Autumn (2023) 6(1): 1-12
DOI: 10.30473/JPHYS.2023.68907.1161
Received: 22 Agu 2023 Accepted: 10 Dec 2023

Optoelectronic

Open Access

ORIGINAL ARTICLE

Electrical Transport in a Quantum Wire Ga1-xAlxAs in the Presence of Electron-Phonon Interaction

Akbar Khalaj[1*], Ali Asghar Shokri[2], Nadia Salami[3]

1 PhD Student, Department of Physics, Payame Noor University, Tehran, Iran.
2 Professor, Department of Theoretical and Nano Physics, Alzahra University, Tehran, Iran.
3 Assistant Professor, Department of Physics, Yasouj Branch, Islamic Azad University, Yasouj, Iran.

Correspondence
Akbar Khalaj
Email: khalaj8481@gmail.com

ABSTRACT
In this paper, using the Green's function approach, the electrical transport properties of a quasi-one dimensional hetero structure based on the GaAs (such as quantum wire) are theoretically studied in the presence of the electron-phonon interaction. In this regards, we consider the desired structure with finite length between two semi-infinite metallic electrodes. Using the Hamiltonian of the system, in the strong dependency approximation framework, we obtain the electron transmission coefficient in the Green's function approach in different concentrations of Al and different lengths of the quantum wire in the middle region. In order to investigate the electron-phonon effects, we consider a time and space dependent external field which is applied on each atoms in a linear chain within the harmonic approximation. The displacement of each atom is effective in its hopping energy with its neighbors. The numerical results of this paper can help our understanding of electron-phonon interaction and its impacts on the electrical transport properties.

KEYWORDS
Electron-Phonon Interaction, Quantum Wire, Transmission Coefficient, Green’s Function, Harmonic Approximation.

How to cite
Khalaj, A. Shokri, A.A. Salami, N. (2023). Electrical Transport in a Ga1-xAlxAs Quantum Wire in the Presence of Electron-Phonon Interaction, Optoelectronic, 6(1), 1-12.

© 2023, by the author(s). Published by Payame Noor University, Tehran, Iran.
This is an open access article under the CC BY 4.0 license (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

سال ششم، شماره یکم، پاییز 1402 (1-12)

تاریخ دریافت: 1402/05/31 تاریخ پذیرش: 1402/09/19

DOI: 10.30473/JPHYS.2023.68907.1161

فصلنامه علمی

اپتوالکترونیک

«مقاله پژوهشی»

ترابرد الکتریکی در یک سیم کوانتومی $Ga_{1-x}Al_xAs$ در حضور برهمکنش الکترون- فونون

اکبر خلج[1*]، علی اصغر شکری[2]، نادیا سلامی[3]

1 دانشجوی دکترا، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

2 استاد، گروه فیزیک نظری و نانو، دانشگاه الزهرا، تهران، ایران

3 استادیار، گروه فیزیک، واحد یاسوج، دانشگاه آزاد اسلامی، یاسوج، ایران

چکیده

در این مقاله، با استفاده از رهیافت تابع گرین خواص ترابرد الکتریکی یک ساختار متجانس شبه یک بعدی مبتنی بر $GaAs$ (مانند سیم کوانتومی) در حضور برهمکنش الکترون- فونون به طور نظری مطالعه می‌شود. برای این منظور، ساختار مورد نظر با طول محدود $Ga_{1-x}Al_xAs$ را بین دو الکترود نیم‌بی‌نهایت فلزی در نظر می‌گیریم. با استفاده از هامیلتونی این ساختار در چارچوب تقریب بستگی قوی، ضریب عبوردهی الکترون را در رهیافت تابع گرین در غلظت‌های مختلف Al و طول‌های متفاوت سیم کوانتمی ناحیه میانی به دست می‌آوریم. برای مطالعه اثر الکترون- فونون، یک نیروی واداشته تابع مکان و زمان را به هر اتم در یک زنجیرهٔ خطی در تقریب هماهنگ در نظر می‌گیریم. جابه‌جایی هر اتم در انرژی پرش آن با همسایه‌ها موثر است. نتایج محاسباتی این مقاله می‌تواند به درک ما از برهمکنش الکترون- فونون و تاثیر آن در خواص ترابرد الکتریکی کمک کند.

واژه‌های کلیدی

برهمکنش الکترون – فونون، سیم کوانتومی، ضریب عبوردهی الکترونی، مدل تابع گرین، تقریب هماهنگ.

نویسنده مسئول:

اکبر خلج

رایانامه: khalaj8481@gmail.com

استناد به این مقاله:

اکبر خلج، علی اصغر شکری، نادیا سلامی (1402). ترابرد الکتریکی در یک سیم کوانتومی $Ga_{1-x}Al_xAs$ در حضور برهمکنش الکترون- فونون. فصلنامه علمی اپتوالکترونیک، 6(1)، 1-12.

مقدمه

امروزه فناوری نانو به دلیل به‌کارگیری خواص کوانتومی نانوساختارها در بسیاری از صنایع الکترونیک و اپتوالکترونیک مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته است. عمده دلیل آن با هدف بهبود افزایش رسانندگی الکتریکی و گرمایی زنجیره‌های اتمی در قطعات الکترونیکی برمی‌گردد، به طوری که چالش‌ها و فرصت‌های فراوانی پیش رو دارد. یکی از مسائل مورد علاقهٔ محققان علاقه‌مند و فعال در زمینهٔ بررسی خواص انتقال الکترونیکی و گرمایی در حضور و غیاب برهمکنش الکترون – فونون است. زیرا بسیاری از پدیده‌ها تجربی در تغییر خواص الکترونیکی و گرمایی سیستم‌ها با در نظر گرفتن این برهمکنش قابل توجیه است [1]. از طرفی داشتن علم و آگاهی نسبت به پراکندگی الکترون‌ها توسط برهمکنش الکترون‌ها با فونون‌ها در سیم‌های یک بعدی، شناخت ما را از پدیده‌های الکتریکی، اپتیکی و ترموالکتریکی در مقیاس‌های نانومتری افزایش می‌دهد. به همین منظور نخست به توصیف برهمکنش الکترون – فونون و کارهای تجربی و نظری صورت گرفته می‌پردازیم.

رسانش الکتریکی در نانوساختارها با میزان پراکندگی الکترون‌ها از طریق ناخالصی‌ها، فونون‌ها و عوامل محیطی (مانند میدان مغناطیسی، میدان الکتریکی، اختلاف پتانسیل و گرادیان دمایی) ارتباط مستقیم دارد. از این رو مطالعه عوامل پراکندگی الکترون‌ها و تاثیر آنها در رسانش الکتریکی از اهمیت بسزایی برخوردار است. از طرفی یکی از مهم‌ترین عوامل موثر بر ترابرد الکتریکی در نانو ساختارها برهمکنش بین الکترون‌ها با فونون‌ها است. به همین دلیل به معرفی فونون و بررسی برهمکنش الکترون‌ها با فونون‌ها می‌پردازیم.

فونون به مدهای ارتعاشی کوانتیده مولکولی در یک شبکه کریستالی (مانند شبکه بلوری اتمی جامدات) گفته می‌شود، که توسط نوسانگرهای شبکه‌ای کوانتیده و با تغییر حالت‌های کوانتومی آنها خلق یا نابود می‌شود.

فونون‌ها نقش مهمی در ویژگی‌های فیزیکی مانند رسانش الکتریکی و رسانش گرمایی مواد ایفا می‌کنند و در قطعات الکترونیکی با ابعاد مختلف بر همکنش الکترون – فونون عاملی مهم و تاثیرگذار بر خواص عبوردهی الکترونی محسوب می‌شود؛ که این مهم در بررسی‌های انجام شده روی ترابرد الکتریکی در نانوساختارها به صورت تجربی و نظری مشاهده شده است [2].

پدیده‌هایی مانند ترموالکتریک، زوج‌های کوپر، ابررسانایی، اثر ناپایداری پایرلز در سیستم‌های یک بعدی و اثر یان تلر و جفت‌شدگی و تراکم حامل‌های بار نتایج متفاوتی از اثر برهمکنش الکترون- فونون هستند.

مشاهدات تجربی نشان می‌دهد که به دلیل جفت‌شدگی الکترون‌ها با فونون‌ها اتلاف انرژی صورت می‌گیرد و این امر تاثیر زیادی بر ترابرد الکتریکی سامانه دارد [3].

این بر هم‌کنش‌ها علاوه بر تاثیرگذاری بر مشخصات دستگاه و کارکرد آن، برای طیف‌سنجی و استنتاج اطلاعات ساختاری نیز استفاده می‌شود [4].

در اواخر سال 1991 طیف تونل‌زنی الکترونی ناکشسان در تک مولکول با میکروسکوپ تونل‌زنی روبشی مشاهده شد. بعد از آن در محدوده نقاط کوانتومی، با اندازه‌گیری روی یک ترانزیستور فولرن (C_{60}) رسانش الکترونی در محدوده دمای اتاق به دست آمد و حساسیت گاف انرژی به اضافه و کم کردن یک الکترون به مولکول فولرن بیانگر برقرار بودن الگوی استتار کولنی در آن مولکول است و علاوه بر آن اثر برهم‌کنش قوی بین تک الکترون رسانشی و ارتعاشات مولکولی در مولکول فولرن مشاهده شد [5]. بر هم‌کنش قوی در مولکول C_{60} با افزایش ترابرد الکترونی همراه بود به این ترتیب که ترابرد الکترونی صورت گرفته روی پل مولکولی با اتصالات مزدوج π در حضور جفت‌شدگی الکترون – فونون هفتاد برابر بیشتر از حالت بدون برهمکنش الکترون – فونون به دست آمد [6 و 8].

