

Research Paper

Investigation of Electronic and Transport Properties of Armchair and Zigzag β_{12} Borophene Nanoribbon¹

Mohammad Reza Heidari Moghari² and Rouhollah Farghadan³ *

Received: 2022.07.30

Revised: 2023.02.22

Accepted: 2023.04.15

Abstract

The electronic and transport properties of the zigzag and armchair borophene nanoribbons β_{12} with different edge geometries using the multi-band tight-binding model and Landauer Butticker formalism were investigated by the mode matching model. Our results show that nanoribbons with different edge geometries show different electronic behaviors from metal phase to semiconductor according to and under thermal gradient or voltage poetical produce electrical current from nano ampere to microampere (most of them have ohmic behavior). Also, vacancy defects with controlling energy gaps could change the phase from metal to semiconductor or from semiconductor to metal in different edge geometries. Moreover, vacancy defects could control the values of electrical currents. Finally, the edge geometries; and defect engineering with application thermal gradient or electrostatic potential could control the electronic and transport properties and convert borophene nanoribbons into a good candidate for application in nano-electronic devices.

Keywords: *Borophene Nanoribbons, Tight-binding Model, Electrical Transport, Thermoelectric Properties, Vacancy Defects.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.41035.1292

²M. Sc. Student, Department of Physics, University of Kashan, Kashan, Iran. Email: m.heidari1117@gmail.com

³ Associate Professor, Department of Physics, University of Kashan, Kashan, Iran. (Corresponding Author). Email: rfarghadan@kashanu.ac.ir



بررسی ویژگی‌های الکترونی و تراپردی نانونوارهای آرمچیر و زیگزراگ^۱ β_{12}

محمد رضا حیدری موعاری^۲ و روح اله فرقدان^{۳*}

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۵/۰۸

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۱/۱۲/۰۳

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۱/۲۶

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال سیزدهم، پیاپی ۳۳، تابستان ۱۴۰۲

صص ۳۱ - ۴۵

چکیده:

ویژگی‌های الکترونی و تراپردی نانونوارهای زیگزراگ و آرمچیر بوروفن (β_{12}) با لبه‌های هندسی مختلف، با استفاده از الگوی تنگ‌بست چند نوازی و فرمول‌بندی لانداور بوتیکر و انطباق مد مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که نانونوارهای مختلف با توجه به هندسه لبه، رفتار الکترونی متفاوتی از فاز فلزی تا نیمه‌رسانایی نشان داده و تحت اثر گرادیان دما و یا اختلاف پتانسیل جریان‌هایی از مرتبه نانوامپر تا میکروآمپر، بیشتر با رفتار اهمی، ایجاد می‌کنند. همچنین نقص‌های تهی‌جای با تغییر اندازه شکاف انرژی می‌توانند سبب تغییر فاز از فلزی به نیمه‌رسانایی و یا از نیمه‌رسانایی به فلزی بسته به نوع لبه نانونوار شوند. همچنین نقص‌های تهی‌جای می‌توانند مقادیر جریان‌های الکتریکی را کنترل نمایند. در پایان، هندسه و شکل لبه‌ها، مهندسی نقص، و اعمال ولتاژ و یا گرادیان‌های گرمایی می‌تواند با کنترل ویژگی‌های الکترونی و تراپردی نانونوارهای بوروفن را به گزینه مناسبی به منظور کاربرد در نانو قطعات الکترونیکی تبدیل نماید.

واژگان کلیدی: نانو نوارهای بوروفن، الگوی تنگ‌بست، تراپرد الکتریکی، ویژگی‌های ترموالکتریکی، نقص تهی‌جای.

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.41035.1292

^۲ دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه فیزیک دانشگاه کاشان، کاشان، ایران. Email: m.heidari117@gmail.com

^۳ دانشیار، گروه فیزیک دانشگاه کاشان، کاشان، ایران. (نویسنده مسئول). Email: rfarghadan@kashanu.ac.ir



۱. مقدمه

کشف مواد دوبعدی و ویژگی‌های جالب آن‌ها مطالعات زیادی را در پی داشته است. بوروفن یک ساختار دوبعدی از اتم‌های بور است که به دلیل توانایی بور در ایجاد پیوندهای چند مرکزی و دو الکترونی، ایزوتوپ‌ها و ساختارهای گوناگونی دارد. همانطور که می‌دانیم، اتم بور در جدول تناوبی عنصرها در همسایگی اتم کربن قرار داشته و دارای یک الکترون کمتر از کربن است. از این رو، ساختار لانه‌زنبوری آن ناپایدار است. اگرچه، ورود اتم‌های اضافی بور در شبکه لانه‌زنبوری می‌تواند با ایجاد تعادل و ایجاد پیوندهایی بین چند اتم بور با دو الکترون، ساختارها را پایدار کند [۱ و ۲]. ورود اتم‌های بور سبب می‌شود پیوندها بسیار پیچیده باشند، در نتیجه تنوع ساختاری و پیچیدگی فیزیکی و شیمیایی فراتر از اتم‌های کربن است [۳].

یکی از ساختارهای مورد توجه، بوروفن β_{12} که مسطح و با پایداری زیاد است [۱]. این ساختار با روش پرتو مولکولی و در حضور خلاء بالا روی بستر نقره (۱۱۱) به صورت تجربی ایجاد شده است [۴]. بررسی‌ها نشان می‌دهد که ساختارهای بوروفن β_{12} دارای فاز فلزی هستند. الگوی تنگ بست چندنواری، ساختار نوار انرژی صفحه را با هماهنگی خوبی با نظریه تابعی چگالی محاسبه می‌کند [۱ و ۵-۹]. همچنین، تاثیر میدان الکتریکی، ناخالصی‌های مختلف و ولتاژ بایاس بر هدایت حرارتی و الکترونی بررسی شده است. افزون بر موارد اشاره شده، با استفاده از تابع گرین و فرمول‌بندی لاندائور بوتیکر، جریان برای عرض‌های مختلف با ویژگی‌های الکترونی متفاوت محاسبه شده است [۱۰-۱۳]. حالت‌های مغناطیسی و تاثیر لبه در نانوآرهای آرمچیر و زیگزاگ و اثرات مغناطیسی لبه نیز مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که نانوآرهای آرمچیر با لبه‌های مختلف با نوار انرژی وابسته به اسپین، اسپین قطبیده بوده و می‌تواند در قطعات اسپینترونیکی به کار رود.

