



## ضریب عبور یک نانونوار گرافن نردبانی شکل بلند متصل به چند بنزن اضافی

فاطمه ندری | محمد مردانی\* | حسن ربانی

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

**چکیده:** در این مقاله به بررسی خواص ترابرد الکترونی پیکربندی‌های متفاوت یک نانونوار نردبانی شکل نامتناهی که چند حلقه بنزن در قسمت کوچکی از آن اضافه شده است، می‌پردازیم. برای این منظور از روش تابع گرین ترازمندی در رهیافت تنگابست و تقریب نزدیک‌ترین همسایه استفاده می‌کنیم. ابتدا با معرفی یک تبدیل متعامد، هامیلتونی نانو نوار در راستای سطح مقطع را قطری می‌کنیم. در واقع، هامیلتونی سامانه مورد نظر را با استفاده از این تبدیل به گونه‌ای تغییر می‌دهیم که هامیلتونی قسمت‌های ایده‌آل آن معادل هامیلتونی دو زنجیره‌ی ساده باشد. نتایج نشان می‌دهد که حضور حلقه‌های اضافی، باعث کاهش رسانش شده و در بعضی موارد، دره‌های ضد تشدید در طیف ضریب عبور الکترونی ایجاد می‌کند. رسانش الکترونی پیکربندی‌های مختلف که از جابجایی مکان حلقه‌های اضافی شکل می‌گیرند، مطالعه و مقایسه شده است. بخصوص مقدار ضریب عبور در انرژی فرمی در پیکربندی‌های متفاوت را مورد توجه قرار داده‌ایم. مدل ارائه شده برای هر ساختار اختیاری لانه زنبوری به عنوان سامانه مرکزی که بین دو نانو نوار گرافن نردبانی شکل قرار گیرد، قابل تعمیم است.

**واژگان کلیدی:** رسانش الکترونی، تابع گرین، تنگابست، نانونوار گرافن، حلقه بنزنی

mohammad-m@sci.sku.ac.ir

ترابردی را در قطعات بر پایه گرافن مشکل می‌سازد. در واقع نمی‌توان از گرافن به عنوان سوئیچ که برای کاربردهای الکترونیکی لازم است، استفاده کرد. این مشکل را می‌توان به وسیله ساخت نانونوارهای گرافنی با عرض کم حل کرد که نتیجه آن ایجاد گاف انرژی غیر صفر باشد. توانایی تنظیم گاف انرژی با پهنای نوار باعث کاربرد وسیع نانونوارها در ترانزیستورها [۵]، حسگرها [۶] و ابزار اسپینترونیک [۷] شده و تحقیقات متنوعی برای محاسبه طیف الکترونی و خواص ترابرد آن‌ها صورت گرفته است [۸-۱۰]. خواص الکترونیکی نانونوارها به طور عمده توسط حالت‌های لبه‌ای زیگزگ و دسته‌صندلی آن‌ها تعیین می‌شود [۱۲ و ۱۱]. به علت نسبت معکوس گاف نواری با پهنای نوار، تنها نانونوارهایی با پهنای کمتر از دو نانومتر جایگزین مناسبی برای سیلیکون در

### ۱- مقدمه

امروزه به دنبال کاهش اندازه قطعات الکترونیکی بررسی خواص ترابرد نانوساختارها اهمیت فزاینده‌ای در علوم پیدا کرده است. در این میان، سامانه‌های نانوالکترونیک بر پایه گرافن اساس بسیاری از مطالعات تجربی و نظری را تشکیل داده‌اند. آرایش لانه زنبوری اتم‌های کربن در لایه‌ای با ضخامت تنها یک اتم، ساختار الکترونی منحصر به فردی با خواص الکتریکی، گرمایی، نوری و مکانیکی شگفت‌انگیز پدید آورده است. در یک ورقه تک‌لایه گرافن دوبعدی، هیبریداسیون  $sp^2$  اتم‌های کربن منجر به تحرک‌پذیری بالای حامل‌های بار در دمای اتاق می‌شود [۴-۱]. گرافن طبیعی نیم-رسانایی با گاف نواری صفر است و فقدان گاف انرژی کنترل خواص

