

بررسی اثر آهارانوف-بوهم بر رسانش الکترونی نانو نوارهای گرافنی خمیده

محمد مردانی^{۱،۲} | حسن ربانی^{۱،۲} | محمود برزویی^۱

۱ گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

۲ مرکز پژوهشی فناوری نانو، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

ویژگی‌های ترابردی در سامانه‌های مولکولی با روش‌های نظری مرسوم در حالت جامد، یعنی حل معادله‌ی بولتزمن بررسی نمی‌شوند، بلکه بررسی آثار کوانتومی از قبیل کوانتس انرژی و آثار تداخل کوانتومی موج‌های الکترونی در این سامانه‌ها الزامی است [۲]. سامانه‌های مولکولی شامل حلقه‌های کربنی در حضور میدان‌های الکترومغناطیسی، پدیده‌های فیزیک جالبی از خود نشان می‌دهند [۳]. بخصوص جریان عبوری از حلقه‌های رسانا به میدان‌های مغناطیسی خارجی حساس هستند و این امر توسط مشاهده‌ی اثر آهارانوف-بوهم در بعضی ساختارها ثابت شده است. جالب اینکه با تغییر مکان اتصال الکترونها می‌توان از میدان مغناطیسی ایجاد شده در هر حلقه برای اهداف ساخت قطعه‌ی اسپینی بهره جست. در سال‌های اخیر، آثار تداخل کوانتومی روی رسانش الکتریکی با توجه به وجود مسیرهای متفاوت برای امواج الکترونی، در ساختارهای مولکولی حلقوی بررسی شده است [۴]. در این رهگذر مولکول بنزن به عنوان نمونه‌ای از سامانه‌های حلقوی بسیار مورد توجه بوده بگونه‌ای که سال‌ها قبل به عنوان یک کلید مولکولی در الکترونیک مولکولی مطرح بوده است [۵]. رفتار شبه ترانزیستوری این مولکول نیز توجهات زیادی را به خود جلب کرده است [۶]. از رفتارهای عجیب در سامانه‌های حلقوی می‌توان به خاصیت مقاومت معکوس مدارهای شامل حلقه‌های سری و موازی اشاره کرد [۷].

گرافن نیز یک سامانه مولکولی متشکل از حلقه‌ها است که فقدان گاف در طیف انرژی آن کاربردش را در کنترل دقیق رفتار ترابردی با مشکل مواجه کرده است. ولی نانونوار گرافنی که ساختار شبه یک بعدی تقلیل یافته از صفحات گرافنی است، به دلیل آثار تحدید کوانتومی کافی در طیف انرژی خود دارند. ویژگی‌های ترابردی نانونوارهای گرافنی به عواملی مانند اثر وجود نقص‌ها [۸]، ناخالصی‌ها [۹]، تغییر در ساختار پیوندی لبه‌ها [۱۰]، اعمال میدان خارجی [۱۱] و غیره وابسته

چکیده

در این مقاله در رهیافت بستگی قوی و همچنین تقریب نزدیک‌ترین همسایه به بررسی رسانش الکترونی نانو نوارهای گرافن دسته‌سندلی و زیگزگاک تک نوار تخت و خمیده متصل به دو رسانای فلزی در حضور و غیاب میدان مغناطیسی می‌پردازیم. برای مورد دسته‌سندلی با استفاده از روش باز بهنجارش، هامیلتونی هر حلقه بنزنی شامل شار مغناطیسی عبوری را به هامیلتونی مؤثر یک مولکول دو اتمی تقلیل می‌دهیم. همچنین میدان مغناطیسی را با وارد کردن ضرایب فاز وابسته به شار در انرژی‌های پرش الکترون پیوندهای مربوطه در مسئله لحاظ می‌کنیم و بالاخره محاسبات عددی مربوط به رسانندگی الکترونی را با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت لاندائو انجام می‌دهیم. نتایج نشان می‌دهد که اعمال میدان مغناطیسی گاف‌های جدیدی در طیف رسانش نانو نوار دسته‌سندلی ایجاد کرده که پهنای آنها به میزان خمیدگی نانو نوار وابسته است. همچنین مقدار رسانش در ناحیه‌ی گاف مرکزی برای مورد دسته‌سندلی حساسیت بیشتری نسبت مورد زیگزگاک به مقدار خمیدگی و میدان مغناطیسی نشان می‌دهد.

