

ترابرد الکترونی یک شبکه‌ی نردبانی واپیچیده

حسن ربانی^{۱*} | محمد مردانی^۲ | مریم زندیان^۱

۱. گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

۲. مرکز پژوهشی فناوری نانو، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

چکیده

قرار می‌دهند [۱ و ۲]. این امر می‌تواند در ساخت ادوات الکترونیکی مولکولی زیستی و کنترل رسانش توسط آن‌ها بسته به شرایط و عوامل محیطی کمک کند.

DNA حامل علایم ژنتیکی جانداران، یک ماکرومولکول در برگیرنده دسته‌های مکرر از نوکلئیدهای متشکل از جفت‌های AT یا CG است که از طریق نوار هیدروژن با یکدیگر پیوند یافته‌اند و در ساختار مارپیچ دوگانه [۳]، از طریق یک رشته بلند (زنجیره) شکر- فسفات نگاه داشته شده‌اند. از این رو با توجه به شکل ساختار هندسی این مولکول، پژوهشگران در مطالعات نظری خود در زمینه بررسی رسانش الکتریکی این مولکول، الگوهای متفاوتی بر پایه مدل تنگابست از جمله شبکه‌های یک بعدی نامنظم، استخوان ماهی و شبکه‌های نردبانی ارائه دادند. یادآور می‌شویم که در بیش‌تر مدل‌های نظری فرض می‌شود که رسانش در طول محور مولکول DNA انجام می‌شود [۴]. بنابراین از آنجایی که ساختار مولکول DNA شبیه به شبکه‌ی نردبانی واپیچیده است، در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین در رهیافت تنگابست، به بررسی رسانش الکترونی یک نردبان واپیچیده می‌پردازیم. نتایج این بررسی می‌تواند در فهم ساز و کار رسانش الکترونی در ساختارهای نردبانی همانند DNA شکل کمک کند.

بررسی‌های ترابرد الکترونی از طریق ساختارهای نردبانی هم به صورت تجربی [۵] و هم به صورت نظری [۶-۹] صورت گرفته است. به عنوان مثال می‌توان از مطالعات اثر گذار فاز فلز-عایق در یک شبکه نردبانی نامنظم [۹] و یا مطالعات تحلیلی مربوط به رسانش الکترونی [۷] نام برد. یکی از مسائلی که می‌تواند روی رسانش الکترونی یک شبکه نردبانی مطرح شود، مطالعه‌ی اثر پیچ و تاب در قسمتی از شبکه‌ی ایده‌آل است. در این مقاله سعی

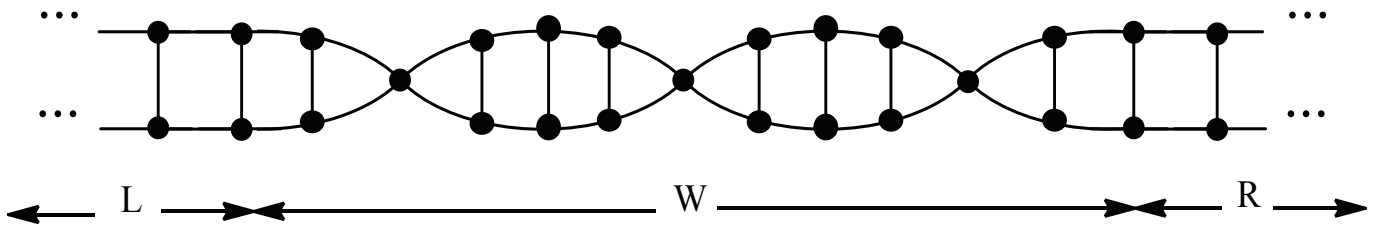
در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین و در رهیافت تنگابست، به بررسی رسانش الکتریکی یک شبکه‌ی نردبان نامتناهی که قسمتی از آن واپیچیده است، می‌پردازیم. برای این منظور اثرات تغییر همپوشانی اربیتال‌های اتم‌های همسایه و پیچش را در پارامترهای پرش قسمت واپیچیده وارد می‌کنیم. همچنین با توجه به تقارن‌های هامیلتونی سامانه، مسئله مورد نظر به مسئله‌ی دو زنجیره‌ی ساده تقلیل می‌یابد. نتایج محاسبات عددی نشان می‌دهد که رسانش الکترونی قویاً به میزان پیچش و ضریب تغییر قدرت همپوشانی اربیتال‌های وابسته است. افزایش واپیچیدگی در نردبان مرکزی باعث کوچک‌تر شدن پنجره انرژی آن شده و در نتیجه ناحیه‌ی رسانش تشدیدی کاهش می‌یابد.