## ۲- مبانی نظری

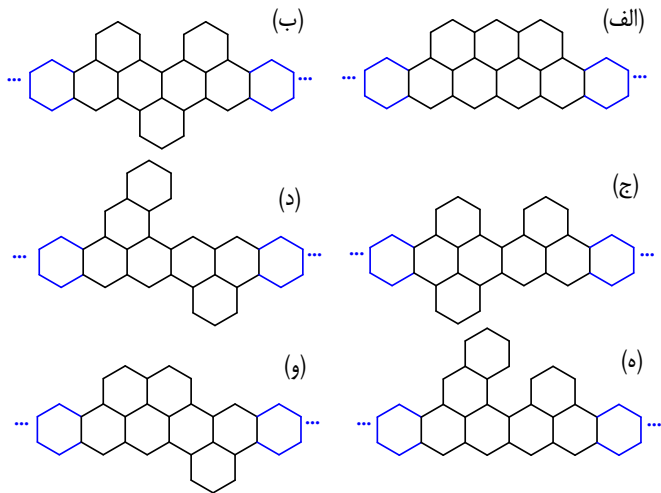
در این بخش فرمول‌بندی مورد نیاز را جهت بررسی رسانش چند پیکربندی از نانونوارهای زیگزگ شامل حلقه‌های بنزن تشدید نشان داده شده در شکل ۱، ارائه می‌دهیم. قسمتی از نانونوار با طول بی‌نهایت را که شامل حلقه‌های بنزن اضافی است، بعنوان سامانه مرکزی و قسمت‌های دیگر را بعنوان هادی‌های چپ و راست معرفی می‌کنیم. می‌توان در رهیافت تنگابست، هامیلتونی کل سامانه شامل هامیلتونی‌های سامانه مرکزی ( $H_W$ )، هادی‌ها ( $H_{L(R)}$ ) و اتصال‌ها ( $H_{WL(R)}$ ) را به صورت زیر نوشت

$$H = H_L + H_{WL} + H_W + H_{WR} + H_R$$

$$= \sum_i \mathbf{c}_i^\dagger \boldsymbol{\varepsilon}_i \mathbf{c}_i + \sum_i (\mathbf{c}_i^\dagger \boldsymbol{\beta}_{i,i+1} \mathbf{c}_{i+1} + h.c.), \quad (1)$$

که در آن  $i$  شمارنده‌ی اتم‌ها در طول محور نانونوار،  $\boldsymbol{\varepsilon}_i$  و  $\boldsymbol{\beta}_{i,i+1}$  به ترتیب ماتریس‌های مربوط به انرژی‌های جایگاهی اتم‌ها در جایگاه  $i$  م و پرش بین اتم‌های جایگاه‌های  $i$  م و  $i+1$  م هستند. همچنین  $\mathbf{c}_i$  و  $\mathbf{c}_i^\dagger$  به ترتیب عملگرهای خلق و فنا مطابق با اتم‌های واقع در جایگاه  $i$  م هستند. مقدار  $i$  در هامیلتونی بالا برای هادی چپ ( $L$ ) برابر با  $0, \dots, -\infty$ ، برای نانو نوار مرکزی ( $W$ )،  $1, \dots, N$  و برای هادی راست ( $R$ )،  $0, \dots, \infty, N+1$  است. هامیلتونی‌های مربوط به اتصال‌های چپ و راست نیز به ترتیب جملات مربوط به  $i=0$  و  $i=N$  در جمله‌ی دوم رابطه-ی (۱) هستند. لازم به ذکر است که ماتریس  $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ ، یک ماتریس سه قطری از مرتبه‌ی تعداد اتم‌های واقع در جایگاه  $i$  م است که عناصر قطری آن  $\boldsymbol{\varepsilon}_C$ ، انرژی جایگاهی اتم کربن و عناصر کنار قطری آن انرژی پرش مربوط به پیوند کربن - کربن،  $\beta$  است. همچنین ماتریس  $\boldsymbol{\beta}_{i,i+1}$ ، ماتریسی سه قطری هم مرتبه با ماتریس  $\boldsymbol{\varepsilon}_i$  است که عناصر کنار قطر می‌تواند صفر یا جمله‌های پرش  $\beta$  باشد که با توجه به چگونگی اتصال اتم‌ها در دو جایگاه به همدیگر، تعیین می‌شوند. حال تبدیل متعامد  $U$  را در راستای عمود بر نانونوار چنان می‌سازیم که هامیلتونی هادی‌های سمت چپ و راست را به هامیلتونی دو زنجیره‌ی مجزا با ساختار AB یکی با انرژی‌های جایگاهی  $\boldsymbol{\varepsilon}_C + \beta$  و  $\boldsymbol{\varepsilon}_C - \beta$  و دیگری  $\boldsymbol{\varepsilon}_C + \beta$  و  $\boldsymbol{\varepsilon}_C - \beta$  هر دو با همان انرژی پرش  $\beta$  تبدیل نماید. این زنجیره‌ها را با مدهای  $+$  و  $-$  نشانه‌گذاری می‌کنیم. بدیهی است که این تبدیل

