

The Effect of Environmental Factors on the Energy Gap and Conduction Band of Black Phosphorene: A Quantum Chaos Approach

Elahe Javanshoor¹, Sohrab Behnia^{*2} and Fatemeh Nemati³

Abstract

Recent advancements in infrared detection technology have garnered significant attention due to their essential applications across various fields, including telecommunications, night vision, and high-resolution imaging. This study explores the potential of black phosphorene, a two-dimensional material with unique structural and electronic properties, as a promising candidate for infrared detectors. The research investigates the impact of ambient temperature, impurity, and electrode voltage on the electrical conductivity of black phosphorene, emphasizing its tunable band gap and high carrier mobility. Utilizing quantum chaos theory and random matrix theory, we analyze the system's dynamics and identify optimal conditions for detector performance. Our findings indicate that at room temperature, with a voltage of 2 V and a boron impurity concentration of 1.1%, black phosphorene exhibits a favorable transition toward the Wigner phase, enhancing its conductive properties. Additionally, the study highlights how varying impurity levels influence energy level distributions, transitioning the system from insulating to metallic behavior. The results underscore the significance of controlling impurity and temperature in optimizing black phosphorene for infrared detection applications. This work contributes to understanding black phosphorene's capabilities and lays the groundwork for future innovations in infrared detector technologies.

Keywords: *Infrared Detector, Black Phosphorene, Quantum Chaos, Random Matrix Theory.*

¹PhD Student, Department of Physics, Faculty of Modern Sciences and Technologies, Urmia University of Technology, Urmia. Email: e.javanshoor@gmail.com

²Professor, Department of Physics, Faculty of Modern Sciences and Technologies, Urmia University of Technology, Urmia. Email: s.behnia@sci.uut.ac.ir

³PhD Graduated, Department of Physics, Faculty of Modern Sciences and Technologies, Urmia University of Technology, Urmia. Email: fatemeh.nemati.1988@gmail.com

تأثیر عوامل محیطی روی شکاف انرژی و نوار رسانایی فسفرن

سیاه:

رهیافت آشوب کوانتومی

الهه جوان شور^۱، سهراب بهنیا^{۲*} و فاطمه نعمتی^۳

چکیده:

پیشرفت‌های کنونی در فناوری تشخیص مادون قرمز به دلیل کاربردهای اساسی آن در زمینه‌های مختلف، از جمله مخابرات، دید در شب و تصویربرداری با وضوح بالا، توجهات بسیاری را به خود جلب کرده است. این مطالعه پتانسیل فسفرن سیاه، یک ماده دیرپای با ویژگی‌های ساختاری و الکترونیکی منحصر به فرد را به عنوان یک نامزد امیدوارکننده برای آشکارسازهای مادون قرمز بررسی می‌کند. به این منظور، تأثیر دمای محیط، ناخالصی و ولتاژ الکترود را بر رسانایی الکتریکی فسفرن سیاه بررسی شده و بر شکاف نوری قابل تنظیم و تحرک بالای حامل آن تأکید می‌شود. با استفاده از نظریه آشوب کوانتومی و نظریه ماتریس تصادفی، دینامیک سامانه مورد بررسی قرار گرفته و شرایط بهینه برای عملکرد آشکارساز شناسایی می‌شود. یافته‌های این پژوهش نشان می‌دهد که در دمای اتاق، با ولتاژ ۲ ولت و غلظت ناخالصی بورون ۱/۱٪، فسفرن سیاه انتقال مطلوبی به سمت فاز ویگنر رخ می‌دهد که ویژگی‌های رسانایی آن افزایش می‌یابد. افزون بر این، این مطالعه نشان می‌دهد که چگونه سطوح مختلف ناخالصی بر توزیع سطح انرژی تأثیر می‌گذارد و سامانه را از رفتار عایق به فلزی تغییر می‌دهد. نتایج بر اهمیت کنترل ناخالصی و دما در بهینه‌سازی فسفرن سیاه برای کاربردهای تشخیص مادون قرمز تأکید می‌کند. این کار به درک قابلیت‌های فسفرن سیاه کمک کرده و زمینه را برای نوآوری‌های آینده در فناوری‌های آشکارساز مادون قرمز فراهم می‌کند.

واژگان کلیدی: آشکارساز مادون قرمز، فسفرن سیاه، آشوب کوانتومی، نظریه ماتریس تصادفی.

^۱ دانشجوی دکتری، گروه فیزیک، دانشکده علوم و فناوری‌های نوین، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه. Email: e.javanshoor@gmail.com

^۲ استاد، گروه فیزیک، دانشکده علوم و فناوری‌های نوین، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه. (نویسنده مسئول). Email: s.behnia@sci.uut.ac.ir

^۳ دانش‌آموخته دکتری، گروه فیزیک، دانشکده علوم و فناوری‌های نوین، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه. Email: fatemeh.nemati.1988@gmail.com

۱. مقدمه

پژوهش‌های روی آشکارسازها، به ویژه در زمینه تشخیص مادون قرمز، در سال‌های کنونی به دلیل کاربردهای همه‌کاره و ضروری آن، توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده است. آشکارسازهای نوری با طبقه‌بندی آن‌ها به آشکارسازهای اشعه ایکس، فرابنفش، نور مرئی و مادون قرمز^۱ بر اساس محدوده طول موجی که شناسایی می‌کنند، نقش مهمی در تعداد بی‌شماری از کاربردهای علمی و صنعتی ایفا می‌کنند [۱]. آشکارسازهای مادون قرمز^۲، به ویژه، به دلیل تطبیق‌پذیری و استفاده گسترده در حوزه‌هایی مانند مخابرات، دید در شب، تشخیص حرکت، تصویربرداری با وضوح بالا، نظارت، دستگاه‌های پاسخ هوشمند و مدارهای نوری مورد توجه قرار گرفته‌اند [۳، ۲]. این ابزار گسترده بر اهمیت پیشرفت فناوری آشکارساز IR برای پاسخگویی به تقاضاهای رو به رشد صنایع نوظهور و پژوهش‌های علمی تأکید می‌کند. مواد سنتی چون سلنید سرب^۳ [۴]، تلورید کادمیوم جیوه^۴ [۵] و ایندیوم گالیوم آرسنید^۵ [۶]، در حالی که موثر هستند، در یکپارچه‌سازی مکمل فلز-اکسید نیمه‌هادی^۶ با چالش‌هایی مواجه هستند و اغلب منجر به دستگاه‌های حجیم می‌شوند [۷، ۸]. پیشرفت‌های کنونی پتانسیل مواد کم‌بعدی، به ویژه مواد دوبعدی و شبه یک‌بعدی با شکاف‌های نوار باریک یا صفر را به عنوان جایگزین‌های امیدوارکننده برای تشخیص IR برجسته کرده است [۹-۱۱]. گرافن، یک ماده دوبعدی بدون شکاف، پوشش IR گسترده‌ای را ارائه می‌کند اما به دلیل جذب ضعیف و جریان تاریک بالا محدود می‌شود [۱۲-۱۴]. این پیشرفت‌ها بر نیاز همیشگی به مواد نوآورانه برای افزایش عملکرد آشکارساز IR تأکید می‌کند.

