# مطالعه نظری رسانش الکترونی در یک سامانه کوانتومی با الکترودهای دو زنجیری

كاميار قادرى، فرهاد خوئينى\*

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران

چکیدہ

در این تحقیق، ویژگیهای رسانش الکترونی یک سامانه کوانتومی متشکل از یک وسیله با شبکه مربعی متصل به دو الکترود فلزی نیم نامتناهی را مطالعه می کنیم. رسانش الکترونی سامانه، بر اساس مدل تنگابست با تقریب نزدیک ترین همسایهها و در رژیم جفتشدگی قوی بررسی می شود. همچنین رهیافت تابع گرین برگشتی برای محاسبات عددی رسانش مورد استفاده قرار می گیرد. نتایج نشان می دهد که با تغییر پهنای سامانه و اعمال میدان مغناطیسی یکنواخت می توان ویژگیهای الکتریکی این سامانه را کنترل نمود. همچنین معرفی ساختار نقص دار سبب کاهش رسانش و ایجاد شکاف انرژی می شود. با کنترل پارامترهایی مانند اندازه سامانه، مقدار شار مغناطیسی ورودی و بی نظمی به صورت تهی جا، گذار فاز نیم فلز – فلز و نیم رسانا– فلز در سامانه رخ می دهد. نتایج این تحقیق می تواند در طراحی ادوات نانوالکترونیک کاربرد زیاد داشته باشد.

**کلیدواژگان:** شبکه مربعی، ترابرد کوانتومی، تابع گرین، مدل تنگابست

#### مقدمه

نانوساختارها بهدلیل ویژگیهای منحصربهفرد و ابعاد بسیار کوچک، در حوزه نانوالکترونیک از اهمیت خاصی برخوردارند و میتوانند کاربردهای بسیاری داشته باشند [۱-٤]. عمدهترین کاربرد این نانوساختارها در ترانزیستورها و حسگرها میباشد، بههمین دلیل بررسی خواص ترابردی آنها قابل توجه است [٥]. شبه یک بعدی، مانند زنجیرههای اتمی هستند که در سالهای اخیر، ویژگیهای ترابردی آنها بسیار بررسی شده است [۲-۱۰]. توجه ویژه به این سامانهها بهدلیل کاربرد بیوپلیمرها در نانوقطعات الکترونیکی میباشد

[۱۳-۱۱]. این بیوپلیمرها میتوانند ویژگیهای الکترونی متفاوتی داشته باشند.

تاکنون مطالعهٔ ترابرد الکترونی در این ساختارها با روشهای گوناگون انجام گرفته است [۱۵–۱۸]. یکی از این روشها، استفاده از رهیافت تابع گرین است. فرمولبندی تابع گرین، با در نظر گرفتن اصول ترابرد کوانتومی، ابزار لازم برای مطالعهٔ نظری این نانوساختارها را فراهم میکند [۱۹–۲۰]. در مرجع الکترونی در این نانوساختارها ارائه شده است. ویژگیهای ترابرد در دو زنجیرهٔ الیگمر (oligomer) موازی و بدون برهمکنش با اندازه و ساختار یکسان در مرجع [۲1] مطالعه شده است. ویژگیهای فیزیکی سامانههای با ساختار شبکهٔ مربعی ومستطیلی، بسیار

<sup>\*</sup> نويسنده مسئول:khoeini@znu.ac.ir

تعداد اتمها در راستای پهنای وسیله (راستای قائم) و M نشان دهنده تعداد اتمها در راستای طول سامانه (راستای افق) است. همچنین در سامانه نقص دار(شکل ۱ب)، V و W بهترتیب تعیینکنندهٔ فاصلهٔ اتمی ناحیهٔ بینظم (تهی جاها) از لبه بالا و پایین وسیله می باشد که در شکل ۱ب برابر ۳ نمایش داده شده است. سامانه را در فضای حقیقی، با هامیلتونی تعمیمیافتهٔ زیر توصیف می کنیم [۱۹،۲۹]:

 $H = H_{L} + H_{LS} + H_{S} + H_{SR} + H_{R}$ 

١

در این رابطه  $H_L$   $H_S = H_L$  بهترتیب هامیلتونی وسیله، الکترود چپ و راست است. همچنین  $H_{LS}$  و  $H_{SR}$  و  $H_{SR}$  و  $H_{SC}$  و میله به الکترودهای بهترتیب هامیلتونی جفت شدگی وسیله به الکترودهای چپ و راست است. همه عناصر ماتریس هامیلتونی جفت شدگی، صفر هستند به جز عناصری که اتمهای جفت شدگی، صفر هستند به جز عناصری که اتمهای الکترود را به وسیله متصل میکنند. هامیلتونی هر قسمت الکترود را به وسیله متصل میکنند. هامیلتونی هر قسمت از سامانه رابطه ۱ را در تقریب نزدیکترین همسایه ها می توان به صورت زیر در نظر گرفت:  $H_j = \sum_n (\epsilon_n |n > < n| + t_{n,n+1} |n > < n +$ 

1| + t<sub>n+1,n</sub>|n + 1 >< n|) , ۲ نرژی پرش بین جایگاه n و n + 1 است.

همچنین  $\varepsilon_n$  و|n| به ترتیب بیانگر انرژی و حالت الکترون در جایگاه n است. مورد مطالعه قرار گرفته است [۲۲-۲۹]. در این مقاله میخواهیم ترابرد کوانتومی را در یک سامانه کوانتومی متشکل از یک وسیله با ساختارشبکه مربعی متصل به الکترودهای فلزی را بررسی نمائیم. بهعنوان نمونه، این مدل را می توان در سامانههای چندلایه مانند ابر شبکهها و ترانزیستورهای اثرمیدانی تونلزنی بهکار برد.

در این کار با استفاده از مدل تنگابست و رهیافت تابع گرین به بررسی رسانش الکتریکی در سامانه خالص با اندازههای گوناگون می پردازیم. سپس اثر میدان مغناطیسی و بی نظمی بر رسانش سامانه را مطالعه می کنیم. در بخش دوم به توصیف سامانهای با هامیلتونی تنگابست در تقریب نزدیکترین همسایهها و ارایه فرمول بندی روش تابع گرین می پردازیم. در بخش سوم نتایج عددی مربوط به رسانش را مورد بحث و بررسی قرار می دهیم. در بخش آخر، با نتیجه گیری تحقیق خود را به پایان می رسانیم.

## توصيف و فرمولبندی مدل

در این بخش، نخست مدل خود را معرفی نموده سپس روش محاسبات عددی مربوط به رسانش سامانه را توضیح خواهیم داد. شکل ۱ سامانه مورد نظر را در دو حالت خالص و نقص دار نشان می دهد. سامانه از یک شبکه اتمی مربعی که به الکترودهای چپ و راست متصل است، تشکیل شده است. در این شکل، N بیانگر

۳.



**شکل ۱**. سامانه کوانتومی مورد بررسی. الف) وسیله یک شبکه مربعی با *N* اتم در راستای پهنا است که به الکترودها متصل شده است. ب) وسیله با نقص ناشی از تهیجاها.

در پیمانه لاندائو A = (-By, 0, 0) یک عامل فاز $e^{i\phi_{i,j}}$  در انرژی پرش و جفتشدگی افقی بین اتمها ظاهر میشود یعنی  $t_{n,n+1}(B) = t_{n,n+1}(B = 0)e^{i\Phi_{i,j}}$  که  $t_{n,n+1}(B) = t_{n,n+1}(B = 0)e^{i\Phi_{i,j}}$  شار  $\Phi_{i,j} = \int_{i}^{j} \frac{A.dl}{\Phi_{0}}$ مغناطیسی کوانتومی است. در این رابطه j=L, R, S, LS, RS بیانگر اندیس هرقسمت از هامیلتونی رابطه۱ است. در این مقاله از برهمکنش الکترون–الکترون و الکترون–فونون صرفنظر مینمائیم و محاسبات خود را در رژیم جفتشدگی قوی انجام میدهیم. اگر یک میدان مغناطیسی یکنواخت عمود بر سطح وسیله اعمال کنیم ٨

$$\begin{split} \widetilde{T} &= \widetilde{t}_0 + t_0 \widetilde{t}_1 + t_0 t_1 \widetilde{t}_2 + \cdots + \\ t_0 t_1 t_2 \ldots \widetilde{t}_n \;, \end{split}$$