به دلیل اهمت اثر بر هم‌کنش الکترون – فونون بر رسانش الکتریکی اتصالات مولکولی، اخیرا کنترل کامل جفت‌شدگی الکترون – فونون با استفاده از یک گروه از دستگاه‌های نانولوله کربنی معلق صورت گرفته است که در حالت‌های خاص کنترل جفت‌شدگی الکترون‌ها با مدهای فونونی ویژه در فضای واقعی امکان‌پذیر شده و در نهایت نشان می‌دهد که جفت‌شدگی بین الکترون‌های داخلی با فونون‌ها در یک سامانه عایق‌بندی شده مستقل از محیط تصادفی رساناهای الکترونیکی است و این موضوع گام مهمی در راستای طراحی رایانه‌های کوانتومی همدوس با برهم‌کنش الکترون-فونون است [7].

روش‌های نظری و تجربی و محاسباتی مختلفی برای بررسی اثرات فونون‌ها و همچنین تاثیر جفت‌شدگی الکترون – فونون بر ترابرد الکتریکی نانو سیم‌های مولکولی تاکنون با استفاده از نظریه تابعی چگالی [8 و 9]، فرمول‌بندی تابع گرین غیر تعادلی [10 و 11 و 12]، ترکیبی از نظریه تابع چگالی و تابع گرین غیر تعادلی، معادله ترابرد بولتزمن [13 و 18]، محاسبه خواص انتقال الکترونیکی در فلزات و نیمه هادی‌ها، با حل معادله انتقال بولتزمن (BTE) و تقریب فرمول مقاومت زیمان بر اساس میانگین تابع جفت آلیش برگ [13]، معادله خودسازگار بورن (SCBA) و روش کوانتومی مونت کارلو [18]، ارائه و بررسی شده است. اخیرا اثر فشار بر پارامترهای ساختاری، ثابت‌های الاستیک و خواص مکانیکی مرتبط، ساختار نوار الکترونیکی، طیف فونون و ابررسانایی در ساختار بلوری CaC2 بر پایه جفت‌شدگی الکترون – فونون به صورت تجربی گزارش شده است. که محاسبات بر اساس تئوری تابعی چگالی است که

در بسته اسپرسو کوانتومی پیاده‌سازی شده اس ت[14]. یکی از روش‌هایی که به آسانی می‌توان برای بررسی تأثیر برهم‌کنش الکترون-فونون بر ترابرد الکتریکی و رسانش الکتریکی نانو ساختارها استفاده کرد، روش تابع گرین در رهیافت تنگ بست است. در صورتی‌که اثرات ارتعاشی ضعیف باشد برای بررسی عبوردهی الکترون و رسانش الکتریکی روش‌های اختلالی مرتبه پایین و رهیافت فونون‌های کلاسیکی استفاده می‌شود، برای فونون های کلاسیکی جابه‌جایی ذرات با استفاده از ماتریس دینامیکی محاسبه شده و اثرات ناشی از برهمکنش الکترون – فونون به صورت اختلال به پارامترهای تنگ بست مسئله وارد می‌شود [2]. اثر برهم‌کنش‌های الکترون-فونون را در سیستم‌های ابررسانای LuH2، LuH3 و LuN تحت فشار صفر تا 10 گیگا پاسکال در دمای اتاق از طریق تئوری تابعی چگالی در سطح GGA-PBE یکی دیگر از مواردی است که در سال‌های اخیر بحث و بررسی شده است [15 و 16].

همچنین در مواقعی که فونون‌ها به صورت کوانتومی در نظر گرفته شوند با به کارگیری روش‌های چند کاناله و فضای فوک و روابط عملگری اثرات آنها را در هامیلتونی مسئله وارد می‌کنند [17]. در این روش ابتدا با استفاده از روش حذفی، هامیلتونی مسئله ساده‌تر شده و به یک هامیلتونی مؤثر تبدیل می‌شود و سپس به کمک روش تابع گرین در رهیافت تنگ- بست و با به کارگیری فضای فوک مسئله بس ذره‌ای با تعداد زیادی متغیر به مسئله تک ذره‌ای تبدیل می‌شود در عین حال یک کانال ورودی با تعداد زیادی کانال خروجی در نظر گرفته می‌شود و نشان می‌دهد که جفت‌شدگی الکترون‌ها با فونون‌ها در جایگاه‌های الکترونی صورت گرفته است و باعث پراکندگی الکترون و خروج آنها از کانال‌های مختلف می‌شود [18].

از مهم‌ترین ترکیب‌های شناخته شده، بین نیم رساناها، GaAs است که دارای خواص منحصر به فردی از جمله گاف نواری انرژی مستقیم است. در لایه نازک GaAs میزان شکاف انرژی 1/425 eV و انرژی پرش الکترونی 1/78 eV محاسبه شده است. با توجه به تحریک‌پذیری الکترونی بالا از آن در ساخت ابزارهای الکترونیکی در مقیاس نانومتری مانند نانوترانزیستورها دارای سرعت بالا استفاده شده است [2و3]. بنابراین، مطالعه خواص ترابرد الکترونیکی در حضور و غیاب برهمکنش الکترون- فونون در سیم کوانتومی متجانس $Ga_{1-x}Al_xAs$ می‌تواند به درک ما در قطعات الکترونیکی شبه یک بعدی کمک کند [1]. در این مقاله، هدف ما بررسی نظری خواص ترابرد الکتریکی در یک نانوسیم شبه یک بعدی $Ga_{1-x}Al_xAs$ متصل به دو الکترود ایده‌آل در حضور و غیاب برهمکنش الکترون- فونون و تاثیر طول سیم و غلظت Al است.

محتوای مقاله به این صورت است که پس از مروری مختصر، سیم کوانتومی شبه یک بعدی $Ga_{1-x}Al_xAs$ متصل به دو سیم نیم بی‌نهایت فلزی را توصیف می‌کنیم. محل اتصال را به صورت سد پتانسیل در نظر می‌گیریم. با بیان مدل مورد نظر و نوشتن هامیلتونی سامانه مورد نظر در چارچوب بستگی قوی برهمکنش الکترون-فونون را در تقریب هارمونیک توصیف می‌کنیم. در بخش دوم این اثر نیروی واداشته را به عنوان یک جابه‌جایی موثر اتم‌ها در نظر گرفته که سرانجام انرژی پرش بین اتم‌ها تغییر می‌کند. خواص ترابرد الکتریکی این نانوسیم را در رهیافت تابع گرین استخراج می‌کنیم [5-4]. در بخش سوم، نتایج محاسبات عددی بیان و توصیف می‌شود. در انتها یک نتیجه‌گیری کلی انجام می‌شود.

توصیف مدل و فرمول‌بندی آن

ساختار مورد بحث ما یک زنجیره شبه یک بعدی همگن به صورت یک سیم کوانتومی از جنس $Ga_{1-x}Al_xAs$ است که به دو الکترود نیم بی‌نهایت فلزی متصل است. الکترودها شبیه هم هستند. بخش میانی شامل N جایگاه است.

با اعمال یک نیروی واداشته خارجی وابسته به زمان که می‌تواند در اثر وجود میدان الکتریکی خارجی متناوب تولید شود، اتم‌ها حول موقعیت تعادلی و ترازمندی‌شان شروع به نوسان می‌کنند.

حرکت دسته جمعی نوسانات اتم‌ها منجر به ایجاد شبه ذرات فونونی می‌شود که می‌تواند با الکترون‌های عبوری از سامانه برهمکنش دهد. این برهمکنش باعث تغییر همپوشانی اربیتال‌های الکترونی نزدیک‌ترین همسایه می‌شود. برای درنظر گرفتن این اثر از مدل جرم و فنر در رهیافت کلاسیکی ایده می‌گیریم به طوری که آن را به صورت اختلال در هامیلتونی الکترونی کل سامانه وارد می‌کنیم [23و24].

در شکل 1، محور $\boldsymbol{U_j(y)}$ انرژی پتانسیل الکترواستاتیک است که وظیفهٔ آن تولید میدان الکتریکی است و مطابق رابطه (1) تعریف شده است [25 و27].

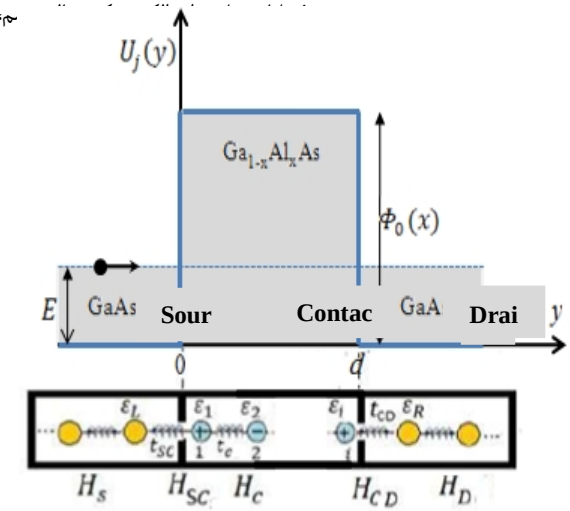
$$U_j(y) = \begin{cases} 0\ , & y < 0 \\ E_F + \Phi_0(x), & 0 < y < d \\ 0\ , & d < y \end{cases} \qquad (1)$$

در این رابطه $\boldsymbol{\Phi_0(x)}$ ارتفاع سد پتانسیل و $\boldsymbol{E_F}$ انرژی فرمی مربوط به الکترودها است

هامیلتونی کل سامانه با رابطه (2) داده می‌شود.

$$\mathbf{H}_{total}=\mathbf{H}_L + \mathbf{H}_{LQw}+\mathbf{H}_{Qw}+\mathbf{H}_{RQw} + \mathbf{H}_R \qquad (2)$$

در این رابطه جمله اول و آخر به ترتیب هامیلتونی الکترود چپ و راست است. جمله سوم هامیلتونی ناحیه میانی و جمله $\mathbf{H}_{LQw}$ و $\mathbf{H}_{RQw}$ به ترتیب هامیلتونی حاصل از جفت‌شدگی ناحیه میانی با الکترود چپ و راست هستند.