فسفرن سیاه^۷، یک ماده دوبعدی با ساختار لانه زنبوری منحصربه‌فرد که توسط اتم‌های فسفر با پیوند کووالانسی تشکیل شده است، نوید قابل توجهی برای متحول کردن صنعت آشکارساز مادون قرمز و امکان‌پذیر کردن فناوری‌های جدید دارد. ویژگی‌های ساختاری و الکترونیکی متمایز آن، از جمله تشکیل نقاط کوانتومی مثلثی، آن را از سایر مواد دوبعدی متمایز می‌کند. BP دارای ویژگی‌های الکترونیکی و نوری فوق‌العاده‌ای است که آن را برای کاربردهای مهندسی بسیار جذاب می‌کند [۱۵]. ساختار الکترونیکی این ماده را می‌توان دقیقاً از راه روش‌هایی مانند کنترل تعداد لایه‌ها، اعمال میدان‌های الکتریکی خارجی، مهندسی کرنش، جذب اتمی و ناخالصی تنظیم کرد [۱۶-۱۷]. به

¹ Infrared (IR)² Infrared detectors³ Lead selenide (PbSe)⁴ Mercury Cadmium Telluride (HgCdTe)⁵ Indium Gallium Arsenide (InGaAs)⁶ Complementary Metal-Oxide-Semiconductor (CMOS)⁷ Black phosphorus (BP)

عنوان مثال، تأثیر ناخالصی بورون، فلوئور یا کربن سبب کاهش شکاف نواری می‌شود، در حالی که آلومینیوم یا کلر آن را افزایش می‌دهد [۲۰]. افزون بر این، ناخالصی‌هایی چون نیکل و منگنز موقعیت‌های اتمی را تغییر می‌دهند و شکاف نواری را بیشتر کاهش می‌دهند، به‌ویژه در سامانه‌های متأثر از ناخالصی نیکل [۲۱]. فاصله نواری فسفرن سیاه از ۰/۵ الکترون‌ولت در شکل توده‌ای تا ۲ الکترون‌ولت در تک‌لایه‌ها متغیر است که با افزایش تعداد لایه‌ها به دلیل تغییر در ساختار الکترونیکی و برهمکنش‌های بین لایه، شکاف به صورت قابل توجهی کاهش می‌یابد [۲۲-۲۴]. این قابلیت تنظیم، همراه با تحرک حامل بالا و ویژگی‌های ناهمسان‌گرد، BP را به عنوان یک نامزد پیشرو برای دستگاه‌های نیمه‌هادی نسل بعدی قرار می‌دهد [۲۲]. بر اساس پیش‌بینی‌های نظری، فسفرن دارای تحرک حامل بالایی در حدود $(\frac{cm^2}{VS})$ ۱۰۰۰ و نسبت روشن/خاموش بالای 10^4 در ترانزیستور اثر میدان در دمای اتاق است [۲۵]. پیشرفت‌های کنونی نشان داده‌اند که مهندسی کرنش می‌تواند به صورت قابل توجهی شکاف نواری BP تک‌لایه و چندلایه را تنظیم کند و کاربردهای فوتونیکی با کارایی بالا را در محدوده مادون‌قرمز متوسط ممکن می‌سازد. اثر استارک^۱ که توسط یک میدان الکتریکی خارجی القا می‌شود، با جابجایی شکاف نواری، جذب نور را بیشتر می‌کند [۲۶، ۲۷]. اتصالات ناهمگن و نانوساختارهای پلاسمونیک، با استفاده از تحرک بالای فسفرن سیاه و جذب نواری گسترده از نور مرئی به فرکانس‌های تراهرتز^۲، مسیرهای کارآمدی را برای توسعه آشکارسازهای نوری پیشرفته ارائه می‌دهند [۲۸]. با این حال، فسفرن سیاه چندلایه به دلیل همپوشانی غیرقابل اغماض توابع امواج الکترونیکی بین لایه‌ها، پیچیدگی ساختاری و الکترونیکی بیشتری را نشان می‌دهد و آن را از سامانه‌های واندروالس دیگر مانند گرافن و مولیبدن دی‌سولفید^۳ متمایز می‌کند [۲۹]. این فعل‌وانفعالات بین لایه‌ای قوی‌تر بر پتانسیل و چالش‌های فسفرن سیاه در پیشرفت فناوری‌های آشکارساز مادون‌قرمز تأکید می‌کند.

با توجه به توانایی فوق‌العاده فسفرن سیاه، در مطالعه حاضر، امکان طراحی آشکارساز نوری بر مبنای این ماده مدنظر خواهد بود. در این مطالعه که به چند بخش تقسیم شده است، ابتدا الگوی پیشنهادی در بخش دوم معرفی می‌شود و توصیف دیداری از ساختار مورد مطالعه ارائه می‌گردد. سپس، رهیافت تحلیل رفتاری (آشوب کوانتومی) شرح داده می‌شود. در بخش بحث و نتیجه‌گیری، نتایج به‌دست آمده بررسی و با نتایج پژوهشگران پیشین مقایسه می‌شود تا الگوی پیشنهادی تأیید گردد. در پایان، در بخش جمع‌بندی، با اشاره به کارهای آینده، مطالعه به پایان می‌رسد.

¹ Stark effect

² Terahertz

³ Molybdenum disulfide (MoS₂)

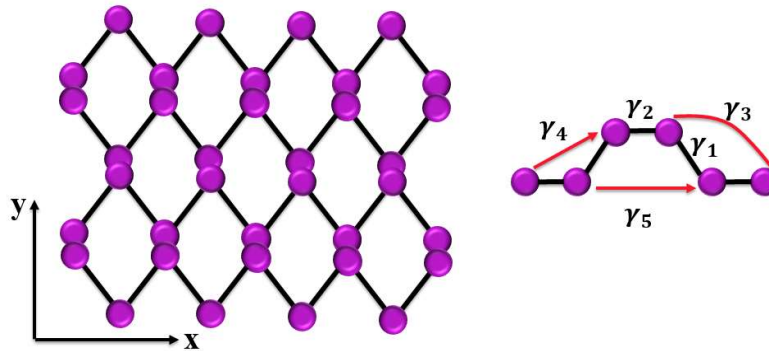


Fig. 1 Crystal lattice of black phosphorene.

شکل ۱ شبکه بلوری فسفر سیاه.

۲. الگو و روش‌ها

الگوهای مختلفی چون مدل تنگ‌بست^۱، هابارد^۲، اندرسون-هولشتاین^۳، سوشریفر-هیگرا^۴، برای مطالعه رفتار الکترونیکی وجود دارد. در این مطالعه، ماتریس هامیلتونی با استفاده از الگوی تنگ-بست نزدیکترین همسایه بدست می‌آید. این الگو جهش الکترون‌ها را بین اتم‌های همسایه در شبکه برای استخراج عناصر ماتریس هامیلتونی در نظر می‌گیرد. ساختار نواری BP را می‌توان به صورت مشابه با دیگر مواد دو بعدی، به عنوان تغییر شکل پیوسته شبکه لانه زنبوری با انرژی‌های پرش متفاوت (γ) بر روی پنج همسایه، همانطور که در شکل (۱) نشان داده شده است، بررسی کرد [۱۵].

هامیلتونی حاکم بر مسئله به صورت زیر بیان می‌گردد [۱۶]:

$$H_{sys} = \gamma_1 \sum_{i \neq j} c_i^\dagger c_j + \gamma_2 \sum_{i \neq j} c_i^\dagger c_j + \gamma_3 \sum_{i \neq j} c_i^\dagger c_j + \gamma_4 \sum_{i \neq j} c_i^\dagger c_j + \gamma_5 \sum_{i \neq j} c_i^\dagger c_j \quad (1)$$

که در آن، γ_i (i=1,2,3,4,5) انرژی پرش در نزدیک‌ترین همسایگی و $c^\dagger(c)$ عملگرهای خلق و نابودی الکترون در شبکه فسفر سیاه هستند. از الکتروادهای طلا به منظور خلق اختلاف ولتاژ استفاده می‌شود:

$$H_{Lead} = \sum_{i=1} \varepsilon_{Au} c_i^\dagger c_i + \sum_{\langle i,j \rangle} \gamma_{Au} (c_i^\dagger c_j + H.c.) + \sum_{\langle i,j \rangle} \gamma_{Au-P} (c_{i+N_x}^\dagger c_1 + H.c.) + \sum_{\langle i,j \rangle} \gamma_{Au-P} (c_{i+N_x}^\dagger c_N + H.c.) \quad (2)$$

¹ Tight-binding

² Hubbard

³ Anderson-Holstein

⁴ Su-Schrieffer-Heeger

در این معادله، ε_{Au} انرژی جایگاهی اتم طلا (به عنوان الکتروود) است که با اتصال به ولتاژ خارجی به صورت $\varepsilon_{Au} \pm \left(\frac{eV_b}{2}\right)$ تصحیح می‌شود. γ_{Au} انرژی پرش نزدیکترین همسایگی بین اتم طلا می‌باشند. همچنین، عبارت γ_{Au-P} بیانگر انرژی پرش بین اتم‌های طلا و فسفر در مرز مشترک بین الکتروود طلا و شبکه BP است. عبارت (c_N) به ترتیب عملگر نابودی الکترون در اولین و آخرین اتم در هر سطر از پیوندهای بین الکتروود طلا و شبکه BP است.

