مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۲، شمارهٔ ۱، بهار ۱۳۹۱

ترابرد الكتروني يك نانو ساختار نردباني در حضور نقص‌هاي شبكه‌اي

محمد مرداني[۱و۲]، حسن رباني[۱و۲] و آزاده مظلوم شهركي[۱]

۱. گروه فيزيك، دانشكده علوم پايه دانشگاه شهركرد، شهركرد
۲. مركز پژوهشي فناوري نانو، دانشگاه شهركرد، شهركرد
پست الكترونيكي: mohammad-m@sci.sku.ac.ir

(دريافت مقاله: ۱۳۹۰/۵/۳۰ ؛ دريافت نسخهٔ نهايي: ۱۳۹۰/۱۱/۲۹)

چكيده

در اين تحقيق، به مطالعهٔ عددي رسانش الكتريكي يك نانو ساختار نردباني نامتناهي ايده‌آل در حضور و غياب نقص‌هاي شبكه‌اي به كمك روش تابع گرين در رهيافت تنگابست پرداخته شده است. نقص‌هاي شبكه‌اي را مي‌توان به عنوان اتصال‌هاي يك نردبان متناهي مركزي به دو نردبان نيمه متناهي به عنوان هادي‌ها در نظر گرفت. نتايج نشان مي‌دهد كه ناحية همپوشاني دو كانال رسانش نردبان را مقدار انرژي پرش در راستاي پله تعيين مي‌كند و با افزايش آن نسبت به انرژي پرش در راستاي نردبان بازهٔ مجاز انرژي رفته بزرگتر شده ولي ناحية همپوشاني كانال‌هاي رسانش كمتر و در نهايت صفر مي‌شود. ايجاد پيوندهاي شاخه‌اي در نردبان مركزي نسبت به مورد بدون شاخه باعث ضعيف‌تر شدن تونل‌زني الكترون مي‌شود. همچنين هر چه انرژي الكترون ورودي به لبه‌هاي گاف انرژي نزديك‌تر شود، تونل‌زني بهتر صورت مي‌گيرد.

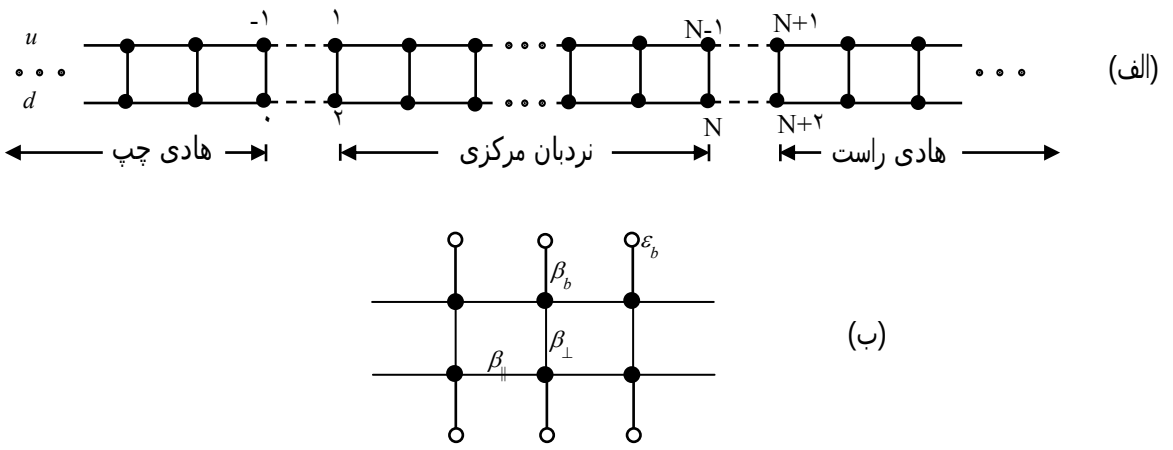
واژه‌هاي كليدي: نانو ساختار نردباني، نقص شبكه‌اي، تابع گرين، رسانش الكتروني

۱. مقدمه

در سال‌های اخير، بررسی طيف الكترونی و رسانش الكتريكی نانو ساختارها از اهميت ويژه‌ای برخوردار بوده است. در اين ميان شبكه‌های نردبانی به عنوان سامانه‌های شبه يک بعدی، بخش ويژه‌ای از اين تحقيقات تجربی و نظری را به خود اختصاص داده است. از دلايل جذابيت مطالعه شبكه‌های نردبانی می‌توان به امكان درک خواص فيزيكی يک شبكهٔ متصل شده به نردبان در تركيب‌های $(VO)_2P_2O_7$ و $Sr_2Cu_2O_6$ [۱-۲] و همچنين بررسی ترابرد الكترونی و چگونگی انتقال بار در رشته‌های DNA اشاره كرد.

