت آزاد میانگین..... ۴۶
- ۳-۱-۳ طول واهلش فاز..... ۴۶
- ۳-۲ فرآیند عبور کلاسیک..... ۴۷
- ۳-۳ فرآیند عبور کوانتومی..... ۴۸
- ۳-۳-۱ عبور بالیستیک..... ۴۸
- ۳-۳-۲ عبور پخشی..... ۵۰
- ۳-۳-۳ ضریب عبور و جریان در ترابرد همدوس..... ۵۰
- ۳-۴ تابع گرین سیم کوانتومی بی نهایت..... ۵۴
- ۳-۵ تابع گرین سیم کوانتومی نیم بی نهایت..... ۵۶

فصل چهارم: طیف سنجی تونل زنی ناکشسان الکترون

- ۴-۱ مقدمه..... ۵۹
- ۴-۲ قسمت تئوری طیف سنجی تونل زنی ناکشسان الکترون..... ۶۱

فصل پنجم: مدل تنگ بست برای ترابرد ناکشسانی در سیم‌های اتمی

- ۵-۱ مقدمه..... ۷۴
- ۵-۲ ارتعاشات زنجیره یک بعدی..... ۷۶
- ۵-۱-۲ مدهای نرمال ارتعاشی..... ۷۶
- ۵-۲-۲ تعیین میزان ارتعاشات..... ۷۹
- ۵-۳ مدل تنگ بست برای اربیتال‌های الکترونیک..... ۸۱

فصل ششم: شکل‌ها و نتایج

۱-۶	مقدمه.....	۸۴
۲-۶	پارامترها برای زنجیره طلا.....	۸۴
۳-۶	محاسبه مد ارتعاشی و جفت شدگی الکترون-فونون.....	۸۵
۴-۶	جریان کشسان و جریان کل.....	۹۱
۵-۶	شکل‌های مشتق اول و مشتق دوم d^2I/dV^2 جریان ناکشسان.....	۹۱
۶-۶	تفاوت رسانندگی و مشتق دوم جریان با توجه به دو ثابت فتر $K=2$ و $K=4$	۱۱۱
۷-۶	مقایسه رسانندگی و مشتق دوم جریان برای سه اتم بین دو الکتروود با افزایش دما.....	۱۱۵
۸-۶	بررسی چگونگی رخ دادن گسیل و جذب فونون.....	۱۲۰
۹-۶	رسانندگی و مشتق دوم جریان ناکشسان برای سه اتم بین دو الکتروود برای تمام مدهای ارتعاشی.....	۱۲۳
۱۰-۶	رسانندگی و مشتق دوم جریان ناکشسان برای مولکول بنزن.....	۱۲۶
	نتیجه‌گیری.....	۱۳۰
	منابع.....	۱۳۱

فهرست شکل‌ها

- شکل (۱-۱): ولتاژ بایاس اعمالی به سیستم پتانسیل شیمیایی در چاهک را نسبت به چشمه پایین می‌آورد. ۴.....
- شکل (۲-۱): شارش الکترون به داخل و خارج کانال تک ترازوی متصل به چشمه و چاهک تصویر ساده‌ای از رابطه سرعت..... ۵.....
- شکل (۳-۱): (a)، کانالی تک ترازوی که با اعمال ولتاژ بایاس اختلاف بین پتانسیل شیمیایی چشمه و چاهک اتفاق می‌افتد. (b)، پهن شدگی ترازها در فرآیند جفت شدگی کانال..... ۷.....
- شکل (۴-۱): (a)، چگالی حالت‌ها قبل از اتصال. (b)، چگالی حالت‌ها پس از جفت شدگی..... ۸.....
- شکل (۵-۱): کانال متصل به یک منبع. مجموعه‌ای از حالت‌های گسسته به حالت‌های پیوسته تبدیل می‌شوند..... ۱۰.....
- شکل (۶-۱): کانال با هامیلتونی $[H]$ با ماتریس جفت شدگی $[\tau]$ به الکتروود با هامیلتونی $[H_R]$ متصل شده است..... ۱۱.....
- شکل (۷-۱): سیم کوانتومی نیم بی نهایت متصل به یک کانال..... ۱۲.....
- شکل (۸-۱): (a)، کانال بدون الکترون جدا شده از الکتروود در حالی که الکترون‌ها حالت‌های $\{\Phi_R\}$ را در الکتروود اشغال کرده‌اند. (b)، توابع $\{\Phi_R\}$ ، پس از جفت شدگی داخل کانال پخش شده منجر به توابع $\{\psi_R\}$ می‌شوند..... ۱۴.....
- شکل (۹-۱): نمایی از اندازه هر عنصر قطری توابع گرین تأخیری و پیش رونده در نمایش ویژه حالت‌ها و تابع طیفی در محدوده زمان..... ۲۰.....
- شکل (۱۰-۱): ترازهای انرژی منبع در اتصال با کانال تک ترازوی..... ۲۲.....
- شکل (۱-۲): تصویری ساده از فرآیند تونل زنی کشسان و ناکشسان..... ۲۷.....
- شکل (۲-۲): اندازه‌گیری رسانش با STM..... ۳۰.....
- شکل (۳-۲): نمایش نمادین اجزای اصلی و اصول عملکرد دستگاه STM..... ۳۲.....
- شکل (۴-۲): نمایش نمادین برقراری جریان..... ۳۳.....
- شکل (۵-۲): مسیر سوزن در مد جریان ثابت..... ۳۵.....
- شکل (۶-۲): ساختار اتمی یک نانوتیوب تک جداره بدست آمده توسط STM..... ۳۵.....