ترانزیستورهای اثر میدانی هستند. در این ابعاد کوچک بی‌نظمی‌های اجتناب ناپذیری خواص الکترونیکی نانونوارها را تحت تأثیر قرار می‌دهند که برای مطالعه‌ی نقش نانونوارها در کاربردهای الکترونیکی باید تأثیر این بی‌نظمی‌ها در خواص تراپردی نانونوارها بررسی شود [۱۳]. از جمله این بی‌نظمی‌ها می‌توان به نقص‌های لبه‌ای، تهی‌جای‌های شبکه‌ای، نوسانات پتانسیل گیت، ناخاصی‌ها و نقص‌های خطی یا نقطه‌ای اشاره کرد. تحقیقات نشان می‌دهد که به خاطر حالت‌های جایگزیده‌ای که در مجاورت مکان نقص‌ها ظاهر می‌شود، رسانش نانونوارهای ناکامل در حالت کلی کاهش می‌یابد. اما جزئیات این کاهش رسانش به ساختار نقص، فاصله‌ی نقص از لبه‌ها و پهنا‌ی نانونوار بستگی دارد [۱۴]. با کاهش پهنا‌ی نانونوارها خواص فیزیکی آن‌ها بیشتر تحت تأثیر چینش اتم‌های لبه قرار می‌گیرد و تأثیر ناکاملی‌های لبه‌ای بر خواص الکترونیکی آن‌ها مهم‌تر می‌شود. در یک نانونوار پهن‌تر، تعداد اتم‌های موجود در یک سطح مقطع بیشتر است. بنابراین الکترون‌ها راحت‌تر از نقص‌ها عبور می‌کنند. اما با کاهش پهنا‌ی نانونوار، ایجاد حتی یک ناکاملی ضعیف لبه‌ای، می‌تواند نانونوارهای زیگزگ را به خاطر جایگزیدگی اندرسون از حالت فلز به نیم‌رسانا تبدیل کند. بنابراین نانونوارهای باریک با حضور ناکاملی‌های لبه‌ای را می‌توان به عنوان اجزایی سودمند در ابزار نانو الکترونیک استفاده کرد. تأثیر ناکاملی‌های لبه‌ای بر تراپرد الکترونی تاکنون با استفاده از نظریه‌ی تابع گرین چگالی [۱۵]، مدل هابارد نامتعامد به همراه فرمول‌بندی تابع گرین ترانزمنده‌ی و یا ناترازمنده‌ی [۱۳] به همراه رهیافت تنگابست [۱۴] محاسبه شده است. در این مقاله به کمک روش تابع گرین در رهیافت تنگابست و تقریب نزدیک‌ترین همسایه‌ها به محاسبه‌ی ضریب عبور الکترونی یک نانونوار گرافن نردبانی شکل ایده‌آل بی-نهایت می‌پردازیم و سپس تأثیر اتصال حلقه‌های بنزن اضافی در لبه‌های ایده‌آل را بر روی ضریب عبور الکترونی مورد مطالعه قرار می‌دهیم. در واقع ما تأثیر نوع چینش حلقه‌های بنزن اضافی متصل به نانونوار اصلی و همچنین تغییر تعداد بنزن‌های درگیر به آن‌ها را در تراپرد الکترونی سامانه بررسی می‌کنیم. در بخش بعد فرمول-بندی لازم برای محاسبات عددی را ارائه می‌دهیم. سپس در بخش نتایج با ارائه نتایج محاسبات به بررسی وابستگی ضریب عبور پیکربندی‌های ممکن می‌پردازیم و در بخش پایانی خلاصه‌ای از مواد و نتایج مقاله را می‌آوریم.



شکل ۱: پیکربندی‌های ممکن برای یک نانونوار نردبانی شکل نامتناهی که ۴ حلقه‌ی بنزن آن به ۳ حلقه بنزن اضافی متصل شده است.

## ۳- نتایج و بحث

حال با استفاده از مدل ارائه شده در بخش قبل رسانش آرایش‌های مختلفی از یک نانونوار گرافن نردبانی شکل نامتناهی را که شامل ۳ حلقه بنزن اضافی است، محاسبه می‌کنیم. از میان پیکربندی‌های ممکن، تنها ساختارهایی را مطالعه می‌کنیم که در آن‌ها تعداد معینی از حلقه‌های بنزن در نانونوار درگیر بنزن‌های اضافه هستند. این تعداد در شکل‌های ۱، ۳ و ۵ به ترتیب چهار، سه و دو انتخاب شده اند. لازم به ذکر است که در محاسبات این مقاله انرژی‌های جایگاه‌های اتم‌های کربن را برابر با صفر و انرژی‌های پرش الکترون بین اتم‌های کربن را برابر یک الکترون-ولت در نظر گرفته‌ایم. مطابق شکل ۱، تعداد ساختارهایی که در آن‌ها ۴ حلقه بنزن درگیر بنزن-های اضافی هستند، شش عدد است. در نانونوارهای زیگزاگ انرژی جنبشی الکترون‌های متحرک در نزدیکی انرژی فرمی کوچک است. بنابراین الکترون‌ها در لبه‌ها جایگزیده هستند و به راحتی در طول ناکاملی‌ها حرکت نمی‌کنند. حضور اتم‌های کربن اضافی در لبه‌های ایده‌آل نانونوارهای زیگزاگ پراکندگی الکترون در لبه‌ها را به دنبال خواهد داشت. حتی یک پراکندگی ضعیف می‌تواند یک حالت جایگزیده ایجاد کند. یک حالت جایگزیده ناشی از یک ناکاملی باعث تشکیل دره‌های رسانشی می‌شود. حضور دره‌های ضدتشدیدی در طیف رسانشی معمولاً ناشی از تداخل ویرانگر توابع موج الکترونی در حلقه‌های بنزن است. تداخل ویرانگر زمانی رخ می‌دهد که مسیرهای ممکن عبور الکترون در حلقه‌های بنزن