تنظیم رسانایی الکتریکی شبکه فسفرن از راه ناخالصی امکان‌پذیر است. لیتیوم، سدیم و پتاسیم انرژی تشکیل پایینی دارند و حالت‌های اهداکننده مؤثری را نزدیک به کمینه نوار هدایت ایجاد می‌کنند. در مقابل، گالیم، ایندیم، مس و نقره نیز به عنوان اهداکننده عمل می‌کنند، اما به دلیل انرژی تشکیل دهنده بالایی که دارند، به سختی تشکیل می‌شوند. ناخالصی‌های گروه II و گروه VIII در جدول تناوبی، حالت‌های نقص را دور از لبه‌های نوار ایجاد می‌کنند، در حالی که روی، کادمیوم و ناخالصی‌های خاص گروه VI، حالت‌های نقص را در شکاف ایجاد نمی‌کنند. در بین ناخالصی‌های گروه VI و VII، فقط اکسیژن، فلوئور و کلر دارای انرژی تشکیل پایین هستند [۱۷]. از طرفی، بورون می‌تواند به عنوان یک ناخالصی نوع p عمل کند و رسانایی الکتریکی را افزایش دهد [۱۸]، اگرچه تأثیر آن به غلظت و توزیع ناخالصی بستگی دارد. وارد مقدار بهینه بورون، می‌تواند رسانایی را بهبود بخشد، اما مقادیر بیش از حد ممکن است ساختار را مخدوش کرده و سبب ایجاد نقص شود [۱۹]. در نتیجه، در مطالعه حاضر، به منظور تنظیم رسانایی الکتریکی شبکه فسفرن از ناخالصی بورون [۲۰] استفاده می‌شود، هامیلتونی ناخالصی به صورت معادله (۳) تعریف می‌گردد:

$$H_{imp} = \sum_{i=1}^n \varepsilon_{imp} c_i^\dagger c_i + \sum_{i \neq j} \gamma_{P-imp} (c_i^\dagger c_j + H.c.) \quad (3)$$

ε_{imp} بیانگر انرژی جایگاهی اتم ناخالصی (به طور خاص در این مطالعه، اتم بورون) می‌باشد. همچنین، عبارت γ_{P-imp} انرژی پرش بین اتم‌های فسفرن و ناخالصی بورون می‌باشد. مقادیر مربوط به کمیت‌های مطرح در معادله (۱)، (۲) و (۳)، در جدول (۱) بیان شده‌اند. با در نظر گرفتن اثرات فونون و دمای محیط بر جریان الکتریکی، این تأثیرات به ترتیب از راه تصحیح

انرژی پرش با عبارت $\tilde{\gamma} = \gamma \times e^{\left(\frac{-\eta^2}{\omega_0^2}\right)}$ و $\tilde{\gamma} = \gamma e^{-3.37 \times \alpha \Delta T}$ انجام می‌گیرد [۲۱] که ΔT ، α و η ضریب بسط حرارتی، تغییرات دما و کمیت تنظیم برهمکنش فونون-الکترون می‌باشد.

به منظور امکان سنجی سوئیچ اپتیکی، بخش الکتریکی نور مادون قرمز از راه تصحیح انرژی جایگاهی الکترون‌ها به صورت $\varepsilon_p - (E_0 \cos(\omega t)) \times y_i$ در شبکه BP انجام می‌پذیرد [۲۲].

جدول ۱ مقادیر کمیت‌های مورد استفاده در معادلات (۱)، (۲) و (۳) [۲۳، ۲۰].

Table 1 Values of parameters used in equations (1), (2) and (3) [20,23].

	Value	parameter
Hopping energy	-1.22	γ_1
	3.566	γ_2
	-0.205	γ_3
	-0.105	γ_4
	-0.055	γ_5
	-0.5155	γ_{Au}
	$\gamma_{Au} \times 0.3$	γ_{Au-P}
	-1.844	γ_{P-B}
On-site energy	-3.276	ε_p
	-1.89	ε_B
	3.09	ε_N
	0.9004	ε_{Au}

۳. روش بررسی

تا به امروز، روش‌های مختلفی برای بررسی دینامیک رفتاری این سامانه‌ها، از جمله نظریه تابعی چگالی^۱، روش‌های تابع گرین^۲ و شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی^۳ به کار گرفته شده‌اند. کارایی DFT به دلیل پیچیدگی محاسبات، نیاز به اصلاحات تجربی و هزینه محاسباتی بالا مرتبط با سامانه‌های بزرگ محدود می‌شود [۲۴]. روش‌های تابع گرین هم از نظر ریاضی و هم از نظر

¹ Density Functional Theory (DFT)

² Green's function

³ Molecular dynamics simulations

محاسباتی پیچیده هستند و اغلب به تقریب‌هایی نیاز دارند که می‌توانند خطا ایجاد کنند [۲۵]. شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی زمان‌بر هستند و می‌توانند با کیفیت داده‌های مرجع ساختار الکترونیکی محدود شوند و اغلب از اثرات ناهارمونیک و دینامیکی که برای پیش‌بینی دقیق طیف‌های مادون‌قرمز حیاتی هستند، غفلت می‌کند [۲۶]. با توجه به محدودیت‌های این روش‌ها و غیرخطی بودن سامانه مورد مطالعه، می‌توان از نظریه آشوب کوانتومی برای تحلیل رفتاری آن استفاده کرد. آشوب کوانتومی مطالعه چگونگی تجلی رفتار آشوب کلاسیک در سامانه‌های کوانتومی است و همچنین ابزارهایی برای مطالعه چگونگی تأثیر بی‌نظمی بر سطوح انرژی، توابع موج و ویژگی‌های انتقال را فراهم می‌کند. به عنوان مثال، می‌تواند به تمایز بین حالت‌های موضعی (عایق) و غیرموضعی (رسانا) در سامانه‌های آشوبناک کمک کند. در این پژوهش از آن برای بررسی یک هامیلتونی تنگ بست استفاده می‌شود. چرا که اثرات بی‌نظمی، تعاملات و پویایی‌های پیچیده را آشکار می‌کند و بینش‌هایی را در مورد موضعی بودن و انتقال فاز ارائه می‌دهد. نظریه ماتریس تصادفی به عنوان سنگ بنای مطالعه آشوب کوانتومی، ارائه یک چارچوب جهانی برای بررسی ویژگی‌های آماری سامانه‌های کوانتومی آشوبناک و آشکار کردن ارتباطات عمیق بین آشوب کلاسیک و مکانیک کوانتومی است. در تلاش برای یافتن روشی مناسب برای مطالعه‌ی سامانه‌های اتمی با برهم‌کنش قوی، و یگنر^۱ نخستین کسی بود که نظریه‌ی ماتریس‌های تصادفی^۲ را معرفی کرد. این نظریه به‌مرور به سنگ‌بنای روش‌های مطالعه‌ی طیفی در مکانیک کوانتومی تبدیل شد و امکان جداسازی رفتار آشوبناک از منظم را فراهم کرد [۲۷]. فرض اساسی برای استفاده از نظریه ماتریس تصادفی در سامانه‌های هامیلتونی این است که درک ما از ماتریس هامیلتونی اساساً بر اساس ویژگی‌های تقارن آن است. عملگر هامیلتونی که با H نشان داده می‌شود، دینامیک سامانه را کنترل می‌کند و یک عملگر هرمیتی است، که نشان می‌دهد که نمایش ماتریسی آن نیز هرمیتی است. در نتیجه، ویژه مقادیر، نشان دهنده سطوح انرژی مجاز سامانه، اعداد واقعی هستند [۲۸]. ماتریس هامیلتونی از عناصر بدست آمده با ارزیابی هامیلتونی با توجه به مجموعه پایه کامل متعامد ساخته شده است. می‌توان عنوان کرد که روش‌های نظریه‌ی RMT برای تحلیل سامانه‌های کوانتومی به دو گروه طبقه‌بندی می‌شوند: تحلیل‌های بر مبنای ویژه مقادیر و تحلیل‌های بر مبنای ویژه حالت‌ها. در تحلیل بر مبنای ویژه مقادیر، تحلیل‌های آماری طیف یک سامانه کوانتومی را می‌توان بر حسب همبستگی‌های بلند و یا کوتاه‌برد دسته‌بندی کرد که شناخته‌شده‌ترین و پرکاربردترین تحلیل در

¹ Wigner² Random Matrix Theory (RMT)

بخش کوتاه برد، بر مبنای RMT توزیع فاصله‌ی بین ترازهای مجاور $P(s)$ است [۲۹]. RMT در درک آشوب کوانتومی، کمک به تجزیه و تحلیل توزیع تراز انرژی و پیش‌بینی رفتار کوانتومی ارزشمند است [۳۰].