واژگان کلیدی: بستگی قوی، آهارانوف-بوهم، نانو نوار، خمیدگی.

۱ مقدمه

پس از پیدایش اولین نشانه‌های استفاده از مولکول‌ها به عنوان اجزای کاربردی در قطعات الکترونیکی [۱]، تلاش برای فهم سازوکار خواص فیزیکی این قطعات نانومقیاس با سرعت فزاینده‌ای روبه‌رو شده و همین امر سبب پیشرفت‌های شگرف در تحقیقات الکترونیک مولکولی شده است. مطالعه‌ی

مغناطیسی را در حلقه‌ی بنزی i ام، $\varphi_i = \Phi_{B,i}/\Phi_0$ در نظر می‌گیریم که $\Phi_0 = \hbar/e$ کوانتای شار مغناطیسی و \mathbf{B} بردار میدان مغناطیسی و $d\mathbf{S}_i$ بردار نرمال المان سطح حلقه است.

در روش تابع گرین و در رهیافت بستگی قوی، ضریب عبور الکترونی طبق رابطه‌ی لاندائو به صورت زیر توسط رابطه‌ی فیشر - لی محاسبه می‌شود [۱۳]

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

که در آن $G_{1,N}$ درایه‌ی سطر اول و ستون N ام ماتریس تابع گرین سامانه‌ی مرکزی در حضور هادی‌ها است (N تعداد اتم‌های سامانه مرکزی است) و $\Sigma_{WR(L)}$ تابع خودانرژی سامانه‌ی مرکزی به خاطر حضور هادی‌های چپ و راست است که برای یک هادی ساده با رابطه‌ی زیر داده می‌شود [۱۴]:

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

که در آن $\theta_{L(R)}$ از رابطه‌ی پاشندگی مربوط به یک زنجیره‌ی اتمی ساده به شکل $\cos \theta_{L(R)} = (\varepsilon - \varepsilon_{L(R)}) / 2\beta_{L(R)}$ به دست می‌آید. در اینجا $\beta_{WR(L)}$ قدرت جفت‌شدگی اتصال بین سامانه مرکزی و هادی راست (چپ)، $\varepsilon_{R(L)}$ و $\beta_{R(L)}$ به ترتیب انرژی‌های جایگاهی و پرش الکترون در هادی‌ها است. همچنین ε انرژی الکترون ورودی است. برای پیدا کردن عنصر $G_{1,N}$ ، باید وارون تابع گرین سامانه‌ی مرکزی را که به شکل زیر است، به دست آورد: [۱۴]

$$G_W^{-1} = \varepsilon I - H_W - \Sigma_R I_{1,1} - \Sigma_L I_{NN}, \quad (3)$$

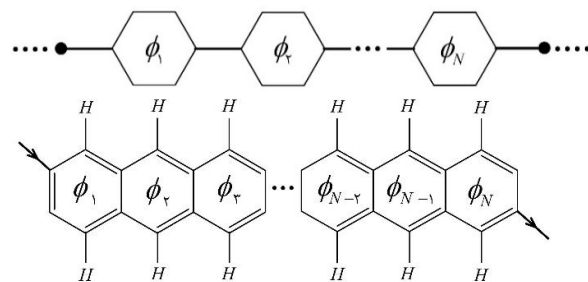
که در آن $I_{N,N}$ ، $I_{1,1}$ ماتریس‌هایی هستند که به ترتیب عناصر اول و آخر قطرشان غیر صفر و برابر یک و بقیه‌ی عناصرشان صفر است. H_W هامیلتونی سامانه‌ی مرکزی به شکل ماتریسی شامل پارامترهای بستگی قوی ε_i و $\beta_{i,j}$ (به ترتیب انرژی جایگاهی اتم i ام و انرژی پرش بین اتم‌های i ام و j ام) است [۱۵]. مقدار این پارامترها به نوع سامانه و

است. از آنجا که هیدروژن شدیداً با گرافن واکنش می‌دهد ساختار الکترونی معمولاً با هیدروژن‌دار کردن گرافن بهینه می‌شود [۱۲]. بنابراین وجود یا عدم وجود هیدروژن در لبه‌های نانو نوار خواص الکترونی را متأثر می‌سازد.