پژوهشگران در مطالعات نظری خود در زمينهٔ بررسی رسانش الكتريكی مولكول DNA الگوهای متفاوتی بر پايهٔ مدل تنگابست از جمله شبكه‌های يک بعدی نامنظم، استخوان ماهی و شبكهٔ نردبانی ارائه داده‌اند [۳]. به طور مثال آنها نشان دادند در شبكهٔ نردبانی با افزايش تعداد نقص‌های شبكه‌ای می‌توان گذار فاز عايق- فلز را مشاهده نمود كه می‌توان از اين خاصيت به عنوان يک كليد در محدودهٔ مزوسكوپيک بهره جست [۴].

در اين مطالعه با استفاده از روش تابع گرين در رهيافت تنگابست، به بررسی رسانش الكتريكی يک نانو ساختار نردبانی ايده‌آل و يک شبكهٔ نردبانی شامل يک يا دو نقص پيوندی شبكه‌ای می‌پردازيم. برای اين منظور يک نردبان متناهی را بين دو نردبان نيمه متناهی قرار می‌دهيم و با در نظر گرفتن مقدارهای مختلف برای انرژی‌های اتصال‌ها، نقص‌ها را شبيه‌سازی می‌كنيم و به محاسبهٔ ضريب عبور الكترونی نانو



شکل ۱ . (الف) یک نردبان متناهی بدون شاخه شامل $n = N/۲$ پله متصل به دو نردبان نیمه متناهی. (ب) هر پله در نردبان‌های سمت چپ، راست و یا مرکزی می‌تواند دارای دو پیوند شاخه – مانند باشد.

ساختارهای نردبانی ایده‌آل و نقص‌دار می‌پردازیم.

در ادامه در بخش بعد به معرفی مدل و فرمول‌بندی رسانش الکترونی برای یک شبکهٔ نردبانی متناهی متصل به دو هادی نردبانی مشابه می‌پردازیم. سپس در بخش نتایج و بحث به تحلیل نتایج پرداخته و در نهایت در بخش آخر خلاصه‌ای از نتایج این مطالعه می‌آوریم.

۲. فرمول بندي

شکل ۱ (الف)، یک نردبان متناهی متشکل از N اتم ($n = N/۲$ پله) را که از سمت چپ و راست به دو نردبان نیمه متناهی ایده‌آل مشابه متصل شده است، نشان می‌دهد.

ترابرد الکترونی این سامانه را با استفاده از هامیلتونی تنگابست و تنها با در نظر گرفتن اثر همسایه‌های اول، مدل‌سازی می‌کنیم [۵-۶]. هامیلتونی نردبان مرکزی H_C به صورت زیر نوشته می‌شوند

$$H_C = \varepsilon_C \sum_{i=۱}^{N} |i\rangle\langle i| + \beta_{C\perp} \sum_{i=۱}^{N-۱} |i\rangle\langle i+۱| + \beta_{C\parallel} \sum_{i=۱}^{N-۲} |i\rangle\langle i+۲| + h.c \ , \quad (۱)$$

که در آن ε_C انرژی جایگاهی اتم‌ها، $\beta_{C\perp}$ و $\beta_{C\parallel}$ به ترتیب انرژی‌های پرش بین اتم‌ها در راستای پله و در راستای نردبان، N تعداد اتم‌ها در نردبان مرکزی هستند. همچنین هامیلتونی نردبان چپ (راست) چنین است

$$H_{L(R)} = \varepsilon_{L(R)} \sum |i\rangle\langle i| + \beta_{L(R)\perp} \sum |i\rangle\langle i+۱| + \beta_{L(R)\parallel} \sum |i\rangle\langle i+۲| + h.c \ , \quad (۲)$$

که در آن $\varepsilon_{L(R)}$ انرژی جایگاهی اتم‌ها در نردبان چپ (راست)، $\beta_{L(R)\perp}$ و $\beta_{L(R)\parallel}$ به ترتیب انرژی‌های پرش بین اتم‌ها در راستای پله و در راستای نردبان چپ (راست) هستند. همچنین در جمع‌های رابطهٔ (۲) مقدار i برای هادی چپ از مقدار $-\infty$ تا صفر و برای هادی راست از $N+۱$ تا ∞ تغییر می‌کند. وارون تابع گرین نردبان مرکزی در حضور هادی‌های چپ و راست، $G_C^{-۱}$ ، به شکل زیر نوشته می‌شود [۶]

$$G_C^{-۱} = \varepsilon I - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R, \quad (۳)$$

