



Electronic transport and thermoelectric properties of a four atomic molecule within the tight-binding approach

M. Mardaani*, H. Rabani, T. Akbari Chaleshtori and M. Piramoon

Department of Physics, Faculty of Sciences, Shahrekord University, Shahrekord, Chaharmahal Bakhtiari

Received: 2026-06-29

Revised: 2026-08-09

Accepted: 2026-08-17

Abstract: In this paper, we investigate the transport and thermoelectric properties of a four-atom nanostructure in different configurations. As an impurity, one of its atoms is assumed to be different from the others. These calculations are performed using the Green's function technique within the tight-binding approach. In the hopping of electrons between atoms of the molecule, the electron wave functions undergo constructive and destructive interferences so that in some configurations and at certain energies, the local density of states finds drastic variation. Correspondingly, in the vicinity of these energies, a Fano resonance is observed in the electronic transmission coefficient curve. The variation in the electronic density of states and the existence of Fano resonance, in turn, lead to a nonzero Seebeck coefficient in the system. In unbranched or impure molecules, despite having a cyclic geometric structure, this phenomenon is not observed. In these molecules, when the number of branches connected to the molecule that has a cyclic structure is larger, the Seebeck coefficient has a higher value. Finally, we calculate and discuss the power and merit coefficients that are important from an experimental viewpoint for different possible molecule configurations. This research facilitates the preparation of compounds with a large Seebeck coefficient, which can lead to the preparation of thermoelectric converter devices with a high thermoelectric figure of merit.

Keywords: tight-binding, Green's function, transmission coefficient, Seebeck, Fano resonance.

Corresponding Author. Email: mohammad-m@sku.ac.ir

How to Cite This Article:

Mardaani M, Rabani H, piramoon M, Akbari Chaleshtori T. Electronic transport and thermoelectric properties of a four atomic molecule within the tight-binding approach. Nanomeghyas. 2026;():e738875 (In Persian). doi: 10.22034/ns.2026.2092891.1438



This is an open access article under the CC-BY license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

ترابرد الکترونی و خواص ترموالکتریکی پیکربندی‌های متفاوت یک مولکول چهار اتمی در رهیافت تنگابست

محمد مردانی* | حسن ربانی | تقی اکبری چالشتی | ملیکا پیرامون

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، چهارمحال و بختیاری

تاریخ دریافت: ۱۴۰۵/۰۴/۰۸ تاریخ بازنگری: ۱۴۰۵/۰۵/۱۸ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۵/۰۵/۲۶

چکیده: در این مقاله خواص ترابردی الکترونی و ترموالکتریکی یک نانو ساختار چهار اتمی در پیکربندی‌های متفاوت، که فرض شده یکی از اتم‌ها بعنوان ناخالصی با بقیه متفاوت است، مورد بررسی قرار می‌گیرد. محاسبات در رهیافت تنگابست و با استفاده از فن تابع گرین انجام شده‌اند. در پرش الکترون بین اتم‌های مولکول، توابع موج الکترونی دچار تداخل‌های سازنده و ویرانگر می‌شوند، به نحوی که در برخی از پیکربندی‌ها و در انرژی‌های خاصی، چگالی حالت‌های الکترونی محلی تغییرات شدیدی پیدا می‌کند. همزمان در منحنی ضریب عبور الکترون و در مجاورت این انرژی‌ها، تشدید فانو مشاهده می‌شود. تغییر در چگالی حالت‌های الکترونی و وجود تشدید فانو به نوبه خود ضریب سیبک در سامانه ایجاد می‌کند. این امر در مولکول‌های فاقد شاخه یا ناخالصی علی‌رغم دارا بودن ساختار هندسی حلقه‌ای مشاهده نمی‌شود. در این مولکول‌ها هر چه تعداد شاخه‌های متصل به مولکولی بیشتر باشد یا مولکول شامل ناخالصی باشد، ضریب سیبک دارای مقدار بیشتری است. همچنین ضرایب توان و شایستگی که از نظر تجربی مورد توجه هستند، برای پیکربندی‌های مختلف محاسبه و مورد بحث قرار گرفته است. این پژوهش ساخت ترکیباتی با ضریب سیبک را که می‌توانند به ساخت قطعات مبدل ترموالکتریک با ضریب شایستگی بالا منجر شوند، پیش‌بینی می‌کند.

واژگان کلیدی: تنگابست، تابع گرین، ضریب عبور، سیبک، تشدید فانو

نویسنده مسئول: mohammad-m@sku.ac.ir

نحوه استناد به این مقاله: مردانی محمد، ربانی حسن، پیرامون ملیکا، اکبری چالشتی تقی. ترابرد الکترونی و خواص ترموالکتریکی پیکربندی‌های متفاوت یک مولکول چهار اتمی در رهیافت تنگابست. Nanomeghyas. 1405;(e738875. doi: 10.22034/ns.2026.2092891.1438

این مقاله تحت مجوز دسترسی آزاد CC-BY منتشر شده است (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)



۱- مقدمه

امروزه با پیشرفت علم و فناوری، ساخت قطعات الکترونیکی در ابعاد نانو به طور شگفت‌انگیزی محقق شده و توسعه یافته است. از این رو بهینه‌سازی خواص الکتریکی قطعات ریزمقیاس مانند رسانش و هدایت گرمایی جایگاه ویژه‌ای در مطالعات محققان پیدا کرده است [۱-۳]. بدیهی است در عبور الکترون و فونون از یک سامانه موزوسکوپیک، تداخل کوانتومی رخ می‌دهد. اثر تداخل کوانتومی به صورت قله‌ها یا دره‌های اضافی در نمودار ضریب عبور دیده می‌شود که می‌تواند در عملکرد کلیدها، حسگرهای مولکولی و دستگاه‌های ترموالکتریک به کار گرفته شود [۴، ۵]. از طرفی می‌توان برای مطالعه ساختار الکترونی سامانه‌ها از اندازه‌گیری جریان ترموالکتریک استفاده کرد. چون کنترل آثار تداخل کوانتومی توسط پیکربندی ساختار مولکولی امکان‌پذیر است، این پدیده از مطالعات نظری و بنیادی فراتر رفته و جنبه‌ی کاربردی پیدا کرده است [۴]. پژوهشگران نظری برای یافتن منشأ این پدیده‌ها و مطالعه آثارشان از روش‌های متفاوتی مانند معادله‌ی ترابرد بولتزمن و فن تابع گرین استفاده می‌کنند [۲، ۶].

در این مقاله علت ظهور تداخل کوانتومی، وابستگی آن به پیکربندی هندسی مولکول و وجود یک اتم با انرژی جایگاهی متفاوت به عنوان ناخالصی مورد مطالعه قرار گرفته است و ضرایب عبور و ترموالکتریکی با استفاده از روش تابع گرین و در هیافت تنگابست بررسی می‌شوند. همچنین وابستگی این ضرایب به تعداد شاخه‌ها و وجود ناخالصی مورد بررسی قرار گرفته است.

