

## مقایسه ویژگی‌های مکانیکی، نوری و انتقال الکترونی دو فاز همسانگرد و ناهمسانگرد بوروفسفین

منصوره پشنگ‌پور

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، واحد اسلامشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، اسلامشهر، ایران

پست الکترونیکی: poor@iaau.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۹/۰۸/۲۰؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۹/۰۹/۰۱)

### چکیده

در این پژوهش، ویژگی‌های مکانیکی، نوری و انتقال الکترونی دو فاز از بوروفسفین گرافین‌گونه با استفاده از نظریه تابعی چگالی بررسی و مقایسه می‌شود. بوروفسفین گرافین‌گونه، ساختاری لانه زنبوری با نسبت‌های مساوی از اتم‌های بور و فسفر است که در دو فاز همسانگرد و ناهمسانگرد معرفی شده است. به این منظور ساختار نواری، چگالی جزیی حالات الکترونی، مدول‌های یانگ، نسبت‌های پواسون، تابع دی‌الکتریک و مشخصه‌های جریان-ولتاژ محاسبه و مقایسه می‌شوند. نتایج نشان می‌دهد که فاز ناهمسانگرد بوروفسفین گرافین‌گونه، یک شبه‌فلز و فاز همسانگرد آن، یک نیمه رسانا با گاف انرژی مستقیم ۰/۹ الکترون ولت است. همچنین مدول یانگ برای هر دو فاز در راستای زیگزاگ و آرمچیر بلور بیشترین و نسبت پواسون در این دو راستا، کمترین مقادیر را دارند. ویژگی‌های نوری این دو ساختار شامل طیف اتلاف انرژی، ضریب شکست، ضریب خاموشی، رسانندگی نوری و ضریب بازتابش برای میدان‌های الکتریکی موازی و عمود بر سطح دو نانولایه مورد مطالعه با تقریب فاز تصادفی از قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک به دست می‌آیند. انرژی پلاسمون‌ها برای فاز ناهمسانگرد ۲/۲۴ و ۸/۸۸ الکترون ولت در راستای آرمچیر و ۹/۰۱ الکترون ولت در راستای زیگزاگ و برای فاز همسانگرد، ۳/۳۸ و ۹/۱۲ الکترون ولت در هر دو راستا به دست آمده است. هر دو فاز در مقابل نور مرئی قطبیده در راستای عمود بر بلور، شفاف بوده و میزان بازتاب و جذب آنها صفر است. با توجه به عبور/جذب/بازتابش گزینشی موج الکترومغناطیسی در دو بلور مورد مطالعه، این ماده به عنوان گزینه‌ای مناسب در ساخت ادوات نانوالکترونیک نوری پیشنهاد می‌شود. در ویژگی‌های انتقال الکترونی فاز همسانگرد، رفتار اهمی و همسانگردی در مشخصه جریان-ولتاژ پس از ولتاژ سوئیده آستانه ۰/۹ ولت مشاهده می‌شود. با توجه به سرعت فرمی بالای حامل‌های بار در فاز ناهمسانگرد بوروفسفین ( $m/s \times 10^5 / 7$ )، این ماده قابلیت استفاده در ادوات نانوالکترونیک را خواهد داشت.

واژه‌های کلیدی: بوروفسفین گرافین‌گونه، نظریه تابعی چگالی، مدول یانگ، تابع دی‌الکتریک، انتقال الکترونی

### ۱. مقدمه

شبه فلز با مخروط دیراک در انرژی‌های کم به دلیل دارا بودن فرمیون‌های دیراک بدون جرم، رسانندگی الکتریکی بسیار خوبی دارد. این ساختار دو بعدی از لحاظ نوری، شفاف و از نظر

پس از ساخت موفقیت آمیز گرافین [۱] در سال ۲۰۰۴، دریچه‌ای جدید به دنیای مواد دو بعدی باز شد. گرافین یک

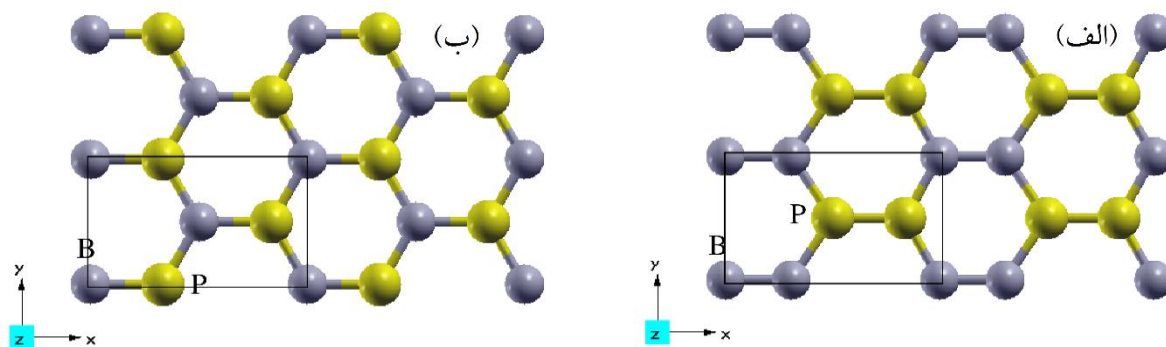
نوری و انتقال الکترونی این دو فاز از بوروفسفین گرافین گونه که یکی ناهمسانگرد (g-aiBP) و دیگری همسانگرد (g-iBP) است بررسی و نتایج مقایسه خواهد شد. نتایج نشان می‌دهد که فاز ناهمسانگرد و همسانگرد g-BP به ترتیب شبه فلز و نیمه رسانا هستند و در ویژگی‌های فیزیکی آنها ناهمسانگردی و همسانگردی مشاهده می‌شود. با توجه به ویژگی‌های انتقال الکترونی، نوری و عبور/ جذب/ بازتابش انتخابی امواج الکترومغناطیسی در دو بلور مورد مطالعه g-BP، این ماده به عنوان گزینه‌ای مناسب در ساخت ادوات نانوالکتروپتیکی پیشنهاد می‌شود.