- شکل (۷-۲): ساختار اتمی سطح سیلیکون بدست آمده توسط STM..... ۳۶
- شکل (۸-۲): مسیر سوزن در مد ارتفاع ثابت..... ۳۶
- شکل (۹-۲): نمودار مشتق اول جریان نسبت به ولتاژ..... ۳۸
- شکل (۱۰-۲): نمودار مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برحسب ولتاژ برای سه نقطه سطحی A و B و C (همانطور که دیده می شود در ماده A پیک های ترازهای ارتعاشی مربوط به ترکیبات C-H دیده نمی شود)..... ۳۹
- شکل (۱۱-۲): اندازه گیری ها برای سیم های کوتاه و بلند..... ۴۱
- شکل (۱-۳): فرآیندهای مختلف پراکندگی..... ۴۹
- شکل (۲-۳): شارش الکترون ها به داخل و خارج کانال، مدل تراز مستقل..... ۵۱
- شکل (۳-۳): شار ورودی و شار خروجی برای یک دستگاه چند تراز که ترازهای انرژی آن توسط ماتریس هامیلتونی H و جفت شدگی آن با چشمه و چاهک با به ترتیب ماتریس های خود انرژی Σ_1 و Σ_2 نشان داده می شود..... ۵۱
- شکل (۱-۴): تصویری از سیستمی با دو الکتروود فلزی، یک مولکول در وسط و ولتاژ به کار برده شده بین دو الکتروود چپ و راست..... ۶۰
- شکل سمت چپ: الکترون های متحرک انرژی کافی برای برانگیختن یک فونون را ندارند به همین دلیل تنها تونل زنی کشسان اتفاق می افتد.
- شکل میانی: هنگامیکه ولتاژ بایاس بیشتر از الکترون ورودی باشد می تواند یک فونون را برانگیخته کند و تونل زنی ناکشسان اتفاق می افتد.
- شکل سمت راست: الکترون های متحرک همچنین می توانند برانگیخته شوند و دوباره یک فونون جذب کنند که منجر به دومین مرتبه تونل زنی کشسان می شود.
- شکل (۲-۴): شمایی از ساختار الکترون تونل زنی ناکشسان در مدل تک سطح..... ۶۰
- شکل (۳-۴): تغییر شیب در جریان نسبت به ولتاژ منجر به پله در مشتق اول جریان و قله در مشتق دوم جریان می شود..... ۶۱
- شکل (۱-۵): نمونه تصویری از الکترون مجاز در فرآیند پراکندگی در یک زنجیره نامحدود یک بعدی با مسافت درون اتمی a ۷۵