واژگان کلیدی: رسانش الکترونی، تنگابست، شبکه نردبانی،

واپیچش

۱. مقدمه

رسانش بارها در مولکول DNA به طور قابل توجهی علاقه فیزیکدان‌ها، شیمی‌دان‌ها و جامعه محققان زیست‌شناسی را متوجه خود کرده است. به دلیل کاربردهای علمی و فنی، فیزیکدانان این مولکول را به عنوان کاندیدایی نوین در راستای علوم فن‌آوری مربوط به سامانه‌های نانو مقیاس مورد پژوهش



شکل ۱

تصویر یک نردبان نامتناهی که قسمتی از آن واپیچیده از بالا. این نردبان می‌تواند شامل هادی‌های راست (R)، چپ (L) و قسمت مرکزی (W) باشد. مقدار در رابطه‌ی (۶)، برای رسم این شکل ۱۳ فرض شده است

که در این روابط

$$\mathbf{c}_i = \begin{pmatrix} c_i^{up} \\ c_i^{down} \end{pmatrix}; \quad \mathbf{c}_i^\dagger = (c_i^{\dagger up}, c_i^{\dagger down}),$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_i = \begin{pmatrix} \varepsilon_\alpha & \beta_{\perp\alpha} \\ \beta_{\perp\alpha} & \varepsilon_\alpha \end{pmatrix}; \quad (\alpha = L, R, W)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_i = \begin{pmatrix} \varepsilon_\alpha & \beta_{\perp\alpha} \\ \beta_{\perp\alpha} & \varepsilon_\alpha \end{pmatrix}; \quad (\alpha = L, R, W)$$

که در آنها $c_i^{up(down)}$ و $c_i^{\dagger up(down)}$ عملگرهای خلق و فنا ی الکترون در حالت پایه ی اتم بالایی (پایینی) پله ی i ام و ε_α انرژی جایگاهی اتم‌ها، $\beta_{\parallel\alpha}$ انرژی پرش بین دو پله ی متوالی و $\beta_{\perp\alpha}$ نیز انرژی پرش بین اتم‌های بالا و پایین هر پله در قسمت α است. با فرض همپوشانی اربیتال‌های s گونه در تشکیل پیوندها، وابستگی انرژی‌های پرش به فاصله ی بین اتم‌ها به صورت نمایی است. بنابراین می‌توان پارامتر $\beta_{\parallel W, i}$ مربوط به نردبان واپیچیده مرکزی را طبق رابطه ی زیر محاسبه نمود

$$\beta_{\parallel W, i} = \beta_{\parallel W} \exp(-\kappa \sqrt{1 + \sin^2(\pi/n)} - 1), \quad (6)$$

که در آن $\beta_{\parallel W}$ جمله پرش بین اتم‌های همسایه در راستای نردبان مرکزی در غیاب پیچش، κ ضریب تغییر قدرت همپوشانی اربیتال‌های اتم‌های همسایه و n یک عدد صحیح است. در واقع، با در نظر گرفتن رابطه ی (۶)، در قسمتی از نردبان ایده‌آل (قسمت مرکزی) انرژی‌های پرش بین اتم‌ها در راستای نردبان، نسبت به قسمت‌های دیگر نردبان (قسمت هادی‌ها) تغییر می‌کند. این تغییر برای تمام انرژی‌ها یکسان بوده و فقط به n و κ بستگی دارد. حال می‌توان در رهیافت تنگابست،

بر این است که با استفاده از روش تابع گرین و با تکیه بر رهیافت تنگابست به این مسئله پرداخته شود.