که در آن I ماتریس واحد و $\Sigma_{L(R)}$ خودانرژی نردبان مرکزی ناشی از حضور نردبان چپ (راست) است و با رابطهٔ زیر محاسبه می‌شود

$$\Sigma_{L(R)} = H_{CL(R)} G_{L(R)} H_{CL(R)}, \quad (۴)$$

که در آن $G_{L(R)}$ تابع گرین نردبان نیمه بینهایت چپ (راست) و $H_{CL(R)}$ هامیلتونی اتصال نردبان مرکزی به نردبان چپ (راست) است. هامیلتونی اتصال با استفاده از تقریب تنگابست به صورت زیر است

$$H_{CL} = \beta_{CL,u}(|-۱\rangle\langle ۱| + |۱\rangle\langle -۱|) + \beta_{CL,d}(|۰\rangle\langle ۲| + |۲\rangle\langle ۰|), \quad (۵)$$

که در آن $\beta_{CL,u(d)}$ جملهٔ پرش بین اتم‌های شاخهٔ بالایی (پایینی) نردبان سمت چپ با اتم‌های شاخهٔ بالایی (پایینی) نردبان مرکزی

است. به طور مشابه برای هامیلتونی اتصال سمت راست داریم

$$H_{CR} = \beta_{CR,u}(|N-1\rangle\langle N+1| + |N+1\rangle\langle N-1|) + \beta_{CR,d}(|N+2\rangle\langle N| + |N\rangle\langle N+2|), \quad (۶)$$

که در آن $\beta_{CR,u(d)}$ جملهٔ پرش بین اتم‌های شاخهٔ بالایی (پایینی) نردبان سمت راست با اتم‌های شاخهٔ بالایی (پایینی) نردبان مرکزی است. باتوجه به نوار انرژی هادی‌ها، $\varepsilon = \varepsilon_{L(R)} + 2\beta_{L(R)\parallel}\cos(ka) \pm \beta_{L(R)\perp}$ ، که در آن k عدد موج و a ثابت شبکهٔ نردبانی است، می‌توان توابع خود انرژی نردبان مرکزی را در حضور هادی‌ها محاسبه کرد [۹-۷]. بنابراین ضریب عبور برای نردبان متناهی متصل به دو نردبان نیمه متناهی با استفاده از رابطهٔ زیر به دست می‌آید

$$T(\varepsilon) = \mathrm{tr}(\Gamma_L . G . \Gamma_R . G^t), \quad (۷)$$

که در آن

$$\Gamma_{L(R)} = -2\,\mathrm{Im}(\Sigma_{L(R)}). \quad (۸)$$

حال ابزار لازم برای محاسبهٔ عددی ضریب عبور الکترونی -که متناسب با رسانش در رژیم پاسخ خطی است [۱۰]- یک شبکهٔ نردبانی در حضور یا غیاب نقص(های) شبکه‌ای فراهم شده است. همچنین لازم به ذکر است برای بررسی موردی که شامل پیوندهای شاخه‌ای (شکل ۱(ب)) است، کافیست به جای انرژی جایگاهی اتم‌های روی پله‌ها، انرژی جایگاهی بهنجار شدهٔ زیر را جایگزین کرد [۵]

$$\varepsilon_C \to \varepsilon_C + \frac{\beta_b^2}{\varepsilon - \varepsilon_b}, \quad (۹)$$

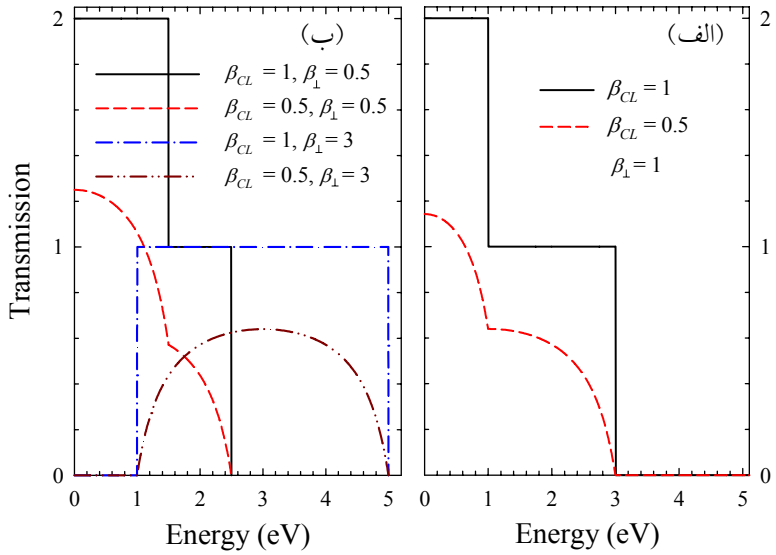
که در آن ε_b و β_b به ترتیب انرژی جایگاهی و پرش اتم و پیوند شاخه‌ای است. در بخش بعد با تغییر انرژی‌های پرش اتصال نسبت به انرژی‌های پرش شبکهٔ ایده‌آل، نقص پیوندی شبکه‌ای را ایجاد و به بررسی ترابرد الکترونی از یک نردبان نامتناهی ایده‌آل و همچنین یک نردبان شامل یک نقص یا دو نقص می‌پردازیم. همچنین اثر نقص‌های پیوندهای شاخه‌ای را بر رسانش الکتریکی چند سامانهٔ نردبانی شاخه‌دار یا بدون شاخه مورد بررسی قرار می‌دهیم.