## ۲. مراحل محاسبات

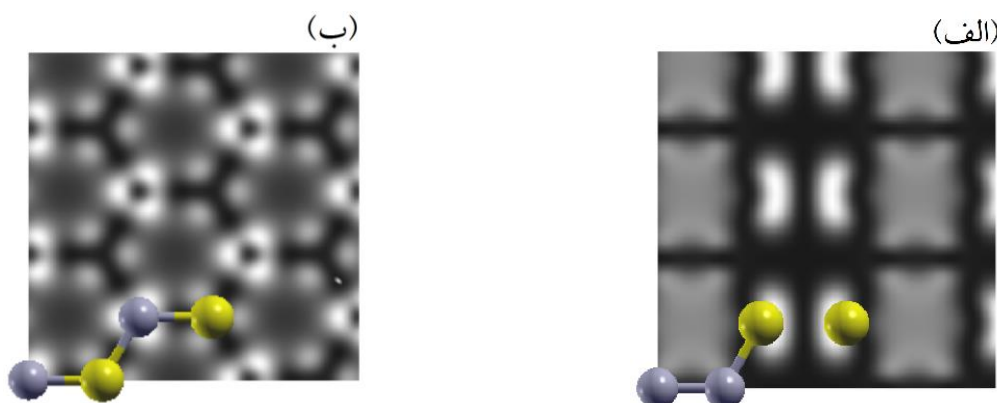
در این بخش به بررسی ویژگی‌های الکترونی ساختار g-BP ناهمسانگرد و همسانگرد (g-aiBP و g-iBP) می‌پردازیم. بررسی ساختار الکترونی بر اساس نظریه تابعی چگالی با اعمال تقریب شیب تعمیم یافته توسط کد PWscf از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو [۱۷] انجام شده است. سلول واحد، ارتورومبیک (راست لوزی ساده) و شامل دو اتم بور و دو اتم فسفر است (شکل ۱). ثابت‌های شبکه g-iBP (g-aiBP) پس از واهلش کامل سلول و مکان اتم‌ها،  $a = 5/563 \text{ \AA}$  (جهت آرمچیر)،  $b = 3/212 \text{ \AA}$  (جهت زیگزاگ) و  $c = 20 \text{ \AA}$  ( $a = 5/561 \text{ \AA}$ ،  $b = 3/219 \text{ \AA}$  و  $c = 20 \text{ \AA}$ ) به دست آمده‌اند که با نتایج پژوهش قبلی مطابقت دارد [۱۶]. خلاصه مابین صفحات بوروفسفین در جهت محور z به منظور حذف برهم‌کنش لایه‌های موازی بوروفسفین،  $20 \text{ \AA}$  در نظر گرفته شده است. انرژی قطع  $50 \text{ Ry}$  و تقسیم بندی فضای وارونه  $20 \times 24 \times 1$  انتخاب شده است [۱۸]. واهلش کامل شبکه و مکان اتم‌ها تا نیروی  $\frac{eV}{\text{Å}} \times 10^{-3}$  انجام شده است. در بلور g-iBP، زاویه بین پیوندها  $\angle BPP = 119/49^\circ$ ،  $\angle BPB = 120/02^\circ$  و طول پیوند B-P،  $1/154 \text{ \AA}$  به دست آمده‌اند و در بلور g-aiBP زاویه بین پیوندها  $\angle BPP = 119/28^\circ$ ،  $\angle BPP = 119/27^\circ$  به دست آمده‌اند که از زاویه  $120^\circ$  در بوروفسفین گرافین گونه کمی انحراف

مکانیکی بسیار سخت است. با توجه به سرعت فرمی بالای شبه ذرات در گرافین، این ساختار دو بعدی گزینه‌ای مناسب و با عملکرد بالا برای کاربرد در ادوات نانوالکترونیکی محسوب می‌شود ولی عدم وجود گاف انرژی در ساختار نواری گرافین، کاربرد آن را محدود ساخته است.