در این مقاله تراورد الکترونی نانونوارهای زیگزاگ هیدروژن‌دار و دسته‌سندلی را با در نظر گرفتن اثر آهارانوف-بوهم و همچنین خمش نانونوارها بررسی می‌کنیم. باید توجه شود که با توجه به تغییرات اندک طول پیوندها s گونه در خمیدگی نانو نوار، در این مقاله صرفاً آثار مغناطیسی ناشی از خمش در نظر گرفته شده و از پرداختن به آثار تنش و کرنش آن چشم‌پوشی کرده‌ایم. فرض می‌شود که سامانه‌ی مورد بررسی بین دو الکتروند فلزی ساده قرار دارد و رسانش الکترونی را با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت بستگی قوی و تقریب نزدیکترین همسایه مطالعه خواهد شد.

۲ مدل‌سازی

در این قسمت به مطالعه‌ی اثر آهارانوف-بوهم بر تراورد الکترونی نانو نوارهای گرافنی خمیده‌ی زیگزاگ هیدروژن‌دار و دسته‌سندلی با استفاده از روش تابع گرین و در تقریب نزدیک‌ترین همسایه‌ی رهیافت بستگی قوی می‌پردازیم. شکل ۱ سامانه‌های مورد نظر را که بین دو الکتروند فلزی ساده‌ی نیمه‌متناهی قرار گرفته‌اند، نشان می‌دهد.



شکل ۱: (الف) یک نانو نوار گرافنی دسته‌سندلی و (ب) یک نانو نوار گرافنی زیگزاگ هیدروژن‌دار که به دلیل خمش شار مغناطیسی متفاوتی از هر حلقه می‌گذرد. سامانه‌ها از سمت چپ و راست به دو رسانا فلزی ساده متصل هستند.

فرض شده است که به دلیل خمیدگی نانو نوارها و تفاوت سطوح مؤثر حلقه‌ها در میدان عمودی اعمالی، حلقه‌های بنزی شار مغناطیسی متفاوتی را احساس می‌کنند. مقدار شار

در بخش بعد با استفاده از فرمول بندی حاضر به ارائه نتایج عددی می پردازیم.

۳. نتایج و بحث

بررسی اثر آهارانوف - بوهم در نانو نوارهای گرافنی

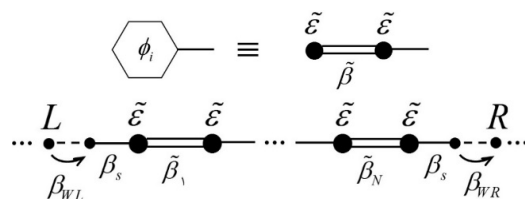
در این بخش به بررسی اثر آهارانوف - بوهم در نانو نوارهای دسته صندلی و زیگزاک می پردازیم. نانو نوارهای تخت و خمیده را در قسمت های مجزا مورد مطالعه قرار می دهیم. لازم به ذکر است که در تمام محاسبات خود انرژی های جایگاهی برای اتم های کربن و هیدروژن را صفر اختیار کرده و انرژی های پرش الکترون در پیوندهای یگانه و دوگانه کربن - کربن را به ترتیب $\beta_s = -3.29 \text{ eV}$ و $\beta_d = -4.33 \text{ eV}$ و در اتصال مولکول به الکتروده $\beta_{WR(L)} = -1.9 \text{ eV}$ و انرژی پرش الکترودهای راست (چپ) $\beta_{R(L)} = -3.81 \text{ eV}$ در نظر گرفته می شود [۱۸].