۳. نتایج و بحث

در این بخش ابتدا ضریب عبور یک نردبان ایده‌آل متناهی را به دست آورده، سپس با ایجاد نقص در ساختار شبکه نردبانی با کمک روابط به دست آمده در قسمت قبل، به بررسی ضریب عبور آنها می‌پردازیم. لازم به ذکر است که خود نردبان ایده‌آل موارد متفاوتی را شامل می‌شود. مثلاً انرژی پرش الکترون در راستای پله با راستای نردبان یکسان باشد یا نباشد و اینکه نردبان ایده‌آل شامل پیوندهای شاخه‌ای باشد یا نباشد. که در این قسمت سعی شده است اثر نقص‌های پیوندی و شبکه‌ای را در بسیاری از این موارد، مورد مطالعه قرار گیرد. با توجه به اینکه در این مقاله، ضریب عبور به‌صورت تابعی از انرژی الکترون ورودی در بازهٔ مجاز انرژی سامانه متقارن است، نمودارها در انرژی‌های مثبت رسم شده است.

اگر مقادیر تمام انرژی‌های پرش در راستای نردبان را با یکدیگر و انرژی‌های پرش در راستای پله را نیز با یکدیگر برابر در نظر بگیریم، به یک نردبان ایده‌آل متناهی می‌رسیم. نمودار ضریب عبور چنین ساختاری با خط پر برای موردی که انرژی جایگاهی همهٔ اتم‌ها برابر صفر و انرژی‌های پرش همهٔ پیوندها برابر یک الکترون ولت باشد، در شکل ۲ (الف) ترسیم شده است. مانند تمام ساختارهای ایده‌آل رسانش شکل پله‌ای دارد. در واقع نردبان ایده‌آل دارای دو کانال رسانشی است که یکی در بازهٔ [۱-،۳-] الکترون- ولت و دیگری در بازهٔ [۱،۳] الکترون- ولت مقدار یک را برای ضریب عبور ایجاد می‌کنند و بنابراین در گسترهٔ [۱-،۱] الکترون ولت این دو کانال همپوشانی کرده و مقدار دو را برای ضریب عبور به دست می‌دهند.

حال اگر در سامانهٔ مشخص شده در شکل ۱ (الف) مقدار انرژی‌های پرش مربوط به فقط اتصال چپ را متفاوت از انرژی‌های پرش در قسمت‌های دیگر سامانهٔ ایده‌آل در نظر بگیریم، مثل این است که دو نردبان مشابه توسط یک اتصال ناکامل به هم وصل شده‌اند $(\beta_{CL,u} = \beta_{CL,d} \neq 1\mathrm{eV})$ و یا به تعبیر دیگر یک نقص متقارن در پیوندهای موازی در شبکهٔ نردبان ایده‌آل نامتناهی ایجاد شده است. ضریب عبور مربوط به چنین ساختاری برای مقادیر مختلف انرژی پرش اتصال در شکل ۲ (الف) توسط نمودار خط چین نشان داده شده است. همان‌طور که قبلاً هم ذکر شد انرژی‌های جایگاهی در تمام