شکل 1. نمایی از سد پتانسیل در ساختار $Ga_{1-x}Al_xAs$ در غیاب ولتاژ خارجی. در این ساختار $\Phi_0(x)$ ارتفاع سد پتانسیل است که تابعی از غلظت ناخالصی آلومینیم می‌باشد.

مطابق با رویکرد بستگی قوی در چارچوب نزدیک‌ترین همسایه، هامیلتونی الکترودهای چپ و راست و جفت‌شدگی اتصال‌ها با الکترودها با رابطه

$$\mathbf{H}_\alpha=\sum_{i=1}^{N}\varepsilon_{i\alpha}a_i^\dagger a_i+\sum_{i}^{N-1}(t_{(i,i-1)_\alpha}a_i^\dagger a_{i-1}+t^\dagger_{(i,i-1)_\alpha}a_{i-1}^\dagger a_i) \quad (3)$$

داده می‌شوند. در این رابطه $\alpha=(L,Qw,R)$ است. لازم به ذکر است که سیم کوانتومی در محیطی کاملاً ایزوله در نظر گرفته شده و هیچ برهمکنشی با محیط اطرافش ندارد. همچنین در رابطه (3) پارامترهای $t_{(i,i-1)_\alpha}$ و $t^\dagger_{(i,i-1)_\alpha}$ میزان انرژی برای پرش الکترون در موقعیت α را نشان می‌دهند و $\varepsilon_{i\alpha}$ انرژی جایگزیده روی موقعیت α است؛ که از تأثیر ولتاژ ورودی V_a روی بخش مرکزی سیم کوانتومی ولی با پتانسیل خروجی $U_j(y)$ حاصل شده است [5]. $U_j(y)$ یک پتانسیل الکترواستاتیک است که وظیفهٔ آن تولید میدان الکتریکی است و طبق رابطه (1) تعریف شده است [8 و10]. به دلیل وجود میدان الکتریکی خارجی حاصل از اعمال ولتاژ بایاس V_a اتم‌های موجود در نانوسیم حول نقطهٔ تعادل خود ارتعاش می‌کنند. بنابراین پارامترهای موثر مربوط به تقریب نزدیک‌ترین همسایه تغییر خواهند کرد. البته گاهی اوقات تأثیر این تغییرات بر روی انرژی جایگاه قابل چشم‌پوشی است [23].

از آنجایی که تابع موج الکترون حاصل از تقریب نزدیک‌ترین همسایه را به صورت ترکیب خطی از اربیتال‌های اتمی حالت پایه در نظر می‌گیریم، میدان الکتریکی یکنواخت ایجاد شده در سایت اتمی هیچ تأثیری بر انرژی‌های روی جایگاه سیستمی ندارد. به همین دلیل، در این مدل ساده برای اربیتال‌های مشابه S انرژی‌های پرش نسبت به نوسان‌های اتمی و تغییر مکان آنها به صورت رابطه (4) نوشته

$$t_{(i,i+1)_\alpha}=t_w e^{-\lambda(u_{i+1}-u_i)} \quad (4)$$

می‌شود. [24]. در این رابطه، پارامتر t_w انرژی حاصل از پرش الکترون برای نزدیک‌ترین همسایه در موقعیت تعادلی در غیاب برهمکنش الکترون– فونون است که یکای آن الکترون ولت نام دارد و λ عدد مربوط به میزان جفت‌شدگی الکترون– فونون در حضور برهمکنش الکترون – فونون و کمیتی بدون بعد است، که به صورت اختلال در هامیلتونی سیستم اعمال می‌شود. در انجام محاسبات عددی، مقدار عددی λ را برابر صفر و 0/2 و 0/4 در نظر گرفته شده است. کمیت‌های u_i و u_{i+1} به ترتیب جابه‌جایی طولی اتم‌های i ام و i+1 ام از موضع تعادلی‌شان هستند. بنابراین؛ بر اساس تقریب هماهنگ در یک زنجیرهٔ خطی با ثابت شبکهٔ a نیروی واداشتهٔ وارد بر اتم i ام تابعی از مکان و زمان است که به صورت رابطه (5) تعریف می‌شود [24].

$$\frac{F_i(t)}{A}=\frac{1}{\omega_0^2}\frac{d^2u_i(t)}{dt^2}+B\frac{du_i(t)}{dt}+2u_i(t)-(u_{i+1}(t)+u_{i-1}(t)) \quad (5)$$

در رابطهٔ (5) ثابت‌های A و B به صورت $A=ma\omega_0^2$ و $B=2\frac{\gamma}{\omega_0}$ تعریف می‌شوند. مقدار ω_0 بسامد طبیعی نوسان است که به طور معمولی در حدود 0/001 Hz است. پارامتر a ثابت شبکه بوده و مقدار عددی آن برابر $a = 5.65A^\circ$ است. همچنین γ ضریب میرایی نوسان که کمیتی بدون بعد و در محاسبات در حدود 0/1 الی 0/01 در نظر گرفته می‌شوند. نیروی خارجی واداشته وابسته به مکان و زمان وارد بر اتم i ام به صورت رابطه زیر در نظر گرفته می‌شوند [23].

$$F_i(t)=(-1)^{i+1}A\delta F\cos(\omega t) \quad (6)$$

در رابطه (6) نیروی خارجی واداشته به صورت تابع زمانی از یک میدان الکتریکی دوره‌ای فرض می‌شود برای جلوگیری از ورود اعداد خیلی بزرگ و خیلی کوچک در برنامه‌نویسی مطابق رابطه $Z = \omega/\omega_0$ کمیت ω بسامد حاصل از نیروی واداشته خارجی وارد بر سیم کوانتومی لازم است که به آن بسامد تشدید می‌گویند. این کمیت برحسب بسامد طبیعی سیستم مقیاس می‌شود که پارامتر مقیاس شده بسامد را Z می‌نامیم؛ بنابراین Z کمیتی بدون بعد است. در ادامه مقادیر مربوط به پارامتر Z را تعیین می‌کنیم. در اینجا پارامتر δ شدت نیروی خارجی را مشخص می‌کند و کمیتی بدون بعد است و مقدار آن برابر $\delta=0.25$ است.

با استفاده از تبدیل فوریه در شرایط ایستا می‌توان روابط کاربردی زیر را با کمک یک نیروی خارجی وابسته به زمان به‌دست آوریم [28]. با وارد نمودن نیروی خارجی وابسته به زمان، جابه‌جایی اتمی بدون بعد و وابسته به زمان $u_i(t)$ به صورت رابطهٔ (7) برحسب عناصر ماتریس تابع گرین فونونی

$$u_i(t)=\frac{1}{A}\mathrm{Real}\left(\sum_{j=1}^{n}G_{i,j}^{ph}F_j(t)\exp(-i\omega t)\right) \quad (7)$$

ناحیه میانی سیم کوانتومی (زنجیره خطی) $G_{i,j}^{ph}$ به دست می‌آید [28]. که با رابطه (8) داده می‌شود:

$$G_{i,j}^{ph}=\frac{Q_{i-1}Q_{N-j}}{Q_N}\ :\quad i\le j \quad (8)$$

در این رابطه کمیت Q_i به صورت زیر تعریف می‌شود [28].

$$\frac{(\beta+\sqrt{\beta^2-1})^{i+1}-(\beta-\sqrt{\beta^2-1})^{i+1}}{2\sqrt{\beta^2-1}}Q_i = \quad (9)$$

کمیت بدون بعد β با کمک عناصر قطری ماتریس گرین فونونی وارون و به صورت رابطه (10) محاسبه می‌شود [28].

$$\beta=1-\frac{Z^2}{2}-i\gamma z \quad (10)$$

تابع گرین معکوس کل سیستم G_W^{-1} به وسیله رابطه

$$\mathbf{G}_W^{-1}=\mathbf{G}_{0w}^{-1}-\mathbf{\Sigma}_L(E)-\mathbf{\Sigma}_R(E) \quad (11)$$

داده می‌شود [13]، که در این رابطه کمیت $\mathbf{\Sigma}_L(E)$ خودانرژی الکترود سمت چپ و $\mathbf{\Sigma}_R(E)$ خودانرژی الکترود سمت راست متصل به سیم کوانتومی میانی است که به صورت

$$\mathbf{\Sigma}_{L(R)}(E)=\mathbf{H}_{C\alpha}\mathbf{G}_{0\alpha}H_{\alpha C} \quad (12)$$

تعریف می‌شود [13] (α=L, R). همچنین $G_{0\alpha}$ تابع گرین ایزوله ناحیه α با α=L ,Qw, R است که به وسیله رابطه (13) محاسبه می‌شود، که در این رابطه E انرژی الکترون ورودی و H_α هامیلتونی بخش مربوطه هستند.

$$\mathbf{G}_{0\alpha}=[(E+i\eta^{+1})\mathbf{I}-\mathbf{H}_\alpha]^{-1} \quad (13)$$

$$|\mathbf{G}_w^{-1}|_{ij}=|\mathbf{G}_{0w}^{-1}|_{ij}-\mathbf{\Sigma}_L(E)\delta_{i1}-\mathbf{\Sigma}_R(E)\delta_{iN} \quad (14)$$