در بخش بعد چارچوب نظری برای محاسبه‌ی ضرایب عبور و ترموالکتریکی از یک نانو ساختار چهار اتمی ارائه می‌شود. سپس نتایج محاسبات برای پیکربندی‌های متفاوت مولکول مورد بحث قرار می‌گیرد. بخش آخر نیز به جمع‌بندی مقاله تعلق دارد.

۲- فرمول‌بندی

مطابق شکل ۱، یک مولکول چهار اتمی که از طریق دو اتصال به دو هادی یکسان متصل است، در نظر می‌گیریم. هامیلتونی این سامانه به صورت زیر نوشته می‌شود [۷]

$$H = H_M + H_{ML} + H_L, \quad (۱)$$

که در آن H_M هامیلتونی مولکول، H_L و H_{ML} به ترتیب هامیلتونی‌های هادی‌ها و اتصال هادی‌ها به مولکول است. شکل آنها در تقریب تنگابست چنین است

$$H_M = \sum_{p=1}^4 \varepsilon_p |p\rangle\langle p| + \sum_{p,q=1}^4 \beta_{p,q} (|p\rangle\langle q| + |q\rangle\langle p|),$$

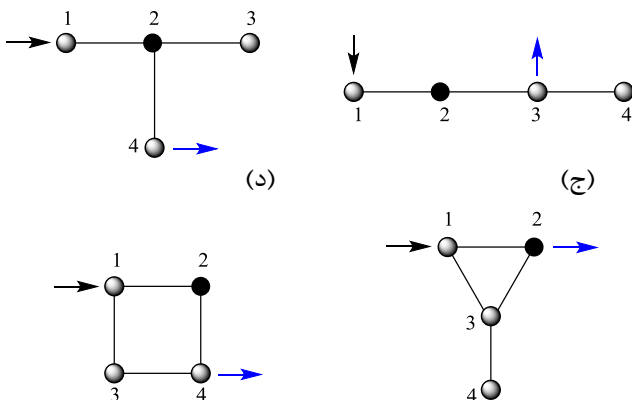
$$H_{ML} = \beta_C (|0\rangle\langle I| + |I\rangle\langle 0| + |5\rangle\langle J| + |J\rangle\langle 5|), \quad (۲)$$

$$H_L = \varepsilon_0 \sum_p |p\rangle\langle p| + \beta_0 \sum_p (|p\rangle\langle p \pm 1| + |p \pm 1\rangle\langle p|),$$

که در آن ε_p انرژی جایگاهی اتم p ام مولکول و $\beta_{p,q}$ انرژی پرش بین اتم‌های آن است. بدیهی است در مواردی که پیوند بین اتم‌ها نیست، مقدار $\beta_{p,q}$ صفر است. همچنین β_C انرژی پرش بین اتم هر هادی و مولکول در اتصال است. در مورد هادی‌ها پارامترهای تنگابست ε_0 و β_0 فرض می‌شوند. لازم به ذکر است که p در جمع‌زنی اول در هامیلتونی H_L ، همه‌ی اعداد صحیح بجز اعداد ۱ تا ۴ را اختیار می‌کند و در جمع‌زنی دوم نیز نباید اعداد داخل کت و براها ۱ تا ۴ باشند. فرض کرده‌ایم که یک هادی به جایگاه I ام و هادی دیگر جایگاه J ام متصل باشند (شماره‌گذاری اتم‌ها مطابق شکل ۱ انجام می‌شود). به منظور بررسی ضریب عبور الکترونی از این سامانه، تابع گرین بخش مرکزی در حضور هادی‌ها را از رابطه زیر محاسبه می‌کنیم [۳]

(ب)

(الف)

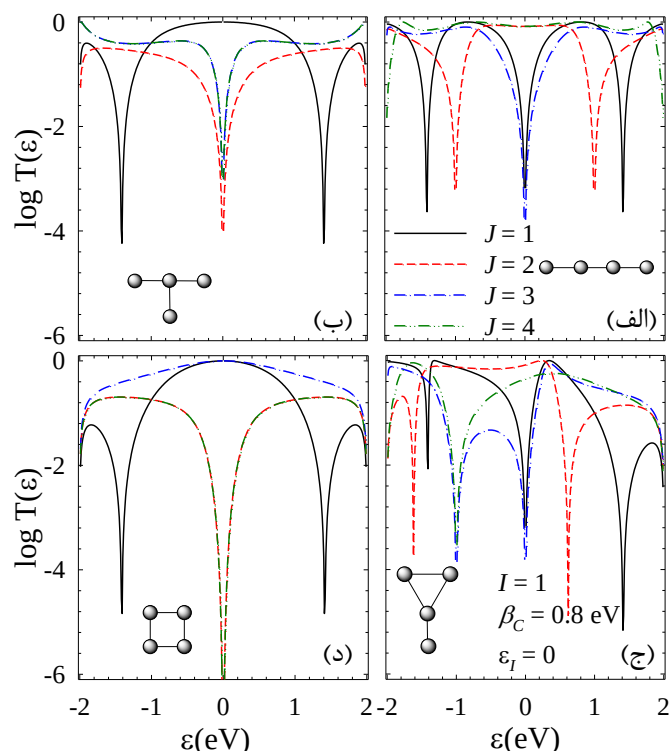


شکل ۱: چهار پیکربندی (الف خطی، (ب T شکل، (ج و (د حلقوی از یک مولکول چهار اتمی که از طریق دو اتم خود به دو هادی ساده متصل شده است. یکی از اتم‌ها (سیاه‌رنگ) به عنوان ناخالصی، متفاوت فرض شده و هادی‌ها با پیکان‌های ورودی و خروجی نشان داده شده است.

$$G_M = \frac{1}{\varepsilon I_{4 \times 4} - H_M - \Sigma}, \quad (۳)$$

که در آن ε انرژی الکترون، $I_{4 \times 4}$ ماتریس یک‌ه از مرتبه ۴ و Σ خودانرژی الکترونی سامانه مرکزی به دلیل وجود هادی‌های اتصال است و به شکل زیر محاسبه می‌شود [۸]

این شکل مشاهده می‌شود، محل قرار گرفتن هادی دوم، تغییرات زیادی در میزان ضریب عبور الکترونی ایجاد می‌کند. این امر ناشی از تفاوت هندسه پیکربندی‌ها است. با توجه به شکل ۲ (الف)، هر چقدر تعداد اتم‌های بین هادی‌ها در پیکربندی افزایش یابد، احتمال عبور الکترون کاهش می‌یابد. در این شکل به وضوح دیده می‌شود که مقدار ضریب عبور الکترون بین اتم‌های یک و سه نسبت به ضریب عبور بین اتم‌های یک و چهار کمتر می‌شود. متصل بودن هر دو هادی به اتم اول باعث افزایش ضریب عبور الکترونی شده است. زیرا در این مورد الکترون‌های بیشتری در فرآیند عبور مشارکت می‌کنند و در نتیجه مقدار ضریب عبور افزایش می‌یابد. در این شکل، منحنی‌های لگاریتم ضریب عبور الکترونی برحسب



شکل ۲: (رنگی در نسخه برخط) لگاریتم ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی از مولکولی با چهار اتم با پیکربندی‌های مختلف. در این شکل‌ها یک هادی به اتم شماره یک و هادی دیگر به همان اتم و سایر اتم‌های دیگر مطابق با شماره‌گذاری شکل ۱ متصل شده است.