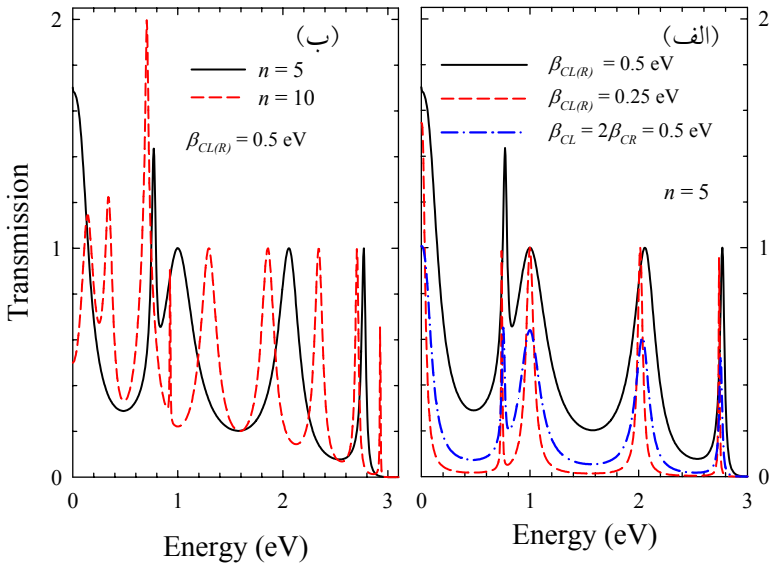


شکل ۲ . ضریب عبور یک نردبان ایده‌آل نامتناهی در حضور ($\beta_{CL}=$۰٫۵eV) و غیاب ($\beta_{CL}=$۱eV) یک نقص پیوندی شبکه‌ای (الف) برای حالتی که انرژی پرش در راستای عمود و موازی نردبان برابر باشد و (ب) برای دو مورد که انرژی پرش در راستای پله ضعیف‌تر یا قوی‌تر از راستای نردبان باشد. در این شکل یکای تمام پارامترها الکترون ولت است.

سامانه برابر با صفر و مقدار یک الکترون ولت را نیز برای تمام انرژی‌های پرش به جز در اتصال در نظر گرفته‌ایم . محاسبات نشان می‌دهد که نمودار رسانش برای مورد $\beta_{CL,u}=\beta_{CL,d}=$۰٫۵eV با نمودار رسانش برای مورد $\beta_{CL,u}=\beta_{CL,d}=$۲eV بر یکدیگر منطبق هستند. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که ترابرد الکترونی در مورد $\beta_{CL,u}=\beta_{CL,d}=\beta$ با مورد $\beta_{CL,u}=\beta_{CL,d}=$۱/$\beta$ هم‌ارز است. همچنین دیده می‌شود با ایجاد چنین نقصی در ساختار شبکه نردبانی ایده‌آل نامتناهی ضریب عبور از حالت پله‌ای خارج شده و مقدار ضریب عبور نسبت به نردبان ایده‌آل نامتناهی کمتر است و این کاهش با دور شدن مقدار انرژی‌های پرش اتصال از مقدار یک الکترون ولت، محسوس‌تر است.

شکل ۱ (ب) ضریب عبور الکترونی را برای دو مورد که انرژی پرش در راستای پله با انرژی پرش در راستای محور نردبان ضعیف‌تر یا قوی‌تر باشد، نشان می‌دهد. همان‌طوری که در این شکل دیده می‌شود در موردی که انرژی پرش در راستای پله نسبت به راستای محور نردبان ضعیف‌تر است، پنجرهٔ مجاز انرژی کوچک‌تر می‌شود که درصد بیشتری از آن را ناحیهٔ همپوشانی کانال‌های رسانش تشکیل می‌دهد. در حالی‌که در موردی که $\beta_\perp=۳\beta_\parallel$ است، یک گاف انرژی به دلیل جدا شدن دو یا همپوشانی نکردن دو کانال رسانش در طیف مشاهده می‌شود. این بدین معنا است که ناحیهٔ همپوشانی را مقدار $\beta_\perp$ تعیین می‌کند و با افزایش $\beta_\perp$ بازهٔ مجاز انرژی رفته رفته بزرگتر شده و ناحیهٔ همپوشانی کانال‌های رسانش کمتر و در نهایت صفر می‌شود. اثر ایجاد یک نقص متقارن نیز مانند قسمت (الف)، همان کاهش رسانش و خارج کردن نمودار از حالت پله‌ای است.

اگر مقادیر انرژی‌های پرش اتصال‌های چپ و راست نشان داده شده در شکل ۱(الف) با مقدار سایر انرژی‌های پرش در نردبان ایده‌آل (مقدار ۱eV) متفاوت باشد، می‌توان سامانه را به صورت یک نردبان ایده‌آل نامتناهی شامل دو نقص پیوندی شبکه‌ای پنداشت. چنین نقص‌هایی در ساختار شبکه نردبانی ایده‌آل نامتناهی معادل است با یک نردبان ایده‌آل متناهی که از سمت چپ با انرژی‌های پرش $\beta_{CL,u(d)}$ و از سمت راست نیز با انرژی‌های پرش $\beta_{CR,u(d)}$ به دو نردبان ایده‌آل نیمه متناهی متصل شده است. نمودارهای ضریب عبور برای چنین سامانه‌ای با در نظر گرفتن $n=۵$ یکاخته ($N=۱۰$) در نردبان مرکزی، برای سه مورد $\beta_{CL(R)}=$۰٫۵eV، $\beta_{CL(R)}=$۰٫۲۵eV و