ماتریس‌های جایگاهی و پرش در هامیلتونی سامانه مرکزی را نیز به شکل  $\tilde{\mathbf{b}}_{i,i+1} = U^\dagger \mathbf{b}_{i,i+1} U$  و  $\tilde{\mathbf{e}}_i = U^\dagger \mathbf{e}_i U$  تحت تأثیر قرار می‌دهد که هامیلتونی مرکزی جدید را به صورت  $\tilde{H}_W$  شامل این انرژی‌های جایگاهی جدید تغییر می‌دهد و بنابراین می‌توان وارون تابع گرین سامانه مرکزی را به صورت زیر نوشت:

$$G_W^{-1} = \varepsilon I - \tilde{H}_W - \Sigma_L - \Sigma_R, \quad (2)$$

که در آن  $\varepsilon$  انرژی الکترون،  $I$  ماتریس واحد،  $\Sigma_L$  ماتریسی است که تمام عناصر آن به جز دو عنصر اول روی قطر که به ترتیب برابر با  $\sigma_L^-$  و  $\sigma_L^+$  بوده، صفر هستند و  $\Sigma_R$  نیز ماتریسی است که فقط دو عنصر انتهایی قطر آن غیر صفر بوده و به ترتیب برابر با  $\sigma_R^-$  و  $\sigma_R^+$  هستند. با توجه به نوار انرژی یک زنجیره خطی AB، خود انرژی‌های ذکر شده به شکل زیر محاسبه می‌شوند:

$$\sigma_{L(R)}^\pm = \frac{\beta^2 (\varepsilon - \varepsilon_C \mp \beta)}{(\varepsilon - \varepsilon_C \mp \beta)(\varepsilon - \varepsilon_C) - \beta^2 (1 + \gamma_\pm + \sqrt{\gamma_\pm^2 - 1})}, \quad (3)$$

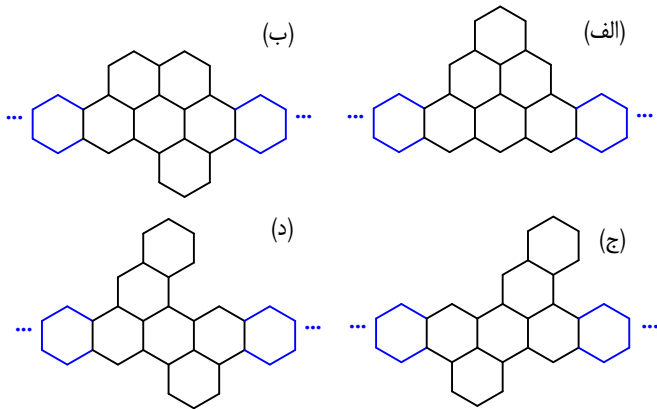
که در واقع توابع خود انرژی سامانه مرکزی در حضور مدهای + و - چپ (راست) هستند و در آن

$$\gamma_\pm = \cos k_\pm a = \frac{(\varepsilon - \varepsilon_C)(\varepsilon - \varepsilon_C \mp \beta)}{2\beta} - 1, \quad (4)$$

که در آن  $k_{+(-)}$  بردار موج الکترون ورودی برای مد + (-) و ثابت شبکه است. لازم به ذکر است که شرط  $|\gamma_\pm| \leq 1$  بازه مجاز انرژی الکترون را تعیین می‌کند. با محاسبه ماتریس تابع گرین از رابطه (۲)، ضریب عبور نانونوار گرافن را به صورت تابعی از با استفاده از رابطه زیر به دست می‌آوریم [۱۶]:

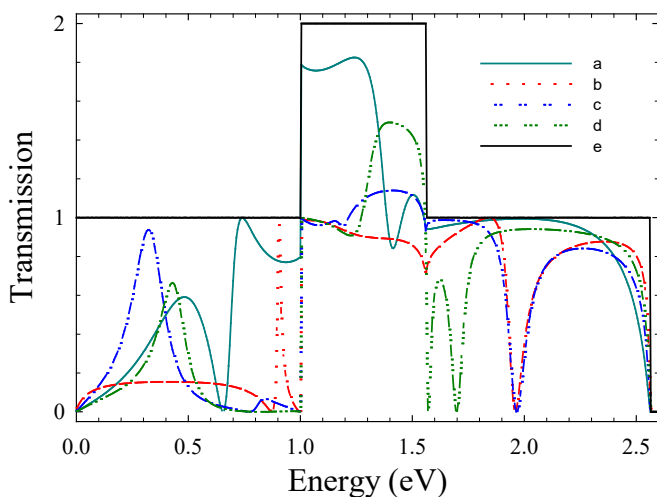
$$T(\varepsilon) = \text{tr}(\Gamma_L G_W \Gamma_R G_W^\dagger), \quad (5)$$

که در آن  $\Gamma_{L(R)} = -2 \text{Im} \Sigma_{L(R)}$  تابع رأس مربوط به سامانه مرکزی در حضور هادی‌های چپ و راست هستند. در بخش بعد به بررسی ترابرد الکترونی یک نانونوار ایده‌آل بی‌نهایت پرداخته و سپس ترابرد الکترونی پیکربندی‌های مختلف ناشی از آرایش‌های متنوع حلقه‌های بنزن متصل به نانونوار اولیه را با یکدیگر و با حالت ایده‌آل مقایسه می‌کنیم.



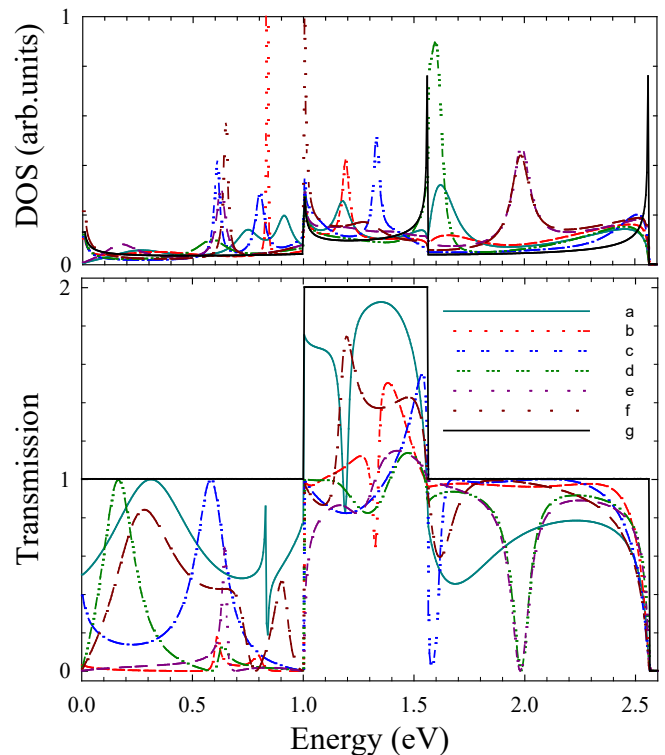
شکل ۳: پیکربندی‌های ممکن برای یک نانونوار نردبانی شکل نامتناهی که ۳ حلقه‌ی بنزن آن به ۳ حلقه بنزن اضافی متصل شده است.

۰/۸۳ الکترون ولت در منحنی ضریب عبور دیده می‌شود که به پدیده فانو شناخته می‌شود [۲۰ و ۲۱]. لازم به ذکر است که افت و خیز رسانش در مرزهای همپوشانی کانال‌های رسانشی (انرژی‌های ۱ و ۱/۵ الکترون ولت) ربطی به پدیده فانو ندارد و صرفاً جمع رسانش دو مد موجود حاصل می‌گردد. با استفاده از نمودارهای مربوط به چگالی‌حالت‌های الکترونی سامانه مرکزی می‌توان به چگونگی طیف سامانه و محل شبه ترازهای سامانه‌ی مرکزی در نوار انرژی پی برد. در واقع قله‌ها نشان‌دهنده‌ی مکان شبه ترازها و پهنای آن‌ها تعیین کننده‌ی زمان واهلش الکترونی در شبه تراز متناظر با آن قله است. با توجه به نمودارهای چگالی‌حالت‌ها و رسانش، می‌توان فهمید که ساز و کار رسانش در اطراف انرژی صفر