ند:  

$$t_i = (I - t_{i-1}\tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1})^{-1}t_{i-1}^2$$
 م  
 $\tilde{t}_i = (I - t_{i-1}\tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1})^{-1}t_{i-1}^2$  م  
 $\tilde{t}_i = (I - t_{i-1}\tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1})^{-1}\tilde{t}_i^2$ 

$$t_{0} = [(E + i\eta)I - H_{unit}]^{-1}H_{coupl}^{\dagger}$$

$$\tilde{t}_{0} = [(E + i\eta)I - H_{unit}]^{-1}H_{coupl}$$

$$(Y)$$

این فرآیند تا زمانی که 
$$t_i \ o \ t_i$$
 از یک عدد دلخواه  
کوچکتر باشند، ادامه پیدا خواهد کرد [۲۹].  
حال می توان با استفاده از ماتریس جفت شدگی الکترود  
چپ (راست) بهوسیله، خود-انرژی الکترود چپ  
(راست) را بهدست آورد.  
 $\Sigma_L = H_{DL}^{\dagger}g_L H_{DL}$  ۱۳  
 $\Sigma_R = H_{DL}g_L H_{DL}$  ۱۴  
 $\Sigma_R = H_{DL}g_L H_{DL}$  ۱۴  
از الکترودهای نیمنامتناهی بهوسیله خود-انرژی ها در  
محاسبات تابع گرین ظاهر می شود.  
با استفاده از تابع گرین ضریب عبور الکترون را می توان  
محاسبه کرد [۱۹]:  
 $T(E) =$   
 $Tr(\Gamma_LG(E)^{\dagger}\Gamma_RG(E))$  ۱۵

مملگر وابسته به خود-انرژی الکترودهای چپ  $\Gamma_{L(R)}$  و راست است که حاوی تمام اطلاعات جفتشدگی بین وسیله و الکترودها است.  $\Gamma_{L(R)} = i [\Sigma_{L(R)}^{\dagger} - \Sigma_{L(R)}]$  ام سلول واحد الکترودها از دو اتم بدون برهمکنش با انرژی جایگاهی (E<sub>L(R</sub> تشکیل شده است که هامیلتونی آنرا بهصورت زیر تعریف مینماییم:

$$H_{unit} = \begin{bmatrix} \epsilon_{L(R)} & 0 \\ 0 & \epsilon_{L(R)} \end{bmatrix} \qquad \qquad \forall$$

همچنین تابع گرین مؤثر سامانه بهصورت زیرقابل محاسبه است[۲۸]:  $G(E) = ((E + in)I - H_s - \Sigma_I -$ 

که در این رابطه، I ماتریس واحد و *η* یک عدد دلخواه بسیار کوچک است که برای همگرایی و وارون پذیری ماتریس گرین لازم است. اثر الکترودها را بهوسیلهٔ خود-انرژی الکترود چپ (راست)، (ΣL(R) وارد تابع گرین مینماییم. برای بهدست آوردن تابع گرین سامانه باید خود-انرژی مربوط به الکترودهای چپ و راست را بهدست آوریم. برای این کار از روش سانچو استفاده میکنیم [۲۹]. این روش نسبت به روش های دیگر از سرعت همگرایی بالایی برخوردار است. در این روش تابع گرین سطحی الکترودهای چپ و راست به صورت زیر محاسبه میشود:

$$g_{L} = \left[ (E + i\eta)I - H_{unit} - H_{coupl}^{\dagger} \widetilde{T} \right]^{-1} \qquad \circ$$

$$g_{R} = \left[ (E + i\eta)I - H_{unit} - H_{coupl}T \right]^{-1} \qquad \neg$$

در اینجا H<sub>unit</sub> و H<sub>coupl</sub> بهترتیب هامیلتونی سلول واحد الکترود و جفتشدگی بین دو سلول واحد در الکترود است.T و T در یک فرآیند تکرارشونده بهصورت زیر محاسبه می شوند:

$$\begin{split} T &= t_0 + \tilde{t}_0 t_1 + \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 t_2 + \cdots + \\ \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 \tilde{t}_2 & \ldots t_n \;, \end{split} \label{eq:tau}$$