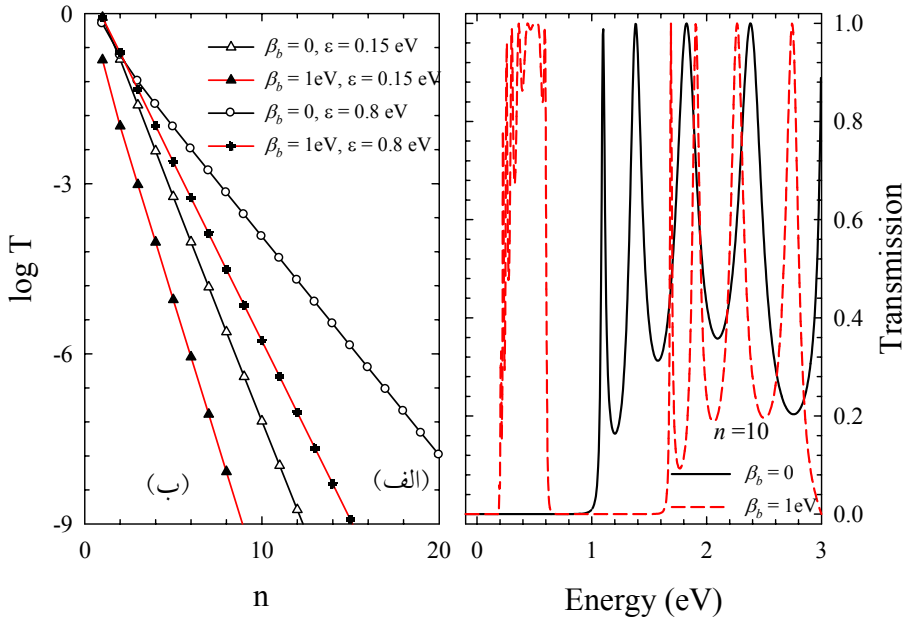


شکل ۳. ضریب عبور برحسب انرژی برای یک نردبان نامتناهی شامل دو نقص پیوندی شبکه‌ای (الف) به فاصلهٔ پنج پله برای چند مقدار متفاوت انرژی پرش نقص‌ها و (ب) به فاصله‌های پنج و ده پله برای انرژی پرش $\beta_{CL(R)} = ۰/۵\text{eV}$.

$\beta_{CL} = ۲\beta_{CR} = ۰/۵\text{eV}$ در شکل ۳ (الف) رسم شده‌اند. به دلیل مساوی در نظر گرفتن انرژی‌های بالا و پایین در اینجا از نوشتن اندیس‌های u و d خودداری شده است. از این نمودارها می‌توان نتیجه گرفت که دور شدن مقادیر انرژی پرش اتصال‌ها از مقدار انرژی پرش در سایر پیوندهای نردبان (۱eV) کاهش ضریب عبور را به دنبال خواهد داشت. همچنین دیده می‌شود ضریب عبور برای مورد آخر یعنی موردی که مقادیر انرژی‌های پرش اتصال چپ و اتصال راست با یکدیگر متفاوت باشند، نسبت به موردی که این پارامترها با یکدیگر برابرند، کم تر خواهد شد اما قله‌های هر دو نمودار با یکدیگر هماهنگ بوده و در انرژی‌های یکسانی رخ می‌دهند.

وابستگی ضریب عبور به تعداد پله‌های بین دو نقص نیز برای یک مورد متقارن در شکل ۳ (ب) نشان داده شده است. مشاهده می‌شود با افزایش تعداد پله‌های بین دو نقص، نوسان‌های نمودار ضریب عبور افزایش می‌یابد. این نتیجه برای تمام سامانه‌های مزوسکوپیک که شامل یک سامانهٔ مرکزی متصل به دو هادی هستند، صادق است. به عبارت دیگر با افزایش تعداد اتم‌های در طول سامانه تعداد شبه انرژی‌های سامانهٔ مرکزی متناسب با تعداد پله‌ها افزایش یافته که منجر به افزایش تعداد قله‌های تشدیدی در منحنی ضریب عبور می‌گردد. البته در نمودارهای شکل ۳ مشاهده می‌شود که در مرز هم‌پوشانی نوارهای انرژی دو کانال رسانش $(\pm ۱\text{eV})$ قله‌ها نسبت به سایر قله‌ها در انرژی‌های دیگر، تیزتر و بلندترند. به عبارت دیگر مرزهای هم‌پوشانی، شروع یا خاتمهٔ اشتراک دو نوار انرژی مربوط به دو کانال رسانش هستند و در این انرژی‌ها ضریب عبور برابر با مجموع قله‌های تشدیدی دو کانال است.