۳-۱ نانو نوار دسته صندلی تخت

ابتدا یک نانو نوار دسته صندلی با ساختار نشان داده شده در شکل ۱ (الف) شامل ۹ حلقه ی بنزی را در نظر می گیریم. در صورت اعمال میدان مغناطیسی یکنواخت، برای یک نانو نوار تخت شار عبوری از حلقه ها با هم برابر است. در شکل ۳ لگاریتم ضریب عبور الکترونی این ساختار به صورت تابعی از انرژی در حضور $(\phi = \pi/4)$ یا غیاب میدان مغناطیسی رسم شده است. به دلیل وجود تقارن تابع ضریب عبور نسبت به انرژی صفر، نمودارها فقط در قسمت مثبت انرژی رسم شده است. همان طور که دیده می شود نمودارها رفتاری نوسانی دارند که دلیل آن به محدود بودن شبه ترازهای سامانه ی مرکزی است. قله ها معمولاً جایی رخ می دهند که انرژی الکترون ورودی برابر با انرژی تراز انرژی سامانه مرکزی باشد. بدیهی است که اگر انرژی الکترون بین دو تراز قرار گیرد کمینه ی منحنی رخ خواهد داد. بنابراین رفتار منحنی کاملاً وابسته به مقادیر شبه ترازهای انرژی سامانه ی مرکزی است که به شکل هندسی، مقادیر انرژی های پرش و اتصال و یا مقدار شار مغناطیسی بستگی دارند. با مقایسه ی دو نمودار

تقریب های بکار رفته بستگی دارد. لازم به ذکر است که شار مغناطیسی توسط تقریب فاز پیرلز [۱۶] در معادلات وارد می شود و تأثیر آن بدین گونه است که انرژی های پرش الکترون مربوط به پیوندهای یگانه (β_s) و دوگانه (β_d) کربن - کربن در حلقه ی بنزن هنگام عبور شار مغناطیسی (ϕ_i) ، از $\beta_{s(d)} \exp(\pm i\phi_i)$ به $\beta_{s(d)}$ تغییر می کند که علامت مثبت برای پرش الکترون در جهت ساعتگرد و علامت منفی برای پرش آن در جهت پادساعتگرد است.

در تقریب می توان هامیلتونی نانو نوار دسته صندلی (شکل ۱ الف)) را با استفاده از روش بازبهنجارش با هامیلتونی یک زنجیره ی اتمی با انرژی های پرش و جایگاهی بهنجار شده جایگزین کرد که بر حسب انرژی جایگاهی کربن (ϵ_0) ، انرژی های پرش الکترون در پیوندهای یگانه و دوگانه کربن - کربن و همچنین شار مغناطیسی هستند. شکل های ۲ (الف) و ۲ (ب) به ترتیب طرح واره ی مربوط به بهنجارش یکپایخته و کل این سامانه را نشان می دهد.



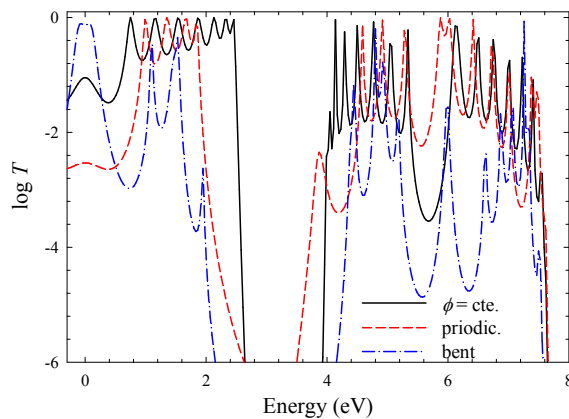
شکل ۲: طرح واره ی مربوط به بهنجارش (الف) یکپایخته و (ب) سامانه ی کل نشان داده شده در شکل ۱ (الف).

با نوشتن معادله ی شرودینگر و حذف ضرایب توابع موج حالت پایه الکترونی برای اتم های بالایی و پایینی حلقه ی بنزی، می توان انرژی های جایگاهی و پرش بهنجار شده ی را که در شکل ۲ (ب) آمده است، به این صورت زیر به دست آورد [۱۷]

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon_0 + \frac{2\beta_s(\epsilon - \epsilon_0)}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - \beta_s^2}, \quad (4)$$

$$\tilde{\beta}_i = \frac{2\beta_s^3 \cos(3\phi_i)}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - \beta_s^2}. \quad (5)$$