- شکل (۲-۵): نمایش گرافیکی مدل گلوله‌ها و فنرها..... ۸۱
- شکل (۱-۶): مدل گرافیکی گلوله و فنر با دو ثابت فنر متفاوت..... ۸۴
- شکل (۲-۶): انرژی ارتعاشی سه مد فونونی..... ۸۷
- شکل (۳-۶): انرژی ارتعاشی شش مد فونونی..... ۸۹
- شکل (۴-۶): (الف) جریان کشسان. (ب) جریان کل..... ۹۱
- شکل (۵-۶): ناحیه ارتعاشی ساندویچ شده بین دو الکتروود..... ۹۲
- شکل (۶-۶): تک تراز مولکولی ساندویچ شده بین دو الکتروود..... ۹۳
- شکل (۷-۶): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 $\Omega_1 = 11/27 \text{ meV}$ ($\Omega = \hbar\omega$)..... ۹۴
- شکل (۸-۶): رسانندگی برای زمانی که $M=0$ (جفت شدگی بین الکترون و فونون ایجاد نشده است)..... ۹۴
- شکل (۹-۶): رسانندگی برای دو مد فونونی اول $\Omega_1 = 12/03 \text{ meV}$ و سوم $\Omega_3 = 4/98 \text{ meV}$
در دمای صفر درجه کلوین..... ۹۷
- شکل (۱۰-۶): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 $\Omega_1 = 12/03 \text{ meV}$ ۹۷
- شکل (۱۱-۶): رسانندگی برای دو مد فونونی اول $\Omega_1 = 12/38 \text{ meV}$ و سوم $\Omega_3 = 7/65 \text{ meV}$
در دمای صفر درجه کلوین..... ۹۹
- شکل (۱۲-۶): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 $\Omega_1 = 12/38 \text{ meV}$ ۹۹
- شکل (۱۳-۶): رسانندگی برای سه مد فونونی اول $\Omega_1 = 12/77 \text{ meV}$ و سوم $\Omega_3 = 10/82 \text{ meV}$
و پنجم $\Omega_5 = 7/23 \text{ meV}$ در دمای صفر درجه کلوین..... ۱۰۲
- شکل (۱۴-۶): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 $\Omega_1 = 12/77 \text{ meV}$ ۱۰۲
- شکل (۱۵-۶): رسانندگی برای هفت مد فونونی در دمای صفر درجه کلوین..... ۱۰۵

- شکل (۶-۱۶): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 ۱۰۵..... $\Omega_1 = 12/98 \text{ meV}$
- شکل (۶-۱۷): رسانندگی برای یازده مد فونونی در دمای صفر درجه کلونین.....
 ۱۰۹.....
- شکل (۶-۱۸): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 ۱۰۹..... $\Omega_1 = 13/01 \text{ meV}$
- شکل (۶-۱۹): (الف) مدهای نرمال و انرژی ارتعاشی زنجیره ۵ اتمی با $K=2 \text{ [eV/\text{Å}^2]}$
 (ب) مدهای نرمال و انرژی ارتعاشی زنجیره ۵ اتمی با $K=4 \text{ [eV/\text{Å}^2]}$
 ۱۱۱.....
- شکل (۶-۲۰): (الف) مشخصه مشتق اول جریان نسبت به ولتاژ برای $K=2$ برای سه مد فونونی
 (ب) مشخصه مشتق اول جریان نسبت به ولتاژ برای $K=4$ برای سه مد فونونی.....
 ۱۱۲.....
- شکل (۶-۲۱): (الف) رسانندگی برای $K=2$, (ب) رسانندگی برای $K=4$, خط نقطه چین رسانندگی
 برای زمانی که جفت شدگی الکترون-فونون نداریم.....
 ۱۱۳.....
- شکل (۶-۲۲): (الف) مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای $K=2$ و یک مد فونونی $\Omega_1 = 12/7 \text{ meV}$
 (ب) برای $k=4$ و یک مد فونونی $\Omega_1 = 17/9 \text{ meV}$
 ۱۱۴.....
- شکل (۶-۲۳): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 در دمای $T=10$ کلونین..... $\Omega_1 = 12/38 \text{ meV}$
 ۱۱۶.....
- شکل (۶-۲۴): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 در دمای $T=20$ کلونین..... $\Omega_1 = 12/38 \text{ meV}$
 ۱۱۶.....
- شکل (۶-۲۵): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 در دمای $T=30$ کلونین..... $\Omega_1 = 12/38 \text{ meV}$
 ۱۱۷.....
- شکل (۶-۲۶): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 در دمای $T=50$ کلونین..... $\Omega_1 = 12/38 \text{ meV}$
 ۱۱۷.....
- شکل (۶-۲۷): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 در دمای $T=100$ کلونین..... $\Omega_1 = 12/38 \text{ meV}$
 ۱۱۸.....
- شکل (۶-۲۸): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 در دمای $T=150$ کلونین..... $\Omega_1 = 12/38 \text{ meV}$
 ۱۱۸.....