۱.۳ نوسانات طیفی

یکی از ابزارهای آشوب کوانتومی برای تحلیل رفتار سامانه، توزیع فاصله نزدیک‌ترین همسایه $(P(s))$ می‌باشد که یک شاخص کلیدی از نوسانات تراز در همبستگی‌های طیفی برد کوتاه است که همبستگی‌های برد کوتاه جایگزیده ویژه مقادیر را اندازه‌گیری می‌کند [۳۱]. طیف انرژی هر سامانه کوانتومی با طیف سایر سامانه‌ها متفاوت بوده و منجر به نوسانات و چگالی‌های متفاوت می‌شود. برای آن‌که بتوان از روش $P(s)$ برای مقایسه‌ی نوسانات طیفی بین سامانه‌های مختلف استفاده کرد، باید قبل از انجام محاسبات عددی طیف انرژی سامانه آنفولد^۱ (به اصطلاح گسترده‌ی طیفی) شود. به گونه‌ای که چگالی متوسط ترازهای طیف گسترده شده برابر ۱ شود. این توزیع به مقایسه ویژگی‌های آماری در بخش‌های مختلف طیف کمک می‌کند. به عبارتی، فواصل $s_i = E_{i+1} - E_i$ از طیف گسترده، مشتق شده‌اند، که با مقیاس مجدد سطوح انرژی به چگالی سطح متوسط واحد و کاهش ۱۰ درصد انرژی در هر دو انتها به دست می‌آیند. یک چند جمله‌ای مرتبه هفتم با تابع شمارش سطح برای بدست آوردن طیف گسترده متناسب است و چگالی طیفی را یکنواخت می‌کند. در یک حالت پایدار با سطوح غیر برهمکنشی، توزیع فاصله نزدیک‌ترین همسایه از توزیع پواسونی پیروی می‌کند ($P(s) = e^{-s}$) و در ($s = 0$) به اوج خود می‌رسد که نشان‌دهنده خوشه‌بندی تراز است [۳۲]. در مقابل، یک سامانه ناپایدار با دافعه ترازهای خطی در ($s \rightarrow 0$) از توزیع ویگنر-دایسون^۲ پیروی می‌کند ($P(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4}s^2}$) [۳۳]. تحت شرایط ویژه، $P(s)$ رفتاری مابین توزیع پواسونی و توزیع ویگنر را نشان می‌دهد. توزیع برودی، که با "کمیت دفع"^۳ (β) مشخص می‌شود، برای توصیف این رفتار میانی استفاده می‌شود [۳۴].

$$P_{\beta}(s) = \alpha(\beta+1)s^{\beta} \exp(-\alpha s^{\beta+1}) \quad (۴)$$

^۱ Unfold

^۲ Wigner-Dyson

^۳ Repulsion paramete

که در این رابطه، $\alpha = \left(\Gamma \left[\frac{\beta+2}{\beta+1} \right] \right)^{\beta+1}$ و β کمیت برودی است. در حد $\beta=0$ توزیع پواسونی است (سامانه‌های جایگزیده) و متناسب با e^{-s} است. برای سامانه‌های غیرجایگزیده ($\beta=1$) توزیع به خوبی توسط توزیع ویگنر توصیف می‌شود و متناسب با $e^{-\frac{\pi s^2}{4}}$ است [۳۵]. الگوریتم‌های مورد استفاده جهت محاسبه کمیت برودی (β) و به عبارتی توزیع $P(s)$ در ضمیمه توصیف شده است.

۲.۳ نمودار جریان-ولتاژ

کمیت دیگر برای بررسی تمایل به فاز فلز/عایق در شبکه مورد مطالعه، جریان الکتریکی است که از آن می‌گذرد. می‌توانیم تعریف عملگر چگالی بار را در چارچوب هایزنبرگ به صورت $n_i(t) = e^{iHt} n_i e^{-iHt}$ تعریف کنیم که در آن، $n_i = c_i^\dagger c_i$ در حقیقت، چگالی بار است. عملگر جریان الکتریکی به صورت زیر بدست می‌آید:

$$I = \frac{d(en_i(t))}{dt} = \frac{-ie}{\hbar} [c_i^\dagger c_i, H] \quad (5)$$

که در این صورت، جریان الکتریکی کلی به شکل $I(t) = \sum_i I_i(t)$ محاسبه می‌شود. بنابراین با استفاده از معادلات مشتق شده، می‌توان تأثیر عوامل مختلف بر جریان الکتریکی را در شبکه بررسی کرد. در مطالعه حاضر از تابع ODE45 نرم‌افزار متلب جهت مطالعه ویژگی‌های رسانایی شبکه فسفرن سیاه استفاده می‌شود.

۴. بحث و نتیجه‌گیری

در مطالعه حاضر، سامانه‌ای با ابعاد 120×100 اتم مورد مطالعه قرار می‌گیرد. شکل (۲) تغییرات مقدار β نسبت به ولتاژ الکترودها را در محدوده 0.5 تا 4 ولت نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل (۲)، نشان داده می‌شود، افزایش ولتاژ تأثیر جالب توجهی بر رسانایی و گذار فاز شبکه فسفرن سیاه دارد (روند افزایش β معادل با افزایش رسانایی و کاهش شکاف نواری و انتقال به فاز ویگنری می‌باشد و برعکس). پیشینه قله β در 2 ولت رخ می‌دهد.

در مطالعه‌ای که توسط وات^۱ و همکارانش بر روی فسفرن سیاه انجام گردید، این مهم تایید شده است [۳۶]. افزون بر این، مشخص شد که با تنظیم ولتاژ الکترودها، شکاف میانی به صورت

^۱ Watts

کامل شکافته شده‌اند، که منجر به حالت‌های موضعی می‌گردد که توان حرارتی را افزایش می‌دهد. این ویژگی‌ها نشان می‌دهد که نانوساختارهای BP نامزدهای امیدوارکننده‌ای برای کاربردهای ترموالکتریک هستند [۳۷].

در این راستا، سه حالت (رنگ سبز)، ۰/۷٪ (رنگ بنفش) و ۱/۱٪ (رنگ مشکی) در شکل (۳) در نظر گرفته شد. خط‌چین‌های آبی و قرمز برای توزیع پواسون و ویگنری، دو حد نظری را برای فاصله سطوح انرژی مشخص می‌کنند. توزیع پواسونی مرتبط به سطوح انرژی در فازهای عایق و توزیع ویگنری سطوح انرژی را در سامانه‌هایی با همبستگی یا برهمکنش قوی، اغلب در سامانه‌های فلزی یا آشوبناک توصیف می‌کند. ناخالصی‌ها می‌توانند پتانسیل دوره‌ای را مختل کنند و بر تعاملات بین سطوح انرژی تأثیر بگذارند.

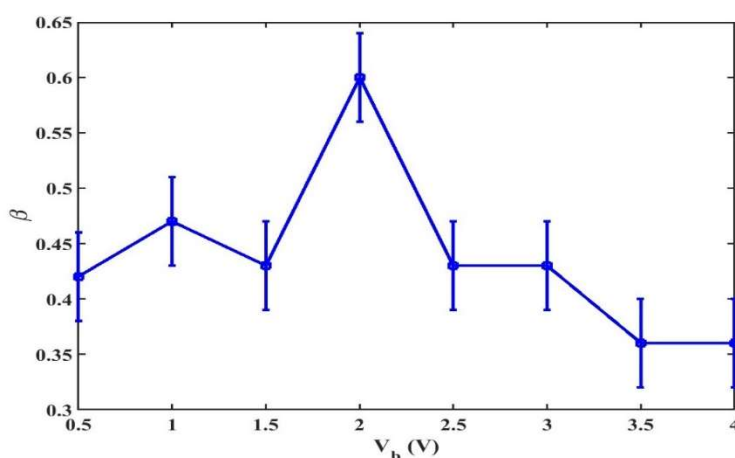


Fig. 2 Variations of the Brody parameter for an impurity-free black phosphorus lattice with dimensions of 100×120 atoms to the change in the voltage of the gold electrodes at a temperature of 300 K, taking into account the effect of lattice phonons with frequency ($\omega_0 = 32(THz)$) and in the absence of infrared light radiation.