۲. مدل‌سازی

مطابق شکل ۱، فرض می‌کنیم که قسمتی از یک شبکه نردبانی بسیار بلند (نامتناهی) واپیچیده است. بنابراین می‌توان برای این سامانه سه قسمت شامل هادی‌های نردبانی شکل سمت چپ و راست و قسمت واپیچیده ی مرکزی فرض نمود. هدف این بخش ارائه ی یک فرمول-بندی نظری برای محاسبه ی رسانش یا معادل آن ضریب عبور الکترونی چنین سامانه‌ای بر پایه ی نظریه ی تابع گرین در رهیافت تنگابست و با در نظر گرفتن تقریب همسایه اول است [۱۰]. بنا بر این توضیحات، هامیلتونی سامانه مورد بررسی به صورت زیر است

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_L + \mathbf{H}_{WL} + \mathbf{H}_W + \mathbf{H}_{WR} + \mathbf{H}_R, \quad (1)$$

که در آن $\mathbf{H}_{L(R)}$ هامیلتونی هادی چپ (راست)، $\mathbf{H}_{WL(R)}$ هامیلتونی اتصال سمت چپ (راست) و \mathbf{H}_W هامیلتونی بخش مرکزی است که در نمایش کوانتشی ثانی به صورت زیر هستند

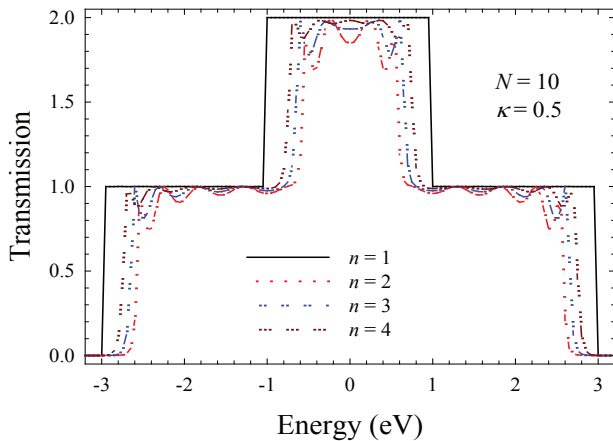
$$\mathbf{H}_L = \sum_{i=-\infty}^0 (\boldsymbol{\varepsilon}_i \mathbf{c}_i^+ \mathbf{c}_i + \boldsymbol{\beta}_{i,i+1} \mathbf{c}_{i+1}^+ \mathbf{c}_i + h.c.), \quad (2)$$

$$\mathbf{H}_R = \sum_{i=N+1}^{\infty} (\boldsymbol{\varepsilon}_i \mathbf{c}_i^+ \mathbf{c}_i + \boldsymbol{\beta}_{i,i+1} \mathbf{c}_{i+1}^+ \mathbf{c}_i + h.c.), \quad (3)$$

$$\mathbf{H}_W = \sum_{i=0}^N (\boldsymbol{\varepsilon}_i \mathbf{c}_i^+ \mathbf{c}_i + \boldsymbol{\beta}_{i,i+1} \mathbf{c}_{i+1}^+ \mathbf{c}_i + h.c.), \quad (4)$$

$$\mathbf{H}_{WL(R)} = \boldsymbol{\beta}_{WL(R)} \mathbf{c}_{0(N)}^+ \mathbf{c}_{1(N+1)} + h.c., \quad (5)$$

کمتر شده است. همچنین پیچش سامانه تقارن منحنی رسانش را نسبت به انرژی (صفر) به هم نمی‌زند. در واقع هرچه تعداد پیچ و تاب‌های سامانه بیش‌تر شود، تاثیر آن روی رسانش الکترونی سامانه بیش‌تر است.