- شکل (۶-۲۹): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 ۱۱۹..... $\Omega_1 = 12/38 \text{ meV}$ در دمای $T=500$ کلوین.....
- شکل (۶-۳۰): تک تراز مولکولی ساندویچ شده بین دو الکترون با $\epsilon_0=1$ الکترون ولت.....
 ۱۲۰.....
- شکل (۶-۳۱): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 ۱۲۱..... $\Omega_1 = 12/38 \text{ meV}$
- شکل (۶-۳۲): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی دوم
 ۱۲۱..... $\Omega_1 = 10/53 \text{ meV}$
- شکل (۶-۳۳): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی سوم
 ۱۲۲..... $\Omega_1 = 7/65 \text{ meV}$
- شکل (۶-۳۴): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی چهارم
 ۱۲۲..... $\Omega_1 = 4/02 \text{ meV}$
- شکل (۶-۳۵): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 ۱۲۴..... $\Omega_1 = 12/38 \text{ meV}$
- شکل (۶-۳۶): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی دوم
 ۱۲۴..... $\Omega_1 = 10/53 \text{ meV}$
- شکل (۶-۳۷): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی سوم
 ۱۲۵..... $\Omega_1 = 7/65 \text{ meV}$
- شکل (۶-۳۸): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی چهارم
 ۱۲۵..... $\Omega_1 = 4/02 \text{ meV}$
- شکل (۶-۳۹): (الف): رسانندگی (ب): مشتق دوم جریان نسبت به ولتاژ برای مد فونونی اول
 ۱۲۹..... $\Omega_1 = 216/74 \text{ meV}$ در دمای $T=26$ کلوین.....

فهرست جداول

- جدول (۱-۶): پارامترهای مورد استفاده در مدل حاضر زنجیره اتمی طلا..... ۸۵
- جدول (۲-۶): پارامترهای مورد استفاده در زنجیره اتمی طلا با ثابت فنر $K=۲$ ۹۲
- جدول (۳-۶): نتایج عددی برای مطالعه زنجیره اتمی با طول‌های متفاوت..... ۱۱۰
- جدول (۴-۶): پارامترهای مورد استفاده در مدل زنجیره اتمی طلا با ثابت فنر ۴ و $K=۲$ ۱۱۲
- جدول (۵-۶): پارامترهای مورد استفاده در زنجیره اتمی طلا با ثابت فنر $K=۲$ ، $\epsilon_0=۱$ و $\Gamma_{L/R}=۰/۵$ ۱۲۰

فصل اول

ترابرد کوانتومی براساس فرمول بندی

تابع گرین غیرتعادلی

۱-۱: مقدمه

برای بررسی چگونگی شارش جریان، اولین قدم در نظر گرفتن تراز انرژی در حال تعادل و چشمه و چاهک با پتانسیل‌های شیمیایی (تراز فرمی) یکسان است. هنگامیکه یک منبع خارجی مانند یک باتری باعث ایجاد اختلاف در پتانسیل شیمیایی الکترودها (چشمه و چاهک) شود و آنها را در دو پتانسیل شیمیایی متفاوت μ_1 و μ_2 نگه دارد، $\mu_2 - \mu_1 = V_D$ کانال در یک حالت غیرتعادلی قرار می‌گیرد و جریان برقرار می‌شود. جریان عبوری از یک دستگاه کاملاً کوچک با یک تراز انرژی در محدوده انرژی مورد نظر، به آسانی محاسبه می‌شود و همانطور که انتظار داریم این جریان به کیفیت اتصال‌ها بستگی دارد. برای کانالی با یک تراز انرژی رسانندگی حداکثری وجود دارد، که یک ثابت اساسی است و بستگی به بار الکترون و ثابت پلانک دارد. (داتا^۱، ۲۰۰۵ و ۱۹۹۵)