انرژی، دارای تقارن حول انرژی صفر هستند و وجود شاخه در مولکول تأثیری در تقارن منحنی ندارد. شکل ۲ (ب) برای مورد مولکول T شکل است که نشان می‌دهد ضریب عبور دارای تغییرات کمتری نسبت به مورد شکل ۲ (الف) است و به نظر تداخل ویرانگر کمتری رخ داده است. در شکل ۲ (ج) در صورت وجود یا عدم وجود ناخالصی، منحنی ضریب عبور حول $\varepsilon = 0$ متقارن نیست و امواج الکترونی که از مسیرهای مختلف در مولکول گذر می‌کنند، باعث تداخل‌های سازنده و ویرانگری می‌شوند که گذر الکترون را در هر مورد متأثر می‌سازند [۱۱]. بنابراین منحنی ضریب عبور با وجود شاخه در مولکول دیگر متقارن نیست. در این مورد نسبت به وقتی که شاخه

$$\Sigma = \frac{\beta_C^2}{\beta_0^2} \left(\varepsilon - \varepsilon_0 - \sqrt{(\varepsilon - \varepsilon_0)^2 - 4\beta_0^2} \right), \quad (4)$$

و با کمک رابطه فیشر-لی ضریب عبور الکترونی به تابع گرین سامانه مرتبط می‌شود [۹]:

$$T_{el}(\varepsilon) = \left| \text{Im} \Sigma (G_M)_{I,J} \right|^2, \quad (5)$$

که در آن، $(G_M)_{I,J}$ درایه واقع در سطر I ام و ستون J ام ماتریس تابع گرین است. با کمک روابط ترمودینامیکی می‌توانیم ضرایب سیبک، توان و شایستگی را به ترتیب را به صورت زیر محاسبه کنیم [۱۰، ۵]

$$S = -\frac{1}{eT} \frac{L_1}{L_0}, \quad (6)$$

$$PF = \frac{1}{T} \frac{L_1^2}{L_0}, \quad (7)$$

$$zT = \frac{L_1^2}{L_0 L_2 - L_1^2}, \quad (8)$$

که در آن e بار الکترون و T دمای مطلق هستند. همچنین ضرایب اوزنرگر از رابطه زیر محاسبه می‌شوند

$$L_n = \int_{-2\beta_0}^{2\beta_0} d\varepsilon T_{el}(\varepsilon) (-\partial f(\varepsilon)/\partial \varepsilon) (\varepsilon - \varepsilon_F)^n \quad (9)$$

که در آن ε_F انرژی فرمی است که در اینجا به دلیل فلزی بودن هادی‌ها صفر اختیار می‌شود.

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp(\varepsilon / k_B T) + 1}, \quad (10)$$

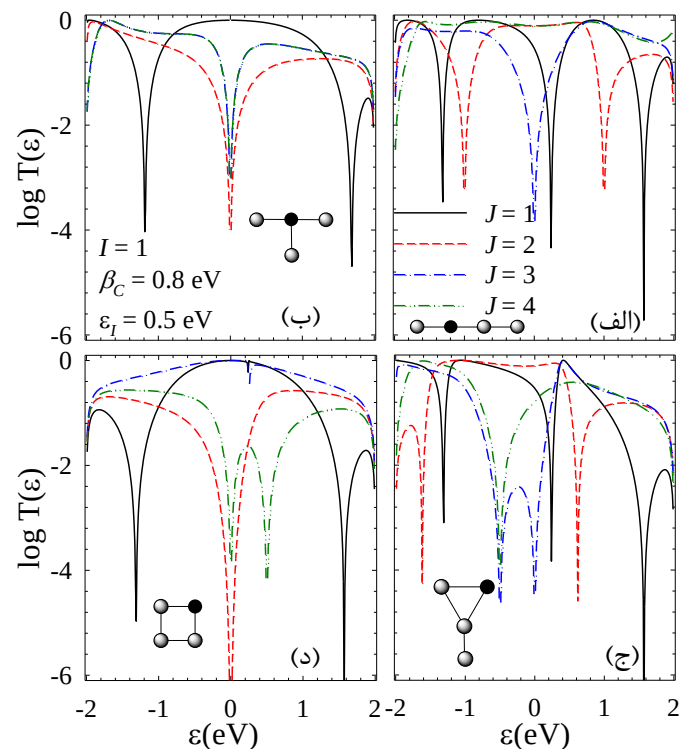
که در اینجا k_B ثابت بولتزمن است.

۳- نتایج و بحث

مطابق شکل ۱، یک هادی به اتم شماره یک و هادی دیگر به ترتیب به اتم‌های شماره یک، دو، سه و چهار مولکول متصل می‌شود. برای سادگی انرژی پرش بین اتم‌های مولکول مورد نظر را مساوی با انرژی پرش بین اتم‌های هادی‌ها و برابر با ۱ eV در نظر می‌گیریم. همچنین انرژی‌های جایگاهی اتم‌های سامانه و پرش در اتصال‌ها به ترتیب صفر و ۰.۸ eV فرض می‌شود. همچنین یکی از اتم‌ها بعنوان ناخالصی می‌تواند دارای انرژی جایگاهی غیر صفر باشد. با اعمال یک ولتاژ گیت به یک اتم، آن اتم می‌تواند مانند ناخالصی رفتار کند و انرژی جایگاهی آن اتم نسبت به بقیه اتم‌ها دیگر جابه‌جا شود.