شکل ۱ تغییرات کمیت برودی (β) برای شبکه فسفر سیاه بدون ناخالصی با ابعاد 100×120 اتم نسبت به تغییر ولتاژ الکترودهای طلا در دمای ۳۰۰ کلوین و با در نظر گرفتن تأثیر فونون‌های شبکه با بسامد ($\omega_0 = 32(THz)$) و در غیاب تابش نور مادون قرمز.

در غلظت‌های کم ناخالصی (رنگ سبز)، سامانه به حالت عایق با کمینه دافعه سطح نزدیک‌تر است که شبیه توزیع پواسون است. همانطور که غلظت ناخالصی بورون افزایش می‌یابد، اتم‌های بورون مراکز پراکندگی بیشتری را معرفی می‌کنند و برهمکنش‌ها را افزایش می‌دهند که منجر به توزیع نوع ویگنر-دایسون می‌شود که دلالت بر همبستگی‌های قوی‌تر و دافعه سطحی معمولی حالت‌های

فلزی یا رسانا دارد. به عبارتی با اعمال ناخالصی بورون، سامانه مورد مطالعه تمایل به سمت توزیع ویگنری را که معادل با افزایش رسانندگی است، طی می‌کند. در مطالعه‌ای که توسط دانیل^۱ و همکارانش انجام گردید، مشخص شد که درصد کمی از ناخالصی بورون سبب گذار شبکه BP از نیمه‌رسانایی به شبه‌فلز می‌شود [۳۸]. این نتایج نشان‌دهنده اهمیت کنترل دقیق نوع ناخالصی‌ها در طراحی و بهینه‌سازی دستگاه‌های الکترونیکی مبتنی بر BP است.

با توجه به اینکه دمای محیط عامل کلیدی در تنظیم رسانایی مواد می‌باشد، در گام بعدی تاثیر دمای محیط مورد مطالعه قرار می‌گیرد. در مطالعه حاضر، در سامانه با ابعاد 120×100 اتم با ناخالصی 0.1% بورون در ولتاژ 0.5 ولت، در محدوده دمایی $[450-0]$ کلوین، شرایط رسانایی شبکه فسفرن سیاه مورد بررسی قرار می‌گیرد. همانطور که در شکل (۴) نشان داده شده است، کمیت برودی (β) روند کاهشی مشخصی را در فاصله دمایی 0 تا 300 کلوین (بخش I) نشان می‌دهد. به دنبال آن یک روند افزایشی متوسط در محدوده دمایی 300 تا 380 کلوین (بخش II) و پس از این، روند کاهشی ملایمی از 380 به 450 کلوین (بخش III) مشاهده می‌شود.

در مطالعه‌ای که توسط ژانگ و همکارانش [۳۹] از راه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انجام شده است، مشخص گردید که با افزایش دما از 300 تا 450 کلوین، شکاف نوار فسفرن کاهش می‌یابد. کاهش شکاف نواری با افزایش دما [۴۰] نشان از وابستگی حرارتی غیرعادی آن است که به ترکیبی از مشارکت‌های انبساط حرارتی هارمونیک و شبکه مرتبط می‌شود [۴۱].

¹ Danil

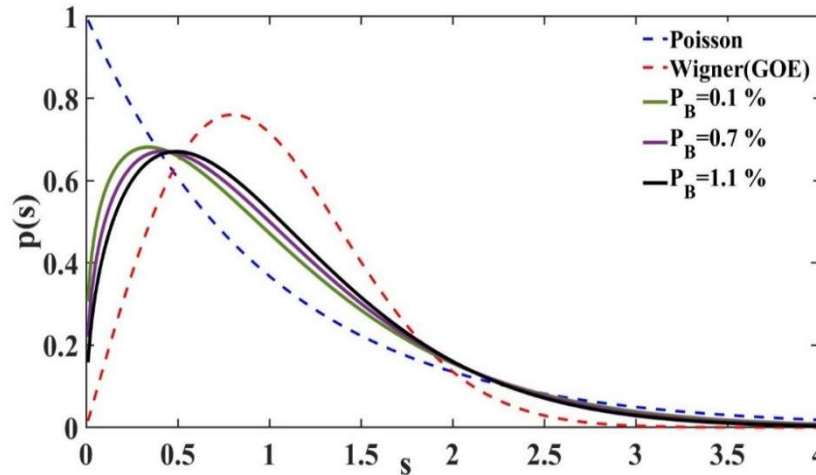


Fig. 3 Spectral distribution of energy levels ($p(s)$) of the black phosphorene lattice for different amounts of boron impurity at a voltage of 0.5 V and a temperature of 300 K in the presence of the effect of lattice phonons with frequency ($\omega_0 = 32(THz)$) and in the absence of infrared radiation. From green to black, the phase transition between the Poisson and Wigner distributions is shown.

شکل ۳ توزیع طیفی سطوح انرژی ($P(s)$) شبکه فسفر سیاه به ازای مقادیر مختلفی از ناخالصی بورون در ولتاژ ۰/۵ ولت و دمای ۳۰۰ کلوین در حضور تأثیر فونون‌های شبکه با بسامد ($\omega_0 = 32(THz)$) و در غیاب تابش مادون قرمز. رنگ‌های آبی و قرمز به ترتیب نشان دهنده توزیع پواسونی و ویگنری کامل هستند و از رنگ سبز تا سیاه، انتقال فاز بین توزیع پواسون و ویگنر را نشان می‌دهد.

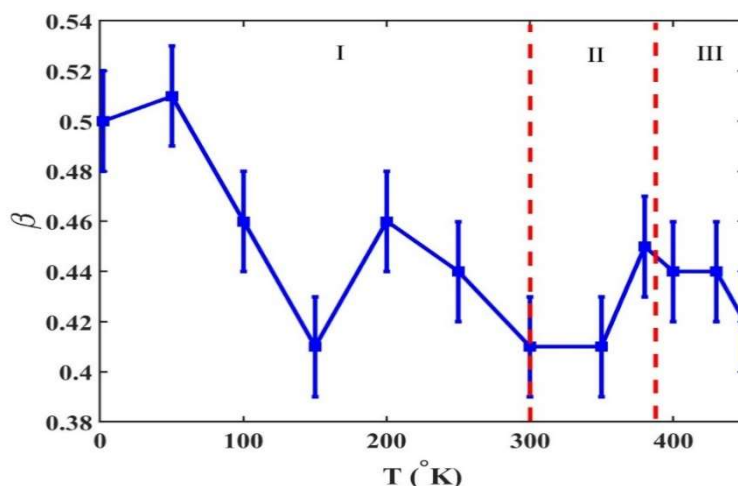


Fig. 4 Variations of the Brody parameter for a black phosphorene lattice with dimensions of 100×120 atoms with a 0.1% boron impurity at a voltage of 0.5 V to the change in ambient temperature in the presence of the effect of lattice phonons with frequency ($\omega_0 = 32(THz)$) and in the absence of infrared radiation.

شکل ۴ تغییرات کمیت برودی (β) برای شبکه فسفرن سیاه با ابعاد 100×120 اتم با ناخالصی ۰/۱٪ بورون در ولتاژ ۰/۵ ولت نسبت به تغییر دمای محیط در حضور تأثیر فونون‌های شبکه با بسامد ($\omega_0 = 32(THz)$) و در غیاب تابش مادون قرمز.