نقطه-خط)، با یکدیگر مقایسه شده‌اند. با توجه به نتایج حاصل شده، مقدار رسانش در انرژی صفر برای مورد آخر بیشترین و دومی کمترین است. دلیل این امر را می‌توان مانند مورد قبلی (نانونوار دسته صندلی تخت) به ارجح شدن یکی از مسیرهای الکترون در حلقه‌های بنزنی با اعمال میدان مغناطیسی نسبت داد. همچنین نوع خمیدگی نانونوار بر پهنای گاف‌های انرژی در ناحیه‌ی تشدید موثر است. این نتایج از نظر کاربردی کنترل رسانش نانو نوار واقع در یک میدان مغناطیسی ثابت توسط خم کردن را پیشنهاد می‌کند.

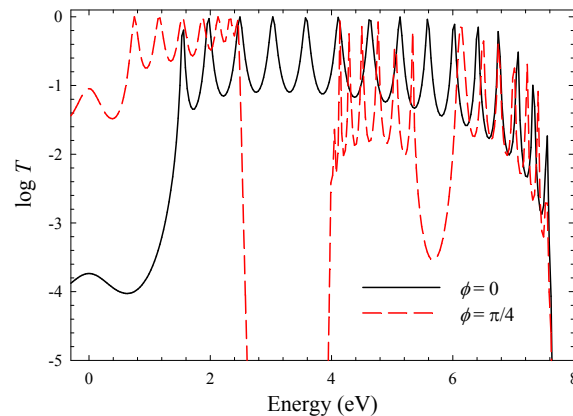


شکل ۲: لگاریتم ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی برای نانو نوار گرافنی دسته صندلی برای مواردی که شار مغناطیسی ثابت $\phi = \pi/4$ (خط پر)، متناوب شامل شارهای $\pi/4$ و $\pi/2$ (خط چین) و موردی که شار با شیب ثابت $\pi/20$ (نقطه-خط) از صفر تا $\pi/4$ تغییر در طول نانو نوار تغییر می‌کند.

۳-۳ نانونوار زیگزاگ تخت

در این قسمت ضریب عبور الکترونی یک نانو نوار گرافنی زیگزاگ هیدروژن دار شده (شکل ۱(ب)) را در حضور یک میدان مغناطیسی یکنواخت بررسی می‌کنیم. در اینجا برای پرهیز از شلوغ شدن نمودارها، طول نانو نوار را برابر پنج حلقه در نظر می‌گیریم. می‌توان با توجه به بحث مربوط به همپوشانی اربیتال الکترون در پیوند هیدروژن - کربن و مقایسه‌ی آن با پیوند کربن - کربن، نشان داد که انرژی پرش الکترون بین اتم‌های کربن و هیدروژن بسیار کمتر است. بنابراین در این مقاله، مقدار این انرژی را برابر $\beta' = 0.1 \text{ eV}$ اختیار می‌کنیم. در فرمول بندی اضافه کردن اثر این پیوند به راحتی با جایگذاری $\epsilon \rightarrow \epsilon_0 + \beta'^2 / (\epsilon - \epsilon_H)$ برای

مربوط به حضور و غیاب میدان، می‌توان دریافت که در ناحیه‌ی گاف مرکزی حول انرژی صفر، برای موردی که شار مغناطیسی وجود دارد، اثر تونل زنی قوی تر بوده و مقدار رسانش الکترونی در انرژی صفر در حضور میدان مغناطیسی بیشتر است. در واقع به دلیل وجود ضریب فاز وابسته به شار، در هر حلقه شامل شار یک مسیر نسبت به مسیر دیگر ارجح شده که به نوبه خود باعث کاهش تداخل‌های کوانتومی گردیده و مقدار رسانش در حضور میدان افزایش می‌یابد. همچنین به دلیل جابجایی و فشردگی ترازهای انرژی سامانه مرکزی در حضور میدان، یک گاف انرژی جدید در انرژی‌های مثبت (و همچنین یک گاف در انرژی‌های منفی)، به دلیل وجود میدان مغناطیسی ایجاد می‌شود.