شکل ۲ لگاریتم ضریب عبور الکترون سامانه با چهار پیکربندی مد نظر، بین اتم شماره یک با خودش و سایر اتم‌ها را نشان می‌دهد. همان‌طور که در

وجود نداشته باشد، الکترون‌های کمتری در فرآیند عبور مشارکت می‌کنند و میزان ضریب عبور نسبت به سایر موارد کمتر است. در شکل ۲ (د) منحنی-های ضریب عبور ضریب عبور الکترونی و لگاریتم آن حول انرژی صفر متقارن هستند و علی‌رغم وجود پیکربندی حلقه‌ای محل اتصال هادی‌ها به اتم‌های مولکول در پیکربندی‌های مختلف فقط باعث تغییر در اندازه ضریب عبور

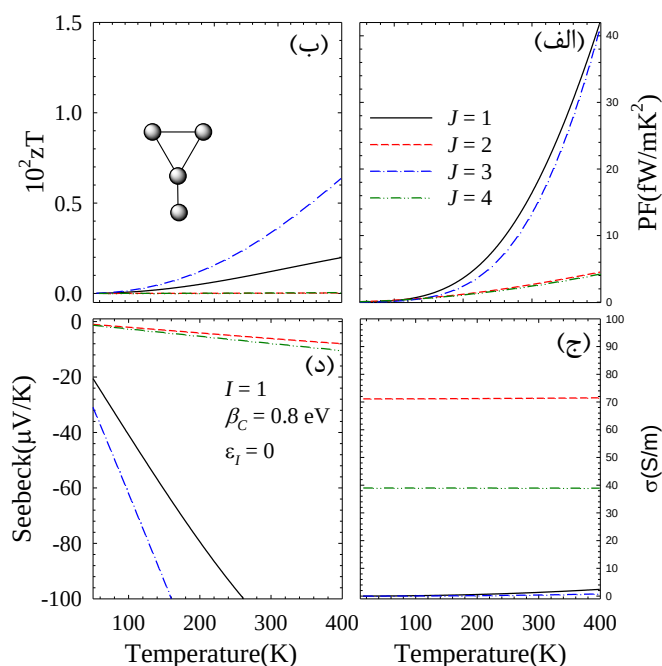


شکل ۳: (رنگی در نسخه برخط) لگاریتم ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی از مولکولی با چهار اتم در پیکربندی‌های متفاوت. در اینجا اتم شماره دو، اتم ناخالصی است. در این شکل‌ها یک هادی به اتم شماره یک و هادی دیگر به همان اتم و سایر اتم‌های دیگر مطابق شماره‌گذاری شکل ۱ متصل شده است.

الکترونی می‌شود. ولی تقارن منحنی‌های ضریب عبور حفظ می‌شود. در ادامه فرض می‌کنیم اتم شماره ۲ دارای انرژی جایگاهی متفاوتی نسبت به سایر اتم‌های مولکول باشد که این موضوع را می‌توان معادل با وجود ناخالصی در مولکول دانست. شکل ۳ لگاریتم ضریب عبور الکترونی آن را در پیکربندی‌های متفاوت نشان می‌دهد. در این شکل دیده می‌شود که محل قرار گرفتن هادی‌ها تغییرات زیادی در میزان ضریب عبور ایجاد می‌کند. با افزایش انرژی جایگاهی در اتم شماره دو که به معنی افزایش قدرت پتانسیل ناخالصی است، ضریب عبور کاهش می‌یابد. همچنین منحنی‌های لگاریتم ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی، دارای تقارن حول انرژی صفر نیستند، که این عدم تقارن ناشی از وجود ناخالصی، در مولکول است. در شکل ۳ (ب)، هر چقدر انرژی جایگاهی ناخالصی افزایش یابد ضریب عبور الکترونی کاهش می‌یابد. در غیاب ناخالصی، منحنی‌های لگاریتم ضریب عبور بر حسب

انرژی، دارای تقارن حول $\varepsilon = 0$ هستند ولی حضور ناخالصی به کاهش ضریب عبور منجر شده است. در شکل ۳ (ج) در صورت وجود ناخالصی، عدم تقارن منحنی حول انرژی صفر بارزتر است. در این مورد تداخل‌های سازنده و ویرانگر بین امواج الکترونی که از مسیرهای مختلف در مولکول می‌گذرند، متأثر از وجود اتم ناخالصی صورت می‌گیرد. در شکل ۳ (د) منحنی‌های لگاریتم ضریب عبور نسبت به موارد مربوط به شکل ۲ (د)، مقدار کمتری دارند. در این مورد و در حضور ناخالصی، منحنی‌ها حول انرژی صفر متقارن نیستند و وجود ناخالصی همانند یک شاخه برای موارد شکل ۳ (ج) باعث کاهش ضریب عبور الکترون از سامانه می‌شود. در این مورد تغییر سریع در افزایش و کاهش متوالی منحنی لگاریتمی دلالتی بر وجود تشدید فانو در منحنی ضریب عبور است [۱۴-۱۲]. تشدید فانو نتیجه‌ی برهمکنش کوانتومی بین یک تراز انرژی گسسته‌ی ناشی از اتم ناخالصی با انرژی جایگاهی متفاوت با یک طیف پیوسته از حالت‌های ناشی از ساختار حلقه‌ای یا زنجیره‌ای مولکول است. این برهمکنش باعث می‌شود که تابع موج الکترون در نزدیکی انرژی تراز گسسته، تداخل سازنده یا ویرانگر با امواج پیوسته پیدا کند. در واقع، ناخالصی به عنوان یک پراکنده‌کننده‌ی تشدید عمل می‌کند که مسیرهای تداخلی مختلف را با شدتی وابسته به انرژی ترکیب می‌کند و همین وابستگی انرژی باعث ایجاد عدم تقارن در طیف می‌شود. اثرات تداخل کوانتومی می‌توانند تا بیش از یک مرتبه‌ی بزرگی، تغییرات رسانش را ایجاد کنند [۱۵، ۱۶].

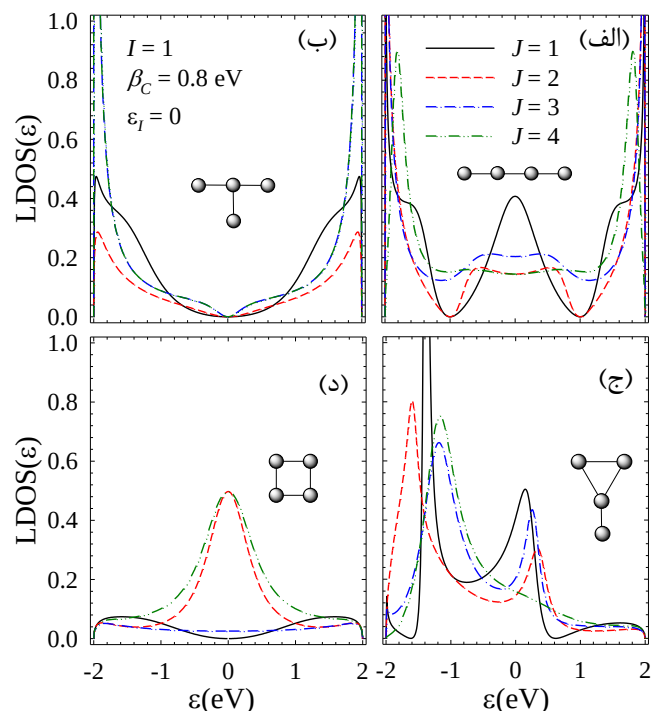
برای فهم بهتر فیزیک مسئله، در شکل‌های ۴ و ۵ چگالی حالت‌های محلی الکترونی روی اتم دوم مولکول را به صورت تابعی از انرژی به ترتیب برای دو مورد وجود و عدم وجود ناخالصی آورده‌ایم. اولاً در غیاب ناخالصی در تمامی پیکربندی‌ها بجز مورد مثلی شاخه‌دار منحنی‌ها نسبت به انرژی صفر متقارند. نکته قابل ملاحظه شکست این تقارن در حضور ناخالصی است که به وضوح در شکل ۵ قابل مشاهده است. دلیل اینکه در غیاب ناخالصی در پیکربندی مثلی شاخه‌دار (شکل ۴ ج)، تقارن وجود ندارد، این است که شاخه متصل به مثلث باعث تغییر انرژی جایگاهی اتم متصل به آن می‌شود و مانند یک ناخالصی عمل می‌کند [۱۷]. از نظر فیزیکی ناخالصی مانند یک سد یا چاه کوانتومی عمل می‌کند و بسته به مقدار انرژی جایگاهی اتم ناخالصی، چگالی حالت‌های الکترونی را تحت تأثیر قرار می‌دهد.