شکل ۲: ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی برای یک نردبان ایده‌آل نامتناهی که ۱۰ پله آن با تناوب‌های مختلف (n) واپیچیده است

در شکل ۳ ضریب عبور الکترونی به ازای $n = 2$ و برای چند مقدار متفاوت κ ، بر حسب انرژی رسم شده است. برای سه تعداد مختلف اتم‌های بخش مرکزی ترسیم شده است. همان‌طوری که دیده می‌شود با افزایش مقدار κ ، پنجره‌ی انرژی نردبان واپیچیده و همچنین ناحیه‌ی همپوشانی دو کانال رسانش نسبت به حالت ایده‌آل کم‌تر شده است. دلیل این امر را می‌توان در کاهش جمله پرش در قسمت مرکزی نردبان جستجو کرد. زیرا طبق رابطه‌ی (۶)، با افزایش κ ، جمله پرش به صورت نمایی کم می‌شود. با نگاهی به قله‌های نمودار، می‌توان دریافت که مقدار رسانش در قله‌ها به خصوص در ناحیه‌ی میانی نمودار، به مقدار κ وابسته است. این در حالی است که این پارامتر تأثیری روی تعداد قله‌ها ندارد. بدیهی است با افزایش ضریب تغییر قدرت هم‌پوشانی اربیتالی در سامانه مرکزی، به علت کاهش پنجره انرژی ساز و کار رسانش در ابتدا و انتهای نوار انرژی نردبان‌های متصل تونل‌زنی خواهد بود.

هامیلتونی هر قسمت α از سامانه نردبانی متقارن را با اعمال یک تبدیل متعامد به هامیلتونی دو زنجیره‌ی مستقل (H_{α}^{\pm}) تبدیل کرد [11]. در این صورت وارون توابع گرین سامانه‌ی مرکزی هر یک از این دو مد تفکیک یافته (\pm) در حضور هادی‌های مربوطه به صورت زیر است

$$(G_{\pm}^{-1})_{i,j} = \delta_{i,j}(\epsilon - \Sigma_L^{\pm} \delta_{1,j} - \Sigma_R^{\pm} \delta_{N,j}) - (H_W^{\pm})_{i,j}, \quad (7)$$

که در آن ϵ انرژی الکترون، I ماتریس واحد و $\Sigma_{L(R)}^{\pm}$ ماتریس خودانرژی مدهای تفکیک شده سامانه مرکزی به دلیل حضور هادی سمت چپ (راست) است که عناصر آن توسط رابطه‌ی زیر قابل محاسبه است

$$\Sigma_{L(R)}^{\pm} = \frac{\beta_{WL(R)\parallel}^2}{\beta_{L(R)\parallel}} \left(\frac{\epsilon - \epsilon_{L(R)} \mp \beta_{L(R)\perp}}{2\beta_{L(R)\parallel}} \right) + \sqrt{\left(\frac{\epsilon - \epsilon_{L(R)} \mp \beta_{L(R)\perp}}{2\beta_{L(R)\parallel}} \right)^2 - 1}, \quad (8)$$

که در آن $\delta_{i,j}$ دلتای کرونکر است. بنابراین ضریب عبور متناظر برای مدهای تفکیک شده از رابطه زیر بدست می‌آید

$$T^{\pm}(\epsilon) = 4 \text{Im} \Sigma_L^{\pm} \text{Im} \Sigma_R^{\pm} |G_{1N}^{\pm}|^2, \quad (9)$$

$$T(\epsilon) = T^{+}(\epsilon) + T^{-}(\epsilon) \quad (10)$$

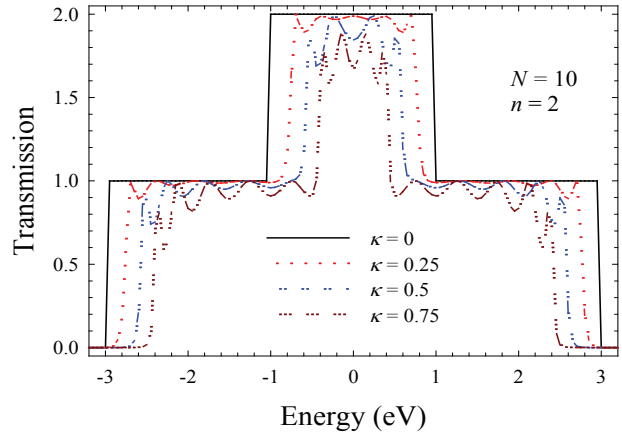
در بخش بعد با استفاده از روابط به دست آمده به محاسبه عددی ضریب عبور الکترونی یک شبکه نردبانی که قسمتی از آن واپیچیده است، می‌پردازیم.