در این مقاله با استفاده از روش تنگ‌بست چندنواری، ویژگی‌های الکترونی و تراپردی نانوآرهای بورفن با لبه‌های مختلف بررسی شده است. سپس با مهندسی تهی‌جای، ویژگی‌های الکترونی و به ویژه شکاف نواری به منظور بهینه‌سازی جریان‌های الکترونی کنترل شده است. نتایج نشان می‌دهد که این نانوآرها با توجه به کنترل ویژگی‌های الکترونی و تراپردی به کمک هندسه‌های مختلف و آرایش لبه نانوآرها می‌توانند گزینه مناسبی در قطعات الکترونیکی باشند.



۲. محاسبات نظری

برای انجام محاسبات ابتدا باید با استفاده از پارمترها و بردارهای شبکه، ساختار β_{12} را برای نانونوارهای آرمچیر و زیگزراگ بوروفن در نرم افزار متلب با تشکیل هامیلتونی چندنواری شبیه‌سازی شود. از نظر جایگاه هندسی، سلول واحد بوروفن با ۵ نوع اتم مختلف مشاهده می‌شود (شکل ۱). فاصله بین تمام اتم‌های این ساختار برابر $(l = 1.69 \text{ \AA})$ است و بردار شبکه $a = 5.068 \text{ \AA}$ و $b = 2.9236 \text{ \AA}$ در نظر گرفته شده است [۱۱، ۱۰، ۶، ۳، ۱]. آزمایش‌ها و محاسبات اصول اولیه نشان می‌دهند که نوارهای نزدیک انرژی فرمی از مدار p_z بدست می‌آیند. از این رو، در این نوع نانونوار تنها مدار p_z در هامیلتونی نقش دارد و به تعداد اتم‌های موجود در سلول واحد، نوار انرژی داریم (تنگ بست پنج نواری)، برای این هامیلتونی داریم:

$$\hat{H}^0 = \sum_i \varepsilon_i f_i^\dagger f_i + \sum_{\langle i|j \rangle} t_{ij} f_i^\dagger f_j + H.C. \quad (1)$$

که در آن، $f_i^\dagger f_j$ می‌تواند برای هر یک از اتم‌های $\{\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}, \hat{d}, \hat{e}\}$ در سلول واحد باشد، t_{ij} ضریب انتگرال جهش بین نزدیک‌ترین همسایه مکان‌های اتمی (i, j) است و ε_i انرژی درون‌جایگاهی را نشان می‌دهد [۱۱، ۷-۵]. اصطلاح $H.C.$ کوتاه شده‌ی عملگرهای مخلوط هرمیتی است. با توجه به برهمکنش بین اتم‌های بور و اتم‌های نقره زیرلایه، سه الگو برای این نوع بوروفن وجود دارد که شامل الگوی همگن (H)، الگوی وارون متقارن (IS) و الگوی وارون نامتقارن (INS) است. در الگوی وارون نامتقارن، اثرات اتم نقره منجر به شکسته شدن تقارن وارونی ساختار شبکه می‌شود. در اینجا می‌توان با استفاده از منابع [۱۳-۷، ۵-۱]، سه نوع نوار انرژی را برای هر مورد محاسبه کرد که برای آسانی و تمرکز روی ادامه کار تنها از الگوی وارون متقارن (IS) استفاده و نتیجه بیان خواهد شد.

در شکل ۱، نانونوارها و سلول‌های آرمچیر و زیگزراگ نشان داده شده است. هر سلول با توجه به عرض و لبه نوار، تعداد مشخص اتم در خود دارد و هامیلتونی ما بر اساس این تعداد اتم در سلول واحد نوشته و محاسبه شده است. هنگامی که از یک سلول واحد به سلول واحد همسایه آن می‌رویم در تابع موج کلی و هامیلتونی به اندازه $e^{ik.a}$ اختلاف فاز ایجاد می‌شود. از این رو، داریم:

$$H(k_x) = H_1 e^{ik_x a} + H_0 + H_1^\dagger e^{-ik_x a} \quad (2)$$

که در آن، H_0 هامیلتونی و برهمکنش در سلول واحد و H_1 برهمکنش بین سلول واحد با سلول همسایه است. a نیز همان بردار اتصال و جابه‌جایی بین دو سلول واحد می‌باشد [۱۴، ۱۲، ۱۱]. در حقیقت، در سلول واحد برهمکنش‌ها تنها با استفاده از انتگرال‌های جهش وارد شده و تغییر فاز تنها

در محل اتصال سلول واحد با سلول همسایه وارد می‌شود. برای بررسی لبه‌های مختلف، شبیه‌سازی برای نانونوار آرمچیر با تعداد ۱۵ اتم بور که لبه بالا و پایین دارای اتم‌های مختلف (a,c,e) و (b,d) است، در مقالات به لبه AB معروف است، شروع شده است (شکل ۱b). برای بررسی انواع مختلف لبه می‌توان تعدادی از اتم‌ها را حذف و سلول واحد و نانونوارها با لبه‌های مختلف را بررسی نمود. با توجه به شکل ۱، حالت‌های متفاوتی وجود دارد (برش و اتمام نانونوار با اتم‌های مختلف). همچون قسمت (a) که سه اتم از پایین نانونوار نوع AB برداشته و حذف می‌شوند، در این حالت نانونوار با اتم‌های نوع b,d شروع و به پایان می‌رسد که این نوع نانونوار آرمچیر به لبه BB شناخته می‌شود. یا قسمت (c) که دو اتم از بالا نانونوار نوع AB برداشته و حذف می‌شوند و نانونوار جدید لبه AA نامیده می‌شود [۱۲]. در ادامه نانونوارهای زیگزاگ در حالتی بررسی شده‌اند که لبه بالا و پایین با اتم‌های یکسان شروع و تمام شوند (همانند شکل ۱) که در اینجا سه نانونوار زیگزاگ با تعداد ۱۳، ۱۵ و ۱۱ اتم بور در سلول واحد را مشاهده می‌شود. نتایج و نوارهای انرژی با روش تنگ بست ۵ نواری و به همراه تراپردی که با استفاده از فرمول بندی انطباق مد انجام می‌شود:

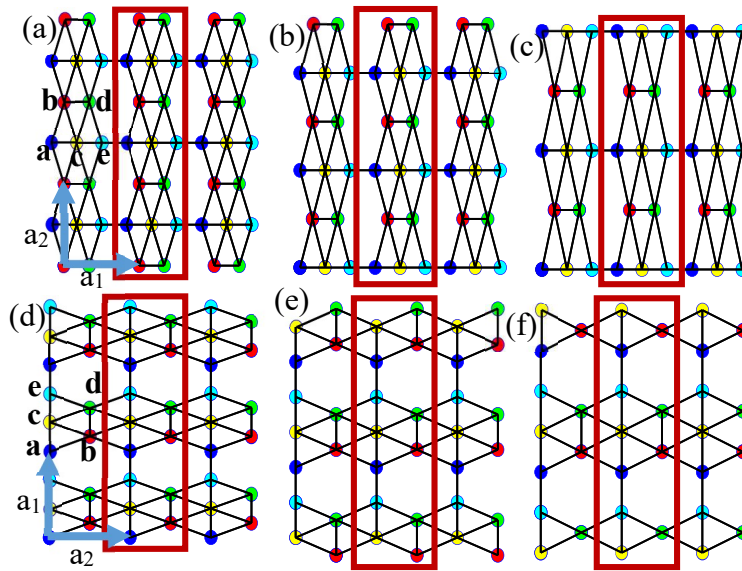
$$T(\varepsilon) = \sum_{\alpha=1}^{M_f} \sum_{i=1}^N \psi_{\alpha i}^{\dagger} \psi_{\alpha i} \quad (3)$$

که در آن، $\psi_{\alpha i}$ قسمت دو مولفه‌ای تابع موج هامیلتونی برای هر ε , k و i بوده و نشان‌دهنده جایگاه اتمی است و N تعداد اتم‌های موجود در سلول واحد است. در حقیقت، در اینجا M_f مجموع تعداد نوارهای انرژی با سرعت گروه مثبت است که شمارش می‌شوند و به عنوان ضریب جهش نشان داده می‌شود [۱۴]. در ادامه برای محاسبه جریان گرمایی (با استفاده از اعمال اختلاف دما) و جریان الکتریکی (با استفاده از اعمال اختلاف ولتاژ) روی الکترودهای (اتصالات) دو طرف این نانونوارها از فرمول بندی لاندائور بوتیکر استفاده شده است:

$$I_{\sigma,\eta} = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T_{\sigma,\eta}(\varepsilon) [f_L(\varepsilon, \mu_L) - f_R(\varepsilon, \mu_R)] d\varepsilon \quad (4)$$

که در آن، e بار الکترون، h ثابت پلانک، $T_{\sigma,\eta}$ تراپرد محاسبه شده و $f_L(\varepsilon, \mu_L)$ تابع توزیع فرمی دیراک با انرژی فرمی و پتانسیل الکتروشیمیایی الکتروود چپ (راست) می‌باشند [۱۱، ۱۲، ۱۴، ۱۵].

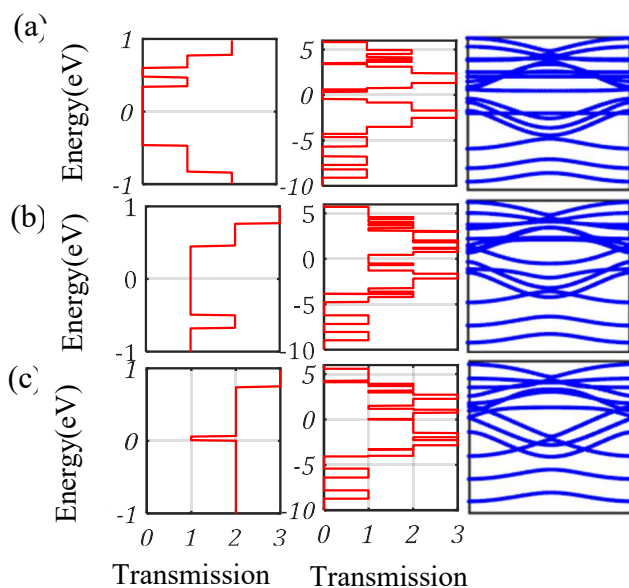




شکل ۱ نانونوارهای آرمچیر و زیگزگاک بوروفن β_{12} . در این شکل، بردارهای a_1, a_2 بردارهای شبکه هستند، مستطیل‌ها سلول واحد را نشان می‌دهند و نوع اتم‌های لبه در هر نانونوار نشان داده شده است. (a) نانونوار آرمچیر با تعداد ۱۷ اتم در سلول واحد که با اتم‌های نوع b, d شروع و تمام شده و لبه BB نام دارد. نوع تمام اتم‌های موجود در نانونوارهای آرمچیر به همراه رنگ متفاوت مشخص شده است، (b) نانونوار آرمچیر با تعداد ۱۵ اتم در سلول واحد که با اتم‌های نوع a, c, e شروع و با اتم‌های b, d تمام می‌شود و لبه AB نام دارد، (c) نانونوار آرمچیر با تعداد ۱۳ اتم در سلول واحد که با اتم‌های نوع a, c, e شروع و تمام شده و لبه AA نام دارد، (d) نانونوار زیگزگاک با تعداد ۱۵ اتم در سلول واحد و لبه شامل اتم‌های نوع e, a است. نوع اتم‌های موجود در این نانونوار زیگزگاک به همراه رنگ متفاوت مشخص شده است، (e) نانونوار زیگزگاک با تعداد ۱۳ اتم در سلول واحد و لبه شامل اتم‌های نوع b, d و (f) نانونوار زیگزگاک با تعداد ۱۵ اتم در سلول واحد و لبه شامل اتم‌های نوع C است.

