

The size-dependent magnetoconductance of a polyacetylene nanoring

F. Moghadasi¹

M. Mardaani²

H. Rabani³

Received: 2015.6.2

Accepted: 2015.11.24

Abstract

In this paper, we study the size-dependent electronic conductance of a polyacetylene nanoring in the presence and absence of magnetic field by using Green's function technique at the tight-binding approach. We consider two types of the nanoring that the number of single and double bonds in the possible paths for electron be or not be identical. The results show that the tunneling conductance in the gap region decreases exponentially and the number of peaks in the resonance region increase by increasing the length of the nanoring. By applying a magnetic field, the position of resonance peaks in the conductance spectrum shift and the tunneling conductance changes too. This means that for a nanoring with fixed length and in the presence of magnetic field, the tunneling conductance improves for the case that there is not bonding symmetry on the electron paths with respect to the absence of field. There is a vise-versa situation for the symmetric case.

Keywords: polyacetylene nanoring, electronic conductance, tight-binding, magnetic flux.

¹ Lecturer of Physics, Shahrekord University, fatemehmoghadasi118@yahoo.com

² Associate Professor of Physics, Shahrekord University

³ Associate Professor of Physics, Shahrekord University

وابستگی مغناطورسانش الکترونی یک نانو حلقه پلی استیلنی به اندازه آن

فاطمه مقدسی^۱

محمد مردانی^۲

حسن ربانی^۳

تاریخ دریافت: ۹۴/۳/۱۲

تاریخ تصویب: ۹۴/۹/۳

چکیده

در این مقاله به کمک روش تابع گرین و رهیافت تنگ بست، رسانش الکترونی یک نانو حلقه پلی استیلنی را در اندازه‌های متفاوت در حضور و غیاب میدان مغناطیسی بررسی می‌کنیم. دو موردی از نانو حلقه را که تعداد پیوندهای یگانه و دوگانه در دو مسیر ممکن الکترون یکسان باشد و نباشد، مورد بررسی قرار می‌دهیم. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش طول نانو حلقه، رسانش

^۱ مربی فیزیک، دانشگاه شهرکرد؛ fatemehmoghadasil18@yahoo.com

^۲ دانشیار فیزیک، دانشگاه شهرکرد

^۳ دانشیار فیزیک، دانشگاه شهرکرد

تونل زنی در ناحیه گاف به صورت نمایی کاهش و تعداد قله های رسانش در ناحیه تشدید می یابد. با اعمال میدان مغناطیسی مکان قله های تشدید در طیف رسانش جابجا شده و رسانش ناحیه تونل زنی نیز تغییر می یابد. بدین صورت که برای نانو حلقه ای با طول ثابت، رسانش تونل زنی به دلیل ارجح شدن یکی از مسیرها، برای موردی که تقارن بین مسیرها از نظر پیوندی وجود ندارد، در حضور میدان نسبت به غیاب آن بهبود می یابد و بالعکس برای موردی که تقارن وجود دارد، تضعیف می شود.

واژه های کلیدی: نانو حلقه ی پلی استیلنی، رسانش الکترونی، تنگ بست، شار مغناطیسی.

۱. مقدمه

هر چند بیش از یک دهه از ساخت اولین نانو حلقه نمی گذرد، ولی این سامانه شگفت انگیز توجه زیادی را به خود جلب کرده است [۱]. از کاربردهای نانو حلقه ها می توان به ذخیره کردن انرژی خورشیدی در موجرها [۲]، تشدید کننده های نانو حلقه برای کنترل نور [۳]، نانو ترانزیستورها [۴] و غیره اشاره کرد. از طرفی پیشرفت های زیادی که در زمینه فناوری نانو صورت گرفته به ما امکان مطالعه ترابرد الکترون در سامانه کوانتومی کم بعد را می دهد [۵و۶]. یک حلقه فلزی مزوسکوپی، مثال خوبی از یک سامانه کوانتومی محدود شده است. به کمک این حلقه ها می توانیم دستگاهی بسازیم که به عنوان یک گیت عمل کند. بنابراین یکسو کننده ها و مدارهای منطقی ترکیبی را می توان به کمک این نانو حلقه ها طراحی کرد [۷-۹]. همچنین می توان مقاومت یک نانو حلقه را توسط میدان های الکتریکی و مغناطیسی تنظیم کرده و خواص الکتریکی متفاوتی را با تغییر هندسه آن به دست آورد و پدیده هایی مانند اثر گیت و یا اثر آهارانوف - بوهم را در آن مشاهده کرد [۱۰و۱۱].