پس از گرافین به تدریج از خانواده مواد دو بعدی، تعداد دیگری از ساختارهای عنصری و ترکیبی سنتز و بررسی شدند که از آن جمله می‌توان از فسفرین [۲]، سیلیسین [۳]، ژرمانین [۴]، h-BN [۵]، MoS<sub>2</sub> [۶]، بوروفین [۷] و ... نام برد. در این خانواده h-BN (با ساختار لانه زنبوری از اتم‌های بور و نیتروژن) ساختاری مشابه گرافین دارد و یک نیمه رساناست. ساختارهای دو بعدی عنصری فسفرین و بوروفین، که به ترتیب شامل عناصر فسفر و بور هستند در فازهای مختلفی سنتز شده‌اند. بوروفین در سال ۲۰۱۵ توسط دو گروه تحقیقاتی مجزا، در آزمایشگاه به روش CVD و روی زیر لایه (۱۱۱) Ag ساخته شد [۷ و ۸]. این ماده در ساختارهایی با حفره‌های شش گوشه و چروکیده مشاهده شده است [۹-۱۳]. بوروفین می‌تواند ساختاری لانه زنبوری همانند گرافین تشکیل دهد ولی به تنهایی و بدون زیر لایه ناپایدار است. ساختار گرافین گونه از بوروفین در سال ۲۰۱۸ روی زیر لایه (۱۱۱) Al سنتز شده است [۱۴]. ناهمسانگردی در ویژگی‌های الکترونی، مکانیکی و نوری از خصوصیات بارز بوروفین است. به تازگی یانگ زونگ و همکارانش در سال ۲۰۱۹ ساختار دو بعدی لانه زنبوری دیگری را که شامل نسبت‌های مساوی از اتم‌های فسفر و بور است با نام بوروفسفین معرفی کردند [۱۵]. نتایج پژوهش آنها نشان می‌دهد که این ماده مخروط دیراک داشته و با توجه به مطالعات دینامیک مولکولی، ساختاری پایدار است. بور و فسفر که در جدول مندلیف همسایه کربن هستند و به ترتیب یک الکترون از کربن کمتر و بیشتر دارند با تشکیل پیوندهای sp<sup>2</sup>، دو ساختار لانه زنبوری همانند گرافین تشکیل می‌دهند [۱۶] که در پژوهش حاضر، این ساختار جدید بوروفسفین گرافین گونه (g-BP) نامیده شده است. در این پژوهش با استفاده از نظریه تابعی چگالی و تابع گرین غیر تعادلی ویژگی‌های الکترونی، مکانیکی،



شکل ۱. نمای بالا از (الف) g-aiBP و (ب) g-iBP و سلول واحد آنها.



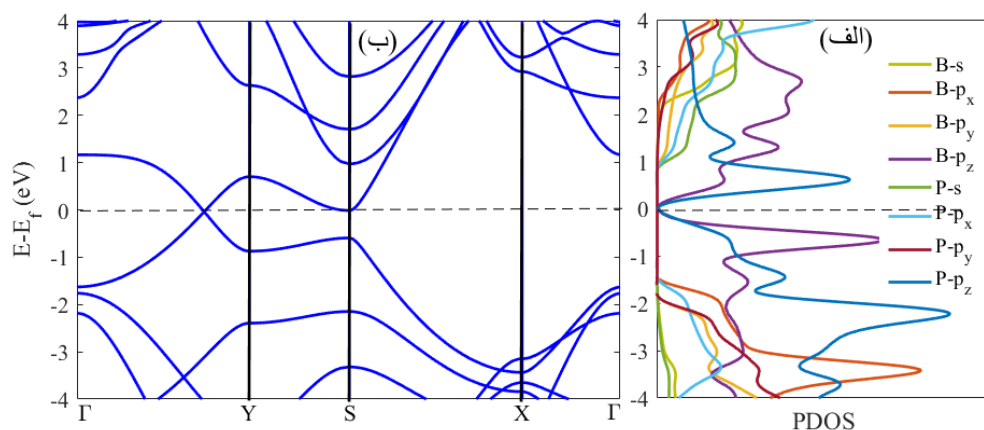
شکل ۲. تصویر شبیه‌سازی STM از (الف) g-aiBP و (ب) g-iBP.

دیراک که توسط اوربیتال‌های  $p_z$  اتم‌های بور و فسفر در مسیر تقارنی  $\Gamma-Y$  تشکیل شده است، کج شدگی ذاتی دارد، به عبارت دیگر محور این مخروط دیراک نسبت به راستای  $z$  انحراف دارد. تحقیقات اخیر نشان می‌دهد در ساختار بوروفین  $Pmmn$  نیز چنین کج‌شدگی مشاهده شده و توسط میدان الکتریکی خارجی قابل تغییر است [۱۹]. سرعت فرمی  $v_F = 0.05 \times 10^8 \text{ m/s}$  و میزان کج‌شدگی مخروط دیراک  $\eta = 0.05$  به دست آمده است که توافق خوبی با نتایج پژوهش قبلی [۱۵] دارد. همان‌طور که در شکل ۳. الف دیده می‌شود، پیوند  $\pi$  توسط اوربیتال‌های  $p_z$  اتم‌های بور و فسفر در اطراف تراز فرمی و پیوند  $\sigma$  توسط اوربیتال‌های  $s$ ،  $p_x$  و  $p_y$  اتم‌های بور و فسفر که دورتر از تراز فرمی قرار دارند تشکیل شده است. نمودارهای PDOS و ساختار نواری g-iBP در شکل ۴. الف و ۴. ب نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود این فاز از g-BP، یک نیمه رسانا با شکاف مستقیم  $0.9 \text{ eV}$  است.