۳. بحث و نتیجه گیری

ابتدا با استفاده از روش تنگ‌بست و انطباق مد نوار انرژی و ضریب عبور برای نانونوارهای آرمچیر و زیگزاگ با هندسه مختلف در لبه محاسبه انجام شده است. در شکل ۲، نوار انرژی نانونوارهای آرمچیر با لبه‌های مختلف و در شکل ۳، نوار انرژی نانونوارهای زیگزاگ با لبه‌های مختلف نشان داده شده است. با توجه به شکل ۲ (a)، می‌توان وجود شکاف انرژی در نانونوار آرمچیر لبه BB با تعداد ۱۷ اتم بور در سلول واحد را مشاهده کرد که سبب فاز نیمه‌رسانایی این نوع نانونوار شده



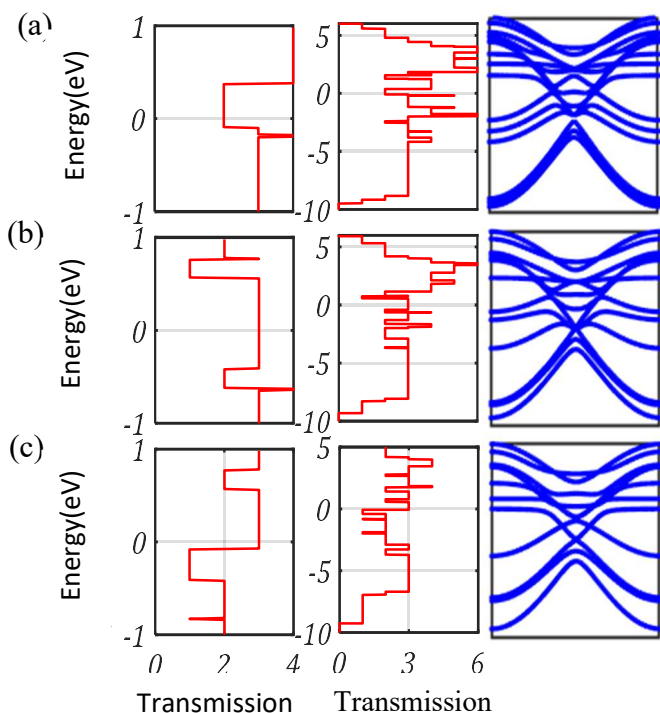
شکل ۲ نوار انرژی، ضریب انتقال (ترابرد) در کل بازه انرژی و ضریب انتقال (ترابرد) برای نانونوار آرمچیر با لبه مختلف (a) نانونوار آرمچیر لبه BB با تعداد ۱۷ اتم در سلول واحد، (b) نانونوار آرمچیر لبه AB با ۱۵ اتم در سلول واحد، (c) نانونوار آرمچیر لبه AA با ۱۳ اتم در سلول واحد.

است. در دیگر نانونوارها شکاف انرژی مشاهده نمی‌شود و همه آن‌ها چه نانونوارهای آرمچیر و چه نانونوارهای زیگزاگ فاز فلزی دارند ((شکل ۲b,c) و (شکل ۳)).

افزایش عرض نانونوار موجب می‌شود که تعداد اتم بور بیشتری در سلول واحد آرمچیر یا زیگزاگ وجود داشته باشند که منجر به افزایش تعداد نوار انرژی و سبب افزایش ترابرد و کاهش احتمال ایجاد شکاف انرژی در نانونوارهای آرمچیر و زیگزاگ بوروفن β_{12} برای الگوهای مختلف می‌شود



[۱۱]. به بیان ساده، هرچه به تعداد اتم‌های موجود در سلول واحد در نانونوار آرمچیر و زیگزاگ این ساختار افزوده می‌شود، انتظار می‌رود که تعداد نوارها افزایش یافته، احتمال ایجاد شکاف انرژی کمتر شود و تراپرد افزایش یابد. همچنین، نانونوارهای آرمچیر با تعداد بیشتر از ۲۷ اتم در سلول واحد، همگی دارای فاز فلزی هستند [۱۲].

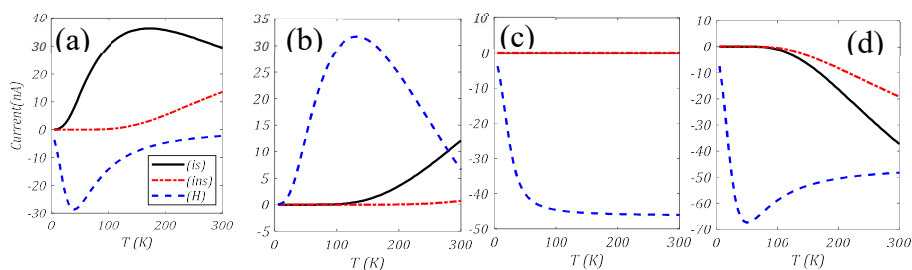


شکل ۳ نوار انرژی، تراپرد نانونوار زیگزاگ در کل بازه انرژی و تراپرد حول سطح فرمی که صفر در نظر گرفته شده است. برای ساختارهای مختلف نانونوار زیگزاگ نشان داده شده است. (a) نانو نوار با تعداد ۱۵ اتم در سلول واحد و نوع لبه ae، (b) نانونوار با تعداد ۱۳ اتم در سلول واحد و نوع لبه bd، (c) نانونوار با تعداد ۱۱ اتم در سلول واحد و نوع لبه c.

تعداد زیاد نوارهای اطراف سطح فرمی و رفتار پیچیده‌ای می‌توانند در انتقال الکترون‌ها در این ساختارها ایجاد کنند. به منظور بررسی توانایی کنترل جریان‌های گرمایی و اثرات آرایش اتم‌ها در لبه‌های نانونوار آرمچیر و زیگزاگ، رفتار جریان گرمایی که با توجه به گرادیان‌های دما بر الکترونها ایجاد می‌شود، بررسی شده است. برای محاسبه جریان گرمایی از تابع توزیع فرمی دیراک

برای الکترودهای چپ و راست استفاده شده و تنها مقادیر ترابرد در نزدیکی انرژی فرمی در جریان گرمایی تاثیر دارد.