۳. نتایج و بحث

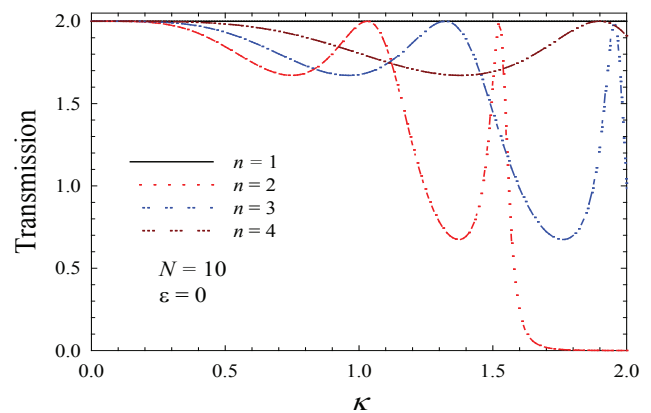
حال به کمک روابط بخش قبل به بررسی ضریب عبور الکترونی یک نردبان ایده‌آل نامتناهی که قسمتی از آن (۱۰ پله) واپیچیده است، می‌پردازیم. برای این منظور، تمام انرژی‌های جایگاهی سامانه را برابر با صفر و انرژی‌های پرش بین نزدیک‌ترین اتم‌ها را برابر با ۱eV در نظر می‌گیریم. در شکل ۲ نمودار ضریب عبور بر حسب انرژی به ازای $\kappa = 0.5$ ، برای چند مقدار متفاوت از دوره تناوب واپیچیدگی (n) رسم شده است. لازم به ذکر است که حالت $n = 1$ با توجه به رابطه‌ی (۶) هیچ‌گونه تغییری در مقدار جمله پرش نداده و حالت سامانه ایده‌آل را نتیجه می‌دهد. همان‌طور که دیده می‌شود با کاهش n ، وضوح بیشینه‌ها و کمینه‌های نمودار رسانش بهتر شده اما دامنه‌ی رسانش تشدید

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از روش تابع گرین و در رهیافت تنگابست، خواص ترابرد الکترونی یک ساختار نردبانی نامتناهی ایده‌آل که قسمتی از آن واپیچیده را مورد بررسی قرار دادیم. نتایج نشان می‌دهد که بیش‌تر شدن تعداد پیچ و تاب‌ها در نردبان تأثیر زیادی بر مقدار رسانش الکترونی سامانه دارد. با افزایش مقدار ضریب تغییر قدرت هم‌پوشانی اربیتال، پنجره انرژی قسمت واپیچیده نردبان و همچنین ناحیه هم‌پوشانی دو کانال رسانش نسبت به حالت ایده‌آل کم‌تر می‌شود. این پارامتر تأثیری روی تعداد قله‌ها ندارد ولی با افزایش مقدار آن به علت کاهش پنجره انرژی نردبان واپیچیده، ساز و کار رسانش در ابتدا و انتهای نوار انرژی نردبان‌های متصل تونل‌زنی است. همچنین با تغییر مقدار ضریب قدرت هم‌پوشانی اربیتال و تغییر میزان پیچش می‌توان مقدار رسانش را در انرژی فرمی نسبت به حالت ایده‌آل کنترل نمود.



شکل ۴۳ ضریب عبور الکترونی یک نردبان نامتناهی که ۱۰ پله آن واپیچیده، به صورت تابعی از انرژی به ازای چند مقدار متفاوت κ .



شکل ۴۴ ضریب عبور الکترونی یک نردبان نامتناهی که ۱۰ پله آن واپیچیده، به صورت تابعی از κ در انرژی صفر به ازای چند مقدار متفاوت n .