در شکل (۵)، با رسم نمودار جریان - ولتاژ، افزایش جریانی الکتریکی نسبت به افزایش ولتاژ نشان داده می‌شود که در مطالعه [۴۲] نشان داده شده است. همانطور که در شکل (۵)، نشان داده شده است، در حضور و غیاب تابش نور مادون قرمز، روند افزایشی جریان الکتریکی حفظ می‌شود. ازای حالتی که تابش نور مادون قرمز وجود ندارد (منحنی سبز)، در $V_b \leq 0.2(V)$ ، کمایش جریانی الکتریکی برای ساختار فسفرن سیاه بین دو الکتروود طلا صفر است و پس از آن به صورت نمایی افزایش می‌یابد، لذا از ۰/۲ حد آستانه ولتاژ برای شروع رانش جریانی الکتریکی خواهد بود. در حالی که برای فسفرن سیاه به گونه‌ای که جنس الکتروودها هم BP باشد، این آستانه در ۰/۶ ولت، رخ می‌دهد [۳۶]، نشان دهنده نیمه‌رسانایی شبکه BP است. در مطالعه‌ای که لی^۱ و همکارانش بر روی ساختار فسفرن/ژرمانیوم انجام دادند نیز افزایش نمایی جریانی الکتریکی (محاسبه شده از راه روش لاند-بوتیکر^۲) بعد از ۰/۲ نشان داده شده است [۴۳]. با اعمال نور مادون قرمز، بر روی سامانه پیشنهادی، روند افزایشی نمودار جریان ولتاژ حفظ می‌شود به گونه‌ای که در ۰/۵ ولت تا ۱ ولت،

¹ Hui Li

² Landauer-Buttiker equation

روند افزایشی آرامی وجود دارد و بعد از آن روند افزایشی سریعی شکل می گیرد. همچنین با توجه به شکل (۵) مشاهده می شود که با اعمال نور تابشی، مقدار جریان الکتریکی به روشنی نسبت به حالت بدون تابش نور، کمتر می باشد [۴۴] که این پدیده می تواند به جذب اشباع پذیر مرتبط باشد که یک پدیده نوری غیرخطی است که تحت شدت نور زیاد رخ می دهد [۴۵, ۴۶]. به عبارتی زمانی که انرژی نور فرودی بیشتر از شکاف نواری ماده باشد، فوتون ها می توانند جذب شوند و به نوبه خود، الکترون های نوار ظرفیت به نوار رسانایی برانگیخته می شوند. با افزایش شدت نور به سطح نسبتاً بالایی، تعداد حامل های نور به بالاتر از آستانه افزایش می یابد. در عین حال، نوار رسانایی دیگر نمی تواند الکترون ورودی را بپذیرد و جذب کاهش می یابد [۴۷].

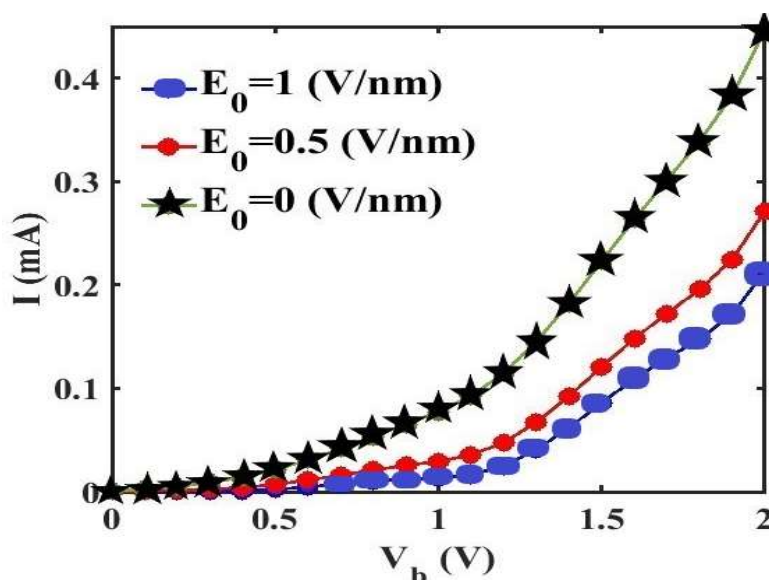


Fig. 5 Current-voltage diagram in a black phosphorus lattice with dimensions of 100×120 atoms in the presence of the effect of lattice phonons with frequency ($\omega_0 = 32(THz)$) and in the presence of infrared radiation with frequency ($\omega_0 = 28(THz)$).

شکل ۵ نمودار جریان-ولتاژ در شبکه فسفر سیاه با ابعاد 100×120 اتم در حضور تاثیر فونون های شبکه با بسامد ($\omega_0 = 32(THz)$) و در حضور تابش مادون قرمز با بسامد ($\omega_0 = 28(THz)$).

۵. نتیجه گیری

در این مطالعه، پتانسیل فسفر سیاه را به عنوان ماده ای برای فناوری های پیشرفته تشخیص مادون قرمز بررسی شده است. یافته های ما ویژگی های ساختاری و الکترونیکی منحصر به فرد فسفر سیاه

را برجسته می‌کند، که امکان تنظیم قابل توجه شکاف نواری آن را با استفاده از روش‌هایی چون افزودن ناخالصی فراهم می‌کند. بررسی‌های انجام شده با استفاده از نظریه آشوب کوانتومی و نظریه ماتریس تصادفی، بینش‌های ارزشمندی را در مورد دینامیک سامانه ارائه کرده است، و نشان می‌دهد که چگونه عوامل مختلف، از جمله دمای محیط و ولتاژ الکتروود، بر رسانایی الکتریکی فسفرن سیاه تأثیر می‌گذارد. نتایج نشان می‌دهد که شرایط بهینه برای تشخیص مادون قرمز را می‌توان در دمای اتاق با ولتاژ ۲ ولت و غلظت ناخالصی بور ۱/۱٪ بدست آورد که منجر به افزایش رسانایی و انتقال مطلوب به سمت فاز ویگنر می‌شود. افزون بر این، این مطالعه بر نقش حیاتی ناخالصی‌ها در تعدیل ویژگی‌های الکترونیکی فسفرن سیاه تأکید می‌کند، که به آن اجازه می‌دهد از حالت عایق به حالت فلزی تبدیل شود و در نتیجه عملکرد آن به عنوان یک آشکارساز نوری را بهبود بخشد. همانطور که فناوری‌های تشخیص مادون قرمز به تکامل خود ادامه می‌دهند، یافته‌های این پژوهش بر اهمیت مواد نوآورانه مانند فسفرن سیاه در برآوردن نیازهای رو به رشد کاربردهای جدید تأکید می‌کند. کار آینده باید بر روی بهینه‌سازی بیشتر روش‌های افزودن ناخالصی و کاوش در ادغام فسفرن سیاه با مواد دیگر برای افزایش عملکرد و عملکرد آشکارساز متمرکز شود. پتانسیل فسفر سیاه در قلمرو اپتوالکترونیک بسیار زیاد است و ادامه پژوهش‌های احتمالاً به پیشرفت‌های قابل توجهی در توانایی‌های تشخیص فروسرخ منجر خواهد شد.

۶. تقدیر و تشکر

از دانشگاه صنعتی ارومیه که امکان پژوهش را برای دانشجویان فراهم می‌کند، کمال تشکر را داریم.

۷. پیوست

در پژوهش حاضر، از نرم‌افزار متلب ۲۰۲۲ جهت محاسبه نتایج استفاده شد. که الگوریتم مورد استفاده برای محاسبه کمیت برودی (β) به صورت زیر است:

Algorithm 1: P(s)

```

1: Input: Hamiltonian Matrix H
2: eigen_values = eig(H)
   eigen_values = sort(real(eigen_values))
3: H_size = length(eigen_values)
4: eigen_values = eigen_values(round(0.1*H_size):end-
   round(0.1*H_size))