شکل ۴ تغییر جریان گرمایی بر حسب تغییر دمای اعمال شده بر الکترودها را نشان می‌دهد. لازم به یادآوری است که در این بررسی‌ها جنس الکترودها و کانال در تمامی موارد یکسان خواهد بود. این نمودار دمای الکتروود سمت چپ با ۲۰ درجه اختلاف بیشتر از دمای الکتروود سمت راست است. برای هر نانونوار با استفاده از داده‌های موجود در منابع در سه الگوی مختلف همگن (H)، وارون متقارن (IS) و وارون نامتقارن (INS) محاسبات انجام شده است (شکل ۴). محدوده جریان گرمایی اندازه‌گیری شده در این نوع نانونوارها در محدوده نانو آمپر (nA) است. رفتار گوناگونی برای جریان گرمایی در این نانونوارها دیده می‌شود که به هندسه نانونوار و ضرایب جهش آن‌ها بستگی دارد. در محاسبه جریان گرمایی برای نانو نوارهای آرمچیر لبه AB, BB به ترتیب به دلیل وجود شکاف انرژی و تقارن ترابرد در دو طرف سطح فرمی، جریان محاسبه شده مقدار کمی داشته و صفر در نظر گرفته شده است. همان‌طور که می‌دانید، در جریان وابسته به دما حامل‌های جریان در بالا و



شکل ۴ بررسی تغییرات جریان با تغییر دمای اعمال شده بر نانو نوارهای مختلف (a) نانونوار آرمچیر لبه AA

با تعداد ۱۳ اتم در سلول واحد، (b) نانونوار زیگزاگ لبه ae با تعداد ۱۵ اتم در سلول واحد، (c) نانونوار زیگزاگ لبه bd با تعداد ۱۳ اتم در سلول واحد، (d) نانونوار زیگزاگ لبه cc با تعداد ۱۱ اتم در سلول واحد است. جریان برای الگوهای وارون متقارن (IS) و وارون نامتقارن (INS) و الگوی همگن (H) برای نانونوار

پایین سطح فرمی همدیگر را خنثی می‌کنند تا جریان در یکی از این جهت‌ها ایجاد شود. در قسمت (a) شکل ۴، جریان گرمایی برای نانونوار آرمچیر لبه AA با تعداد ۱۳ اتم در سلول واحد محاسبه شده است. در این نانونوار در هر سه الگو، شکاف انرژی دیده نمی‌شود و ترابرد در محدوده سطح فرمی مقدار دارد، از این رو، حامل جریان وجود دارد. در الگوی وارون متقارن (IS)، به دلیل وجود پرش ترابرد در سطح فرمی، با شروع دما جریان نیز از صفر شروع و از نوارهای زیر سطح فرمی به سمت مثبت ایجاد و به صورت غیرخطی افزایش می‌یابد. اگرچه، با افزایش دما تاثیرگذاری



انرژی‌های بیشتر نیز وارد شده و با برعکس شدن رفتار تراپرد، جریان به مقدار بیشینه رسیده و در ادامه با افزایش دما جریان رفتار کاهشی دارد (مقاومت منفی) که در این حالت حامل‌های جریان در دو طرف سطح فرمی همدیگر را خنثی می‌کنند. در الگوی وارون نامتقارن (INS)، در محدوده کوچک انرژی تراپرد در دو طرف سطح فرمی متقارن است که سبب می‌شود حامل‌های انرژی همدیگر را خنثی کرده و جریان در ابتدا برابر با صفر باشد (دمای آستانه). اگرچه، در ادامه محدوده بیشتری از انرژی بر جریان تاثیر می‌گذارد که وجود نوار انرژی بیشتر در زیر سطح فرمی سبب ایجاد جریان به سمت مثبت می‌شود ولی این جریان با رفتار غیر خطی و شیب کم افزایش می‌یابد. دلیل آن تقارن تراپرد در انرژی‌های دورتر از فرمی است که سبب خنثی شدن حامل‌های جریان در دو طرف سطح فرمی می‌شود. در الگوی همگن (H) برای این نانونوار، تراپرد در دو طرف سطح فرمی تقارن داشته و انتظار می‌رود که جریان صفر باشد ولی به دلیل وجود یک شکاف در تراپرد در زیر سطح فرمی این تقارن بهم ریخته و جریان با شیب بسیار زیاد ایجاد می‌شود. با افزایش بیشتر دما جریان به یک مقدار بیشینه می‌رسد و به دلیل برقراری تقارن در تراپرد (برابر بودن مقدار حامل‌ها در دو طرف) حامل‌های جریان همدیگر را خنثی کرده و با افزایش دما، جریان کاهش یافته و با رفتار غیرخطی و شیب ملایم به سمت صفر برمی‌گردد (مقاومت منفی).

در قسمت (b) شکل ۴، جریان گرمایی برای نانونوار زیگزاگ بوروفن با لبه دارای اتم‌های نوع a, e با تعداد ۱۵ اتم در سلول واحد محاسبه شده است. در این نانونوار با استفاده از دو الگوی وراون متقارن (IS) و نامتقارن (INS) رفتار مشابه دیده می‌شود. این نانونوار در ابتدا در برابر تغییرات دمایی مقاومت می‌کند که این دمای آستانه در الگوی متقارن (IS) تا محدوده ۱۰۰ کلوین و در الگوی نامتقارن (INS) تا محدوده ۲۰۰ کلوین است. با افزایش بیشتر دما، دامنه بیشتری از انرژی و تراپرد در جریان تاثیر می‌گذارند که در هر دو الگوی بیان شده جریان به کمک حامل‌های زیر سطح فرمی (به دلیل جهت جریان) ایجاد شده و افزایش می‌یابد. در الگوی همگن (H) رفتار جالبی مشاهده شده است. در ابتدا دارای رفتار دمای آستانه می‌باشد ولی با افزایش دما مقاومت منفی نشان می‌دهد که این رفتار به دلیل تراپرد ویژه در این نانونوار است.