در این تحقیق با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت تنگابست به محاسبه رسانش الکتریکی یک نانو حلقه پلی استیلنی در حضور یک میدان مغناطیسی می پردازیم. سپس با

فرض اینکه شار میدان مغناطیسی بر واحد سطح ثابت باشد، اثر اندازه نانو حلقه را بر تراپرد آن مورد بررسی قرار می‌دهیم.

۲. فرمول‌بندی

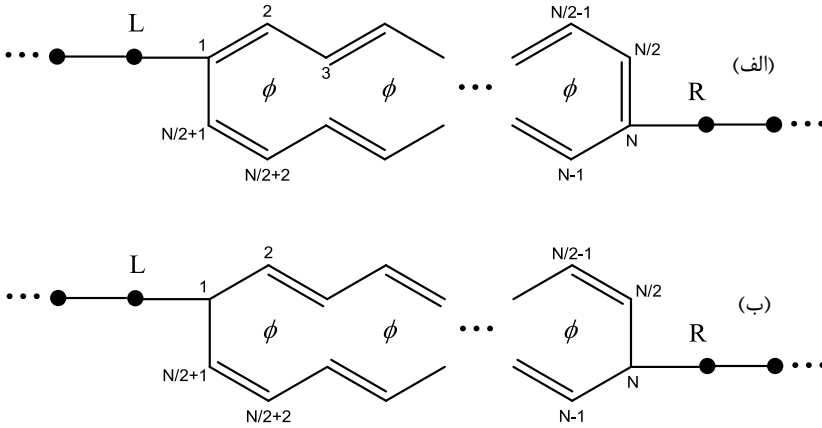
در این بخش فرمول‌بندی مورد نیاز برای محاسبه‌ی خواص رسانش الکترونی یک نانو حلقه پلی‌استیلنی N اتمی را که توسط دو اتم متقابل خود به دو هادی ساده فلزی متصل است (شکل ۱)، ارائه می‌کنیم. کوچکترین حلقه پلی‌استیلنی را یک حلقه بنزنی است که شامل شش اتم است. از آنجا که فرض می‌کنیم هادی‌ها درست در نقطه مقابل هم قرار گرفته‌اند یعنی سامانه مرکزی به دو قسمت مساوی تقسیم می‌شود، بنابراین حلقه‌های پلی‌استیلنی بزرگتر با اضافه شدن هر بار چهار اتم به حلقه قبلی ایجاد می‌شوند ($N = 2 + 4n$ ، n عدد صحیح). سامانه از سه بخش مرکزی (W) یعنی نانو حلقه و دو بخش دیگر یعنی هادی‌های سمت چپ (L) و سمت راست (R) تشکیل شده است. هامیلتونی کل سامانه چنین است [۱۲].

$$H = H_L + H_{WL} + H_W + H_{WR} + H_R, \quad (1)$$

که در آن $H_{L(R)}$ ، $H_{WL(R)}$ ، H_W به ترتیب هامیلتونی‌های حلقه منزوی، اتصال حلقه با نیم سیم سمت چپ (راست) و هادی سمت چپ (راست) هستند. با اختیار کردن مقدار صفر برای تمام انرژی‌های جایگاهی اتم‌های کل سامانه، این هامیلتونی‌ها در تقریب تنگ بست چنین نوشته می‌شوند

$$H_{L(R)} = \beta_{L(R)} \sum_{i=-\infty(N+1)}^{-1(\infty)} |i\rangle \langle i+1| + h.c., \quad (2)$$

$$H_{WL(R)} = \beta_{WL(R)} |0(N)\rangle \langle 1(N+1)| + h.c., \quad (3)$$



شکل ۱. یک نانو حلقه پلی استیلینی N اتمی که از طرفین به دو نیم سیم فلزی ساده متصل است. (الف) و (ب) به ترتیب مواردی را نشان می دهند که اتصال هادی ها به نانو حلقه پیوند دو گانه را در محل اتصال حذف نکرده و کرده است. شماره گذاری اتم ها به گونه ای انجام شده است که اتم شماره یک به هادی سمت چپ و اتم شماره N به هادی سمت راست متصل باشد.