```

```

eta = zeros(1, length(eigen_values))
5:   For index_E = 1:length(eigen_values) do
6:     N = find(eigen_values <= eigen_values(index_E))
       eta(index_E) = length(N);
7:   end
   f = polyfit(eigen_values', eta, p_degree);
8:   chi = zeros(length(eigen_values), 1);
9:   For index_f = 1:length(f)
10:    chi = chi + f(index_f) * eigen_values.^ (length(f)-index_f)
11:   end
   E1 = sort(chi)
   hist(E1)
   s = diff(E1)
   a = find(s > 7)
   s(a) = []
   n_bins = 2 * sqrt (length(E1))
   [p_s, bin] = hist (s, n_bins)
   binsize = (bin(2)-bin(1))
   p_s = p_s./sum(p_s)/binsize
12:   mean(s)
   Eta = 0.01:0.01:0.99
   p_degree = 40
   counter = 1
   Error = zeros(1, length(Eta))
   index_eta = 0
13:   for eta = Eta
       index_eta = index_eta + 1;
       alpha = gamma((eta+2)/(eta+1))^(eta+1);
       A = alpha .* (eta+1);
       p_eta = A * bin.^eta .* exp(-alpha.*bin.^(eta+1));
14:       error = p_eta - p_s;
       Error(index_eta) = sum(error.^2);
15:   end
   a = find(Error == min(Error))
   Optimized_eta(counter) = Eta(a)
   optimized_alpha = gamma((Optimized_eta(counter)+2)/
16:   (Optimized_eta(counter)+1))^(Optimized_eta(counter)+1)
   x = 0.01:0.01:max(s)
   p_eta = optimized_alpha .* (Optimized_eta(counter)+1) .*
       x.^Optimized_eta(counter)...
17:   .* exp(-optimized_alpha.*x.^(Optimized_eta(counter)+1))
   p_w = (pi/2).*x.*exp(-(pi/4)*x.^2)
   p_p = exp(-x)
18:   createfigureP_s(bin, p_s, x, p_w, p_p)
   hold on
   plot(x, p_eta, 'g', 'LineWidth', 2)
   plot(x, p_w, 'g', 'r', x, p_p, 'k')
   hold on

```

stairs(bin,p_s)

Algorithm 2: CreatefigureP_s

```

1: function createfigureP_s (X1, YMatrix1, X2, YMatrix2, YMatrix3)
    %CREATEFIGURE(X1, Y1, YMATRIX1)
    % X1: stairs x
    % Y1: stairs y
    % YMATRIX1: matrix of y data
2: % Create figure
    figure1 = figure

    % Create axes
    axes1 = axes('Parent',figure1)
    box(axes1,'on')
    hold(axes1,'all')

    % Create stairs
    plot1(1) = stairs(X1,YMatrix1,'Parent',axes1,'Color', [0 0 0])

    % Create multiple lines using matrix input to plot
    plot1(2) = plot(X2,YMatrix2,'Parent',axes1)
    plot1(3) = plot(X2,YMatrix3,'Parent',axes1)
    set (plot1(1),'DisplayName','Numeric','Color', [0 0 0])
    set (plot1(2),'Color', [1 0 0] , 'DisplayName','Wigner')
    set (plot1(3),'Color', [0 0 1] , 'DisplayName','Poisson')

3: % Create xlabel
    xlabel ('s','FontSize',16,'FontName','Times New Roman')

    % Create ylabel
    ylabel('P(s)','FontSize',16,'FontName','Times New Roman')
4:
5: % Create legend
    legend(axes1,'show') ;
    setlegend,'EdgeColor', [1 1 1] , 'YColor', [1 1 1] , 'XColor', [1 1 1] ,...
    'FontSize',14,...
    'FontName','Times New Roman' ;

```

منابع

- [1] Xu, K., Zhou, W. and Ning, Z., "Integrated structure and device engineering for high performance and scalable quantum dot infrared photodetectors", *Small* **16**(47), 2003397, 2020. <https://doi.org/10.1002/sml.202003397>
- [2] Yang, M., Han, Q., Liu, X., Han, J., Zhao, Y., He, L., Gou, J., Wu, Z., Wang, X. and Wang, J., "Ultrahigh stability 3D TI Bi2Se3/MoO3 thin film heterojunction infrared photodetector at

- optical communication waveband", *Advanced Functional Materials* **30(12)**, 1909659, 2020. <https://doi.org/10.1002/adfm.201909659>
- [3] Tadeo, I.J., Mukhokosi, E.P., Krupanidhi, S.B. and Umarji, A.M., "Low-cost VO₂ (M1) thin films synthesized by ultrasonic nebulized spray pyrolysis of an aqueous combustion mixture for IR photodetection", *RSC advances* **9(18)**, 9983-9992, 2019. <https://doi.org/10.1039/C9RA00189A>
- [4] Weng, B., Qiu, J., Zhao, L., Yuan, Z., Chang, C. and Shi, Z., "Recent development on the uncooled mid-infrared PbSe detectors with high detectivity", In *Quantum Sensing and Nanophotonic Devices XI* **8993**, 178-185. SPIE, 2014. <https://doi.org/10.1117/12.2041276>
- [5] Kopytko, M., Kębłowski, A., Gawron, W., Martyniuk, P., Madejczyk, P., Jóźwikowski, K., Kowalewski, A., Markowska, O. and Rogalski, A., "MOCVD grown HgCdTe barrier detectors for MWIR high-operating temperature operation", *Optical Engineering* **54(10)**, 105105-105105, 2015. <https://doi.org/10.1117/1.OE.54.10.105105>
- [6] Matveev, B., Aidaraliev, M., Gavrilov, G., Zotova, N., Karandashov, S., Sotnikova, G., Stus, N., Talalakin, G., Il'inskaya, N. and Aleksandrov, S., "Room temperature InAs photodiode-InGaAs LED pairs for methane detection in the mid-IR", *Sensors and Actuators B: Chemical* **51(1-3)**, 233-237, 1998. [https://doi.org/10.1016/S0925-4005\(98\)00200-7](https://doi.org/10.1016/S0925-4005(98)00200-7)
- [7] Fedeli, J.M. and Nicoletti, S., "Mid-infrared (Mid-IR) silicon-based photonics", *Proceedings of the IEEE* **106(12)**, 2302-2312, 2018. <https://doi.org/10.1109/JPROC.2018.2844565>
- [8] Wu, J., Chen, H.Y., Yang, N., Cao, X., Yan, X., Liu, F., Sun, Q., Ling, X., Guo, J. and Wang, H., "High tunnelling electroresistance in a ferroelectric van der Waals heterojunction via giant barrier height modulation", *Nature Electronics* **3(8)**, 466-472, 2020. <https://doi.org/10.1038/s41928-020-0441-9>
- [9] Guo, Q., Pospischil, A., Bhuiyan, M., Jiang, H., Tian, H., Farmer, D., Deng, B., Li, C., Han, S.J., Wang, H. and Xia, Q., "Black phosphorus mid-infrared photodetectors with high gain", *Nano letters* **16(7)**, 4648-4655, 2016. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b01977>
- [10] Yuan, S., Shen, C., Deng, B., Chen, X., Guo, Q., Ma, Y., Abbas, A., Liu, B., Haiges, R., Ott, C. and Nilges, T., "Air-stable room-temperature mid-infrared photodetectors based on hBN/black arsenic phosphorus/hBN heterostructures", *Nano letters* **18(5)**, 3172-3179, 2018. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.8b00835>
- [11] Shen, C., Liu, Y., Wu, J., Xu, C., Cui, D., Li, Z., Liu, Q., Li, Y., Wang, Y., Cao, X. and Kumazoe, H., "Tellurene photodetector with high gain and wide bandwidth", *ACS nano* **14(1)**, 303-310, 2019. <https://doi.org/10.1021/acs.nano.9b04507>
- [12] Spirito, D., Coquillat, D., De Bonis, S.L., Lombardo, A., Bruna, M., Ferrari, A.C., Pellegrini, V., Tredicucci, A., Knap, W. and Vitiello, M.S., "High performance bilayer-graphene terahertz detectors", *Applied Physics Letters* **104(6)**, 2014. <https://doi.org/10.1063/1.4864082>
- [13] Li, X.L., Han, W.P., Wu, J.B., Qiao, X.F., Zhang, J. and Tan, P.H., "Layer-number dependent optical properties of 2D materials and their application for thickness determination", *Advanced Functional Materials* **27(19)**, 1604468, 2017. <https://doi.org/10.1002/adfm.201604468>
- [14] Guo, Q., Yu, R., Li, C., Yuan, S., Deng, B., García de Abajo, F.J. and Xia, F., "Efficient electrical detection of mid-infrared graphene plasmons at room temperature", *Nature materials* **17(11)**, 986-992, 2018. <https://doi.org/10.1038/s41563-018-0157-7>
- [15] Yarmohammadi, M., Hoi, B.D. and Phuong, L.T.T., "Systematic competition between strain and electric field stimuli in tuning EELS of phosphorene", *Scientific Reports* **11(1)**, 3716, 2021. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-83213-0>
- [16] Solomenko, A.G., Sahalianov, I.Y., Radchenko, T.M. and Tatarenko, V.A., "Straintronics in phosphorene via tensile vs shear strains and their combinations for manipulating the band gap", *Scientific Reports* **13(1)**, 13444, 2023. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-40541-7>
- [17] Li, P., Liu, S., Zhou, H., Xu, J., Huang, K., Zhang, L., Yu, J. and Wang, L., "Impurity properties in phosphorene: First-principles calculations and comparisons", *Materials Science in Semiconductor Processing* **151**, 107006, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2022.107006>