در قسمت (c) شکل ۴، جریان گرمایی برای نانونوار زیگزاگ بوروفن با لبه دارای اتم‌های نوع b, d با تعداد ۱۳ اتم در سلول واحد محاسبه شده است. در این نانونوار نیز الگوهای وارون متقارن و نامتقارن (IS, INS) رفتار مشابهی دارند. در این دو الگو در ابتدای ایجاد جریان، تراپرد در دو طرف سطح فرمی به صورت کامل تقارن دارد و حامل‌های جریان اثر همدیگر را خنثی کرده و جریان

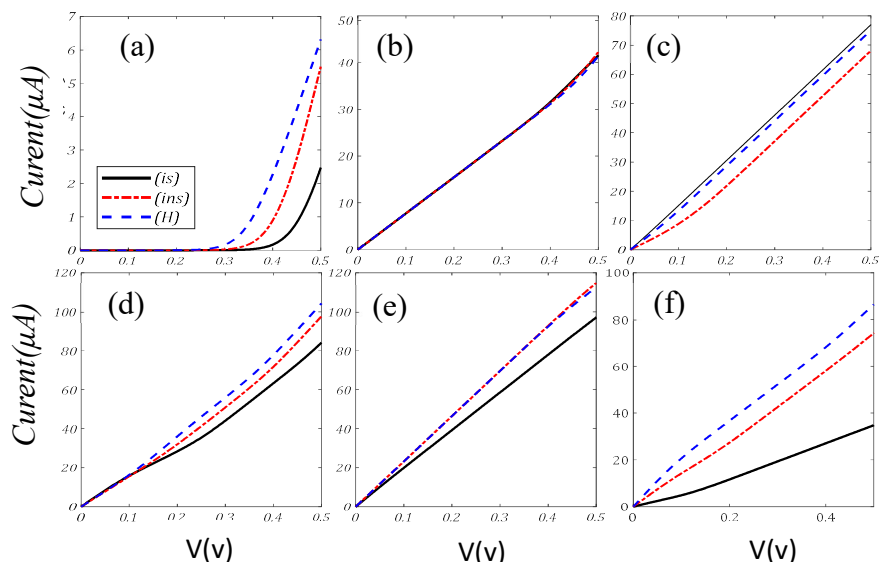
ضعیفی ایجاد می شود که صفر در نظر گرفته شده است. در الگوی همگن (H) ترابرد در زیر سطح فرمی و بالای سطح فرمی تقارن ندارد. پش ترابرد کمابیش روی سطح فرمی قرار می گیرد که موجب می شود با شروع دما حامل های جریان از بالای سطح فرمی به سمت پایین حرکت کرده و جریان با شیب زیاد و در جهت منفی ایجاد شود. با افزایش دما رفتار ترابرد در انرژی های دورتر از سطح فرمی وارونه شده و شیب افزایش جریان، کمتر می شود.

در قسمت (d) شکل ۴، جریان گرمایی برای نانونوار زیگزاگ بوروفن با لبه دارای اتم های نوع C با تعداد ۱۱ اتم در سلول واحد محاسبه شده است. در این نانونوار نیز دو الگوی وارون متقارن و نامتقارن (IS,INS) ترابرد و رفتار جریان مشابهی دارند. در هر دو الگو، ابتدا ترابرد تقارن دارد و دمای آستانه مشاهده می شود ولی با افزایش دما محدوده تاثیر گذاری انرژی بیشتر می شود که موجب می شود از دمای آستانه تقریباً ۵۰ کلوین جریان ایجاد شده و در دو الگو با شیب متفاوت، جریان افزایش یابد. در الگوی همگن (H) تقارن ترابرد وجود ندارد و وجود یک دره در ترابرد زیر سطح فرمی و پش ترابرد در سطح فرمی موجب می شود حامل های جریان از بالای سطح فرمی به سمت پایین حرکت کرده و جریان به سمت منفی ایجاد شود. اگرچه، با افزایش دما به دلیل ثابت ماندن ترابرد در دو طرف سطح فرمی و وارونه شدن رفتار ترابرد در انرژی های دورتر شیب افزایش جریان کمتر شده، بعد از یک مقدار بیشینه، مقدار جریان کاهش می یابد (رفتار مقاومت منفی).

در ادامه تغییرات جریان الکتریکی (تغییر جریان بر اساس تغییر ولتاژ بر دو الکتروود) بررسی شده است (شکل ۵). تغییرات جریان الکتریکی در نانونوارهای آرمچیر و زیگزاگ در حد میکروآمپر (μA) است ولی تفاوت زیادی در بین نانونوارهای مختلف وجود دارد که به تعداد نوارهای انرژی، شیب نوار انرژی و از همه مهم تر نوع و روش قرارگیری اتم های بور در نانونوار (هندسه) بستگی دارد. در بررسی شکل ۵، همان طور که انتظار می رفت، نانونوار آرمچیر لبه BB با تعداد ۱۷ اتم در سلول واحد به دلیل وجود شکاف نواری، دارای ولتاژ آستانه (۷) ۰.۳ است. با افزایش ولتاژ محدوده بیشتری از انرژی در جریان تاثیر می گذارد که موجب می شود حامل های جریان انرژی بیشتری داشته باشند و از شکاف انرژی عبور کرده و جریان ایجاد شود. در هر سه الگو جریان الکتریکی در این نوع نانونوار با رفتاری غیرخطی و نمایی افزایش می یابد و در بیشینه ولتاژ بررسی شده (۰.۵۷)، مقدار جریان در هر سه الگو به محدوده ۲.۵ تا $۶.۵ \mu A$ رسیده است. با توجه به دیگر جریان ها، همان طور که در شکل ۵ مشاهده می شود، فاز فلزی در آنها قابل مشاهده است و



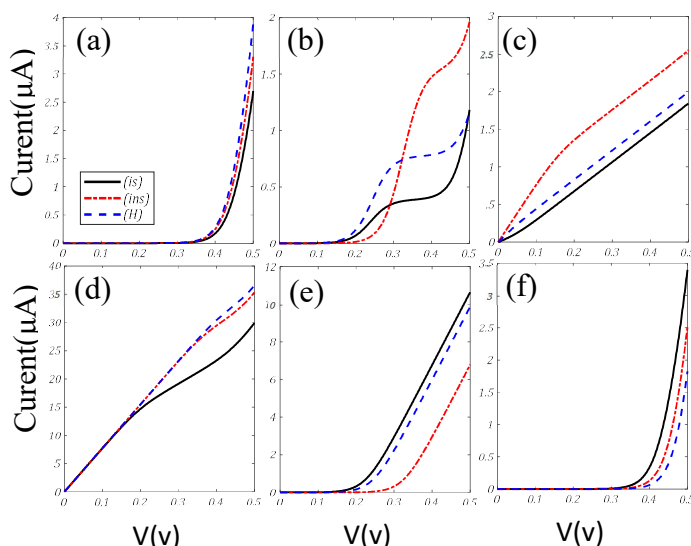
با اعمال کمترین مقدار ولتاژ بر الکترودها، جریان ایجاد و در بیشتر حالت‌های بررسی شده به صورت خطی افزایش یافته است.