در شکل ۴ (الف) نمودارهای ضریب عبور الکترونی مربوط به یک نردبان بدون شاخه $(\beta_b = ۰)$ و یک نردبان شاخه دار $(\beta_b = ۱\text{eV})$ به طول ده پله با پارامترهای $\beta_{C\perp} = ۳\beta_{C\parallel} = ۳\text{eV}$ و متصل به دو نردبان ایده‌آل همگن $(\beta_{L(R)\perp} = \beta_{L(R)\parallel} = ۱\text{eV})$ رسم شده است. دیده می‌شود که در موارد بدون شاخه و شاخه‌دار به ترتیب در طیف رسانش یک و سه گاف انرژی وجود دارد که رفتار رسانش در این ناحیه‌ها تونل‌زنی است. برای بررسی قدرت تونل‌زنی و وابستگی آن به نوع ساختار با انتخاب دو انرژی در نواحی گاف، نمودار لگاریتم ضریب عبور تابعی از تعداد پله‌ها را برای این دو نوع ساختار (شاخه‌دار و بدون شاخه) در شکل ۴ (ب) آورده‌ایم. همان‌طور که می‌بینیم وجود پیوندهای شاخه‌ای در نردبان مرکزی باعث ضعیف‌تر شدن تونل‌زنی الکترون می‌شود. در مورد نردبان بدون شاخه هرچه انرژی انتخابی به لبه‌های



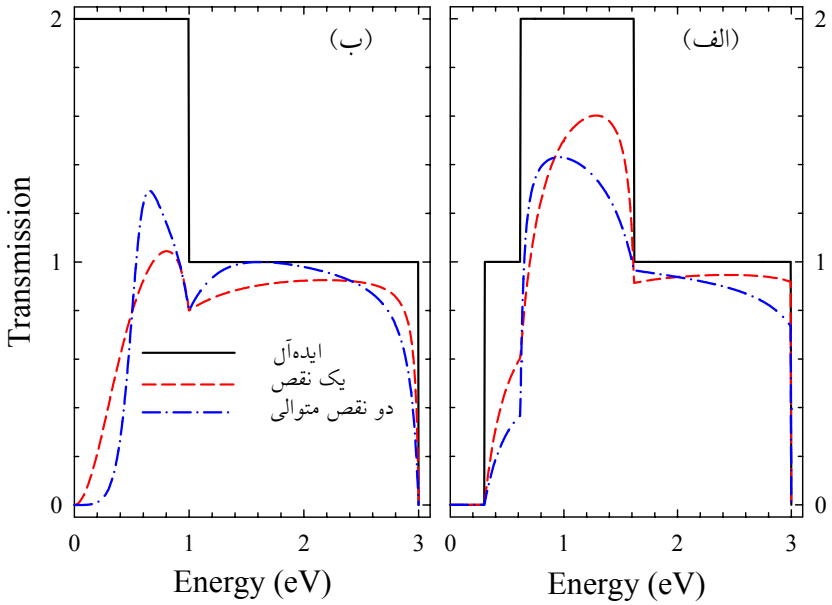
شکل۴. (الف) ضریب عبور یک نردبان بدون شاخه ($\beta_b = ۰$) و شاخه دار ($\beta_b = ۱$eV) با پارامترهای $\beta_{C\perp} = ۳\beta_{C\parallel} = ۳$eV متصل به دو نردبان ایده‌آل نیمه بینهایت با پارامترهای $\beta_{L(R)\perp} = \beta_{L(R)\parallel} = ۱$eV (ب) منحنی لگاریتم ضریب عبور به‌صورت تابعی از طول نردبان مرکزی به ازای دو انرژی متفاوت در ناحیهٔ گاف انرژی در حضور و غیاب شاخه‌ها در نردبان مرکزی (همانند (الف)). حضور شاخه‌ها منجر به ضعیف‌تر شدن تونل‌زنی الکترونی می‌شود.

گاف نزدیک‌تر شود تونل‌زنی بهتر صورت می‌گیرد و در مورد نردبان شاخه‌دار تونل‌زنی در گاف مرکزی سخت‌تر از بقیهٔ گاف‌ها است.

حال به بررسی ترابرد الکترونی از یک نردبان ایده‌آل شاخه‌دار (بدون شاخه) شامل صفر، یک یا دو نقص متوالی می‌پردازیم. شکل ۵ (الف) نمودار ضریب عبور الکترونی را برحسب انرژی برای یک نردبان ایده‌آل نامتناهی شاخه‌دار شامل صفر یک و دو نقص متوالی نشان می‌دهد. همچنین شکل ۵ (ب) نمودار ضریب عبور الکترونی را برحسب انرژی برای یک نردبان ایده‌آل نامتناهی بدون شاخه شامل صفر یک و دو نقص متوالی نشان می‌دهد. منظور از یک نقص نداشتن (داشتن) شاخه‌های بالا و پایین در یک پلهٔ از نردبان ایده‌آل شاخه‌دار (بدون شاخه) است. در این شکل تمام انرژی‌های جایگاهی برابر صفر و تمام انرژی‌های پرش برابر یک الکترون- ولت انتخاب شده‌اند. با توجه به اینکه ناحیهٔ مجاز انرژی را نوار انرژی الکترودها مشخص می‌کند، همان‌طور که انتظار می‌رود در گاف مرکزی مورد شاخه‌دار رسانش دقیقاً صفر است. از قیاس نمودارهای شکل ۵ (الف) و (ب) می‌توان نتیجه گرفت رسانش برای مورد بدون شاخه در حضور نقص‌ها نسبت به مورد شاخه‌دار بیشتر تحت تاثیر قرار می‌گیرد.