- [18] Arani, L.A., Hosseini, A., Asadi, F., Masoud, S.A. and Nazemi, E., "Intelligent computer systems for multiple sclerosis diagnosis: a systematic review of reasoning techniques and methods", *Acta Informatica Medica* **26(4)**, 258, 2018. <https://doi.org/10.5455/aim.2018.26.258-264>
- [19] Chen, X., Wang, L., Wu, Y., Gao, H., Wu, Y., Qin, G., Wu, Z., Han, Y., Xu, S., Han, T. and Ye, W., "Probing the electronic states and impurity effects in black phosphorus vertical heterostructures", *2D Materials* **3(1)**, 015012, 2016. <https://doi.org/10.1088/2053-1583/3/1/015012>
- [20] Mortezaei Nobahari, M., "Electro-optical properties of strained monolayer boron phosphide", *Scientific Reports* **13(1)**, 9849, 2023. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-37099-9>
- [21] Paprotzki, E., Osterkorn, A., Mishra, V. and Kehrein, S., "Quench dynamics in higher-dimensional Holstein models: Insights from truncated Wigner approaches", *Physical Review B* **109(17)**, 174303, 2024. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.174303>
- [22] Jung, J. and MacDonald, A.H., "Magnetoelectric coupling in zigzag graphene nanoribbons", *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics* **81(19)**, 195408, 2010. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.195408>
- [23] Rudenko, A.N., Yuan, S. and Katsnelson, M.I., "Toward a realistic description of multilayer black phosphorus: From GW approximation to large-scale tight-binding simulations", *Physical Review B* **92(8)**, 085419, 2015. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.085419>
- [24] Illas, F., de PR Moreira, I., Bofill, J.M. and Filatov, M., "Extent and limitations of density-functional theory in describing magnetic systems", *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics* **70(13)**, 132414, 2004. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.70.132414>
- [25] Qin, M., "Combination of tensor network states and Green's function Monte Carlo", *Physical Review B* **102(12)**, 125143, 2020. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.125143>
- [26] Chng, C.P., Dowd, A., Mechler, A. and Hsia, K.J., "Molecular dynamics simulations reliably identify vibrational modes in far-IR spectra of phospholipids", *Physical Chemistry Chemical Physics* **26(27)**, 18715-18726, 2024. <https://doi.org/10.1039/D4CP00521J>
- [27] Wigner, E.P., "Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions i", *The Collected Works of Eugene Paul Wigner: Part A: The Scientific Papers*, 524-540, 1993. https://doi.org/10.1007/978-3-662-02781-3_35
- [28] Brody, T.A., Flores, J., French, J.B., Mello, P.A., Pandey, A. and Wong, S.S., "Random-matrix physics: spectrum and strength fluctuations", *Reviews of Modern Physics* **53(3)**, 385, 1981. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.53.385>
- [29] Mehta, M.L., "Random matrices. Third. Vol. 142", *Pure and Applied Mathematics (Amsterdam). Elsevier/Academic Press, Amsterdam*, **9**, 2004.
- [30] Beenakker, C.W., "Random-matrix theory of quantum transport", *Reviews of modern physics* **69(3)**, 731, 1997. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.69.731>
- [31] Haldar, S.K., Chakrabarti, B., Chavda, N.D., Das, T.K., Canuto, S. and Kota, V.K.B., "Level-spacing statistics and spectral correlations in diffuse van der Waals clusters", *Physical Review A* **89(4)**, 043607, 2014. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.89.043607>
- [32] Schierenberg, S., Bruckmann, F. and Wettig, T., "Wigner surmise for mixed symmetry classes in random matrix theory", *Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics* **85(6)**, 061130, 2012. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.85.061130>
- [33] Magner, A.G., Levon, A.I. and Radionov, S.V., "Simple approach to the chaos-order contributions and symmetry breaking in nuclear spectra", *The European Physical Journal A* **54(12)**, 214, 2018. <https://doi.org/10.1140/epja/i2018-12645-8>
- [34] Brody, T.A., "A statistical measure for the repulsion of energy levels", *Lettere al Nuovo Cimento (1971-1985)* **7(12)**, 482-484, 1973. <https://doi.org/10.1007/BF02727859>
- [35] Batistić, B., Lozej, Č. and Robnik, M., "Statistical properties of the localization measure of chaotic eigenstates and the spectral statistics in a mixed-type billiard", *Physical Review E* **100(6)**, 062208, 2019. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.062208>

- [36] Watts, L., Haidar, E.A. and Stampfl, C., "Electron Transport Study of Hydrogen Peroxide Sensing with 2D Phosphorene and Molybdenum Disulfide", *The Journal of Physical Chemistry C* **126(36)**, 15397-15404, 2022. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c02520>
- [37] Ma, R., Geng, H., Deng, W.Y., Chen, M.N., Sheng, L. and Xing, D.Y., "Effect of the edge states on the conductance and thermopower in zigzag phosphorene nanoribbons", *Physical Review B* **94(12)**, 125410, 2016. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.125410>
- [38] Boukhvalov, D.W., "The atomic and electronic structure of nitrogen- and boron-doped phosphorene." *Physical Chemistry Chemical Physics* **17(40)**, 27210-27216, 2015. <https://doi.org/10.1039/C5CP05071E>
- [39] Zhang, S. and Sun, H., "Effects of temperature on strain engineering and transition-metal adatom magnetization in phosphorene: ab initio molecular dynamics studies", *Physical Review B* **103(15)**, 155432, 2021. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.155432>
- [40] Huang, S., Wang, F., Zhang, G., Song, C., Lei, Y., Xing, Q., Wang, C., Zhang, Y., Zhang, J., Xie, Y. and Mu, L., "From anomalous to normal: temperature dependence of the band gap in two-dimensional black phosphorus", *Physical Review Letters* **125(15)**, 156802, 2020. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.156802>
- [41] Villegas, C.E., Rocha, A.R. and Marini, A., "Anomalous temperature dependence of the band gap in black phosphorus", *Nano letters* **16(8)**, 5095-5101, 2016. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b02035>
- [42] Erande, M.B., Pawar, M.S. and Late, D.J., "Humidity sensing and photodetection behavior of electrochemically exfoliated atomically thin-layered black phosphorus nanosheets", *ACS applied materials & interfaces* **8(18)**, 11548-11556, 2016. <https://doi.org/10.1021/acsami.5b10247>
- [43] Dai, X., Zhang, L., Jiang, Y. and Li, H., "Electronic transport properties of phosphorene/graphene (silicene/germanene) bilayer heterostructures: A first-principles exploration", *Ceramics International* **45(9)**, 11584-11590, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.03.029>
- [44] Youngblood, N. and Li, M., "Ultrafast photocurrent measurements of a black phosphorus photodetector", *Applied Physics Letters* **110(5)**, 2017. <https://doi.org/10.1063/1.4975360>
- [45] Paschotta, R., *Encyclopedia of laser physics and technology*. Vol. 1. Berlin: Wiley-vch, 2008. <https://doi.org/10.1002/9783527640331.fmatter>
- [46] Zeng, L., Zhang, X., Liu, Y., Yang, X., Wang, J., Liu, Q., Luo, Q., Jing, C., Yu, X.F., Qu, G. and Chu, P.K., "Surface and interface control of black phosphorus", *Chem* **8(3)**, 632-662, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.chempr.2021.11.022>
- [47] Huang, J., Dong, N., Zhang, S., Sun, Z., Zhang, W. and Wang, J., "Nonlinear absorption induced transparency and optical limiting of black phosphorus nanosheets", *ACS Photonics* **4(12)**, 3063-3070, 2017. <https://doi.org/10.1021/acsphotonics.7b00598>