$$G_0 \equiv \frac{q^2}{h} = 38.7 \mu s = (25.8 k\Omega)^{-1} \quad (1-1)$$

کانال‌های کوچک با دو تراز انرژی (یکی اسپین بالا و دیگری اسپین پایین) یکسان (ترازهای تبهگن) دارای رسانایی برابر با $2G_0$ هستند. اما اگر اتصال الکترودها نامناسب باشد، رسانایی کمتر از این خواهد بود. اما در هر حال، حد بالایی برای رسانایی وجود دارد که با کامل‌ترین الکترودها به دست می‌آید. برای اندازه‌گیری رسانایی در یک جسم بسیار کوچک باید دو الکترودها را به آن متصل کنیم. تا اواخر قرن بیستم، هیچ‌گونه اطلاعی از نحوه اتصال الکترودها و اندازه‌گیری رسانایی یک جسم بسیار کوچک وجود نداشت. اما در نهایت طول رساناها از $10 \mu m$ در سال ۱۹۶۰ به $0.1 \mu m$ در سال ۲۰۰۰ رسید و این کاهش اندازه در رساناها به طراحان و مهندسان این فرصت را داد تا بتوانند تعداد ترانزیستورهای داخل یک تراشه را ۱۰۰۰۰ برابر افزایش دهند که خود انقلابی در صنعت کامپیوتر بود. در ادامه فصل درباره چگونگی عبور الکترون‌ها در سیستم‌های مزوسکوپیک در حال تعادل بحث خواهیم کرد و مفاهیمی چون پهن‌شدگی ترازهای انرژی، تابع گرین و طول عمر را بررسی می‌کنیم.

¹ Datta

۲-۱: چگونگی شارش جریان

اگر چشمه و چاهک به کانال متصل شوند (با $V_D = 0$)، الکترون‌ها در دمای متداول $T = 300k$ به داخل و خارج قطعه حرکت می‌کنند و سعی می‌کنند که با انرژی μ در تعادل باشند و در این حالت تعداد الکترون‌ها در هر تراز انرژی نوعاً یک عدد نیست و با تابع فرمی زیر داده می‌شود:

$$f_0(E - \mu) = \frac{1}{1 + \exp[(E - \mu)/K_B T]} \quad (2-1)$$

ترازهای انرژی زیر پتانسیل شیمیایی μ ، همیشه پر هستند و $f_0 = 1$ در حالیکه ترازهای انرژی بالاتر از μ همیشه خالی هستند و $f_0 = 0$. ترازهای انرژی با چند $K_B T$ بالاتر و پایین‌تر از μ گاهی پر و گاهی خالی هستند. بنابراین تعداد متوسط الکترون‌ها بین صفر تا یک است. توجه کنید که این عدد از یک تجاوز نمی‌کند زیرا طبق اصل طرد بیشتر از یک الکترون در هر تراز مجاز نیست.

برای نمایش چگونگی شارش جریان در یک مولکول، دستگاهی متصل به دو منبع، دو الکتروود چشمه^۱ و چاهک^۲ را در نظر می‌گیریم که در پتانسیل‌های شیمیایی (ترازهای فرمی) یکسان و در حالت تعادل با یکدیگر و با منبع قرار دارند. هنگامی که توسط یک منبع خارجی مانند باتری، اختلاف پتانسیل میان پتانسیل‌های شیمیایی μ_1 و μ_2 در دو الکتروود ایجاد شود، حالت تعادل بین کانال و الکتروودها از بین می‌رود. در واقع باتری ترازهای انرژی در چاهک را نسبت به ترازهای انرژی چشمه جا به جا کرده و پایین‌تر می‌آورد و اختلاف پتانسیلی بین این دو وضع ایجاد می‌کند، $qV = (\mu_1 - \mu_2)$ و این موضوع منجر به ایجاد توابع فرمی متفاوت می‌شود، شکل (۱).

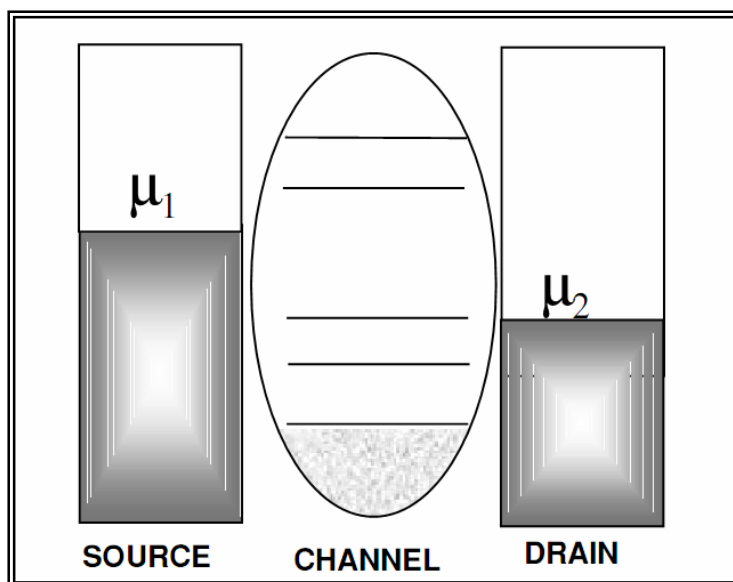
$$f_1(\mathcal{E}) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu_1}{K_b T}\right)} \equiv f_0(E - \mu_1) \quad (3-1)$$