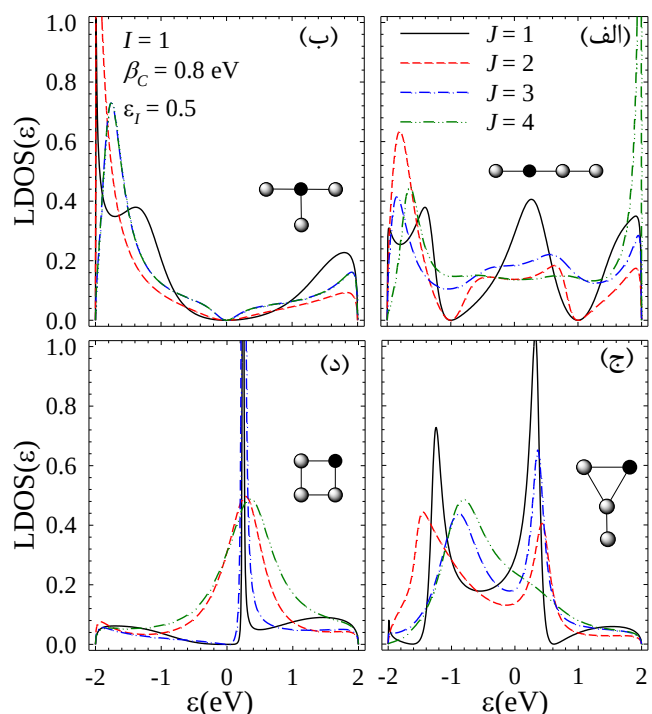
شکل ۶: (رنگی در نسخه برخط) منحنی‌های ضرایب شایستگی، توان، سیبیک و رسانندگی الکتریکی برحسب دما وقتی برای پیکربندی مثلثی شاخه‌دار ترسیم می‌شوند. در این شکل‌ها ضرایب وقتی یکی از هادی‌ها به اتم اول و هادی دیگر به همان اتم و سایر اتم‌ها مطابق شماره‌گذاری شکل ۱ متصل شده است، بر حسب دما ترسیم شده است.

در شکل ۶، منحنی‌های ضرایب شایستگی، توان، سیبیک و رسانندگی الکتریکی بر حسب دما برای پیکربندی شکل ۱ (ج) دیده می‌شوند. مقدار این ضرایب برای سایر پیکربندی‌ها در غیاب ناخالصی، صفر است. علت وجود ضرایب غیر صفر در این پیکربندی تداخل بین امواج الکترونی از مسیرهای داخل حلقه و شاخه متصل به آن است که باعث ایجاد تغییر شدید در چگالی حالت‌های محلی می‌شود. در همان انرژی، نمودار ضریب عبور الکترون دارای تشدید فانو است. در این صورت، ضریب عبور در انرژی خاصی افزایش یافته و پیرو آن ضریب سیبیک غیر صفر می‌شود.

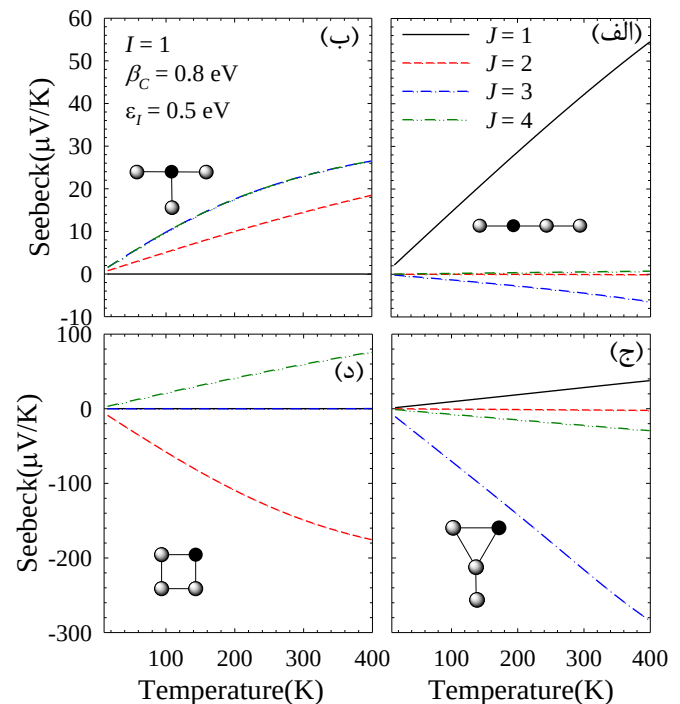
در شکل ۷، منحنی‌های ضریب سیبیک بر حسب دما برای پیکربندی‌های مختلف شکل ۱ با فرض متفاوت بودن اتم شماره دو نمایش داده شده‌اند. همان‌طور که در این شکل‌ها مشاهده می‌شود، وجود ناخالصی باعث تداخل امواج الکترونی عبوری از مولکول در پیکربندی‌های مختلف می‌شود. حتی در غیاب وجود حلقه، چگالی حالت‌ها در انرژی‌های خاصی افزایش شدید یافته و پیرو آن تشدید فانو در ضریب عبور رخ داده و منجر به ایجاد



شکل ۴: (رنگی در نسخه برخط) چگالی حالت‌های محلی الکترونی روی اتم دوم مولکول به صورت تابعی از انرژی. در اینجا یک هادی به اتم یک و هادی دیگر به همان اتم و سایر اتم‌های دیگر مطابق شماره‌گذاری شکل ۱ متصل شده است.