وارون ماتریس تابع گرین زنجیره یک بعدی سیم کوانتومی با رابطه (14) به‌دست خواهد آمد که در این رابطه $|\mathbf{G}_{0w}^{-1}|_{ij}$ وارون ماتریس تابع گرین ساختار مرکزی و دو کمیت $\mathbf{\Sigma}_L(E)\delta_{i1}$ و $\mathbf{\Sigma}_R(E)\delta_{iN}$ ماتریس‌های خودانرژی الکترود سمت چپ و خودانرژی الکترود سمت راست متصل به ساختار مرکزی هستند [13]. پس از محاسبهٔ تابع گرین فونونی با کمک روابط بالا، ضریب عبوردهی الکترونی وابسته به زمان از رابطه به دست می‌آید [13].

$$T(E, t)=Trac(\mathbf{\Gamma}_L\mathbf{G}_W\mathbf{\Gamma}_R\mathbf{G}_W^{\dagger}) \quad (15)$$

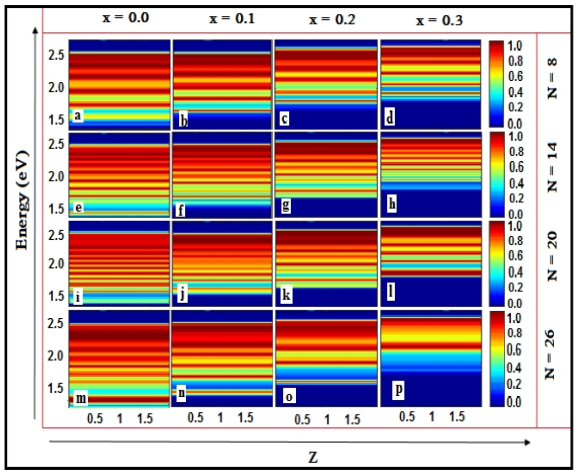
به دلیل وجود وابستگی زمانی نیروی خارجی واداشته، رابطه جابه‌جایی اتمی وابسته به زمان به‌دست آمد و این تابعیت زمانی در هامیلتونی سامانه و در نتیجه در ضریب عبور الکترونی آن وارد می‌شود. بنابراین؛ برای محاسبه ضریب عبوردهی متوسط از عبارت (15) انتگرال‌گیری روی زمان انجام می‌دهیم:

$$T_{ave}(E, \omega)=\frac{\omega}{2\pi}\int_0^{\frac{2\pi}{\omega}}T(E,t)dt \quad (16)$$

در اینجا، کمیت $T_{ave}(E, \omega)$ ضریب عبوردهی الکترونی سیم کوانتومی وابسته به بسامد نیروی حاصل از میدان خارجی و انرژی ورودی الکترون است. اگر ویژه مقدار انرژی الکترون یک سیم کوانتومی را در حالت ایزوله شده به‌دست آوریم در این صورت رفتار رسانش الکتریکی را در حالت تشدیدی می‌توان محاسبه نمود [23-26].

نمودارها و تحلیل و توصیف نتایج عددی

در شکل‌های 2، 3 و 4 نمودارهای پربند تغییرات احتمال عبوردهی الکترون از سیم کوانتومی $Ga_{1-x}Al_xAs$ متصل به دو الکترود شبه یک بعدی فلزی را برحسب انرژی الکترون فرودی و پارامتر بسامد تشدید (بدون بعد) حاصل از اعمال نیروی خارجی در شدت‌های مختلف برهمکنش الکترون- فونون λ =0، λ = 0.2 و λ = 0.4 به ترتیب رسم شده است. شکل 2 در غیاب برهمکنش الکترون-فونون، شکل 3 و 4 به ترتیب در حضور برهمکنش الکترون- فونون ضعیف و قوی نشان می‌دهند. در این شکل‌ها، نمودارها برای چهار غلظت مختلف x = 0، x = 0.1، x = 0.2 و x = 0.3 و همچنین چهار طول مختلف نانوسیم میانی (سد پتانسیل) با تعداد اتم‌های N = 8، N = 14، N = 20 و N = 26 بیان شده‌اند. پهنای سد پتانسیل نانوسیم $Ga_{1-x}Al_xAs$ با استفاده از رابطه L=Na محاسبه شده است که در آن a = 0.565 nm ثابت شبکه GaAs است. بنابراین پهنای سد پتانسیل در چهار حالت به ترتیب برابر 4/52 و 7/91 و 11/30 و 14/69 nm است. جرم موثر الکترون در ناحیه میانی $m(x) = 0.067 + 0.083x$ و گاف نواری آن با رابطه $E_g^\Gamma(x) = 1.425 + 1.155x + 0.370x^2$ داده می‌شود [29]. به طوری که $E_F + \phi = E_g^\Gamma(x) + 2t_w$ [30]. در اینجا، پارامتر پرش سیم کوانتومی ناحیه میانی در تقریب جرم موثر به صورت $t_w = h^2/2ma^2$ داده می‌شود که در آن h ثابت پلانک است و مطابق رابطه اخیر انرژی پرش t_w تابعی از جرم مؤثر الکترون $(m(x))$ و در نتیجه تابع میزان غلظت Al درون نانو ساختاراست.

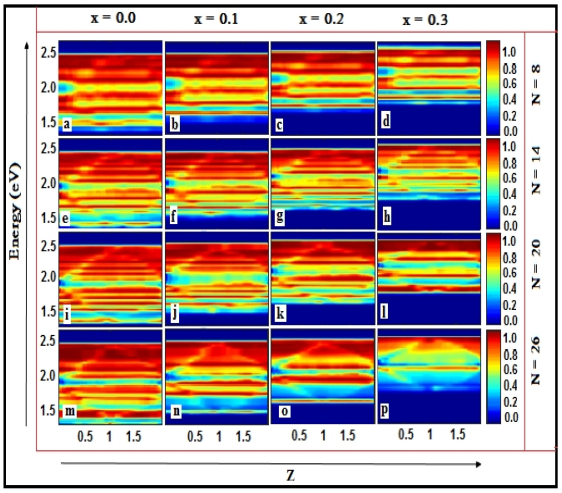


شکل 2. نمودار تغییرات ضریب عبوردهی الکترونی برحسب تغییرات انرژی الکترون فرودی و بسامد واداشته بدون بعد در زنجیره اتمی یک بعدی مربوط به ساختار همگن $Ga_{1-x}Al_xAs$ در غیاب برهمکنش الکترون- فونون (λ=0) و در چهار غلظت مختلف Al درون سیم کوانتومی $Ga_{1-x}Al_xAs$ مقادیر مختلف (0.3 و $x = 0, 0.1, 0.2$) و چهار طول مختلف برای ناحیه میانی با تعداد اتم‌های 26 و $N = 8, 14, 20$.

مطابق پنل‌های ستون سمت چپ شکل 2 که در غیاب ناخالصی رسم شده است ترابرد الکتریکی در گستره انرژی 1 الی 2/5 eV مقادیر غیرصفر دارد. شدت عبوردهی از روی راهنمای

رنگ‌ها در سمت راست نمودارها مشخص شده است. اما در پنل‌های دیگر با افزایش ناخالصی تغییرات نمودارها کاملاً محسوس است به طوری که با افزایش تعداد اتم‌ها و طول سد پتانسیل میزان شکاف انرژی نیز افزایش یافته است.

همچنین از شکل 2 می‌توان مشاهده کرد که ضریب عبوردهی در غیاب برهمکنش الکترون- فونون مستقل از مقدار بسامد واداشته بوده و تغییری در نوارهای انرژی مشاهده نمی‌شود ولی با افزایش پهنای سد پتانسیل (طول سیم میانی) و همچنین افزایش مقدار غلظت ناخالصی Al، شکاف انرژی افزایش می‌یابد. این در حالی است که میزان ناخالصی نقش بسیار مهم‌تری نسبت به طول ناحیه مرکزی در سیستم مورد بررسی ما دارد. به عبارتی دیگر، با افزایش پهنای سد پتانسیل، پنجره مجاز انرژی برای ترابرد الکترونی نیز افزایش یافته است.



شکل 3. نمودار تغییرات ضریب عبوردهی الکترونی برحسب تغییرات انرژی الکترون فرودی و بسامد واداشته بدون بعد در زنجیره اتمی یک بعدی مربوط به ساختار همگن $Ga_{1-x}Al_xAs$ در حضور برهمکنش ضعیف الکترون- فونون با شدت $\lambda = 0.2$ و در چهار غلظت مختلف Al درون سیم کوانتومی $Ga_{1-x}Al_xAs$ مقادیر مختلف 0.3 و $x = 0,\ 0.1, 0.2$ و چهار طول مختلف برای ناحیه میانی با تعداد اتم‌های 26 و $N = 8, 14, 20$. شدت عبوردهی از روی راهنمای رنگ‌ها در سمت راست نمودارها مشخص شده است.

نمودارهای شکل 3 ضریب عبوردهی الکترون را در سیم کوانتومی مورد نظر برحسب تغییرات انرژی الکترون فرودی و بسامد واداشته در حضور برهمکنش ضعیف الکترون- فونون با شدت $\lambda = 0.2$ نشان می‌دهد. مانند شکل قبل نمودارها برای طول‌های مختلف سیم ناحیه میانی (پهنای سد پتانسیل) و غلظت‌های مختلف (ارتفاع سد پتانسیل) رسم شده‌اند. ترابرد الکتریکی در گستره انرژی 1 الی 2/5 eV مقادیر غیرصفر دارد. در پنل‌های مربوط به غلظت غیرصفر دیده می‌شود که با افزایش طول سیم میانی یا پهنای سد پتانسیل میزان شکاف انرژی نیز افزایش یافته است به گونه‌ای که در دو ردیف $x = 0.2$ و $x = 0.3$ این افزایش کاملاً مشهود است. از نظر فیزیکی پراکندگی الکترونی از نوار اصلی را شاهد هستیم. همچنین چندین نقطه عطف در نواحی مختلف نمودارها دیده می‌شوند. این به این معنی است که در حضور جفت‌شدگی ضعیف الکترون- فونون، رسانش الکتریکی ضعیفی رخ می‌دهد.