همچنین رسانش الکتریکی سامانه بهصورت زیر بهدست میآید:

$$G = \frac{2e^2}{h}T$$

#### بحث و بررسی نتایج عددی

با استفاده از فرمولبندی بخش قبل، به بررسی رسانش الکترونی در سامانه مورد نظر می پردازیم. ابتدا مقادیر عددی پارامترهای به کار رفته در محاسبات عددی را معرفی مینمائیم. انرژی جایگاهی اتمهای وسیله و الكترودها را برابر صفر فرض مىكنيم. همچنين همه انرژیهای پرش مربوط به نزدیکترین همسایهها را در غياب ميدان مغناطيسي، برابر t = -3 eV در نظر می گیریم. در این مقاله از برهم کنش الکترون–الکترون و الكترون-فونون صرفنظر مينمائيم و محاسبات خود را در رژیم جفت شدگی قوی انجام میدهیم. در این رژیم، انرژی پرش بین وسیلهٔ کوانتومی و الکترودها را مقدار  $t_{LS(SR)} = 0.75t$  انتخاب مىنمائيم. در جفت شدگی کامل  $t_{LS(SR)} = t$  است. اما در جفت شدگی ضعیف می توان  $t_{LS(SR)} = 0.5t$  در نظر گرفت. انرژی فرمی سامانه را نیز برابر صفر در نظر می گیریم. در محاسبات خود، تمام انرژیها را برحسب انرژی پرش الکترودها در نظر می گیریم. در تمام محاسبات، طول افقی وسیله را برابر M=2 فرض می نماییم. وسیله را در دو حالت کامل و نقص دار در نظر می گیریم. ابتدا به بررسی ترابرد الکترون در سامانهٔ كامل مى پردازىم.

نخست اثر تغییر پهنای وسیله (طول در راستای قائم، N) بر رسانش سامانه را بررسی مینمائیم. نمودارهای شکل ۲الف تا ۲د رفتار رسانش برحسب انرژی الکترون ورودی را برای چهار پهنای مختلف وسیله (٥٤، ١٦، N= ۵،۱۲) نشان میدهند. با تغییر پهنای وسیله، رسانش سامانه تغيير ميكند. در واقع با تغيير تعداد اتمها، رسانش حول انرژی فرمی از صفر تا ۲**G**<sub>0</sub> تغییر میکند زیرا سامانه دارای دو کانال است و ضریب عبور حداکثر برابر دو میباشد. این رفتار با افزایش تعداد اتمها بهصورت نوسانی تکرار میشود. قلههای تشدیدی در نمودار رسانش، در انرژیهای تشدیدی رخ میدهد این انرژیها همان ویژهمقایر مربوط به هامیلتونی وسیله است [۳۰]. در حالتهایی که N ضریبی از ۲ باشد سامانه تقریباً نیمفلز (N=۱۲،٥٤) است زیرا در انرژی فرمی، یک شکاف انرژی صفر وجود دارد که بیانگر ویژگی نیمفلزی است. سامانه در حالتهای دیگر (N=٥،١٦) یک فلز محسوب می شود زیرا در انرژی فرمی مقدار رسانش یک مقدار محدود دارد. با افزایش تعداد اتمها در وسیله تعداد این قلههای

تشدیدی افزایش مییابد. وابسته به اندازه وسیله، مقدار و تعداد این قلهها تغییر میکند. بهدلیل وجود تقارن در هندسه سامانه و در انرژیهای جفتشدگی وسیله به الکترودها، نمودارهای رسانش در طیف انرژی منفی و مثبت از تقارن لازم برخودار هستند.