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از رهیافت تابع گرین، خواص ترابرد الکترونی یک ساختار نردبانی نامتناهی در حضور یا غیاب نقص‌های شبکه‌ای بررسی شده است. برای یک نردبان ایده‌آل نامتناهی، ضریب عبور شامل دو پله است که مقدار آن به دلیل وجود حداکثر دو کانال رسانش دارای مقادیر صفر، یک یا دو است. ناحیهٔ همپوشانی دو کانال رسانش را مقدار انرژی پرش در راستای پله تعیین می‌کند و با افزایش آن نسبت به انرژی پرش در راستای نردبان بازهٔ مجاز انرژی رفته رفته بزرگتر شده و ناحیهٔ همپوشانی کانال‌های رسانش کمتر و در نهایت صفر می‌شود. ضریب عبور دو نردبان یکسان نیمه متناهی متصل به یکدیگر، که معادل با یک نردبان نامتناهی ایده‌آل شامل یک نقص است، نسبت به یک نردبان ایده‌آل نامتناهی، از حالت پله‌ای خارج شده و مقدار آن بسته به میزان دورشدگی مقدار انرژی



شکل ۵. ضریب عبور برحسب انرژی برای: (الف) یک نردبان ایده‌آل نامتناهی شاخه‌دار شامل صفر یک و دو نقص متوالی، (ب) یک نردبان ایده‌آل نامتناهی بدون شاخه شامل صفر یک و دو نقص متوالی. در (الف) منظور از نقص نداشتن شاخه و در (ب) داشتن شاخه در یک پله است. در این شکل تمام انرژی‌های جایگاهی برابر صفر و تمام انرژی‌های پرش برابر یک الکترون ولت انتخاب شده‌اند.

پرش نقص نسبت به سایر انرژی‌های پرش نردبان، کاهش می‌یابد. همچنین دورشدگی مقادیر انرژی‌های پرش اتصال از مقدار انرژی پرش سایر انرژی‌های پرش در این ساختار، کاهش ضریب عبور را در پی خواهد داشت. برای مورد نامتقارنی که اتصال‌های چپ و راست با یکدیگر متفاوت هستند، نسبت به مورد متقارن، مقدار ضریب عبور کمتر است. در بازهٔ هم‌پوشانی نوارهای انرژی دو کانال رسانش نیز قله‌ها نسبت به سایر قله‌ها در انرژی‌های دیگر بلندتر و در روی مرز تیزترند. ایجاد پیوندهای شاخه‌ای در نردبان مرکزی نسبت به مورد بدون شاخه باعث ضعیف‌تر شدن تونل‌زنی الکترون می‌شود. همچنین به عنوان یک نتیجه کلی هر چه انرژی الکترون ورودی به لبه‌های گاف انرژی نزدیک‌تر شود، تونل‌زنی بهتر صورت می‌گیرد. برای نردبان‌های ایده‌آل نامتناهی شاخه‌دار (بدون شاخه) عدم وجود (وجود) شاخه در یک یا چند پله رسانش الکتریکی کاهش یافته و کاهش آن برای مورد بدون شاخه نسبت به مورد شاخه‌دار بیشتر تحت تاثیر قرار می‌گیرد و رفتاری شبیه به رفتار تونل‌زنی پیدا می‌کند.

سپاسگزاری

بدین وسیله از حمایت‌های مالی معاونت پژوهشی دانشگاه شهرکرد قدردانی می‌شود.

مراجع

1. R Gutiérrez, S Mohapatra, H Cohen, D Porath, and G Cuniberti, *Phys. Rev.* B **74** (2006) 1.
2. M Troyer, H Tsunetsugu, and D Wurtz *Phys. Rev.* B **50** (1994) 13515.
3. G Cunibrti et. al. *Phys. Rev.* B **65** (2002) 241314(R)7.
4. S Sil, S Mati, and A Chakrabarti, *Phys. Rev.* B **78** (2008) 113103.
5. M Mardaani, H Rabani, and A Esmaeili, *Solid State Communications* **151** (2011) 928.
6. S Datta; "*Electronic Transport in Mesoscopic Systems*", Cambridge, University Press, Cambridge (1997).
7. D Ferry, and S Goodnik, "*Transport in Nanostructures*", Cambridge University press (1997).
8. M Mardaani, and K Esfarjani, *Physica* E **25** (2004) 119.
9. M Mardaani, and A A Shokri, *Chem. Phys.* **324** (2006) 541.
10. Y Imry, and R Landauer, *Rev. Mod. Phys.* **71** (1999) S306.