نمودارهای شکل 3 ضریب عبوردهی الکترون را در سیم کوانتومی مورد نظر برحسب تغییرات انرژی الکترون فرودی و بسامد واداشته در حضور برهمکنش ضعیف الکترون- فونون با شدت $\lambda = 0.2$ نشان می‌دهد. مانند شکل قبل نمودارها برای طول‌های مختلف سیم ناحیه میانی (پهنای سد پتانسیل) و غلظت‌های مختلف (ارتفاع سد پتانسیل) رسم شده‌اند. ترابرد الکتریکی در گستره انرژی 1 الی 2/5 eV مقادیر غیرصفر دارد. در پنل‌های مربوط به غلظت غیرصفر دیده می‌شود که با افزایش طول سیم میانی یا پهنای سد پتانسیل میزان شکاف انرژی نیز افزایش یافته است به گونه‌ای که در دو ردیف $x = 0.2$ و $x = 0.3$ این افزایش کاملاً مشهود است. از نظر فیزیکی پراکندگی الکترونی از نوار اصلی را شاهد هستیم. همچنین چندین نقطه عطف در نواحی مختلف نمودارها دیده می‌شوند. این به این معنی است که در حضور جفت‌شدگی ضعیف الکترون- فونون، رسانش الکتریکی ضعیفی رخ می‌دهد.

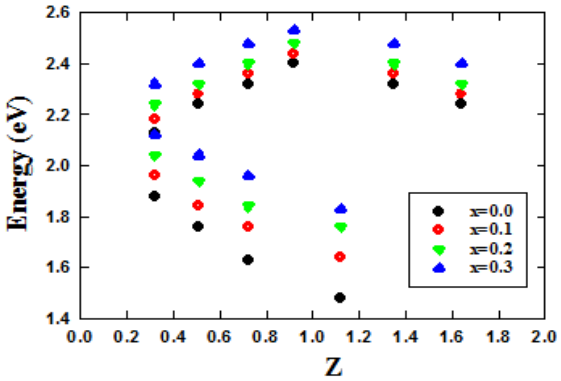
برای دیدن اثر شدت نسبتاً قوی‌تر برهمکنش الکترون- فونون، تغییرات ضریب عبوردهی الکترون در سیم کوانتومی مورد نظر را در انرژی‌ها الکترون فرودی و بسامد واداشته متفاوت در شکل 4 در گستره انرژی 1 الی 2/5 eV رسم شده است. در اینجا، شدت برهمکنش الکترون- فونون را $\lambda = 0.4$ فرض می‌کنیم. همچنین اثرات ارتفاع سد و پهنای سد پتانسیل به ترتیب با تغییرات غلظت‌های مختلف x و طول‌های مختلف نانوسیم در شکل‌های 2 الی 4 دیده می‌شود. مانند شکل قبل نمودارها برای طول‌های مختلف سیم ناحیه میانی (پهنای سد پتانسیل) و (ارتفاع سد پتانسیل) رسم شده‌اند. مانند شکل قبلی با افزایش پهنای سد پتانسیل یا طول سیم کوانتومی ناحیه مرکزی میزان شکاف انرژی زیاد می‌شود. در تمام نمودارهای شکل‌های 2 الی 4، نمودارها کاملاً متقارن هستند. ما در اینجا فقط نمودار را به ازای انرژی مثبت رسم کرده‌ایم.

همان طوری که از شکل‌های 3 و 4 دیده می‌شود چندین نقطه زین اسبی وجود دارد که در آن ضریب عبوردهی رفتار دره‌ای‌گونه دارد. این نقاط که به انرژی‌های ویژه ساختار برمی‌گردد در بسامدهای خاصی اتفاق می‌افتد و تابعی از طول ناحیه میانی و غلظت ناخالصی می‌باشند. یعنی با افزایش بسامد واداشته برای جفت‌شدگی حاصل از برهمکنش الکترون – فونون، شدت رسانش الکتریکی یا ضریب عبوردهی در سامانه افزایش می‌یابد و در برخی از نقاط که انرژی الکترون ورودی با ویژه مقادیر انرژی ساختار مرکزی برابر است رفتار ضریب عبوردهی که تابع بسامد تشدید Z است تغییر کرده و به حداقل مقدار می‌رسد.

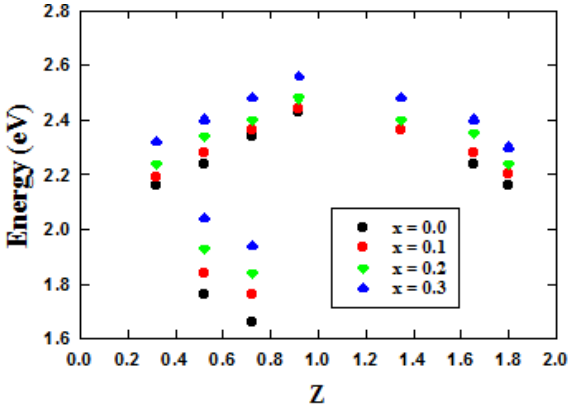
برای مطالعه بیشتر، ما این نقاط را برای دو حالت برهمکنش الکترون-فونون ضعیف ($\lambda = 0.2$) و قوی ($\lambda = 0.4$) برای طول نانوسیم متناظر با زنجیره 14 اتمی به ترتیب در جدول‌های 1 و 2 برحسب (Z و E) استخراج کردیم. از این جدول‌ها دیده

جدول 1. ویژه مقادیر انرژی در نقاط Zهای مشترک درون نانوسیم شبه یک بعدی $Ga_{1-x}Al_xAs$ با $N = 14$ اتم برای چهار غلظت مختلف 0.3 و $x = 0,\ 0.1, 0.2$ در حالت جفت‌شدگی ضعیف الکترون– فونون با شدت $\lambda = 0.2$. نتایج بر مبنای شکل 3 استخراج شده‌اند.

Z	(x= 0) E (eV)	(x= 0,1) E (eV)	(x=0) E (eV)	x= 0/3 E (eV)
0,32	2,13	2,18	2,24	2,32
0,51	2,24	2,28	2,32	2,40
0,72	2,32	2,36	2,40	2,48
0,92	2,40	2,44	2,48	2,53
1,12	1,48	1,64	1,76	1,83
1,35	2,32	2,36	2,40	2,48
1,64	2,24	2,28	2,32	2,40
0,32	1,88	1,96	2,04	2,12
0,51	1,76	1,84	1,94	2,04
0,72	1,63	1,76	1,84	1,96

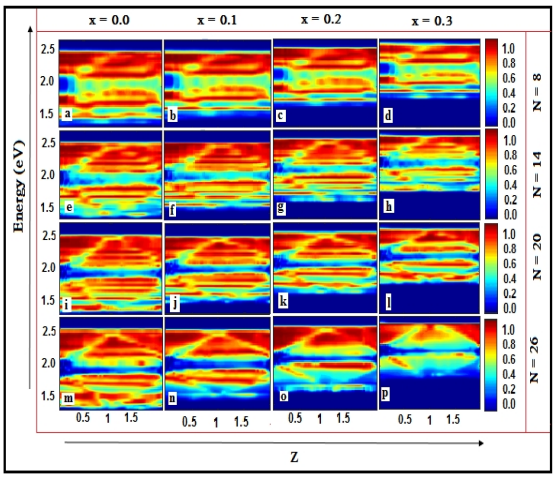


شکل 5. نمودار تغییرات انرژی الکترون فرودی برحسب بسامد واداشته در حضور برهمکنش ضعیف الکترون- فونون $\lambda = 0.2$ در حالت زنجیره $N = 14$ اتمی و با تغییر مقدار x در نانوساختار $Ga_{1-x}Al_xAs$.



شکل 6. نمودار تغییرات انرژی الکترون فرودی بر حسب بسامد واداشته در حضور برهمکنش قوی الکترون- فونون $\lambda = 0.4$ در حالت زنجیره $N = 14$ اتمی و با تغییر مقدار x در نانوساختار $Ga_{1-x}Al_xAs$

می‌شود که افزایش ویژه مقادیر انرژی در نقاط Zهای مشترک، با افزایش میزان غلظت Al درون نانوسیم $Ga_{1-x}Al_xAs$ زیاد می‌شوند. اعداد مربوط به Z همان اعداد نقاط عطف یا زین‌اسبی هستند که در شکل‌های 3 و 4 مشاهده می‌کنیم. در این جدول افزایش پنجره مجاز انرژی با افزایش مقدار غلظت Al را در نقاط Zهای مشترک شاهد هستیم. نتایج داده‌های جدول 1 برای سهولت در مطالعه در شکل 5 ترسیم شده‌اند.



شکل 4. نمودار تغییرات ضریب عبوردهی الکترونی برحسب تغییرات انرژی الکترون فرودی و بسامد واداشته بدون بعد در زنجیره اتمی یک بعدی مربوط به ساختار همگن $Ga_{1-x}Al_xAs$ در حضور برهمکنش قوی الکترون- فونون با شدت $\lambda = 0.4$ و در چهار غلظت مختلف Al درون سیم کوانتومی $Ga_{1-x}Al_xAs$ مقادیر مختلف 0.3 و $x = 0,\ 0.1, 0.2$ و چهار طول مختلف برای ناحیه میانی با تعداد اتم‌های 26 و $N = 8, 14, 20$. شدت عبوردهی از روی راهنمای رنگ‌ها در سمت راست نمودارها مشخص شده است.