شکل ۵: (رنگی در نسخه برخط) چگالی حالت‌های محلی الکترونی روی اتم دوم مولکول به صورت تابعی از انرژی. در اینجا اتم شماره دو ناخالصی است. یک هادی به اتم شماره یک و هادی دیگر به همان اتم و سایر اتم‌های دیگر در پیکربندی نشان داده شده با طرح‌واره شکل ۱ متصل شده است.

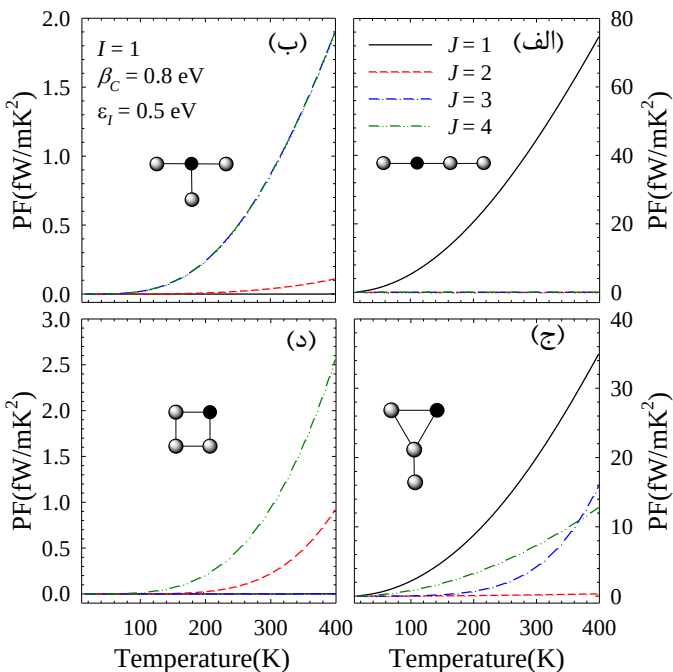


شکل ۷ (رنگی در نسخه برخط) این شکل منحنی‌های ضریب سبیک را بر حسب دما برای پیکربندی‌های نمایش داده در شکل ۱ نشان می‌دهد. که در آنها یک هادی به اتم شماره یک و هادی دیگر به همان اتم و سایر اتم‌ها مطابق شماره گذاری شکل ۱ متصل شده است و فرض کرده‌ایم اتم شماره دو انرژی جایگاهی متفاوتی نسبت به سایر اتم‌های مولکول داشته باشد، که این امر معادل وجود ناخالصی در جایگاه اتم شماره دو است.

ضریب سبیک غیر صفر می‌شود. وجود حلقه مسیرهای متفاوتی برای حرکت موج الکترونی فراهم می‌کند (بر خلاف مولکول خطی) و الکترون می‌تواند از دو مسیر بالا و پایین حلقه به مقصد برسد. امواج الکترونی گذرا از این دو مسیر با هم تداخل کرده و در نتیجه تشدید در ضریب عبور ایجاد می‌شود. شیب مثبت منحنی‌های سبیک شکل ۷، نشان دهنده تداخل سازنده بین دو مسیر الکترون یکی شامل اتم ناخالصی و دیگری مسیر فقدان آن است در این موارد با افزایش انرژی، فاز نسبی موج‌ها طوری تغییر می‌کند که همپوشانی موجی بیشتر می‌شود و ضریب عبور افزایش می‌یابد. شیب منفی این منحنی‌ها نشان دهنده تداخل ویرانگر است. یعنی فاز نسبی به نقطه‌ای رسیده که دو مسیر یکدیگر را خنثی می‌کنند و ضریب عبور الکترونی کاهش می‌یابد. چون مشتق ضریب عبور نسبت به انرژی به شدت به فاز خودانرژی و انرژی پرش اتصال بستگی دارد، این تغییر شیب، نتیجه مستقیم تغییر سریع فاز تابع گرین در حضور ناخالصی نسبت به انرژی در نزدیکی تراز گسسته است [۱۸]. در پیکربندی‌های (ج) و (د) از شکل ۱ وجود حلقه بدون اتم ناخالصی، باعث می‌شود منحنی ضریب عبور معمولاً نوسانات متقارن (قله‌های برت-ویگنر) داشته باشد، که شیب مثبت و منفی در دو طرف قله‌ها و دره‌ها متقارن است [۱۹]. ناخالصی می‌تواند به عنوان یک مرکز پراکندگی تشدید عمل کند که مسیرهای تداخلی مختلف را با شدت وابسته به انرژی ترکیب می‌کند. به همین دلیل، همان‌طور که در شکل ۵ دیده می‌شود،

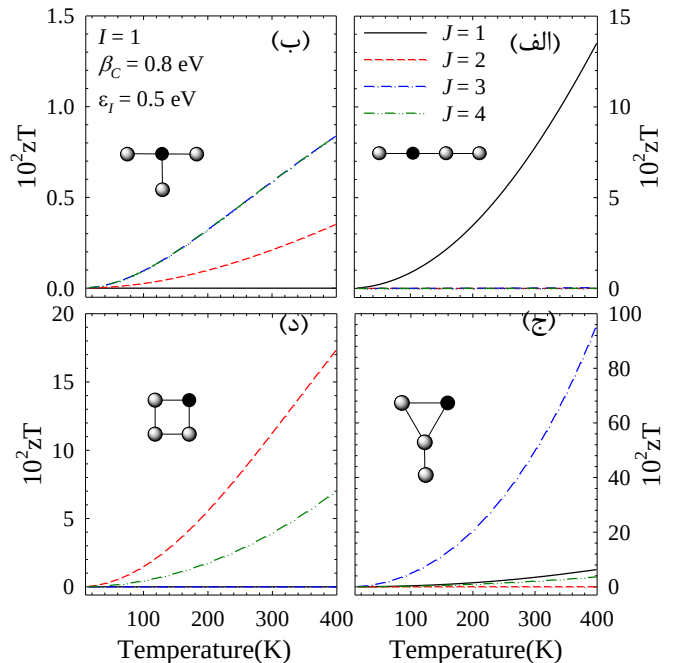
برخی از قله‌ها یا دره‌ها (دست‌کم در مقیاس انرژی نزدیک تراز ناخالصی) به شدت نامتقارن می‌شوند و شیب‌های بسیار تند مثبت و منفی در کنار هم ظاهر می‌شوند که به ضریب سبیک غیر صفر منجر می‌شوند. همان‌طور که در شکل ۷ مشاهده می‌شود، علامت ضریب سبیک می‌تواند وابسته به ساختار ترازهای انرژی که از حلقه و یا ناخالصی‌ها ناشی می‌شوند، این کمیت می‌تواند هر عدد حقیقی باشد و مقدارش برای سامانه‌های واقعی مانند حلقه‌های مزوسکوپی، نقاط کوانتومی، نانوحلقه‌های با ناخالصی، متفاوت است، اما امکان رسیدن به مقادیر خیلی بزرگتر یا کوچکتر برای ضریب سبیک وجود دارد. محدوده عددی این ضریب به نوع ماده، دما و ساختار وابسته است. برای فلزاتی مثل مس و آلومینیوم اغلب زیر ۱۰ میکرو ولت بر کلین است. زیرا در فلزات چگالی حالت در سطح فرمی هموار است و تغییر زیادی ندارد و برای سیلیکون از ۳۰۰- تا ۱۰۰۰ میکرو ولت بر کلین و برای نیمرساناهای نوع p از ۵۰۰- تا ۶۰۰ میکرو ولت بر کلین نیز گزارش شده است. این کمیت برای نانوساختارها و سامانه‌های کوانتومی می‌تواند بسیار بزرگ شود ($10^3 \square 10^5 \mu V/K$) و برای حلقه‌های با ساختار نانو و ناخالصی و نقطه کوانتومی با تشدید فانو تا $10^4 \mu V/K$ گزارش شده است [۲۰، ۱۸]. همچنین در نیمه‌هادی‌های بسیار آلائیده مقدارش به مقادیر ضریب سبیک در فلزات نزدیک می‌شود.