نمودار تغییرات ضریب عبور به صورت تابعی از κ در انرژی صفر، برای سه چند مقدار متفاوت n در شکل ۴ رسم شده است. مشاهده می‌شود که برای مقدار رسانش در انرژی صفر (یا همان انرژی فرمی سامانه)، بسته مقدار n رفتار رسانش به صورت تابعی از κ می‌تواند متفاوت باشد. با این حال در مقادیر کوچک κ رسانش مستقل از n است. بیش‌ترین تغییرات مربوط به مورد $n=2$ است که در آن فاصله‌ی اتم‌های نردبان میانی از هم بیشینه شده و در نتیجه انرژی پرش الکترونی کم‌ترین مقدار خواهد شد. نکته دیگری که در مورد $n=2$ ، قابل بیان است، صفر شدن رسانش در مقادیر $\kappa \geq 1.7$ است. در واقع این نمودار نشان می‌دهد که پیچش قسمتی از یک نردبان ایده‌آل تنها در صورتی بر مقدار رسانش در انرژی فرمی اثر خواهد داشت که مقدار κ بزرگتر از مقدار خاصی (مثلاً در اینجا $\kappa \approx 0.3$) باشد و با انتخاب بعضی مقادیر بخصوص برای آن می‌توان تغییرات مقدار رسانش را در انرژی فرمی نسبت به حالت ایده‌آل بیشینه کرد.

مراجع

- [1] J. A. McCammon and S. C. Harvey, *Dynamics of proteins and nucleic acids*. Cambridge University Press, 1988.
- [2] J. Zu, S. Luryi, and A. Zaslavsk, "Future Trends in Microelectronics: The Road Ahead," DTIC Document, 1999.
- [3] J. D. Watson and F. H. C. Crick, "Molecular structure of nucleic acids," *Nature*, vol. 171, no. 4356, pp. 737–738, 1953.
- [4] N. R. Walet and W. J. Zakrzewski, "A simple model of the charge transfer in DNA-like substances," *Nonlinearity*, vol. 18, no. 6, p. 2615, 2005.
- [5] B. Liang, H. Huang, Z. Liu, G. Chen, G. Yu, T. Luo, L. Liao, D. Chen, and G. Shen, "Ladder-like metal oxide nanowires: Synthesis, electrical transport, and enhanced light absorption properties," *Nano Res.*, vol. 7, no. 2, pp. 272–283, 2014.
- [6] M. Mardaani, H. Rabani, and A. Esmaeili, "An analytical study on electronic density of states and conductance of typical nanowires," *Solid State Commun.*, vol. 151, no. 13, pp. 928–932, 2011.
- [7] 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 Microstruct.*, vol. 59, pp. 106–114, 2013.
- [8] M. Mardaani, H. Rabani, and A. Mazloom Shahraki, "Electronic transport through a ladder nanostructure in the presence of network defects," *Iran. J. Phys. Res.*, vol. 12, no. 1, pp. 37–43, 2012.
- [9] S. Sil, S. K. Maiti, and A. Chakrabarti, "Ladder network as a mesoscopic switch: An exact result," *Phys. Rev. B*, vol. 78, no. 11, p. 113103, 2008.
- [10] S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge university press, 1997.
- [11] M. Mardaani and K. Esfarjani, "Some analytical results in phase coherent transport in quantum wire," *Phys. E Low-dimensional Syst. Nanostructures*, vol. 25, no. 1, pp. 119–130, 2004.

Electronic Transport of a Twisted Ladder Network

H. Rabani^{*1,2} | M. Mardaani^{1,2} | M. Zandiyan¹

1.Department of Physics, Faculty of Science, Shahrekord University P. O. Box 115, Shahrekord, Iran

2.Nanotechnology Research Center, Shahrekord University, 8818634141, Shahrekord, Iran

Abstract

In this paper, we study the electronic transport of an infinite ladder network that a part of it is twisted by using Green's function method at the tight-binding approach. For this purpose, we insert the effects of orbital overlapping of the neighbor atoms as well as the effect of twisting, in the tight-binding parameters of the twisted part. Moreover, due to the symmetric considerations of the system Hamiltonian, the under consider problem reduces to the problem of the two simple chains. The numerical results show that the conductance dramatically depends on amount of twisting and the coefficient of variation of orbital overlapping strength. Increasing of twisting in the center ladder causes the decreasing of its energy window and consequently the resonance region becomes smaller.

Keywords

electronic conductance, tight-binding, ladder network, twisting.