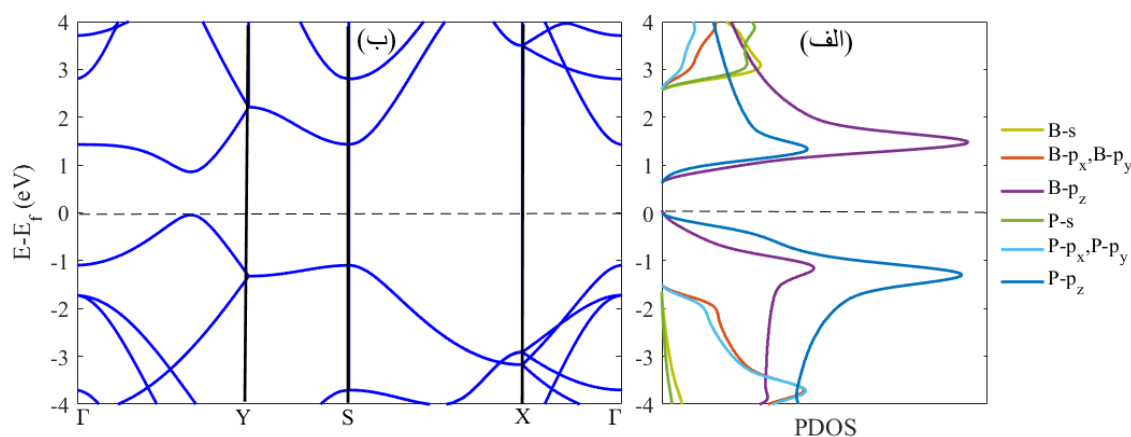
نشان می‌دهد. طول پیوند B-B، B-P و P-P به ترتیب  $1.65 \text{ \AA}$ ،  $1.154 \text{ \AA}$  و  $2.113 \text{ \AA}$  به دست آمده است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که علاوه بر همسانگردی و ناهمسانگردی در شکل ساختار g-BP، در خصوصیات مکانیکی، نوری و انتقال الکترونی نیز همسانگردی و ناهمسانگردی وجود دارد. در شکل ۲ تصویر شبیه‌سازی STM از g-BP نشان داده شده است. دیم‌های B-B و P-P در g-aiBP و دیم‌های B-P در g-iBP مشاهده می‌شود.

### ۳. ویژگی‌های الکترونی بوروفسین گرافین‌گونه ناهمسانگرد و همسانگرد

نمودارهای چگالی حالات جزئی (PDOS) و ساختار نواری در شکل‌های ۳ و ۴ نشان داده شده است. g-aiBP مانند گرافین یک شبه فلز با مخروط دیراک است. با توجه به PDOS (شکل ۳. الف) و ساختار نوارهای انرژی (شکل ۳. ب)، این مخروط



شکل ۳. (الف) چگالی جزئی g-aiBP و (ب) ساختار نوارهای انرژی g-aiBP. انرژی فرمی به صفر انتقال داده شده است.



شکل ۴. (الف) چگالی جزئی g-iBP و (ب) ساختار نوارهای انرژی g-iBP. انرژی فرمی به صفر انتقال داده شده است.

رابطه  $\varepsilon_L = \frac{L-L_0}{L_0}$ ، به صورت نسبت تغییر طول به طول اولیه تعریف می‌شود که نمایه  $L$  راستای اعمال کرنش،  $L_0$  طول اولیه و  $L$  طول پس از اعمال کرنش است. با اعمال کرنش طولی تک محوری در راستای  $a$  (b)،  $\varepsilon_a = \frac{a-a_0}{a_0}$ ، تنش  $\sigma_b$  ( $\varepsilon_b = \frac{b-b_0}{b_0}$ ) در راستای عرضی ایجاد می‌شود که با واهلش سلول در راستای عرضی به صفر رسانده می‌شود. برای کرنش دو محوری  $\varepsilon_{ab}$  ( $\varepsilon_a = \varepsilon_b$ ) و همچنین کرنش برشی، با واهلش موقعیت اتم‌های سلول پس از اعمال کرنش، نیروی وارد بر آنها به صفر می‌رسد. در پژوهش حاضر برای محاسبه ثابت‌های کشسانی ( $C_{\alpha\beta}$ )، از شیبه نمودارهای

تیهگنی دوگانه در مسیر  $YS$  و  $SX$  در ساختار نواری g-iBP مشاهده می‌شود. با این که نوارهای انرژی (در نقاط  $Y$  و  $X$ ) در مسیر  $X\Gamma$  و  $Y\Gamma$  تیهگنی خود را از دست می‌دهند و هر یک به دو نوار مجزا تبدیل می‌شوند ولی وارونگی نوارهای انرژی رخ نمی‌دهد و نقاط دیراک تشکیل نمی‌شود. سهم اصلی حالت‌های اطراف تراز فرمی مربوط به اوربیتال‌های  $p_z$  اتم‌های بور و فسفر است. تراز فرمی دقیقاً در بیشینه نوار ظرفیت قرار گرفته است.

#### ۴. ویژگی‌های مکانیکی بوروفسین گرافین‌گونه ناهمسانگرد و همسانگرد

در این بخش ویژگی‌های مکانیکی g-BP با اعمال کرنش‌های کوچک در ناحیه کشسان بررسی شده است. کرنش با توجه به

از راستای  $b$  است. مدول یانگ  $g$ -BP در مقایسه با گرافین و  $h$ -BN کمتر و در مقایسه با ژرمانین و سیلیسین بیشتر است. بنابراین می‌توان گفت ساختار  $g$ -BP از گرافین و  $h$ -BN نرم‌تر ولی در مقایسه با ژرمانین و سیلیسین، سخت‌تر است [۲۱]. لازم به ذکر است با اعمال کرنش تک محوری و دو محوری در نقطه دیراک  $g$ -aiBP گاف انرژی ایجاد نمی‌شود و در شکاف انرژی  $g$ -iBP تغییرات کوچکی حاصل می‌شود (با کرنش تک محوری ۱۰ درصد، مقدار شکاف انرژی به اندازه  $0.2 \text{ eV}$  افزایش می‌یابد).