در شکل ۸، ضریب توان پیکربندی‌های متفاوت مولکول را به صورت تابعی از دما در حضور ناخالصی ترسیم کرده‌ایم. در اینجا نیز همانند شکل-های پیشین، یک هادی را به اتم اول مولکول و هادی دیگر را به اتم J متصل کرده‌ایم. مقدار عددی ضریب توان در سامانه‌های مولکولی می‌تواند مقادیر کوچکی در حد فمتو نیز اختیار کند [۲۱]. دیده می‌شود که با افزایش دما و به نوبه آن افزایش تعداد حامل‌ها مقدار ضریب توان افزایش می‌یابد.



شکل ۸: (رنگی در نسخه برخط) ضریب توان بر حسب دما برای مولکول متصل به دو هادی در چهار پیکربندی‌های متفاوت. یک هادی از جایگاه اتم

شماره یک و دیگری از جایگاه J به مولکول متصل شده است. شماره-گذاری آنها مطابق شکل ۱ است و اتم شماره ۲ مولکول با دیگر اتمها تفاوت داشته و نقش ناخالصی را بازی می کند.



شکل ۹: (رنگی در نسخه برخط) ضریب شایستگی بر حسب دما برای مولکول متصل به دو هادی در چهار پیکربندیهای متفاوت. یک هادی از جایگاه اتم شماره یک و دیگری از جایگاه J مطابق شماره گذاری شکل ۱ به مولکول متصل شده است. همچنین انرژی جایگاهی اتم شماره ۲ بعنوان ناخالصی با انرژی جایگاهی دیگر اتمهای مولکول تفاوت دارد.

پیکربندیهای متفاوت و محل اتصالها مقدار ضریب توان را تغییر می دهد که دلیل آن وقوع تداخلهای کوانتومی بخصوص برای مواردی است که هم حلقه و هم شاخه هر دو در ساختار وجود داشته باشند.

در شکل ۹، منحنی ضریب شایستگی پیکربندیهای متفاوت مولکول را به صورت تابعی از دما در حضور ناخالصی آورده ایم. یکی از هادیها به اتم اول و هادی دیگر به اتم J ام متصل شده است. ضریب شایستگی شاخصی از کارایی یک سامانه ترموالکتریکی است که نشان می دهد تا چه مقدار جریان الکتریکی در برابر انتقال حرارت ایجاد می شود [۲]. از این رو مقدار بالاتر آن نشان دهنده عملکرد بهتر سامانه در تبدیل انرژی گرمایی به انرژی الکتریکی است. در اینجا نیز مانند ضریب توان، ضریب شایستگی با نسبت به افزایش دما رفتاری صعودی داشته و مقدار آن برای پیکربندی حلقوی و شاخه دار بیشتر از سایر پیکربندیها است.

۴. نتیجه گیری

بطور خلاصه بررسی ضرایب ترابردی و ترموالکتریکی مربوط به یک مولکول چهار اتمی در پیکربندیهای متفاوت شامل یک ناخالصی که از دو جایگاه

اختیاری به دو هادی ساده متصل شده است، منجر به نتایج زیر می شود. وجود ناخالصی به تنهایی، حتی در غیاب ساختار حلقه ای، می تواند باعث ایجاد تشدید فانو در ضریب عبور الکترونی شده و به ضریب سیبک غیرصفر منتج شود. در حالی که در مولکولهای بدون ناخالصی، تنها پیکربندی حلقه ای شاخه دار چنین رفتاری را از خود نشان می دهند، در واقع وجود شاخه پراکندگی امواج الکترونی را افزایش می دهد. این یافته، شناخت قبلی را که تشدید فانو را بیشتر به وجود حلقه ها نسبت می دادند [۵]، گسترش می دهد. وجود تشدید فانو به خودی خود تضمین کننده ضریب سیبک غیرصفر نیست. در سامانه ای مورد بررسی وقتی که تشدید فانو وجود دارد، ضریب سیبک غیر صفر می شود. نشان داده شده که وجود ناخالصی، حتی در پیکربندیهای متقارن هندسی، تقارن طیف رسانش حول انرژی جایگاهی اتمهای میزبان را از بین برده و این عدم تقارن شرط لازم برای وجود ضریب سیبک غیر صفر است. در ساختارهای حلقه ای، الکترون می تواند از مسیرهای متفاوت عبور کند. بسته به مقدار اختلاف فاز تابع موج الکترون عبوری بین این مسیرها، تداخل سازنده یا ویرانگر رخ می دهد. وجود ناخالصی باعث می شود که فازهای کسب شده در مسیرها دیگر متقارن نباشند و تشدید فانو شکل بگیرد. در پیکربندی خاص که منحنی ضریب عبور آن دارای تشدید فانو است، اغلب شاهد ضریب سیبک غیرصفر هستیم. بنابراین با انتخاب پیکربندی خاص که منحنی ضریب عبور آن دارای تشدید فانو باشد، می توان مواد ترموالکتریک کارآمدی طراحی کرد. در این پیکربندیها هر چه تعداد شاخه ها بیشتر شود یا ناخالصی در ترکیب وجود داشته باشد، ضریب سیبک سامانه مقدار بزرگتری خواهد داشت [۱۴، ۱۳]. همان طور که انتظار می رود نتایج نشان می دهد که ضرایب توان و شایستگی نیز همانند ضریب سیبک رفتار می کنند. رهیافت و نتایج این مقاله ممکن است در طراحی حس گر ها و کلیدهای ترموالکتریک و همچنین پیش بینی خواص آنها مفید باشد.