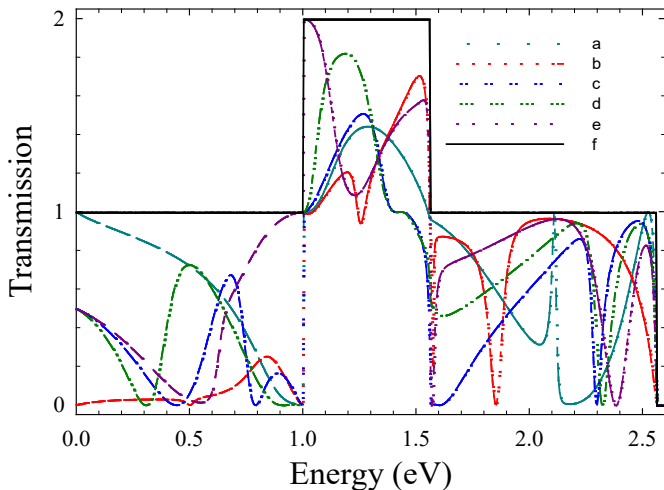


شکل ۴: نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی برای آرایش‌های متفاوت وجود سه حلقه بنزن اضافی در یک نانو نوارگرافن، وقتی که سه حلقه بنزنی را درگیر کرده است. نمودارهای a تا f به ترتیب مربوط به ضریب عبور ساختارهای نشان داده شده در شکل ۳ (الف) تا ۳ (د) هستند. خط توپر پله‌ای شکل (نمودار e) رسانش نانونوار ایده‌آل را نشان می‌دهد.

متفاوت باشد [۱۷]. در شکل ۲ منحنی‌های ضریب عبور و چگالی-حالت‌های الکترونی مربوط به این ساختارها همراه با نمودار مربوط به یک نانونوار ایده‌آل نامتناهی نردبانی شکل ترسیم شده است. همان‌گونه که می‌دانیم به دلیل عدم وجود گاف در نوار انرژی، نانونوارهای زیگزاگ حالت ایده‌آل دارای خاصیت فلزی هستند [۱۹ و ۱۸]. دیده می‌شود که منحنی ضریب عبور الکترونی در مورد حالت ایده‌آل شکل پله‌ای دارد و حداکثر تا مقدار ۲ افزایش می‌یابد که به دلیل همپوشانی کانال‌های رسانش است. برای پیکربندی-های شکل‌های ۱ (الف) و ۱ (ج)، مقدار ضریب عبور الکترونی در انرژی فرمی (در اینجا انرژی صفر) غیر صفر است درحالی‌که برای دیگر پیکربندی‌های شکل ۱ مقدار آن بسیار ناچیز است. به نظر می‌رسد که در انرژی صفر تابع موج الکترونی گذرنده از مسیرهای بالا و پایین در پیکربندی‌های مذکور منجر به تداخل ویرانگر شده و باعث از بین رفتن رسانش گردیده است. مکان وقوع قله‌های تشدیدی در نمودارها نیز قویاً به هندسه نانونوار وابسته است. برای ساختار شکل ۱ (الف)، یک افزایش و کاهش متوالی حول انرژی



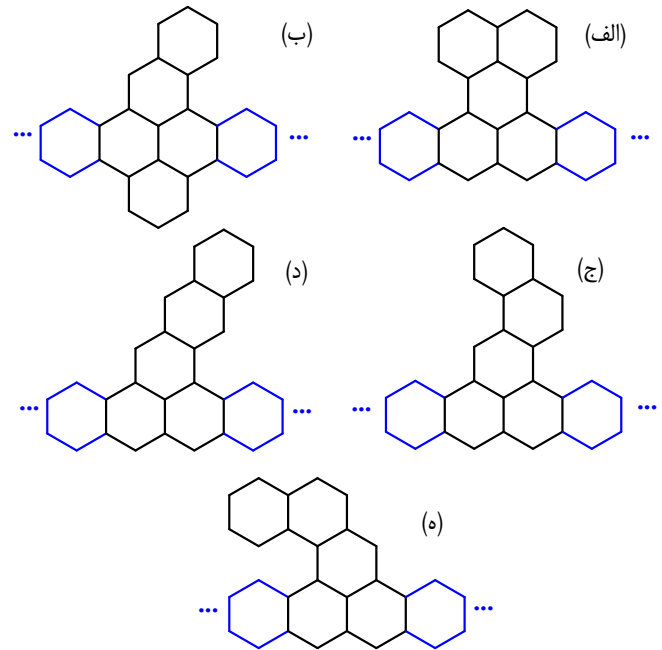
شکل ۵: نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی برای آرایش‌های متفاوت ناشی از وجود سه حلقه بنزن اضافی در یک نانو نوارگرافن، وقتی که چهار حلقه بنزنی را درگیر کرده است. نمودارهای a تا f به ترتیب مربوط به ضریب عبور ساختارهای نشان داده شده در شکل ۱ (الف) تا ۱ (و) هستند. خط توپر پله‌ای شکل (نمودار g) رسانش ایده‌آل را نشان می‌دهد. همچنین در بالای نمودار رسانش، چگالی‌حالت‌های الکترونی ناحیه‌ی مرکزی در واحد اختیاری نیز رسم شده است.