**شکل۲**. نمودار رسانش الکترونی برحسب انرژی الکترون برای پهناهای مختلف وسیله و در غیاب میدان مغناطیسی.

رسانش کاهش یافته و گذار فاز فلز-نیم فلز رخ می دهد. این گذار فاز به دلیل اثر تداخل کوانتومی توابع موج عبوری از پیوندهای بین اتمی در وسیله است. در مرجع [۳۰] سامانه شبه یک بعدی است واثر تداخل کوانتومی توابع موج عبوری از بازوی بالایی با پایینی یک حلقه سبب تقویت کامل (تداخل سازنده و در نتیجه افزایش رسانش) و تضعیف کامل (تداخل ویرانگر و درنتیجه کاهش رسانش به مقدار صفر) می شود اما در این سامانه که دوبعدی است، کانالهای متفاوتی برای عبور الکترون وجود دارد و به همین علت در برخی حالتها حضور میدان مغناطیسی سبب کاهش رسانش و در بعضی موارد سبب افزایش آن می شود. حال یک میدان مغناطیسی یکنواخت عمود بر سطح وسیله کوانتومی اعمال میکنیم. اعمال میدان سبب تغییر انرژی پرش بین اتمهای وسیله میشود. شکل ۳ رسانش سامانه را برحسب انرژی الکترون برای اندازههای متفاوت وسیله، N، و در حضور شار مغناطیسی نشان میدهد. نمودارها نشان میدهند که رسانش الکتریکی سامانه به اندازهٔ وسیله و شار مغناطیسی فرودی بستگی دارد. در سامانهای با اندازه وسیله مدان مغناطیسی فرادی بستگی دارد. در سامانهای با اندازه وسیله مناطیسی رسانش افزایش یافته و گذار فاز نیمفلز – فلز رخ میدهد. اما در سامانه با پهنای وسیله ۱۲=N در غیاب میدان شاهد خواص فلزی بودیم که با اعمال میدان مغناطیسی



شکل۳. نمودار رسانش الکترونی برحسب انرژی الکترون برای وسیلهای با پهناهای مختلف و در حضور شارمغناطیسی۵٫

فرمی بالاتر از صفر است یعنی سامانه یک فلز می باشد. شکل ٤ب سامانه هایی با ۳=۷ و ۳۶=W را نشان می دهد. در هر دو حالت ۳=۷، ۳=W و ۳=۷، ٤=۷ خواص فلزی مشاهده می شود. از مقایسه حالت ٤=۷=۷ با ٥=۷=۷ نتیجه می گیریم که سامانه های با ۷=۷ زوج، نیم رسانا هستند اما سامانه های با ۷=۷ فرد فلز می باشند. همچنین در این حالت با افزایش بی نظمی (تعداد تهی جاها) مقدار شکاف انرژی کاهش می یابد. در حالت هایی که ۷⊄ باشد سامانه فلز است. در واقع با تغییر تعداد تهی جاها یک گذار فاز نیم رسانا فلز رخ می دهد. در ادامه رسانش را برای سامانهٔ نقص دار بررسی میکنیم. برای اینکه یک تهی جا در وسیله داشته باشیم باید پیوند آن را با اتمهای همسایه قطع نماییم این کار را با صفر نمودن مقدار انرژی پرش و یا بی نهایت در نظر گرفتن مقدار انرژی جایگاهی انجام می دهیم. در اینجا مقدار انرژی جایگاهی اتم های حذف شده را بی نهایت در نظر می گیریم. در شکل ٤ رسانش الکتریکی برای سامانه هایی با V و W متفاوت و ۲۱= N نشان داده شده است. شکل ٤الف، سامانه هایی با T=V و T= رفتار نشان می دهد. در سامانه ای با T=V و رفتار نیم رسانایی با شکاف انرژی Vه رسانش حول انرژی اما در سامانه ای با T=V و T=



**شکل ٤.** رسانش برحسب انرژی الکترون در سامانه نقصدار با پهنای N=16 اتم و V و W متفاوت وشار عبوری صفر.

در شکل ۵ نتایج مربوط به اثر میدان مغناطیسی بر رسانش الکتریکی در سامانهٔ نقص دار را نشان داده ایم. مقادیر همه پارامترهای استفاده شده در اینجا با پارامترهای نمودارهای شکل ٤ یکسان است. در شکل ٥الف رفتار سامانه در حضور شار مغناطیسی ٥/٠ و با ٢=٧ و ٢/٣=W نشان داده شده است. در حضور میدان مغناطیسی، رسانش الکتریکی در همه انرژیها افزایش می یابد. علت این افزایش برهم نهی سازنده دو

موج عبوری از پیوند شماره ۱ و ۲ وسیله است. در شکل ۵ب، رفتار سامانه در حضور میدان با ۳=۷ و ۳٫٤=W نشان داده شده است. مطابق این شکل، رسانش الکتریکی سامانه در همه انرژیهای مجاز بالاتر از صفر است و این بیانگر یک سامانه فلزی است. به طور کلی می توان گفت در اثر اعمال شار مغناطیسی ۰/۰ به سامانهای با W=V زوج، یک گذار فاز نیم رسانا-فلز رخ می دهد.