$$H_W = \sum_{i=1}^N \beta_{Wi} |i\rangle \langle i+1| + h.c., \quad (۴)$$

که در آن $\beta_{L(R)}$ انرژی پرش الکترون بین جایگاه ها در هادی سمت چپ (راست)، β_{Wi} انرژی پرش بین اتم های i ام و $i+1$ ام را در نانو نوار مشخص می کند و برای پیوندهای یگانه و دو گانه کربن - کربن به ترتیب مقادیر β_s و β_d را اختیار می کند. در حالتی که یک شار میدان مغناطیسی $n\phi$ از نانو حلقه پلی استیلینی عبور کند، مقادیر انرژی های پرش سامانه مرکزی در یک ضریب فاز $\exp(\pm i\phi)$ ضرب می شوند که علامت های مثبت (منفی) برای پرش الکترون در جهت ساعتگرد (پادساعتگرد) است [۱۲]. عناصر تابع گرین وارون در حضور میدان مغناطیسی به صورت زیر است:

$$(G_W^{-1})_{ij} = (\varepsilon - \sum_L \delta_{i,1} - \sum_R \delta_{i,N}) \delta_{i,j} - \beta_{Wi} (e^{-i\phi} \delta_{i,j+1} + e^{i\phi} \delta_{i,j-1}) \quad (۵)$$

که در آن $\sum_{L(R)}$ خود انرژی نانو حلقه به دلیل وجود هادی چپ (راست) است و با رابطه زیر داده می شود [۱۳]:

$$\sum_{L(R)} = \frac{\beta_{WL(R)}^2}{2\beta_{L(R)}^2} \exp\left(\frac{\varepsilon}{2\beta_{L(R)}}\right). \quad (6)$$

سرانجام ضریب عبور الکترونی به صورت زیر نوشته می شود:

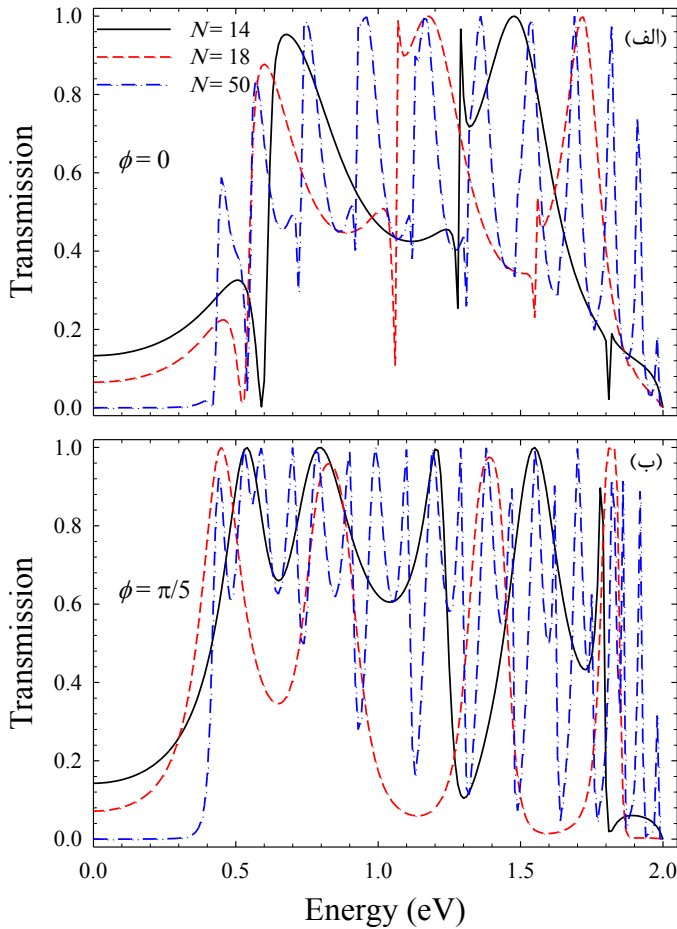
$$T(\varepsilon, \phi) = 4 \operatorname{Im} \sum_L \operatorname{Im} \sum_R \left| G_{W,1N} \right|^2. \quad (7)$$

که در آن $G_{W,1N}$ درایه سطر اول و ستون N ام ماتریس تابع گرین سامانه در حضور هادی ها است.