### ۵. ویژگی‌های نوری $g$ -BP

در این بخش، ویژگی‌های نوری  $g$ -BP شامل تابع دی‌الکتریک مختلط  $(\epsilon = \text{Re}(\epsilon) + i \text{Im}(\epsilon))$ ، اتلاف انرژی، ضریب شکست  $(n)$ ، ضریب خاموشی  $(k)$ ، ضریب بازتابش  $(R)$  و رسانندگی نوری  $(\sigma)$  با تقریب فاز تصادفی مطالعه شده است. تابع دی‌الکتریک مختلط که شامل دو بخش حقیقی و موهومی است یکی از مهم‌ترین کمیت‌های نوری بوده و با به کارگیری آن می‌توان دیگر ویژگی‌های نوری ماده را بررسی کرد. قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک  $(\text{Re}(\epsilon))$ ، جریان حامل‌های بار و قطبش محیط در حضور میدان الکترومغناطیس خارجی و قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک  $(\text{Im}(\epsilon))$ ، برهم‌کنش الکترون-فوتون را توصیف می‌کنند.

در این پژوهش، قسمت حقیقی و قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط توسط پاسخ تک لایه  $g$ -BP به موج الکترومغناطیسی فرودی در سه حالت با قطبش‌های متفاوت، دو حالت موازی سطح (جهت  $a$  و  $b$  بلور) و یک حالت عمود بر سطح (جهت  $c$  بلور)، محاسبه شده است و پس از تعیین آنها، سایر کمیت‌های نوری بررسی شده‌اند. قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک با در نظر گرفتن سهم تمام گذارهای بین نواری مستقیم از حالت‌های پر شده در تراز ظرفیت  $(|\psi_k^v\rangle)$  به حالت‌های خالی در تراز رسانش  $(|\psi_k^c\rangle)$  از رابطه زیر به دست می‌آید [۲۲]:

تنش-کرنش استفاده شده است  $(C_{\alpha\beta} = \frac{\partial \sigma_{\alpha}}{\partial \epsilon_{\beta}} \Big|_{\epsilon=0})$  [۲۰] و چهار ثابت کشسانی مستقل  $C_{11}$ ،  $C_{22}$ ،  $C_{12}$  و  $C_{44}$  برای  $g$ -aiBP به ترتیب  $137/8 \text{ N/m}$ ،  $152/2 \text{ N/m}$ ،  $24/3 \text{ N/m}$  و  $45/7 \text{ N/m}$  و برای  $g$ -iBP به ترتیب  $143/4 \text{ N/m}$ ،  $144/8 \text{ N/m}$ ،  $28/7 \text{ N/m}$  و  $50/75 \text{ N/m}$  به دست آمده‌اند که به غیر از  $C_{12}$ ، نتایج به دست آمده با پژوهش یانگ زنگ و همکارانش که ثابت‌های کشسانی را از طریق نمودار انرژی-کرنش به ترتیب  $136/6 \text{ N/m}$ ،  $154/7 \text{ N/m}$ ،  $34/8 \text{ N/m}$  و  $49/6 \text{ N/m}$  برای  $g$ -aiBP به دست آورده‌اند، مطابقت دارد [۱۵]. مدول‌های یانگ در دو راستای  $a$  و  $b$  با استفاده از روابط  $Y_a = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{22}}$  و  $Y_b = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{11}}$  و نسبت پواسون نیز با استفاده از روابط  $\nu_a = \frac{C_{12}}{C_{22}}$  و  $\nu_b = \frac{C_{12}}{C_{11}}$  محاسبه و نتایج در جدول ۱ آورده شده است.

نمودار مدول یانگ در راستای دلخواه با استفاده از رابطه

$$Y(\theta) = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{11}S^4 + C_{22}C^4 + \left( \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{44}} - 2C_{12} \right) C^2 S^2}$$

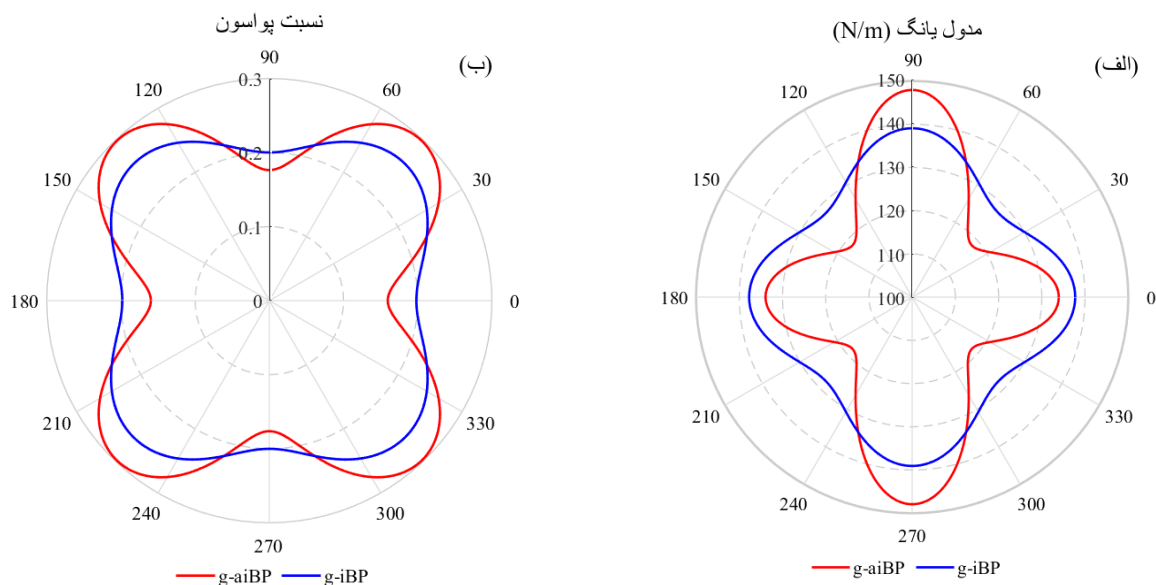
نمودار نسبت پواسون نیز با استفاده از رابطه