$$f_2(\mathcal{E}) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu_2}{K_b T}\right)} \equiv f_0(E - \mu_2) \quad (4-1)$$

¹ Source

² Drain

هرکدام از الکترودها سعی می‌کند که دستگاہ را به حالت تعادل با خود در آورد. الکتروده چشمه، الکترون‌ها را به داخل کانال می‌فرستد و الکتروده چاهک برای رسیدن به تعادل با کانال، الکترون‌ها را بیرون می‌کشد و کانال در حالتی غیرتعادلی بین این دو منبع قرار می‌گیرد. کانالی با یک تراز، متصل بین دو منبع که در پتانسیل‌های متفاوت قرار دارند و تراز انرژی ϵ آن بین این دو پتانسیل قرار دارد، شکل (۱-۱)، در نظر می‌گیریم. چشمه، تعداد $f_1(\epsilon)$ الکترون را مشاهده می‌کند و الکتروده چاهک تعداد $f_2(\epsilon)$ الکترون را می‌بیند که ترازها را اشغال کرده‌اند. $f_1(\epsilon)$ و $f_2(\epsilon)$ توابع فرمی در دو الکتروده هستند و تعداد متوسط الکترون‌ها در حالت تعادل پایدار و مقداری بین $f_1(\epsilon)$ و $f_2(\epsilon)$ است.



شکل (۱-۱): ولتاژ بایاس اعمالی به سیستم پتانسیل شیمیایی در چاهک را نسبت به چشمه پایین می‌آورد.

شار خالص I_1 که از الکتروده چپ در جریان است، متناسب با $(f_1 - N)$ است.

$$I_1 = \frac{q\gamma_1}{h} (f_1 - N) \quad (5-1)$$

بار هر الکترون، $-q$ ، است.

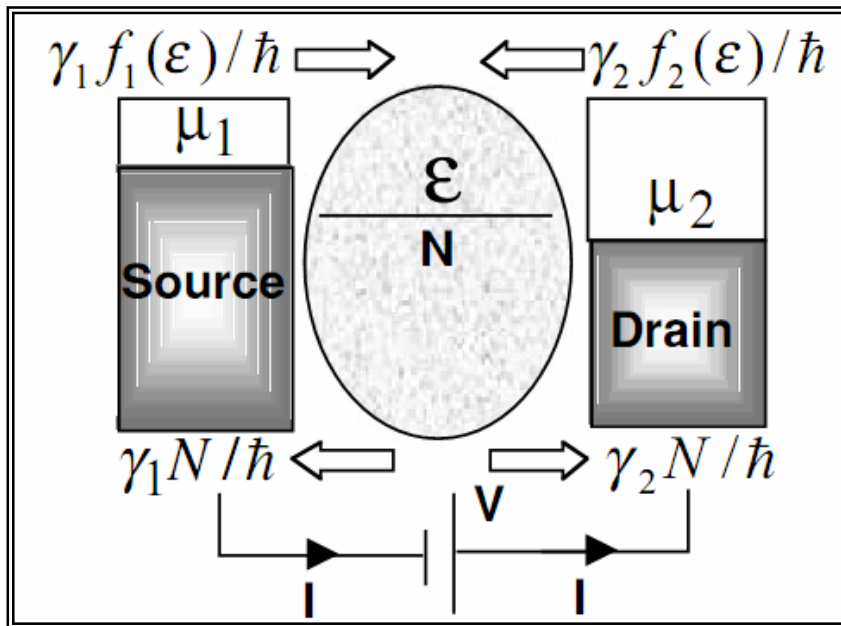
به طور مشابه جریان I_2 از سمت راست در جریان است و متناسب است با:

$$I_2 = \frac{q\gamma_2}{\hbar}(f_2 - N) \quad (6-1)$$

الکترونی که در تراز ϵ قرار دارد، از چشمه و چاهک به ترتیب با سرعت‌های γ_1/\hbar و γ_2/\hbar فرار می‌کند. γ_1 و γ_2 دارای بعد انرژی هستند. شکل (۲-۱)