۳. نتایج عددی

در ابتدا متذکر می شویم که در محاسبات خود مقادیر عددی مربوط به انرژی های پرش الکترون را در هادی ها برابر با 1eV ، در اتصال ها برابر 0.9eV و برای پیوندهای یگانه، دوگانه کربن - کربن به ترتیب برابر با 0.8eV و 1.2eV اختیار می کنیم. شکل ۲(الف) نمودار رسانش سه حلقه نشان داده شده در شکل ۱(الف) با طول های مختلف را بر حسب انرژی الکترون در غیاب شار مغناطیسی نشان می دهد. همان طور که دیده می شود در بازه مشترک مربوط به پنجره ی انرژی نانو حلقه و هادی ها، رفتار منحنی رسانش نوسانی بوده و خارج از پنجره ی انرژی نانو حلقه (در اینجا گاف نانو حلقه)، رفتار رسانش نمایی یا تونل زنی است. در واقع زمانی که انرژی الکترون تزریق شده به سامانه با هر کدام از سطوح انرژی نانو حلقه واقع بین دو الکتروود تطبیق داشته باشد، الکترون به راحتی عبور می کند و یک قله در رسانندگی نمایان می شود. بنابراین هر کدام از قله های تشدیددی در طیف رسانش نماینده ی یک ویژه مقدار مربوط به نانو حلقه است. طبیعتاً در سامانه های شامل طول بیشتر، به علت افزایش تعداد ترازهای انرژی های سامانه مرکزی در ناحیه ی مجاز، تعداد این قله ها در نمودار ضریب عبور الکترونی افزایش یافته است. در ناحیه ی تشدیددی دو پدیده به چشم می خورد: یکی پدیده ی تشدید فانو (افزایش و کاهش پیاپی رسانش حول یک انرژی خاص) که مکان آن در طیف رسانش به طول نانو حلقه وابسته است و دیگری دره های ضد تشدیددی که انرژی وقوع این مورد نیز به طول نانو حلقه بستگی دارد. علت وقوع پدیده ی ضد تشدیددی به این واقعیت برمی گردد که مسیرهای بالا و پایین برای

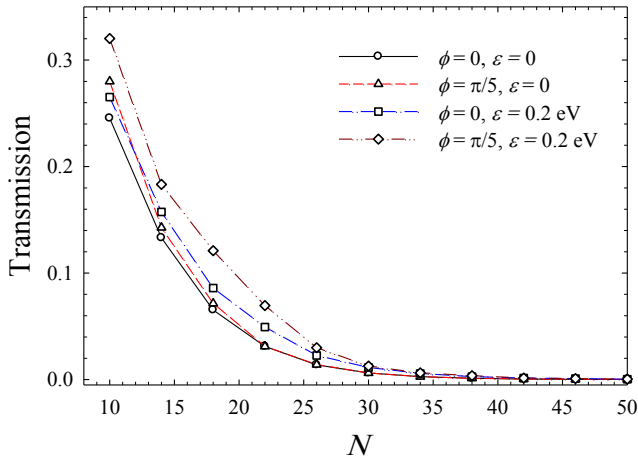
الکترون در شکل ۱(الف)، با توجه به اختلاف تعداد پیوندهای منفی در مسیرها، متفاوت هستند. تعداد مشاهده می شود که هر چه طول نانو حلقه بیشتر شود، رسانش تونل زنی در ناحیه گاف کمتر می شود که این پدیده برای ساختارهای نانومقیاس معمولاً رخ می دهد [۱۵].



شکل ۲. نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی الکترون ورودی برای یک نانو حلقه پلی استیلنی (نشان داده شده در شکل ۱(الف)) برای سه مورد $N = 12, 16, 52$ (الف) $\phi = 0$ (ب) $\phi = \pi/5$.