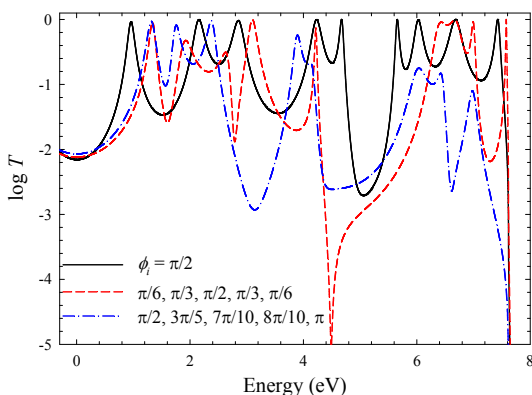


شکل ۳: لگاریتم ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی برای یک نانو نوار گرافن دسته صندلی تخت شامل ۹ حلقه‌ی بنزنی در حضور و غیاب میدان مغناطیسی.

۳-۲ نانونوار دسته صندلی خمیده

برای یک نانو نوار خمیده و در صورت اعمال یک میدان مغناطیسی یکنواخت، مقدار شار مغناطیسی گذرنده از حلقه‌های بنزنی دیگر برابر نیست. این مورد را می‌توان معادل موردی دانست که یک نانو نوار تخت در یک میدان مغناطیسی نایکنواخت واقع شود. در شکل ۴ رسانش سه مورد متفاوت شامل مورد تخت که از تمامی حلقه‌ها شار مغناطیسی ثابت $\phi = \pi/4$ عبور می‌کند (خط پر)، موردی که شار مغناطیسی عبوری از حلقه‌ها به طور متناوب مقادیر $\pi/4$ و $\pi/2$ را اختیار می‌کند (خط چین) و بالاخره مورد خمیده که شار در حلقه‌ی اول صفر و در حلقه‌های بعدی با شیب $\pi/20$ اضافه می‌شود

در هر حلقه دو مسیر برای الکترون وجود دارد که می‌تواند یکی نسبت به دیگری ارجح شود ولی در مورد زیگزگ مسیرها آنقدر زیادند که این امر امکان‌پذیر نیست. نکته قابل توجه دیگر در این شکل ظهور یک کمینه در طیف رسانش در مورد نمودار خط چین است. معمولاً دلیل فیزیکی چنین دره‌هایی در طیف رسانش را به تداخل‌های ویرانگر توابع موج الکترونی در مسیره‌های ممکن نسبت می‌دهند. گویا در این مورد شرایط به گونه‌ای گشته که این تداخل کوآتومی رخ داده است.

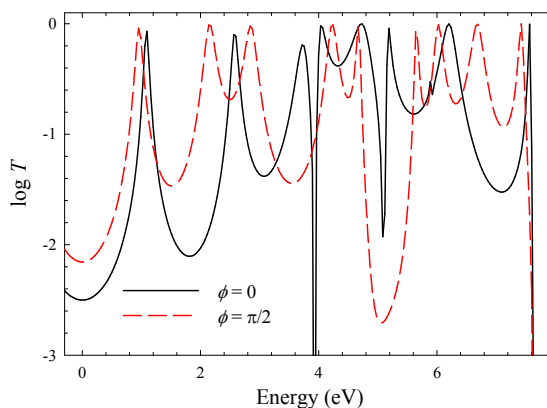


شکل ۶: لگاریتم ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی برای نانو نوار گرافنی زیگزگ هیدروژن‌دار برای سه مورد متفاوت شار مغناطیسی در طول نانو نوار

۴ نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت بستگی قوی و همچنین تقریب نزدیک‌ترین همسایه به بررسی اثر آهارانوف - بوهم بر رسانش الکترونی نانو نوارهای گرافن تخت و خمیده متصل به دو رسانای فلزی پرداختیم. با استفاده از روش بازپهن‌جاش، نانو نوار دسته‌صندلی را به یک زنجیره‌ی اتمی با انرژی‌های جایگاهی و پرش مؤثر تبدیل کرده و سپس به کمک فرمول‌بندی لاندائو رسانش آن را به صورت عددی محاسبه کردیم. اثر میدان مغناطیسی را نیز با اعمال یک ضریب فاز در انرژی پرش الکترون برای پیوندهای حاضر در حلقه‌های بنزنی، وارد می‌شود. نتایج محاسبات برای نانو نوار دسته‌صندلی نشان می‌دهد که اعمال میدان مغناطیسی باعث ایجاد گاف‌های انرژی جدید در ناحیه‌ی تشدیدی شده که خمیدگی نوار بر پهنای آن‌ها تأثیر