۵. مراجع

- [1] J.J. Ramsden, "Nanotechnology: An Introduction", Elsevier, 2011. DOI: 10.1016/C2014-0-03912-3
- [2] D.K. Ferry, S.M. Goodnick, J. Bird, "Transport in Nanostructures", Cambridge University Press, 2009. DOI:10.1017/CBO9780511840463
- [3] S. Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems", Cambridge Univ. Press (1995). DOI: 10.1017/CBO9780511805776
- [4] S. Hershfield, K.A. Muttalib and B.J. Nartowt, "Thermoelectric power of a quantum dot in the

caloritronic performance”, arXiv preprint, 2026. DOI:10.48550/arXiv.2605.27181

[13] J.A. Briones-Torres, R. Pérez-Álvarez, S. Molina-Valdovinos and I. Rodríguez-Vargas, “Enhancement of the thermoelectric properties in bilayer graphene structures induced by Fano resonances”, Scientific Reports, 6, 13872, 2021. DOI: 10.1038/s41598-021-93220-w

[14] P. Yang, H. Pan, J. Li, Y. Wang and S. Hou, “Strategic design of Fano resonance in molecular junctions”, Journal of Materials Chemistry C, 14, 630-669, 2026. DOI: 10.1039/D5TC04567A

[15] D.A. Lovey and R.H. Romero, “Quantum interference through gated single-molecule junctions”, Chemical Physics Letters, 530, 86-92, 2012. DOI: 10.1016/j.cplett.2012.01.050

[16] P. Seyfizadeh and A. Phirouznia, “Quantum interference effects in graphene based side-coupled quantum ring: A non-equilibrium Green’s function approach”, Chemical Physics, 595, 112703. 2025. DOI: 10.1016/j.chemphys.2025.112345

[17] M Mardaani, H Rabani, A Esmaili, “An analytical study on electronic density of states and conductance of typical nanowires”, Solid state communications, 151, 928-932, 2011. DOI: 10.1016/j.ssc.2011.04.010

[18] K.R. Das and S. Dutta, “Quantum Interference Driven Electron Transport through Fano-Anderson Systems”, arXiv preprint, 2025. DOI: 10.48550/arXiv.2412.16529

[19] M. Saiz-Bretin A.V. Malyshev, P.A. Orellana, and F. Dominguez-Adame, “Enhancing thermoelectric properties of graphene quantum rings”, Physical Review B, 91, 085431, 2015. DOI: 10.1103/PhysRevB.91.085431

Kondo regime”, Physical Review B, 88, 085426, 2013. DOI:10.1103/PhysRevB.88.085426

[5] D. Nozaki, S.M. Avdoshenko, H. Sevinçli and G. Cuniberti, “Comparison of electron and phonon transport in molecular junctions”, Journal of Applied Physics, 116, 074308, 2014. DOI: 10.1063/1.4893189

[6] T. Markussen and K.S. Thygesen, “Temperature effects on quantum interference in molecular junctions”, Physical Review B, 89, 085420, 2014. DOI: 10.1103/PhysRevB.89.085420

[7] G. Grosso and G.P. Parravicini, “Solid State Physics”, Academic Press, London, 2000. DOI: 10.1016/B978-012304460-0/50001-3

[8] H. Rabani and M. Mardaani, “Electronic transport of a twisted ladder network”, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 67, 112-115, 2015. DOI: 10.1016/j.physe.2014.11.015

[9] D.S. Fisher and P.A. Lee, “Relation between conductivity and transmission matrix”, Physical Review B, 23, 6851, 1981. DOI:10.1103/PhysRevB.23.6851

[10] A. Zevalkink, D.M. Smiadak, J.L. Blackburn and A.J. Ferguson, “A practical field guide to thermoelectrics: Fundamentals, synthesis, and characterization”, Applied Physics Reviews, 5, 2018. DOI: 10.1063/1.5021094

[11] E.G. Emberly and G. Kirczenow, “Antiresonances in molecular wires”, Journal of Physics: Condensed Matter, 11, 6911-6920, 1999. DOI: 10.1088/0953-8984/11/35/315

[12] P. Senapati and K. Pradhan, “Microwave-driven Floquet-Fano interference in a ring-chord quantum dot structure for enhanced spin-

[20] G. Latronico, H. Asnaashari Eivari and P. Mele, “Insights into One-Dimensional Thermoelectric Materials: A Concise Review of Nanowires and Nanotubes”, *Nanomaterials*, 14, 1272, 2024. DOI: 10.3390/nano14151234

[21] C.L. Dai, W.H. Li, T. Ono and C.C. Hsu, “Design and fabrication of CMOS-based thermoelectric microgenerators with enhanced power factor”, *IEEE Sensors Journal*, 25, 41164-41173, 2025. DOI:10.1109/JSEN.2025.3617533



Electronic transport and thermoelectric properties of a four atomic molecule within the tight-binding approach

M. Mardaani*, H. Rabani, T. Akbari Chaleshtori and M. Piramoon

Department of Physics, Faculty of Sciences, Shahrekord University, Shahrekord, Chaharmahal Bakhtiari

Received: 2026-06-29

Revised: 2026-08-09

Accepted: 2026-08-17

Abstract: In this paper, we investigate the transport and thermoelectric properties of a four-atom nanostructure in different configurations. As an impurity, one of its atoms is assumed to be different from the others. These calculations are performed using the Green's function technique within the tight-binding approach. In the hopping of electrons between atoms of the molecule, the electron wave functions undergo constructive and destructive interferences so that in some configurations and at certain energies, the local density of states finds drastic variation. Correspondingly, in the vicinity of these energies, a Fano resonance is observed in the electronic transmission coefficient curve. The variation in the electronic density of states and the existence of Fano resonance, in turn, lead to a nonzero Seebeck coefficient in the system. In unbranched or impure molecules, despite having a cyclic geometric structure, this phenomenon is not observed. In these molecules, when the number of branches connected to the molecule that has a cyclic structure is larger, the Seebeck coefficient has a higher value. Finally, we calculate and discuss the power and merit coefficients that are important from an experimental viewpoint for different possible molecule configurations. This research facilitates the preparation of compounds with a large Seebeck coefficient, which can lead to the preparation of thermoelectric converter devices with a high thermoelectric figure of merit.

Keywords: tight-binding, Green's function, transmission coefficient, Seebeck, Fano resonance.

Corresponding Author. Email: mohammad-m@sku.ac.ir

How to Cite This Article:

Mardaani M, Rabani H, piramoon M, Akbari Chaleshtori T. Electronic transport and thermoelectric properties of a four atomic molecule within the tight-binding approach. Nanomeghyas. 2026;():e738875 (In Persian). doi: 10.22034/ns.2026.2092891.1438



This is an open access article under the CC-BY license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).