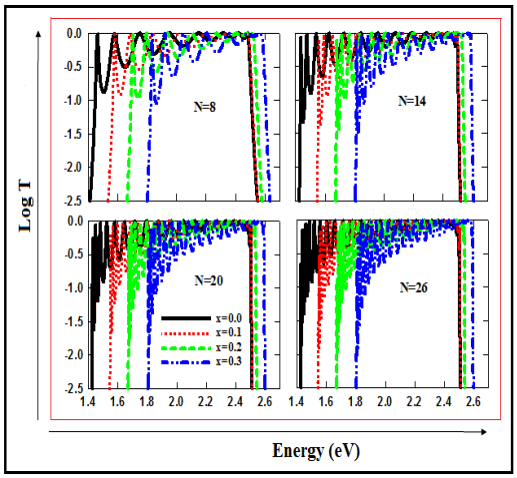
در این شکل محور قائم انرژی‌های الکترون‌های فرودی نانوسیم و محور افقی بسامد واداشته است. مشاهده می‌شود که با اعمال برهمکنش الکترون –فونون و افزایش بسامد حاصل از جفت‌شدگی میزان جابه‌جایی فونون‌ها و پراکندگی الکترون‌ها افزایش می‌یابد.

این پدیده بر میزان شدت رسانندگی الکتریکی تاثیر به سزایی می‌گذارد. بنابراین در نقاط زین‌اسبی که تاثیر برهمکنش الکترون – فونون حداکثر می‌شود رسانش الکتریکی کاهش قابل توجهی را به دنبال دارد. نتایج داده‌های جدول 2 در شکل 6 رسم شده‌اند. در این شکل محور قائم ویژه انرژی‌های الکترون‌های فرودی نانوسیم و محور افقی بسامد واداشته است.

بنابراین برای بسامدهای مختلف جفت‌شدگی الکترون- فونون و با اعمال درصدهای متفاوتی از حضور Al در ساختار همگن $Ga_{1-x}Al_xAs$ به صورت زوج‌های مرتب شده در غلظت‌های مختلف مورد نظر که یک سد پتانسیل کوانتومی را در پی دارد اندازه بسامد واداشته و ویژه مقدار انرژی مربوط به هر یک از نقاط زین‌اسبی در همه حالت‌های سدی به‌دست آمد.

البته با افزایش غلظت Al درون ساختار سیم کوانتومی و تک سدی $Ga_{1-x}Al_xAs$ از حالت بدون ناخالصی ($x = 0$) تا بیشترین غلظت یعنی ($x0.3$) شاهد جابه‌جایی رو به بالای ویژه مقادیر انرژی در بسامدهای تشدید مشترک هستیم. جدول شماره 2 و مربوط به حالت برهمکنش قوی الکترون- فونون با شدت $\lambda = 0.4$ در زنجیره 14 اتمی شبه یک بعدی با ساختار همگن $Ga_{1-x}Al_xAs$ است که افزایش ویژه مقادیر انرژی مجاز در نقاط Zهای مشترک، با افزایش میزان غلظت Al را نشان می‌دهد. در شکل 6 که نمودار مربوط به تغییرات انرژی برحسب بسامد واداشته نشان داده شده است افزایش پنجره مجاز انرژی با افزایش مقدار غلظت Al را در نقاط Zهای مشترک مشاهده می‌کنیم.

به طور خلاصه نتیجه استخراج شده از نمودارهای تغییرات ضریب عبوردهی الکترونی برحسب تغییرات انرژی الکترون های فرودی و بسامد واداشته بدون بعد در زنجیره اتمی یک بعدی مربوط به ساختار همگن $Ga_{1-x}Al_xAs$ گویای این مطلب است که در حضور برهمکنش الکترون – فونون، تاثیر بسامدهای مختلف حاصل از نیروی واداشته بر روی رسانش الکتریکی در غیاب نوسانات میرا، افزایش می‌یابد و در نقاط زین اسبی به‌وجود آمده به دلیل تاثیر نیروهای میرایی با ضریب میرایی ($\gamma = 0/1$) تاثیر جفت‌شدگی الکترون – فونون بر شدت رسانش کمتر می‌شود.



شکل 7. نمودار لگاریتم ضریب عبوردهی الکترونی برحسب تغییرات انرژی الکترون فرودی در زنجیره اتمی یک بعدی مربوط به ساختار $Ga_{1-x}Al_xAs$ در چهار غلظت مختلف Al یعنی ($x = 0,\ 0.1, 0.2$ و 0.3) و چهار طول مختلف برای ناحیه میانی با تعداد اتم‌های 26 و $N = 8, 14, 20$ در غیاب برهمکنش الکترون- فونون (λ=o). پهنای سد پتانسیل با تغییر تعداد اتم‌ها تغییر می‌کند.

در شکل 7 الی 9 نمودارهای لگاریتم ضریب عبوردهی الکترون از سیم کوانتومی $Ga_{1-x}Al_xAs$ متصل به دو سیم شبه یک بعدی GaAs برحسب انرژی الکترون فرودی در چهار طول مختلف متناظر با تعداد اتم‌های 26 و $N = 8, 14, 20$ به

جدول 2. ویژه مقادیر انرژی در نقاط Zهای مشترک درون نانوسیم شبه یک بعدی $Ga_{1-x}Al_xAs$ با $N = 14$ اتم برای چهار غلظت مختلف $x = 0,$ 0.3 و 0.1, 0.2 در حالت جفت‌شدگی ضعیف الکترون – فونون با شدت $\lambda = 0.4$. نتایج بر مبنای شکل 4 استخراج شده‌اند.

Z	(x= 0) E (eV)	(x= 0,1) E (eV)	(x=0) E (eV)	x= 0/3 E (eV)
0,32	2,16	2,19	2,24	2,32
0,52	2,24	2,28	2,34	2,40
0,72	2,34	2,36	2,40	2,48
0,92	2,43	2,44	2,48	2,56
1,12	2,44	2,44	2,48	2,57
1,35	2,36	2,36	2,40	2,48
1,65	2,24	2,28	2,35	2,40
1,80	2,16	2,20	2,24	2,30
0,52	1,76	1,84	1,93	2,04
0,72	1,66	1,76	1,84	1,94

ازای پارامتر بسامد تشدید (بدون بعد) حاصل از اعمال نیروی خارجی در شدت‌های مختلف برهمکنش الکترون- فونون λ=o، $\lambda = 0.2$ و $\lambda = 0.4$ به ترتیب رسم شده است. در تمام شکل‌ها، ضریب عبوردهی برحسب انرژی یک رفتار نوسانی از خود نشان می‌دهد به طوری که به ازای برخی از انرژی‌های الکترون فرودی به عدد 1 می‌رسد. به این انرژی‌های خاص، انرژی‌های تشدیدی سیستم می‌گویند.

در مدل حاضر، ساختار همگن ناحیه مرکزی را به عنوان یک سد پتانسیل با ارتفاع و پهنای مشخص تصور می‌کنیم به طوری که رفتار نوسانی برای الکترون‌هایی با انرژی فرودی بزرگ‌تر از ارتفاع سد اتفاق می‌افتد [30 و 31].

با تغییر غلظت Al درون ساختار $Ga_{1-x}Al_xAs$ با مقادیر مختلف 0.3 و $x = 0,\ 0.1, 0.2$ ارتفاع سد پتانسیل زیاد و با افزایش تعداد اتم‌ها پهنای سد پتانسیل زیاد می‌شود. بنابراین از شکل دیده می‌شود که در همه حالت‌ها تعداد قله‌های نمودار بر اساس تعداد اتم‌های نانوسیم تغییر می‌کند. تعداد قله‌های نمودارها در هر چهار نمودار شکل 7 به ترتیب 8 و 14 و 20 و 26 قله براساس تعداد اتم‌های نانوساختار مورد بحث حاصل شده است. همچنین پنجره مجاز ویژه مقادیر انرژی برای تونل‌زنی و ترابرد الکترونی در هر چهار نمودار شکل 7 مطابق با میزان غلظت Al تغییر می‌کند و مستقل از تعداد اتم‌های نانوساختار است.

به این ترتیب در هر چهار نمودار این شکل در حالت x=0 ، پنجره مجاز انرژی از 1/41 eV تا 2/53 eV، در حالت x =0/1 ، پنجره مجاز انرژی از 1/53 eV تا 2/54 eV، در حالت x = 0/2، پنجره مجاز انرژی از 1/66 eV تا 2/56 eV و در حالت x=0/3 ، پنجره مجاز انرژی از 1/79 eV تا 2/61 eV است؛ بنابراین در

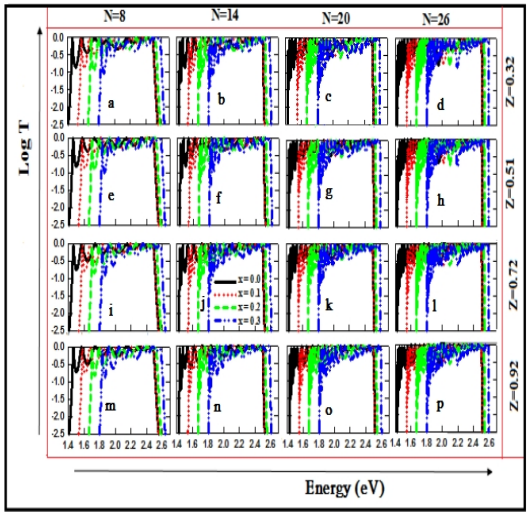
حالت x = 0، لگاریتم ضریب عبوردهی الکترون به ازای حداقل ویژه مقدار انرژی 1/40 eV حاصل شده است. با افزایش میزان غلظت Al در حالت x=0/3 ، درون نانوساختار $Ga_{1-x}Al_xAs$ حداقل ویژه مقدار انرژی لازم برای عبوردهی الکترون برابر و 1/79 eV است.