انرژی جایگاهی اتم کربن متصل به هیدروژن انجام‌پذیر است که در اینجا ε_H انرژی جایگاهی الکترون در اتم هیدروژن بوده و ما در اینجا آن را صفر در نظر می‌گیریم [۱۸]. در شکل ۵ تغییرات لگاریتم ضریب عبور الکترونی این نانو نوار زیگزگ تخت شامل پنج حلقه‌ی بنزنی بر حسب انرژی در حضور و غیاب میدان مغناطیسی یکنواخت رسم شده است. دیده می‌شود که در اینجا نیز تونل‌زنی الکترونی در گاف انرژی سامانه در حضور میدان مغناطیسی بیشتر شده است. همچنین مقدار رسانش در انرژی صفر به مقدار میدان مغناطیسی وابسته است.



شکل ۵: لگاریتم ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی برای یک نانو نوار گرافن زیگزگ هیدروژن‌دار شامل پنج حلقه‌ی بنزنی در حضور و غیاب میدان مغناطیسی.

۳-۴ نانونوار زیگزگ خمیده

در شکل ۶ لگاریتم ضریب عبور الکترونی یک نانو حلقه زیگزگ هیدروژن‌دار را بر حسب انرژی برای سه موردی که در یکی شار مغناطیسی عبوری از تمام حلقه‌ها یکسان (مورد تخت - خط پر)، یکی شار عبور از حلقه‌های کناری کمتر و از حلقه‌ی میانی بیشتر است (مورد خمیده - خط چین) و دیگری شار با شیب $\pi/10$ در طول نوار افزایش یابد، رسم شده است. مشاهده می‌شود در مورد زیگزگ رسانش در ناحیه‌ی گاف مرکزی حساسیت زیادی به این تغییرات نشان نمی‌دهد در حالیکه در مورد دسته‌صندلی این حساسیت چشمگیر است. علت این پدیده به این واقعیت برمی‌گردد که برای نانو نوار زیگزگ الکترون مسیره‌های زیادی در پیش رو دارد. در حالیکه در نانو نوار دسته‌صندلی با جدا شدن حلقه‌های بنزنی،

گذار است. در مورد نانو نوارهای گرافنی زیگزاگ نیز محاسبات وابستگی مقدار رسانش الکتریکی را به میدان اعمالی و خمیدگی نانو نوار نشان می‌دهد. مقایسه‌ی بین رسانش نانو نوارهای دسته‌صندلی و زیگزاگ نشان می‌دهد که رسانش در ناحیه‌ی گاف مرکزی برای مورد دسته‌صندلی حساسیت بیشتری نسبت مورد زیگزاگ به مقدار خمیدگی و میدان مغناطیسی دارد.