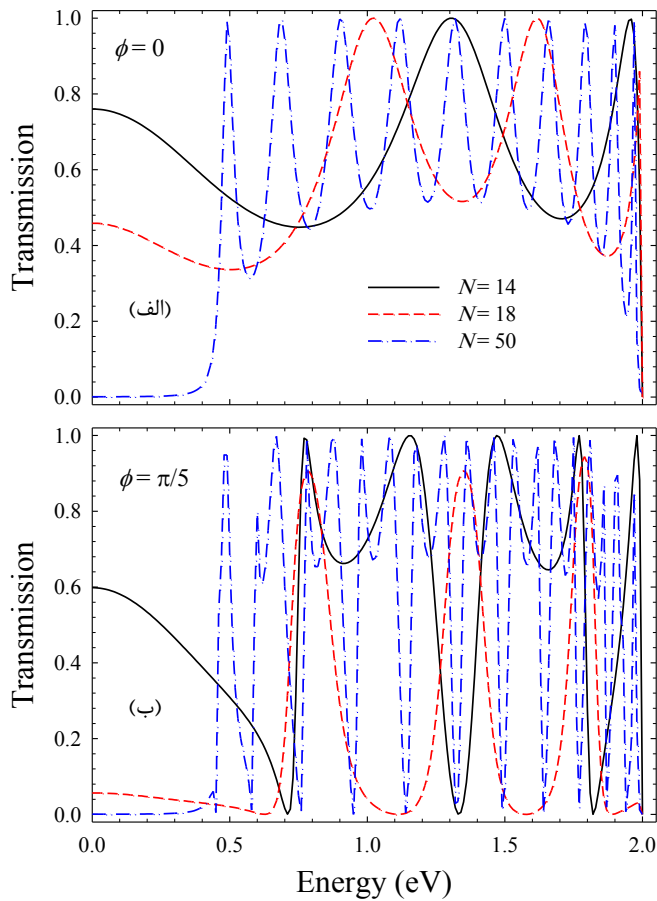
حال یک میدان مغناطیسی یکنواخت عمود بر سطح نانو حلقه اعمال می‌کنیم. شکل ۲(ب) رسانش سامانه را بر حسب انرژی الکترون برای سه طول متفاوت حلقه و در حضور شار مغناطیسی نشان می‌دهد. مقایسه شکل‌های ۲(الف) و ۲(ب) نشان می‌دهد که حضور میدان مغناطیسی باعث جابجا شدن مکان قله‌های تشدید شده است. همچنین دیده می‌شود که پدیده‌های تشدید فانو و ضد تشدید در حضور میدان مغناطیسی رخ نداده‌اند. تغییرات رسانش در بازه‌ی گاف نانو حلقه نسبت به افزایش طول آن چه در حضور و چه در غیاب میدان مغناطیسی نیز از نظر کاربردی مورد توجه است. در واقع چنین رفتاری یک کلید مولکولی دو طرفه را پیشنهاد می‌کند. بدین معنی که با تغییر ولتاژ گیت روی یک نانو حلقه می‌توان طیف الکترونی را به سمت چپ و راست نوار انرژی هادی‌ها جابه‌جا کرد و بن‌براین با تغییرات ولتاژ گیت از ناحیه‌ی عایق به ناحیه‌ی رسانشی و بالعکس سوئیچ کرد.

برای مقایسه‌ی قدرت تونل‌زنی در گاف نانو حلقه‌ی پلی‌استیلنی، نمودار ضریب عبور الکترونی را در حضور و غیاب میدان بر حسب طول سامانه در انرژی‌های صفر و 2 eV رسم می‌کنیم. این نمودار در شکل ۳ نشان داده شده است. چنانکه مشاهده می‌شود، با اضافه شدن طول حلقه، ضریب عبور الکترونی کاهش می‌یابد. همچنین در اکثر انرژی‌های الکترون ورودی، حضور میدان منجر به بهبود تونل‌زنی الکترون می‌شود. اعمال میدان باعث شده که به دلیل ورود ضریب فاز وابسته به شار، یک مسیر در سامانه‌ی نسبت به مسیر دیگر ارجح شود. از آنجایی که در مورد شکل ۱(الف)، مسیر بالایی دارای یک پیوند دوگانه‌ی بیشتر نسبت به مسیر دیگر است، محاسبات نشان می‌دهد که مسیر بالایی نسبت به مسیر پایینی ارجح شده است. در واقع مقدار رسانش در حضور میدان افزایش یافته است و در رساناهای همیوگ (دارای پیوند دوگانه - یگانه متوالی) هر چه تعداد پیوندهای دوگانه در مسیرهایی با طول یکسان بیشتر شود، رسانش تونل‌زنی نیز بهتر می‌شود [۱۴].



شکل ۳. منحنی ضریب عبور الکترونی به صورت تابعی از طول نانو حلقه به ازای دو انرژی متفاوت واقع در ناحیه گاف انرژی در حضور و غیاب میدان مغناطیسی.