**شکل**۵. رسانش برحسب انرژی الکترون در سامانه نقصدار با پهنای N=16 اتم و VوW متفاوت وشار عبوری ۰٫۵.

نتيجه گيرى

با استفاده از مدل تنگابست و رهیافت تابع گرین، رسانش الکترونی را در یک سامانه کوانتومی با شبکه مربعی بررسی نمودیم. با افزایش پهنای سامانه، رسانش الکتریکی حول انرژی فرمی به صورت نوسانی (از صفر تا ۲G0) تغییر میکند. علت این امر، وجود دو کانال عبور الکترونی میباشد. نتایج عددی نشان میدهند که با اعمال شارمغناطیسی یک گذار فاز نیمفلز-فلز و فلز-نیمفلز (باتوجه به پهنای وسیله) در سامانه مشاهده میشود. علاوه بر این، معرفی ساختار نقص دار، به صورت تهی جاها، سبب کاهش رسانش سامانه میشود. وابسته به تعداد تهی جاها در وسیله، سامانه یک نیمرسانا و یا یک فلز خواهد بود. همچنین در اثر اعمال

میدان مغناطیسی به این سامانه نقص دار در حالت V=W زوج، یک گذار فاز نیم رسانا-فلز مشاهده می شود. این گذار فاز به دلیل تداخل کوانتومی توابع موج عبوری از سامانه می باشد. به طور کلی با تغییر پارامترهایی مانند پهنای وسیله، مقدار شار فرودی و ایجاد نقص در وسیله، می توان خواص الکتریکی سامانه ایجاد نقص در وسیله، می توان خواص الکتریکی سامانه ایجاد نقص در وسیله، می توان خواص الکتریکی سامانه ایجاد نقص در وسیله، می توان خواص الکتریکی سامانه ایجاد نقص در می می توان خواص الکتریکی سامانه ادوات نانوالکترونیک کاربردهای زیادی داشته باشد. سامانه های چندلایه مانند ابر شبکه ها و ترانزیستورهای اثر میدانی تونا زنی می تواند کاربر داشته باشد. [13] Y.W. Kwon, C.H. Lee, D.H. Choi, J. Jin, Materials science of DNA, *Journal of Materials Chemistry* 19 (2009) 1353-1380.

[14] N. Kobayashi, M. Brandbyge, M. Tsukada, First-principles study of electron transport through monatomic Al and Na wires, *Physical Review B* 62 (2000) 8430-8437.

[15] X. Qian, J. Li, S. Yip, Calculating Phase Coherent Quantum Transport in Nanoelectronics with ab initio Quasiatomic Orbital Basis Set, *Physical Review B* 82 (2010) 195442-195460.

[16] T. Ando, Quantum point contacts in magnetic fields, *Physical Review B* 44 (1991) 8017-8027.

[17] P. Harrison, Quantum wells, Wires and Dots, John Wiley, New York, (2000).

[18] D.S. Fisher, P.A. Lee, Relation between conductivity and transmission matrix, *Physical Review B* 23 (1981) 6851-6854.

[19] S. Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems, Cambridge University Press, (1997).

[20] S. Datta, Nanoscale device modeling: the Green's function method, *Superlattices and Microstructures* 28 (2000) 253-278.

[21] Z.G. Yu, D.L. Smith, A. Saxena, A.R. Bishop, Electronic transmission in conjugatedoligomer tunnel structures: effects of lattice fluctuations, *Journal of Physics: Condensed Matter* 10 (1998) 617-638.

[22] S. Saha, R. Mandal, S. Barman, D. Kumar, B. Rana, Y. Fukuma, S. Sugimoto, Y.C. Otani, A. Barman, Tunable Magnonic Spectra in Two-Dimensional Magnonic Crystals with Variable Lattice Symmetry, *Advanced Functional Materials* 23 (2013) 2378–2386.