تشکر و قدردانی

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

مراجع

- [1] A. Nitzan, and M. A. Ratner, "Electron Transport in Molecular Wire Junctions", *Science* vol. 300, pp. 1384-1389, 2003.
- [2] K. Tagami, L. Wang, and M. Tsukada, "Interface Sensitivity in Quantum Transport through Single Molecules", *Nano. Lett.* Vol. 4, pp. 209-212, 2004.
- [3] O. Kalman, P. Foldi, M. G. Benedict, and F. M. Peeters, "Magnetoconductance of rectangular arrays of quantum rings", *Phys. Rev. B*, vol. 78, pp. 125306, 2008.
- [4] D. Rai, O. Hod, and A. Nitzan, "Magnetic fields effects on the electronic conduction properties of molecular ring structures", *Phys. Rev. B*, vol. 85, pp. 155440, 2012.
- [5] M. A. Reed, C. Zhou, C. J. Muller, T. P. Burgin, and J. M. Tour, "Conductance of a Molecular Junction" *Science*, vol. 278, pp. 252-254, 1997.
- [6] M. Di Ventura, and S. T. Pantelides, "Effect of nitric oxide annealing on the interface trap densities near the band edges in the 4H polytype of silicon carbide" *Appl. Phys. Lett.* vol. 76, pp. 1713-1715, 2000.
- [7] P. Dutta, S. K. Maiti, and S. N. Karmakar, "Quantum transport in an array of mesoscopic rings: Effect of interface geometry" *Solid state Commun.* vol. 150, pp. 1056-1061, 2010.
- [8] H. Zeng, J. P. Leburton, Y. Xu and J. Wei, "Defect symmetry influence on electronic transport of zigzag nanoribbons" *Nanoscale Research Lett.* vol. 6, pp. 254, 2011.
- [9] L. Rosales, M. Pacheco, Z. Barticevic, A. Latgé, and P. A. Orellana, "Transport properties of graphene nanoribbons with side-attached organic molecules" *Nanotechnology*, vol. 19, pp. 065402, 2008.
- [10] S. Ihnatsenka, I. V. Zozoulenko, and G. Kirczenow, "Band-gap engineering and ballistic transport in edge-corrugated graphene nanoribbons" *Phys. Rev. B*, vol. 80, pp. 155415, 2009.
- [11] S. Dutta, A. K. Manna, and S. K. Pati, "Intrinsic Half-Metallicity in Modified Graphene Nanoribbons" *Phys. Rev. Lett.* vol. 102, pp. 096601, 2009.
- [12] S. Bhandary, O. Eriksson, and B. Sanyal, "Complex edge effects in zigzag graphene nanoribbons due to hydrogen loading" *Phys. Rev. B*, vol. 82, pp. 165405, 2010.
- [13] D. S. Fisher, and P. A. Lee, "Relation between conductivity and transmission matrix" *Phys. Rev. B*, vol. 23 pp. 6851 1981.
- [14] S. Datta, *Electronic Transport Properties of Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press 1995.
- [15]. ح. ربانی و آ. مظلوم شهرکی، "تأثیر نوع نانو نوار زیگزاگ و دسته صندلی گرافن بر ضریب عبور و گاف انرژی" *مجله‌ی علوم خوارزمی*، جلد ۱۲، شماره ۴، ص ۶۶۹-۱۳۹۲.
- [16] C. Ritter, S. S. Makler, A. Latgé, "Transport properties of two finite armchair graphene nanoribbons" *Phys. Rev. B*. vol. 77 195443, 2008; "Energy-gap modulations of graphene ribbons under external fields: A theoretical study" *Phys. Rev. B*, vol. 82, pp. 089903, 2010.
- [17] M. Mardaani, and H. Rabani, "An analytical model for magnetoconductance of poly(p-phenylene)-like molecular wires in the tight-binding approach" *J. Mag. Mater.* vol. 331, pp. 28-32, 2013.
- [18] B. E. Kohler, *J. Chem. Phys.* 93 (1990) 5838; J. L. Brédas, R. Silbey (Eds.), *Conjugated Polymers*, Dordrecht, Netherland, Kluwer 1991.

Study of Aharonov-Bohm Effect on the Electronic Conductance of Bent Graphene Nanoribbons

M. Mardaani^{1,2,*}, H. Rabani^{1,2}, M. Borzouei¹

1 Department of Physics, Faculty of Science, Shahrekord University, Shahrekord

2 Nanotechnology Research Center, Shahrekord University, Shahrekord

Abstract In this paper, we study the electronic conductance of the flat and bent armchair and zigzag graphene nanoribbons in the presence and absence of an external magnetic field within the nearest neighbor tight-binding approach. For the armchair case, we reduce the Hamiltonian of each benzene ring including the treated magnetic flux to the Hamiltonian of a two atomic molecule by using the renormalization method. Also, consider the effect of magnetic field by inserting the flux dependent phase coefficients in the corresponding hopping energies in the problem. Finally, we perform the numerical calculations related to the transmission coefficient by the means of the Green's function technique within the Landauer approach. The results show that the applying an external magnetic field on the armchair nanoribbon creates some extra gaps in the conductance spectra. The widths of these gaps depend on the amount of nanoribbon bending. Furthermore, the value of conductance in the central gap for armchair case is more sensitive on the bending and magnetic field amounts with respect to zigzag case.

Keywords

Tight-binding, Aharonov-Bohm, nanoribbon, bending.