در ادامه به بررسی رسانش نانو حلقه‌ی نشان داده شده در شکل ۱(ب) می‌پردازیم. در شکل‌های ۴(الف) و ۴(ب) رسانش الکتریکی این سامانه به صورت تابعی از انرژی ورودی در حضور و غیاب میدان رسم شده است. مقایسه شکل‌های ۲ و ۴ نشان می‌دهد که تغییر نوع پیوند کنار اتصال‌ها از دوگانه به یگانه، باعث جابجایی مکان ترازهای انرژی سامانه در طیف آن و در نتیجه تغییرات مشهود در نمودارهای ضریب عبور الکترونی شده است. در این شکل اثری از وقوع پدیده‌های فانو و ضد تشدید حتی در غیاب میدان مغناطیسی دیده نمی‌شود که دلیل این امر به مساوی بودن تعداد پیوندهای دوگانه و یگانه در مسیرهای بالا و پایین بر می‌گردد. همچنین چه در حضور و چه در غیاب میدان مغناطیسی مقدار رسانش در انرژی صفر برای مورد شکل ۱(الف) بیشتر از مورد شکل ۱(ب) است. در مورد سامانه‌ی شکل ۱(ب)، اعمال میدان مغناطیسی باعث کاهش رسانش در ناحیه‌ی گاف شده است. علت را چنین مطرح کرد که در این مورد به دلیل تقارن حلقه‌ی بنزنی هر مسیری که توسط میدان ارجح شود، یک پیوند یگانه‌ی بیشتر نسبت به دوگانه دارد و رسانش نسبت به حالتی که الکترون از دو مسیر برای عبور بهره می‌گیرد کمتر می‌شود.



شکل ۴. نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی الکترون ورودی برای یک نانو حلقه پلی استیلنی دارای نقص پیوندی برای سه مورد $N=14, 18, 50$ (الف) $\phi = 0$ (ب) $\phi = \pi/5$.

۴. نتیجه گیری

در این تحقیق با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت تنگ بست، به بررسی اثر اندازه یک نانو حلقه پلی استیلنی که از دو جایگاه متقابلش به دو هادی یک بعدی متصل شده است، بر ضریب عبور الکترونی آن پرداخته شده است. رسانش این نانو حلقه در حضور و غیاب میدان مورد بحث قرار گرفت. نتایج نشان می دهند که با افزایش طول نانو حلقه تعداد نوسانات در منحنی ضریب عبور در ناحیه تشدیدی بیشتر شده و پدیده تونل زنی الکترونی در داخل گاف انرژی به صورت تابعی نمایی از طول سامانه ضعیف تر می گردد.

این امر برای هر دو موردی که تعداد پیوندهای یگانه و دوگانه در دو مسیر الکترون در نانو حلقه مساوی یا نامساوی باشد، برقرار است. ولی در موردی که میدان مغناطیسی اعمال می‌شود، رسانش تونل‌زنی نانو حلقه‌ای با طول ثابت، در این دو مورد رفتاری متفاوت نشان می‌دهند. در واقع به دلیل ارجح شدن یکی از مسیرها، رسانش موردی که تقارن بین مسیرها از نظر پیوندی وجود ندارد، در حضور میدان نسبت به غیاب آن بهبود می‌یابد.

۵. منابع

- [1] X.Y. Kong, Y. Ding, R. Yang, and Z.L. Wang; *Science* **303** (2004) 1348.
- [2] W. Khunnam and P.P. Yupapin; *Optik* **121** (2010) 2053.
- [3] P.P. Yupapin and J. hotons; *Optik* **121** (2010) 1925.
- [4] S. Abaslou and D. Fathi; *Physica E* **44** (2012) 1309.
- [5] P. Dutta, S. Maiti, and S. Karmakar; *Physics Letters A* **376** (2012) 1567.
- [6] P. Dutta, S. Maiti, and S. Karmakar; *Solid State Communication* **150** (2010) 1056.
- [7] S. Maiti; *Solid State communication* **149** (2009) 1684.
- [8] S. Maiti; *Physics Letters A* **373** (2009) 4470.
- [9] S. Maiti; *Solid State Communications* **150** (2010) 1741.
- [10] M. Pyataev and M. Kokoreva; *International Journal of Modern Physics B* **27** (2013) 1350103.
- [11] H. Rabani and M. Mardaani; *Solid State Sciences* **14** (2012) 1100.
- [12] S. Datta; “*Electronic Transport in Mesoscopic Systems*”; Cambridge University Press. Cambridge (1995).
- [13] M. Mardaani and K. Esfarjani; *Physica E* **25** (2004) 119 .
- [14] D. Nozaki, H.M. Pastawski, and G. Cuniberti; *New Journal of Physics* **12**, No. 6 (2010) 063004.