شکل ۵ بررسی تغییرات جریان با تغییر ولتاژ اعمال شده بر نانو نوارهای مختلف (a) نانو نوار آرمچیر با لبه BB با تعداد ۱۷ اتم در سلول واحد، (b) نانو نوار آرمچیر با لبه AB با تعداد ۱۵ اتم در سلول واحد، (c) نانو نوار آرمچیر با لبه AA با تعداد ۱۳ اتم در سلول واحد، (d) نانو نوار زیگزاگ با لبه ae با تعداد ۱۵ اتم در سلول واحد، (e) نانو نوار زیگزاگ با لبه bd با تعداد ۱۳ اتم در سلول واحد، (f) نانو نوار زیگزاگ با لبه cc با تعداد ۱۱ اتم در سلول واحد، در همه نمودارها با استفاده از رنگ‌های مختلف و نوع خط مختلف جریان را برای الگوهای وارون متقارن (IS)، الگوی وارون نامتقارن (INS) و الگوی همگن (H) برای نانو نوار استفاده، محاسبه و با رنگ و نوع خط مختلف نشان داده شده است.

نکته جالب بعدی در شکل ۵ (b) دیده می‌شود که محاسبه جریان در هر سه الگو کمی تفاوت دارد و نتایج بدست آمده به هم نزدیک است. در نانو نوار آرمچیر با تغییر در لبه (از BB به AB و AA) که روی شکل ۵ از (a) به (b) و (c) است و سبب کاهش تعداد اتم موجود در سلول واحد (از ۱۷ به ۱۵ و ۱۳) است، مقدار جریان افزایش یافته است (از ۷ به ۵۰ و ۸۰ μA). در روند تغییر لبه در نانو نوار زیگزاگ جریان رفتار وارونه نشان می‌دهد یعنی با تغییر لبه از ae به bd و به cc (در شکل ۵ d, e, f)، جریان نه تنها افزایش نیافته بلکه کاهش نیز دارد. این رفتار انتظار می‌رفت، چرا که در این روند تعداد اتم‌های موجود در سلول واحد کمتر شده و مقدار حامل‌های جریان کم می‌شود. نکته

جالب دیگر در شکل ۵ (f) اتفاق می افتد، جایی که تفاوت زیادی بین جریان های محاسبه در سه الگو مختلف مشاهده می شود که دلیل آن تفاوت در نوار انرژی و تراپرد است. در قسمت آخر تاثیر مهندسی نقص تک اتم بر جریان الکتریکی این نانونوارها بررسی شده است. در این نانونوارها برای هر اتم یک سطر و ستون در ماتریس هامیلتونی در نظر گرفته شد و برای حذف آن اتم، آن سطر و ستون را از ماتریس هامیلتونی حذف شده که یک نوار انرژی کم می شود و سبب تغییر فاز الکترونی آن نانو نوار به صورت کامل می شود. برای نمونه، نانونوارهایی که در حالت عادی فاز فلزی و ساختار انرژی بدون شکاف داشتند با اعمال نقص به نانو نوارهایی با شکاف انرژی و فاز نیمه رسانا تبدیل می شوند و می توان مقدار شکاف آن را با حذف اتم های مختلف هدایت کرد.



شکل ۶ بررسی تغییرات جریان با تغییر ولتاژ اعمال شده بر نانونوارهای مختلف با حضور نقص در نانونوار (a) نانونوار آرمچیر لبه BB با تعداد ۱۷ اتم در سلول واحد و نقص اتم شماره ۱۰، (b) نانونوار آرمچیر لبه BB با تعداد ۱۷ اتم در سلول واحد و نقص اتم شماره ۱، (c) نانونوار آرمچیر لبه BB با تعداد ۱۷ اتم در سلول واحد و نقص اتم شماره ۳، (d) نانونوار آرمچیر لبه AB با تعداد ۱۵ اتم در سلول واحد و نقص اتم شماره ۱۳، (e) نانونوار آرمچیر لبه AB با تعداد ۱۵ اتم در سلول واحد و نقص اتم شماره ۱، (f) نانونوار آرمچیر لبه AB با تعداد ۱۵ اتم در سلول واحد و نقص اتم شماره ۳.

در شکل ۶، تاثیر مهندسی نقص تک اتم بر جریان الکتریکی در نانونوار آرمچیر لبه BB با ۱۷ اتم در سلول واحد و لبه AB با ۱۵ اتم در سلول واحد نشان داده شده است. برای بررسی آسان حذف،



اتم‌ها به ترتیب نوع e, d, c, b, a از پایین نانونوار به سمت بالا شماره‌گذاری می‌شوند و حذف آن‌ها با شماره اتم کنترل می‌شود. در نمودارهای ردیف بالا (a) تا (c) حذف یک اتم از نانونوار آرمچیر لبه BB با تعداد ۱۷ اتم در سلول واحد را مورد بررسی قرار داده شده است. این نانونوار بدون حذف اتم از ابتدا دارای شکاف انرژی و فاز نیمه‌فلزی با ولتاژ آستانه $0.3(V)$ بود (شکل ۵(a)). ولی با حذف اتم‌های مختلف ولتاژ آستانه در آن نانونوار، تا $0.35(V)$ در $6(a)$ افزایش، در $6(b)$ تا $0.15(V)$ کاهش یافته و حتی در حالتی فاز رسانایی هم نشان می‌دهد (شکل ۶(c)). نتیجه جالب دیگر در قسمت (b) شکل ۶ مشاهده می‌شود، در این نمودار نیز جریان در الگوهای مختلف رفتار متفاوت دارد. در شکل ۶ قسمت (d) تا (e)، (نمودارهای پایین) حذف یک اتم در جایگاه‌های مختلف از نانونوار آرمچیر لبه AB با تعداد ۱۵ اتم در سلول واحد بررسی شده است. این نانونوار در ابتدا دارای شکاف انرژی نیست و در شکل ۵(b)، فاز رسانایی در حد صفر تا $40(\mu A)$ است. این نانونوار در صورت حذف برخی از اتم‌ها دارای ویژگی رسانایی ضعیف‌تر در حد 30 تا $35(\mu A)$ می‌شود (شکل ۶(d)). حتی حذف اتم ممکن است در این نانونوار سبب ایجاد فاز نیمه‌رسانایی با ولتاژ آستانه 1.5 تا $3.5(V)$ شود (شکل ۶(f,e)). در ادامه اعمال نقص بر دیگر نانونوارهای بوروفن بررسی شده است که در آن‌ها نیز تغییراتی در نوار انرژی و تراپرد و جریان مشاهده شد. البته در بیشتر آن‌ها تغییر فاز ایجاد نشده ولی به دلیل وجود نقص مقدار فاز فلزی و مقدار جریان عبوری از نانونوار تغییر می‌کند که به دلیل تاثیر کم اعمال نقص به نتایج بهتر بسنده شده است.