$$\nu(\theta) = \frac{\left( C_{11} + C_{22} \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{44}} \right) C^2 S^2 - C_{12}(S^4 + C^4)}{C_{11}S^4 + C_{22}C^4 + \left( \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{44}} - 2C_{12} \right) C^2 S^2}$$

در شکل‌های ۵. الف و ۵. ب نشان داده شده است. در این روابط  $S = \sin \theta$ ،  $C = \cos \theta$  و  $\theta$  زاویه راستای دلخواه نسبت به جهت  $a$  بلور است. مدول یانگ و نسبت پواسون  $g$ -aiBP به میزان قابل ملاحظه‌ای در مقایسه با  $g$ -iBP ناهمسانگرد است. بیشترین و کمترین مدول یانگ، برای  $g$ -aiBP به ترتیب در راستای  $b$  و راستای  $45^\circ$  بلور است. بیشترین نسبت پواسون برای  $g$ -aiBP، مقدار  $0.3$  و در زاویه  $45^\circ$  است و کمترین نسبت پواسون  $g$ -BP در راستای  $a$  و  $b$  رخ می‌دهد. نسبت پواسون  $g$ -aiBP در راستای  $a$  اندکی کمتر

جدول ۱. ثابت‌های کشسانی مستقل (بر حسب N/m)، مدول‌های یانگ (بر حسب N/m) و نسبت‌های پواسون در دو راستای a و b برای g-BP محاسبه شده در پژوهش حاضر و پژوهش یانگ زنگ و همکارانش [۱۵].

$\nu_b$	$\nu_a$	$Y_b$	$Y_a$	$C_{\phi\phi}$	$C_{1\phi}$	$C_{\phi\phi}$	$C_{11}$	روش
۰/۱۸	۰/۱۶	۱۴۷/۹	۱۳۳/۹	۴۵/۷	۲۴/۳	۱۵۲/۲	۱۳۷/۸	پژوهش حاضر g-aiBP
۰/۲۵	۰/۲۲	۱۴۵/۸	۱۲۸/۸	۴۹/۶	۳۴/۸	۱۵۴/۷	۱۳۶/۶	پژوهش یانگ زنگ و همکارانش g-aiBP
۰/۲۰	۰/۱۹۸	۱۴۱	۱۴۲/۴	۵۰/۷۵	۲۸/۷	۱۴۴/۸	۱۴۳/۴	پژوهش حاضر g-iBP



شکل ۵. مقایسه (الف) مدول یانگ و (ب) نسبت پواسون وابسته به  $\theta$  برای g-aiBP و g-iBP.

نوری g-aiBP نیز ظاهر می‌شود. در حالی که ویژگی‌های نوری برای g-iBP در دو راستای a و b یکسان است ولی با جهت c متفاوت است.

مقدار قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر، ثابت دی‌الکتریک استاتیک را مشخص می‌کند که برای g-aiBP مقدار ۳/۷ در راستای a و b به دست آمده است. نتایج نشان می‌دهد برای هر دو ساختار، ثابت دی‌الکتریک نوری (ثابت دی‌الکتریک در انرژی‌های بالا) برابر است با ۰/۹۸. علامت مثبت (منفی) قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک یک ماده، رفتار دی‌الکتریکی (فلزی) آن ماده را نشان می‌دهد. در گستره‌های انرژی که قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک منفی است امواج در محیط منتشر نمی‌شوند و تا حد زیادی فرایند بازتابش رخ