[23] J. Li, Z.Y. Li, D.Z. Zhang, Nonlinear frequency conversion in two-dimensional nonlinear photonic crystals solved by a plane-wave-based transfer-matrix method, *Physical Review B* 77 (2008) 195127-195132.

[24] C. Tournier-Colletta, L. Moreschini, G. Aute`s, S. Moser, A.Crepaldi, H. Berger, A.L. Walter, K.S. Kim, A. Bostwick, P.Monceau, E. Rotenberg, O.V. Yazyev, M. Grioni, Electronic Instability in a Zero-Gap Semiconductor: The

[1] D.K. Ferry, S.M. Goodnick, Transport in Nanostructures, Cambridge University Press, (1997).

[2] N.D. Lang, Ph. Avouris, Oscillatory conductance of Carbon-Atom Wires, *Physical Review Letters* 81 (1998) 3515-3518.

[3] D. Vasileska, S.M. Goodnick, Nano-Electronic Devices, Springer (2011).

[4] J.S. Wang, J. Wang, J.T. Lu, Quantum thermal transport in nanostructures, *The European Physical Journal B* 62 (2008) 381-404.

[5] Y. Wada, M. Tsukada, M. Fujihira, K. Matsushige, T. Ogawa, M. Haga, S. Tanaka, Prospects and Problems of Single Molecule Information Devices, *Japanese Journal of Applied Physics* 39 (2000) 3835-3849.

[6] C.C. Wan, J.L. Mozos, G. Taraschi, J. Wang, H. Guo, Quantum transport through atomic wires, *Applied Physics Letters* 71 (1997) 419-421.

[7] M.P. Anantram, M.S. Lundstrom, D.E Nikonov, Modelling of nanoscale devices, *Proceedings of the IEEE* 96 (2008) 1511-1550.

[8] M. Mardaani, K. Esfarjani, Analytical results on ballistic transport in a periodic molecular wire, *Chemical Physics* 317 (2005) 43-48.

[9] M. Mardaani, K. Esfarjani, Some analytical results in phase coherent transport in quantum wire, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 25 (2004) 119-130.

[10] G.P. Zhang, X.W. Fang, Y.X. Yao, C.Z. Wang, Z.J. Ding, K.M. Ho, Electronic structure and transport of a carbon chain between graphene nanoribbon leads, *Journal of Physics: Condensed Matter* 23 (2011) 025302-025306.

[11] S.R. Forres, The path to ubiquitous and lowcost organic electronic appliances on plastic, *Nature* 428 (2004) 911-918.

[12] S. Malakooti, E.R. Hedin, Y.D. Kim, Y.S. Joe, Enhancement of charge transport in DNA molecules induced by the next nearest-neighbor effects, *Journal of Applied Physics* 112 (2012) 094703-094709.

۳۸

## مراجع

[29] M.P.L. Sancho, J.M.L. Sancho, J. Rubio, highly convergent schemes for thecalculation of bulk and surface Green functions, *Journal of Physics F* 15 (1985), 851-858.; F. Khoeini, A. A. Shokri, F. Khoeini, Electronic transport through superlattice-graphene nanoribbons, *The European Physical Journal B* 75 (2010) 505– 509.

[30] Farzad Khoeini, Farhad Khoeini, Analytical and numerical study of quantum transport in an array of nanorings: A case study with double rings, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 47 (2013) 297-302. Charge-Density Wave in (TaSe<sub>4</sub>)<sub>2</sub>I, *Physical Review Letters* 110 (2013) 236401-236406.

[25] D. Girardi, N.S. Branco, Influence of aperiodic modulations on first-order transitions: Numerical study of the two-dimensional Potts model, *Physical Review E* 83 (2011) 061127-061136.

[26] V.O. Cheranovskii, O. Esenturk, H.O.

Pamuk, Magnetic properties of multiband  $U=\infty$ Hubbard model on anisotropic triangular and rectangular lattice strips, *Physical Review B* 58 (1998) 12260-12266.

[27] H. Hatami, N. Abedpour, A. Qaiumzadeh, R. Asgari, Conductance of bilayer graphene in the presence of a magnetic field: Effects of disorder, *Physical Review B* 83 (2011) 125433-125440.

[28] S. Datta, Quantum Transport: Atom to Transistor, Cambridge University Press, (2005).