۴. نتیجه‌گیری

با استفاده از مدل تنگ بست، روش انطباق مد و فرمول‌بندی لاندائور بوتیکر برای نانونوارهای آرمچیر و زیگزاگ بوروفن با لبه‌های مختلف، نوار انرژی، تراپرد و جریان‌های گرمایی و بیاس محاسبه شد. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که تفاوت هندسه، نوع لبه و تعداد اتم در نانونوارها سبب رفتار متنوع شده است. برای نمونه، رفتار فلزی و نیمه‌رسانایی با ولتاژ آستانه متفاوت مشاهده شد و یا در جریان گرمایی تاثیر تراپرد حول سطح فرمی بر جریان به خوبی قابل مشاهده است و حتی در یک نانونوار با بررسی هندسه‌های مختلف نتایج متفاوت بدست آمد. در انتها تاثیر حذف یک اتم از نانونوار بررسی شد که می‌توانست رفتار نانونوار را به صورت کامل تغییر دهد یا مقدار آن را بهینه سازد.

۵. تقدیر و تشکر

این مقاله از پایان‌نامه ارشد مصوب و دفاع شده در دانشگاه کاشان استخراج شده است. نویسندگان بر خود لازم می‌دانند مراتب تشکر صمیمانه خود را از هیئت داوران پایان‌نامه، هیئت داوران مقاله و سردبیر مقاله که ما را در انجام و ارتقای کیفی این پژوهش یاری دادند، اعلام کنند.

منابع

- [1] Le, P. T. T., Phong, T. C., & Yarmohammadi, M. β 12-Borophene becomes a semiconductor and semimetal via a perpendicular electric field and dilute charged impurity. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 21(39), 21790-21797, 2019. 10.1039/C9CP04719K
- [2] Sun, X., Liu, X., Yin, J., Yu, J., Li, Y., Hang, Y., ... & Guo, W. Two-dimensional boron crystals: structural stability, tunable properties, fabrications and applications. *Advanced Functional Materials*, 27(19), 2017. 10.1002/adfm.201603300
- [3] Li, D., Chen, Y., He, J., Tang, Q., Zhong, C., & Ding, G. Review of thermal transport and electronic properties of borophene. *Chinese Physics B*, 27(3), 036303, 2018. 10.1088/1674-1056/27/3/036303
- [4]] Feng, B., Zhang, J., Zhong, Q., Li, W., Li, S., Li, H., ... & Wu, K. Experimental realization of two-dimensional boron sheets. *Nature chemistry*, 8(6), 563-568. (2016). 10.1038/nchem.2491
- [5] Hoi, B. D., Tung, L. V., Vinh, P. T., Khoa, D. Q., & Phuong, L. T. Electric field and charged impurity doping effects on the Schottky anomaly of β 12-borophene. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 23(3), 2080-2087. (2021) 10.1039/D0CP05219A
- [6] Nguyen, H. T., Hoi, B. D., Vu, T. V., Nham, P. V., & Binh, N. T. On the in-plane electronic thermal conductivity of biased nanosheet β 12-borophene. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22(11), 6318-6325. (2020) 10.1039/C9CP06606C
- [7] Ezawa, M. Triplet fermions and Dirac fermions in borophene. *Physical Review B*, 96(3), 035425. (2017) 10.1103/PhysRevB.96.035425
- [8] Pham, Khang D., et al. "Magnetic properties of β 12-borophene in the presence of electric field and dilute charged impurity." *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 120 (2020): 114074. 10.1016/j.physe.2020.114074
- [9] Khoa, Doan Quoc, Nguyen N. Hieu, and Bui Dinh Hoi. "Enhanced anisotropic electrical conductivity of perturbed monolayer β 12-borophene." *Physical Chemistry Chemical Physics* 22.1 (2020): 286-294. 10.1039/C9CP05597E
- [10] Izadi Vishkayi, S., & Bagheri Tagani, M. (2018). Edge-dependent electronic and magnetic characteristics of freestanding β 12-borophene nanoribbons. *Nano-micro letters*, 10(1), 1-13. 10.1007/s40820-017-0167-z
- [11] Davoudiniya, M., & Mirabbaszadeh, K. (2021). Effects of strain and electric fields on the electronic transport properties of single-layer β 12-borophene nanoribbons. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 23(34), 18647-18658. 10.1039/D1CP00340B
- [12] Norouzi, F., Farokhnezhad, M., Esmaeilzadeh, M., & Szafran, B. (2021). Controllable spin filtering and half-metallicity in β 12-borophene nanoribbons. *Physical Review B*, 104(24), 245431. 10.1103/PhysRevB.104.245431
- [13] Davoudiniya, M., and K. Mirabbaszadeh. "Quantum transport along the armchair and zigzag edges of β 12-borophene nanoribbons in the presence of a Zeeman magnetic



- field and dilute charged impurities." *Physical Chemistry Chemical Physics* 23.46 (2021): 26285-26295. 10.1039/D1CP03798F
- [14] Ildarabadi, F., & Farghadan, R. (2021). Fully spin-valley-polarized current induced by electric field in zigzag stanene and germanene nanoribbons. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 23(10), 6084-6090. 10.1039/D0CP05951J
- [15] Vishkayi, S. I., & Tagani, M. B. Current-voltage characteristics of borophene and borophane sheets. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19(32), 21461-21466. (2017). 10.1039/C7CP03873A



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).