شکل ۶: نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی برای آرایش‌های متفاوت وجود سه حلقه بنزن اضافی در یک نانو نوار گرافن، وقتی که دو حلقه بنزنی را درگیر کرده است. نمودارهای a تا e به ترتیب مربوط به ضریب عبور ساختارهای نشان داده شده در شکل ۵ (الف) تا ۵ (و) هستند. خط توپر پله‌ای شکل (نمودار f) رسانش نانونوار ایده‌آل را نشان می‌دهد.

## ۴- نتیجه‌گیری

در این تحقیق به کمک روش تابع گرین و رهیافت تنگابست و به صورت تحلیلی - محاسباتی به بررسی تأثیر وجود حلقه‌های بنزن اضافی به یک نانونوار ایده‌آل نامتناهی نردبانی شکل پرداختیم. محاسبات برای پیکربندی‌های مختلف حاصل از اتصال سه حلقه بنزن اضافی انجام شد که با آرایش‌های مختلفی به تعداد معینی از حلقه‌های بنزن (دو، سه و چهار عدد) در یک سامانه مرکزی متصل شده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که تنها در موردی که هر سه حلقه بنزنی از یک طرف درگیر چهار حلقه بنزنی گردد، پدیده فانو مشاهده می‌شود و در موارد دیگر شاهد وقوع این پدیده در طیف رسانش سامانه نخواهیم بود. مقدار رسانش در انرژی فرمی سامانه از نظر کاربردی بسیار مورد توجه است. این کمیت برای ساختارهای مذکور مورد بررسی قرار گرفت. نتایج مربوطه نشان می‌دهند که برای تمام پیکربندی‌هایی که دو حلقه بنزنی در یک طرف و یک حلقه در طرف دیگر اضافه شده است (به جز یک مورد متقارن شکل (ج))، مقدار ضریب عبور در انرژی فرمی، صفر است. در پایان متذکر می‌شویم که تداخل ویرانگر ناشی از وجود مسیرهای ممکن متفاوت برای عبور الکترون از حلقه‌های بنزن، احتمال وقوع دره-های ضدتشدیدی را در طیف رسانش افزایش می‌دهد.



شکل ۵: پیکربندی‌های ممکن برای یک نانونوار نردبانی شکل نامتناهی که ۲ حلقه‌ی بنزن آن به ۳ حلقه بنزن اضافی متصل شده است.

برای پیکربندی‌های شکل ۱ (ب) و ۱ (و)، تونل‌زنی است که می‌توان از این ناحیه به عنوان گاف انرژی ساختاری که از تکرار سامانه‌ی مرکزیشان ساخته می‌شود، تعبیر کرد. حال تعداد حلقه‌های بنزنی نانونوار را که درگیر سه حلقه بنزنی اضافی هستند، به سه عدد کاهش می‌دهیم و پیکربندی‌های متفاوت ممکن را در شکل ۳ نشان داده‌ایم. بدیهی است که چنین تغییری در سامانه رسانش آن را تحت تأثیر قرار خواهد داد. در شکل ۴ منحنی‌های مربوط به ضریب عبور این ساختارها بر حسب انرژی آمده است. مشاهده می‌شود که در انرژی فرمی، مقدار رسانش بسیار ناچیز است. تنها ساختارهای ممکن که در آن‌ها با اتصال نانو نوار به سه حلقه بنزن اضافی، فقط دو بنزن درگیر می‌شوند، در شکل ۵ آمده‌اند و منحنی‌های مربوط به ضریب عبور الکترونی آن‌ها در شکل ۶ نشان داده شده است. دیده می‌شود که مقدار ضریب عبور در انرژی صفر برای تمام پیکربندی‌ها به جز برای ساختار شکل ۵ (ب) غیر صفر بوده و مقداری قابل ملاحظه دارند. نکته قابل توجه این است که این مقدار برای ساختارهایی که هر سه حلقه بنزنی بصورت خطی (متوالی) در یک طرف نانو نوار قرار گرفته‌اند، یکسان و برابر نیم است. همچنین مقدار ضریب عبور برای ساختار متقارن شکل ۵ (الف) حدود یک است.

[11] C. Motta, D. S-Portal and M.I. Trioni, "Transport properties of armchair graphene nanoribbon junctions between graphene electrodes" *Physical Chemistry Chemical Physics*, 14, 10683, 2012.

[12] L. Brey and H.A. Fertig, "Electronic states of graphene nanoribbons" *Physical Review B*, 73, 10683, 2006.

[13] N. Djavid, K. Khaliji, S. M. Tabatabaei and M. Pourfath, "A computational study on the electronic transport properties of ultra-narrow disordered zigzag graphene nanoribbons" *IEEE Transactions on Electron Devices* 61, 23-29, 2014.

[14] N. Gorjizadeh, A. Farajian and Y. Kawazoe, "The effects of defects on the conductance of graphene nanoribbons" *Nanotechnology*, 20, 015201, 2008.

[15] Y. Ouyang, S. Sanvito and J. Guo, "Effects of edge chemistry doping on graphene nanoribbon mobility" *Surface Science*, 605, 1643-1648, 2011.