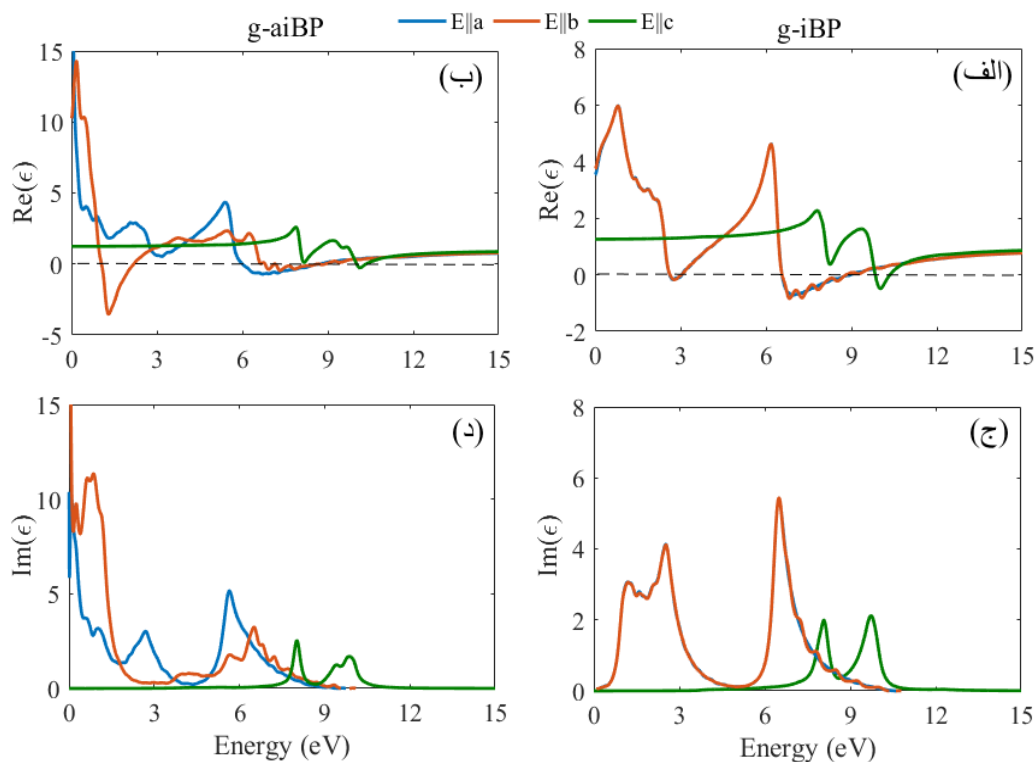
رابطه کرامرز-کرونیک به شکل زیر محاسبه می‌شود:

$$Im(\varepsilon) = \frac{4\pi e^2}{m^* \omega^2} \sum_{c,v} \int d\vec{k} \left| \langle \psi_k^c | \vec{p} \cdot \vec{r} | \psi_k^v \rangle \right|^2 \delta(E_k^c - E_k^v - \hbar\omega), \quad (1)$$

که  $E_k^c$  و  $E_k^v$  انرژی الکترون‌ها در حالت‌های متناظر  $|\psi_k^c\rangle$  و  $|\psi_k^v\rangle$  هستند. قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک نیز با استفاده از

$$Re(\varepsilon) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{+\infty} \frac{\omega' Im(\varepsilon)}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega', \quad (2)$$

در اینجا P قسمت اصلی انتگرال است. نمودار قسمت حقیقی و قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک بر حسب انرژی فوتون فرودی برای g-aiBP و g-iBP در شکل ۶ الف تا ۶ د نشان داده شده است. در نمودارهای قسمت حقیقی و قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک g-aiBP، ناهمسانگردی مشاهده می‌شود؛ به عبارت دیگر محورهای نوری آن رفتارهای متفاوتی از خود نشان می‌دهند. این ناهمسانگردی در دیگر ویژگی‌های



شکل ۶. (الف) و (ب) قسمت حقیقی، (ج) و (د) قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط برای g-iBP و g-aiBP.

جدول ۲. مکان قله‌های قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک، ریشه‌های قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک و قله‌های طیف اتلاف انرژی الکترون‌ها بر حسب eV برای g-aiBP. اعداد پر رنگ نشان دهنده انرژی‌های پلاسמוنی هستند.

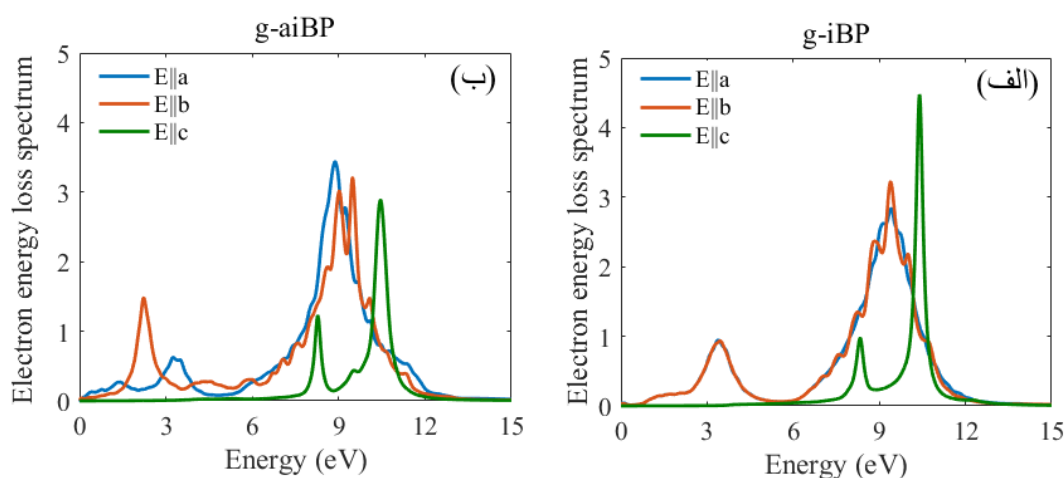
g-aiBP								
<i>Max Im(ε)</i>			<i>Re(ε) = 0</i>			<i>MaxEELs</i>		
E  a	E  b	E  c	E  a	E  b	E  c	E  a	E  b	E  c
۰/۰۸۹	۰/۲۷	۸/۰۳	۶/۰	۱/۰۵۵	۱۰/۰۱	۰/۳۸	۲/۲۴	۸/۲۷
۰/۶۶	۰/۶۷	۹/۴۲	۸/۷۳	۲/۱۹	۱۰/۳۵	۰/۸	۴/۳۹	۹/۵۲
۱/۰۳	۰/۸۶	۹/۸۹	-	۶/۷۹۵	-	۱/۳۴	۵/۹۳	۱۰/۴۵
۲/۶۹	۴/۸۶	-	-	۸/۹۲	-	۳/۳	۹/۰۱	-
۵/۶	۵/۶۴	-	-	-	-	۳/۴۶	۹/۵۲	-
-	۶/۵۱	-	-	-	-	۸/۸۸	۱۰/۱	-
-	-	-	-	-	-	۹/۲۳	-	-