در نمودارهای لگاریتم ضریب عبوردهی برحسب ویژه مقادیر انرژی مطابق شکل 8 تاثیر جفت‌شدگی ضعیف بین الکترون – فونون ($\lambda = 0.2$) بر روی ترابرد الکترونی رسم شده است. با تغییر غلظت Al درون ساختار $Ga_{1-x}Al_xAs$ با مقادیر مختلف و با افزایش تعداد اتم‌ها که افزایش پهنای سد پتانسیل متناظر با آنها به ترتیب برابر با 4/52 nm و 7/91 nm و 11/3 nm و 14/69 nm را به دنبال دارد و همچنین با افزایش بسامد واداشته، نتایج زیر حاصل شده است:

الف) پنجره مجاز ویژه مقادیر انرژی برای تونل‌زنی و ترابرد الکترونی مستقل از تعداد اتم‌های نانوساختار (یا پهنای سد پتانسیل) بوده و با تغییر غلظت Al (ارتفاع سد پتانسیل) تغییر می‌کند. به این ترتیب که در حالت x = 0، پنجره مجاز انرژی از 1/41 eV تا 2/54 eV، در حالت x =0/1، پنجره مجاز انرژی از 1/52 eV تا 2/53 eV، در حالت x = 0/2، پنجره مجاز انرژی از 1/67 eV تا 2/58 eV و در حالت x = 0/3، پنجره مجاز انرژی از 1/79 eV تا 2/62 eV است. بنابراین در حالت x=o، لگاریتم ضریب عبوردهی الکترون به ازای حداقل ویژه مقدار انرژی 1/41 eV حاصل شده است و با افزایش میزان غلظت Al در حالت x = 0/3، درون نانوسیم $Ga_{1-x}Al_xAs$ حداقل ویژه مقدار انرژی لازم برای عبوردهی الکترون برابر و 1/79 eV است.

ب) در نمودارهای لگاریتم عبوردهی برحسب انرژی مشاهده می‌شود که یک بسامد واداشته معین دره ایجاد شده است. علت آن افزایش شدت پراکندگی الکترون‌ها در یک طول موج و انرژی خاص است. بنابراین نقاطی که در آنها گذار فاز رخ داده به شرح زیر است: در حالت N =20 و N =26 به ترتیب با پهنای سد پتانسیل L =11/3 nm و L = 14/69 nm، در غیاب Al انرژی مربوط به گذار فاز برابر 1/95 eV و در غلظت 0/1، 0/2 و 0/3 انرژی مربوط به نقطه گذار فاز به ترتیب برابر 2/02، 2/09 و 2/19 الکترون ولت است.

ج) دره‌های ایجاد شده با افزایش غلظت Al درون سیستم $Ga_{1-x}Al_xAs$ به طرف انرژی‌های بیشتر به دلیل تغییر پنجره‌های مجاز انرژی با افزایش افزایش غلظت Al سوق داده می‌شود. البته در تمام موارد مشاهده می‌شود که با افزایش پهنای سد پتانسیل در بسامدهای تشدید معین دره‌های ایجاد شده دارای عمق بیشتری هستند. البته با افزایش بسامد تشدید همراه با ثابت ماندن پهنای سد پتانسیل عمق دره‌ها در حین گذار فاز کمتر می‌شود. همچنین مقدار ضریب عبوردهی نیز کاهش قابل ملاحظه‌ای دارد.



شکل 8. نمودار لگاریتم ضریب عبوردهی الکترونی برحسب تغییرات انرژی الکترون فرودی در زنجیره اتمی یک بعدی مربوط به ساختار $Ga_{1-x}Al_xAs$ در چهار غلظت مختلف Al یعنی ($x = 0,\ 0.1, 0.2$ و 0.3) و چهار طول مختلف برای ناحیه میانی با تعداد اتم‌های 26 و $N = 8, 14, 20$ در غیاب برهمکنش الکترون- فونون ($\lambda = 0.2$). پهنای سد پتانسیل با تغییر تعداد اتم‌ها تغییر می‌کند.

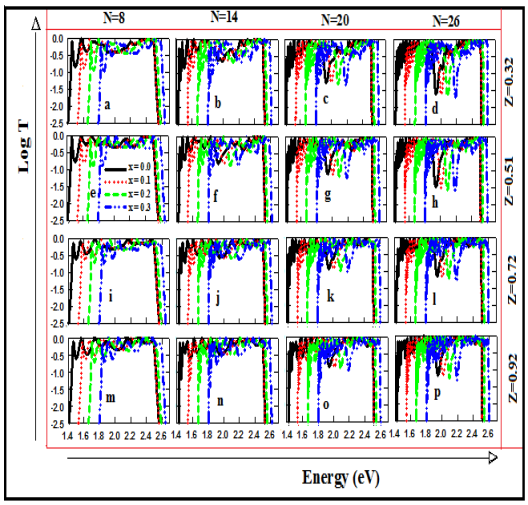
شکل 9 نمودارهای لگاریتم ضریب عبوردهی برحسب ویژه مقادیر انرژی را در حالت جفت‌شدگی قوی بین الکترون– فونون ($\lambda = 0.4$) در چهار طول مختلف متناظر 4/52 nm و 7/91 nm و 11/3 nm و 14/69 nm رسم شده است. نتایج در غلظت‌های مختلف ناخالصی Al درون نانوسیم $Ga_{1-x}Al_xAs$ به دست آمده است.

الف) پنجره مجاز ویژه مقادیر انرژی برای تونل‌زنی و ترابرد الکترونی با تغییر میزان غلظت Al تغییر کرده است. به این ترتیب که در حالت غلظت x = 0 پنجره مجاز انرژی از 1/41 eV تا 2/52 eV، در حالت x = 0/1 پنجره مجاز انرژی از 1/53 eV تا 2/52 eV، در حالت x = 0/2 پنجره مجاز انرژی از 1/65 eV تا 2/55 eV و در حالت x = 0/3 پنجره مجاز انرژی از 1/79 eV تا 2/61 eV است.

ب) که در نمودارهای لگاریتم ضریب عبوردهی برحسب انرژی الکترون فرودی در یک بسامد واداشته معین دره ایجاد شده است به طوری که متناظر با یک طول موج یا انرژی خاص گذار فاز اتفاق می‌افتد. بنابراین نقاطی که در آنها گذار فاز رخ داده به شرح زیر است: در حالت N =8 و در غلظت‌های x = 0، x = 0/1، x = 0/2 و x = 0/3 با بسامدهای واداشته Z=0/32، Z=0/51، Z=0/72 و Z=0/92 انرژی مربوط به نقاط گذار فاز به ترتیب برابر با 1/97 eV، 2/03 eV، 2/13 eV و 2/22 eV هستند. در حالت N =14 و در غلظت‌های x = 0، x = 0/1، x = 0/2 و x = 0/3 با بسامدهای واداشته Z=0/32، Z=0/51، Z=0/72 و Z=0/92 انرژی مربوط به نقاط گذار فاز به ترتیب عبارت‌اند از:

1/94 eV، 2/01 eV، 2/09 eV و 2/19 eV هستند. در حالت N =20 و N =26 به ترتیب با پهنای سد پتانسیل L =11/3 nm و L = 14/69 nm در غلظت‌های x =0، x = 0/1، x = 0/2 و x = 0/3 با بسامدهای واداشته Z=0/32، Z=0/51، Z=0/72 و Z=0/92 انرژی مربوط به نقاط گذار فاز به ترتیب عبارت‌اند از: 1/93 eV، 2/0 eV، 2/09 eV و 2/18 eV.

ج) دره‌های ایجاد شده با افزایش غلظت Al درون سیستم $Ga_{1-x}Al_xAs$ در حضور برهمکنش الکترون- فونون (λ = 0.4) نسبت به دو حالت قبلی با شدت جفت‌شدگی الکترون – فونون (λ = 0.0) و (λ = 0.2) نسبتا عمیق‌تر به‌دست آمده است و همانند حالت (λ = 0.2) به طرف انرژی‌های بالاتر به دلیل تغییر پنجره‌های مجاز انرژی با افزایش افزایش غلظت Al سوق داده می‌شود. البته در تمام موارد مشاهده می‌شود که با افزایش پهنای سد پتانسیل در بسامدهای تشدید معین دره‌های ایجاد شده دارای عمق قابل توجهی هستند. البته با افزایش بسامد تشدید همراه با ثابت ماندن پهنای سد پتانسیل عمق دره‌ها در حین گذار فاز کمتر می‌شود. همچنین مقدار ضریب عبوردهی نیز کاهش قابل ملاحظه‌ای دارد.



شکل 9. نمودار لگاریتم ضریب عبوردهی الکترونی برحسب تغییرات انرژی الکترون فرودی در زنجیره اتمی یک بعدی مربوط به ساختار $Ga_{1-x}Al_xAs$ در چهار غلظت مختلف Al یعنی (0.3 و $x = 0,\ 0.1, 0.2$) و چهار طول مختلف برای ناحیه میانی با تعداد اتم‌های 26 و $N = 8, 14, 20$ در غیاب برهمکنش الکترون- فونون (λ = 0.4). پهنای سد پتانسیل با تغییر تعداد اتم‌ها تغییر می‌کند.