[16] Y. Meir and N.S. Wingreen, "Landauer formula for the current through an interacting electron region" *Physical Review Letter*, 68, 2512, 1992.

[17] T. Markussen, R. Stadler and K.S. Thygesen, "The relation between structure and quantum interference in single molecule junctions" *Nano Letters*, 10, 4260-4265, 2010.

[18] H. Rabani, M. Mardaani and A.M. Shahraki, "Analytical study of the ballistic transport of ladder-like graphene nanoribbons within the tight-binding approach" *Superlattices and Microstructures*, 59, 106-114, 2013.

[۱۹] م. مردانی، ح. ربانی و آ. مظلوم شهرکی، "ترابرد الکترونی یک نانو ساختار نردبانی در حضور نقص‌های شبکه‌ای" پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۲، ۳۷-۴۳ بهار ۱۳۹۱.

[۲۰] م. مردانی و س. انصاری، "رسانندگی الکترونی سیم‌های مولکولی پلی‌پیرول (PPy) و ظهور پدیده فانو رزونانس" پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۲، ۴۵-۵۰ بهار ۱۳۹۱.

[21] A.E. Miroshnichenko, S. Flach and Y.S. Kivshar, "Fano resonances in nanoscale structures" *Review of Modern Physics*, 82, 2257, 2010.

[1] A.K. Geim and K.S. Novoselov, "The rise of graphene" *Nature Materials*, 6, 183-191, 2007.

[2] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov and A. K. Geim, "The electronic properties of graphene" *Review of Modern Physics*, 81, 109, 2009.

[3] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva and A.A. Firsov, "Electric field effect in atomically thin carbon films" *Science*, 306, 666-669, 2004.

[4] S.D. Sarma, S. Adam, E.H. Hwang and E. Rossi, "Electronic transport in two dimensional graphene" *Review of Modern Physics*, 83, 407, 2011.

[5] Y.M. Lin, C. Dimitrakopoulos, K.A. Jenkins, D.B. Farmer, H.Y. Chiu, A. Grill and Ph. Avouris, "100-GHz transistors from wafer-scale epitaxial graphene" *Science*, 327, 662, 2010.

[6] K. Janani, C.P. Kala, R.M. Hariharan, S. Sivasathya and D. John, "Electron transport of zigzag graphene nanoribbon based biosensor-a future perspective towards biosensor and biomedical applications" *International Journal of ChemTech Research*, 7, 928-935, 2015.

[7] Q. Wu, P. Zhao and D. Liu, "Spin-dependent transport properties in a pyrene-graphene nanoribbon device" *RSC Advances*, 16634-16639, 2016.

[۸] ح. ربانی و آ. مظلوم شهرکی، "تاثیر نوع نانونوار زیگزاگ و دسته صندلی گرافن بر ضریب عبور و گاف انرژی" نشریه علوم دانشگاه خوارزمی، جلد ۱۲، ۶۷۶-۶۶۹ پاییز ۱۳۹۲.

[9] S.K. Chin, K.T. Lam, D. Seah and G. Liang, "Quantum transport simulations of graphene nanoribbon devices using Dirac equation calibrated with tight-binding  $\pi$ -bond model" *Nanoscale Research Letters*, 7, 013004, 2012.

[10] X. Wang, Y. Ouyang, X. Li, H. Wang, J. Guo and H. Dai, "Room-temperature all semiconducting sub-10-nm graphene nanoribbon field-effect transistors" *Physical Review Letter*, 100, 206803, 2008.



# Transmission Coefficient of a Lengthy Ladder-Like Graphene Nanoribbon Connected to Some Additional Benzene Rings

F. Nadri, M. Mardaani\*, H. Rabani

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

**Abstract:** In this paper, we consider the electronic transport properties of different configurations of a ladder-like nanoribbon which is connected to some benzene rings in its small part. To this end, we use the equilibrium Green's function method within the tight-binding approach and the nearest neighbor approximation. We first introduce a unitary transformation matrix in order to diagonalize the matrix Hamiltonian of the nanoribbon in its cross-section direction. In fact, we rewrite the Hamiltonian of the system in a way that the Hamiltonian of the ideal parts converts to the Hamiltonian of two simple chains. The results show that the existence of the extra rings makes the conductance decreasing and creation of some anti-resonance deeps in the transmission coefficient spectra for some cases. The electronic transmission coefficients of the different configurations which are constructed by position variation of extra rings are studied and compared. Particularly, the value of the electronic conductance in the Fermi energy for different configurations is taken into the investigation. The model can be extended for any arbitrary honeycomb structure of the center part which is connected to two ladder-like nanoribbon leads.

**Keywords:** Electronic conductance, Green's function, Tight-binding, Graphene nanoribbon, Benzene ring