در حالت تعادل، هیچ جریان ورودی و خروجی به داخل کانال وجود ندارد و $I_1 + I_2 = 0$ است. $3N$ ، عدد اشغال، تعداد الکترون‌هایی است که هر کدام از الکترونها آن را می‌بیند:

$$N = \frac{\gamma_1 f_1 + \gamma_2 f_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (7-1)$$



شکل (۲-۱): شارش الکترون به داخل و خارج کانال تک تراز متصل به چشمه و چاهک. تصویر ساده‌ای از رابطه سرعت.

و جریان در حالت تعادل برابر است با

$$I_1 = I_2 = \frac{q}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} [f_1(\epsilon) - f_2(\epsilon)] \quad (8-1)$$

که این مقدار برای حالتی با دو اسپین، دو برابر می‌شود.

این نتایج، حقایقی ساده درباره فرآیند شارش جریان را به تصویر می‌کشند. اول اینکه، هنگامیکه $f_1(\mathcal{E}) = f_2(\mathcal{E})$ هیچ جریانی وجود ندارد. تراز با انرژی پایین‌تر از μ_1 و μ_2 ، سهمی در جریان ندارد. زیرا $f_1(\mathcal{E}) = f_2(\mathcal{E}) = 1$ و تراز با انرژی بالاتر نیز سهمی ندارد. زیرا $f_1(\mathcal{E}) = f_2(\mathcal{E}) = 0$. تنها هنگامی که تراز انرژی در کانال، چند $k_B T$ بالاتر یا پایین‌تر از μ_1 و μ_2 ، قرار داشته باشد و $f_1(\mathcal{E}) \neq f_2(\mathcal{E})$ ، شاهد شارش جریان خواهیم بود.

الکتروود چشمه سعی می‌کند که الکترون‌ها به داخل کانال پمپ کرده و تعداد آنها را از N به f_1 برساند، در حالیکه الکتروود چاهک الکترون‌ها را به بیرون از کانال کشیده تا تعداد آنها را به f_2 برساند و نتیجه این فرآیند، تراورد پیوسته الکترون‌ها از چشمه به چاهک است.

۳-۱: جنبه کوانتومی رسانش

کانالی را در نظر می‌گیریم که ولتاژ کوچکی به آن اعمال می‌شود و باعث اختلاف میان پتانسیل‌های شیمیایی چشمه و چاهک می‌شود (شکل (۳-۱)). جریان عبوری در این دستگاه از رابطه (۱-۸) به دست می‌آید. با فرض $\mu_1 > \mathcal{E} > \mu_2$ و دمای به اندازه کافی پایین داریم، $f_1(\mathcal{E}) \equiv f_0(E - \mu_1) \approx 1$ و $f_2(\mathcal{E}) \equiv f_0(E - \mu_2) \approx 0$ اگر $\gamma_1 = \gamma_2$

$$I = \frac{q}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} = \frac{q \gamma_1}{2\hbar} \quad (۹-۱)$$

به همین دلیل می‌توانیم جریان نامحدودی را در این کانال با افزایش $\gamma_1 (= \gamma_2)$ وارد کنیم که این کار با جفت شدگی هر چه قوی‌تر الکتروودها با کانال میسر است. هر چند که یکی از نتایج اصلی فیزیک مزوسکوپی رسنایی حداکثر G_0 در کانال تک تراز است اما نکته ای که نباید فراموش شود پهن شدگی ترازهای انرژی است که از نتایج اجتناب ناپذیر جفت شدگی کانال با الکتروودها است. این موضوع باعث می‌شود که قسمتی از تراز انرژی به خارج از محدوده انرژی میان μ_1 و μ_2 که جریان در آن شارش دارد نفوذ کند. به این ترتیب جریان واقعی نسبت به مقداری که در رابطه (۹-۱) وجود دارد با ضریب $C \gamma_1 / (\mu_1 - \mu_2)$ که کسری از تراز است که در پنجره میان μ_1 و μ_2 قرار می‌گیرد کاهش می‌یابد. $C \gamma_1$ عرض مؤثر تراز است و C یک مقدار عددی ثابت است. از آنجائیکه