نتیجه‌گیری

محاسبات عددی با استفاده از شبیه‌سازی در نرم‌افزار متلب برای نانو سیم کوانتومی $Ga_{1-x}Al_xAs$ جهت استخراج خواص ترابرد الکتریکی آن در رهیافت تابع گرین، در حضور و غیاب بر همکنش الکترون – فونون و همچنین تاثیر افزایش پهنای سد پتانسیل و افزایش غلظت Al تحت ولتاژ اعمالی انجام شده است. برای این منظور سیم کوانتومی شبه یک بعدی $Ga_{1-x}Al_xAs$ متصل به دو سیم نیم‌بی‌نهایت فلزی را به صورت سد پتانسیل در نظر می‌گیریم و هامیلتونی سامانه مورد نظر را در چارچوب بستگی قوی و در حضور برهمکنش الکترون- فونون با اعمال تقریب هارمونیک می‌نویسیم و با استفاده از رهیافت تابع گرین خواص ترابرد الکتریکی این نانوسیم را استخراج و بررسی می‌کنیم. که نتایج زیر حاصل شده است.

1) با افزایش پهنای سد پتانسیل یعنی طول نانوسیم کوانتومی به دلیل وجود منطقه شکاف انرژی، ضریب عبوردهی الکترون با انرژی قبلی امکان‌پذیر نیست و باید ویژه مقدار انرژی افزایش یابد تا الکترون بتواند با انجام تونل‌زنی عبور نماید و رسانش الکتریکی برقرار شود.

2) در حضور برهمکنش الکترون- فونون، تاثیر بسامدهای مختلف حاصل از نیروی واداشته بر روی خواص ترابرد الکتریکی در غیاب نوسانات میرا، افزایش می‌یابد و در نقاط زین‌اسبی به وجود آمده به دلیل تاثیر نیروهای میرایی، تاثیر جفت‌شدگی الکترون - فونون بر شدت رسانش کمتر می‌شود.

3) با افزایش غلظت Al درون ساختار همگن $Ga_{1-x}Al_xAs$ و در غلظت‌های مختلف Al درون نانو سیم، پنجره‌های مجاز انرژی برای عبودهی الکترون تغییر می‌کند به طوری که شاهد جابه‌جایی رو به بالای ویژه مقادیر انرژی در بسامدهای تشدید مشترک هستیم یعنی رسانش الکترونی با انرژی قبلی امکان‌پذیر نیست و برای برقراری رسانش الکترونی و تونل‌زنی ویژه مقادیر بالاتر انرژی مورد نیاز است.

4) با افزایش پهنای سد پتانسیل در بسامدهای تشدید معین دره‌های ایجاد شده دارای عمق بیشتری هستند. البته با افزایش بسامد تشدید همراه با ثابت ماندن پهنای سد پتانسیل عمق دره‌ها در حین گذار فاز کمتر می‌شود. همچنین مقدار ضریب عبوردهی نیز کاهش قابل ملاحظه‌ای دارد.

References

[1] Barford W., Electronic and Optical Properties Of Conjugated Polymers, Oxford University Press, 2005.
[2] M. Mardaani, H. Rabani, "Coherent electronic conductance of a nanowire in the presence of electron–phonon interaction", Phys. Status Solidi b 251, 1001 (2014).
[3] H. Park, J. Park, A. K. L. Lim, E. H. Anderson, A. P. Alivisatos and P. L. McEuen, "Nano-mechanical Oscillations in a Single-C60 Transistor", Nature (London) 407, 57 (2000).
[4] C. Sauer, M. Wießner, A. Schöll and F. Reinert, "Interface originated modification of electron-vibration coupling in resonant photoelectron spectroscopy", Phys. Rev. B 89, 075413 (2014).
[5] J. Sukegawa, Ch. Schubert, X. Zhu, H. Tsuji, D. M. Guldi and E. Nakamura, "Electron transfer through rigid organic molecular wires enhanced by electronic and electron–vibration coupling", Nature Chemistry 6, 899 (2014).

[6] A. Benyamini, A. Hamo, S. Viola Kusminskiy, F. von Oppen and S. Ilani, "Real-space tailoring of the electron-phonon coupling in ultraclean nanotube mechanical resonators", Nature Physics 10, 151 (2014).
[7] S. Kim and N. Marzari, "First-principles quantum transport with electron-vibration interactions: A maximally localized Wannier functions approach", Phys. Rev. B 87, 245407 (2013).
[8] S. Ulstrup, T. Frederiksen and M. Brandbyg, "Nonequilibrium electron-vibration coupling and conductance fluctuations in a C60-junction", Phys. Rev. B 86, 245417 (2012).
[9] Superconductivity and thermodynamic properties of MPb7 (M= Al, Mg) compounds: A first principles study, Solid State Communications Fatemeh Shirvani, Aliasghar Shokri 371 (2023) 11528
[10] S. Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems (Cambridge University Press, Cambridge, 1995); Quantom Transport: Atom to Transistor (Cambridge University Press, Cambridge, 2005).
[11] W. Zhang, C. Delerue, Y. M. Niquet, G. Allan, and E. Wang, "Atomistic modeling of electron-phonon coupling and transport properties in n-type silicon nanowires", Phys. Rev. B 82, 115319 (2010).
[12] EPW: Electron-phonon coupling, transport and superconducting properties using maximally localized Wannier functions S Poncé, ER Margine, C Verdi, F Giustino - Computer Physics…, 2016 – Elsevier
[13] Electron-Phonon Coupling and Superconductivity in C_2 Compound upon Compression S. Dilmi, S. Saib & N. Bouarissa Journal of Superconductivity and Novel agnetism volume 34, pages 1311–1320 (2021)
[14] Electron-phonon interactions in LuH2, LuH3, and LuN T Lu, S Meng, M Liu- arXiv preprint arXiv:2304.06726, (2023) - arxiv.org
[15] Energy storage applicability of novel two-dimensional transition metal nitride alloys: First principle stud Fatemeh Shirvani, Maryam Masoudi https://doi.org/10.1016/j.ssc.2022.115002
[16] M. Zebarjadi, A. Shakouri and K. Esfarjani, "Thermoelectric transport perpendicular to thin-film heterostructures calculated using the Monte Carlo technique", Phys. Rev. B 74, 195331 (2006).
[17] L.F. Torres, H.M. Pastawski and S.S. Makler, "Tuning a resonance in Fock space: Optimization of phonon emission in a resonant-tunneling device", Phys. Rev. B 64, 193304 (2001).
[18] H. M. Pastawski, E. Medina, "Tight Binding methods in quantum transport through molecules and small devices: from the coherent to the decoherent description", Rev. Mex. Fis. 47S1, 1 (2001).
[19] Qiu X.H., Nazin G.V., Ho W., Vibronic States in Single Molecule Electron Transport, Physical Review Letters, 92, 206102, 2004. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.206102
[20] Coropceanu V., Cornil J., da Silva D.A., Olivier Y., Silbey R., Bredas J.L., Charge transport in organic semiconductors, Chemical Reviews, 107,926-952, 2007. https://doi.org/10.1021/cr050140x
[21] Datta S., Electonic Transport in Mesoscopic System, Cambridge University Press, 1997.
[22] R. Landauer, Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction, IBM Journal of Research and Development, 32, 306-316, 1988, DOI: 10.1147/rd.323.0306; Jefferson J.H., Ramšak A., Rejec T., Entanglement and transport anomalies in nanowires, Journal of Physics: Condensed Matter, 20 164206, 2008. https://doi.org/10.48550/arXiv.0804.0141
[23] Mardaani M., Rabani H., Esmaili E., Shariati A., The effect of driven electron-phonon coupling on the electronic conductance of a polar nanowire, Journal of Applied Physics, 118, 054306, 2015. DOI: 10.1063/1.4928084
[24] Mardaani M., Rabani H., Keshavarz M., Phonon transport properties of a mass–spring simple cubic nanocrystal within the harmonic approximation, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 44, 1342-1345, 2012. https://doi.org/10.1016/j.physe.2012.02.015
[25] Shokri A.A., Mardaani M., The role of nano-cantacts in electrical transport through a molecule wire, Chemical Physics, 330, 287-294, 2006. https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2006.08.023
[26] Mardaani M., Esfarjani K., Some analytical results in phase coherent transport in quantum wire, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 25, 119-130, 2004. https://doi.org/10.1016/j.physe.2004.06.057. 119
[27] Shokri A.A., Saffarzadeh A., Temperature and voltage dependence of magnetic barrier junctions with a nonmagnetic spacer, The European Physical Journal B – Condensed Matter and Complex Systems, 42, 187-191, 2004. https://doi. org/10.1140/epjb/e2004-00371-x
[28] Mardaani M., Rabani H., Phonon scattering in harmonic model for a typical quantum wire, Solid State Communications, 151, 311-314, 2011. https://doi.org/10.1016/j.ssc.2010.11.040
[29] Shokri A.A., Jamshidi R., Merging of defect modes in a superlattice of one-dimensional metamaterials photonic crystals, AIP Advances, 9,055318,2019.https://doi.org/10.1063/1.5089413
[30] Khalaj A., Shokri A., Salami N., Effects of electron-phonon interactions on electrical transport properties of GaAs/GaAlAs semiconductor heterostructure, Physica B: Condensed Matter, In Press (2023) 415146. https://doi.org/10.1016/j.physb.2023.415146
[31] Grosso G., Pastori Parravicini G., Solid State Physics, Academic Press; 2nd edition, 2013.