دی‌الکتریک) برای g-aiBP و g-iBP گزارش شده است. یکی از شرط‌های لازم برای ایجاد برانگیختگی‌های پلاسمونی، صفر شدن قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک است که در بحث نمودار اتلاف انرژی به آن اشاره خواهد شد. نتایج نشان می‌دهد موج

می‌دهد. لازم به ذکر است که قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک در هر سه راستا بعد از ۱۰/۹ eV همگرا می‌شوند. در جدول‌های ۲ و ۳ مکان صفرهای قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک (مکان‌های تغییر علامت قسمت حقیقی تابع

جدول ۳. مکان قله‌های قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک، ریشه‌های قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک و قله‌های طیف اتلاف انرژی الکترون‌ها بر حسب eV برای g-iBP. اعداد پر رنگ نشان دهنده انرژی‌های پلاسמוنی هستند.

g-iBP								
Max Im( $\epsilon$ )			Re( $\epsilon$ ) = 0			MaxEELs		
E  a	E  b	E  c	E  a	E  b	E  c	E  a	E  b	E  c
۱/۱۱	۱/۱۱	۸/۰۷	۲/۶۲	۲/۶۴	۹/۸۴	۳/۳۸	۳/۳۸	۸/۳۱
۱/۴۸	۱/۴۸	۹/۷۳	۳/۰۵	۳/۰۴	۱۰/۳۶	۹/۱۲	۹/۱۲	۱۰/۴۰
۲/۴۲	۲/۴۲	-	۶/۵۷	۶/۵۷	-	۹/۳۸	۹/۳۸	-
۶/۴	۶/۴	-	۸/۹۸	۸/۸۲	-	-	-	-



شکل ۷. مقایسه طیف اتلاف انرژی برای g-iBP (الف) و g-aiBP (ب).

تابع دی‌الکتریک g-iBP مشاهده می‌شود. تکینگی در نمودار قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک در انرژی‌های نزدیک صفر، ویژگی فلزی g-aiBP را نشان می‌دهد.

در شکل ۷، طیف احتمال اتلاف انرژی در واحد طول برای الکترون (EELs) در حال عبور از ماده نشان داده شده است  $(EELs = Im(\frac{1}{\epsilon}) = \frac{Im(\epsilon)}{Re(\epsilon)^2 + Im(\epsilon)^2})$ . قله‌های طیف اتلاف انرژی در مکانی تشکیل می‌شود که  $Re(\epsilon)$  و  $Im(\epsilon)$  هر دو کوچک باشند. همان طور که قبلاً اشاره شد یکی از شرط‌های لازم برای ایجاد برانگیختگی‌های پلاسمونی، صفر شدن قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک است ولی شرط کافی نیست. ریشه‌های  $Re(\epsilon)$ ، دو دسته هستند: در بعضی صفرها تغییر علامت  $Re(\epsilon)$  از مثبت به منفی است که در نزدیک این ریشه‌ها  $Im(\epsilon)$  مقدار بیشینه خود را دارد. در برخی دیگر از

قطبیده در راستای a با انرژی ۶/۷۳-۸ eV در راستای b با انرژی ۱/۲-۰۵۵/۱۹ eV (نور سرخ، نارنجی و زرد از طیف نور مرئی) و ۶/۸-۷۹۵/۹۲ eV و در راستای c با انرژی ۱۰/۱۰-۰۱/۳۵ eV در محیط g-aiBP منتشر نمی‌شود. در محیط g-iBP، موج قطبیده در راستای a و b با انرژی ۳-۲/۰۵ eV (نور زرد، سبز، آبی و بنفش از طیف نور مرئی) و ۹/۱۰-۸۴/۳۶ eV و در راستای c با انرژی ۶/۸-۵۷/۹۸ eV منتشر نمی‌شود. قله‌های قسمت موهومی که گذارهای بین نواری دستگاه را نشان می‌دهد در مکان‌هایی قرار دارند که جذب فوتون بیشینه است و اتلاف انرژی موج الکترومغناطیس در ماده رخ می‌دهد. در جدول‌های ۲ و ۳ مکان قله‌های قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک برای g-iBP و g-aiBP گزارش شده است. گاف نوری حدود ۰/۸ eV در نمودار قسمت موهومی



رنگ‌های سرخ، نارنجی و زرد در مقایسه با رنگ‌های آبی و بنفش میرایی کمتری دارند.

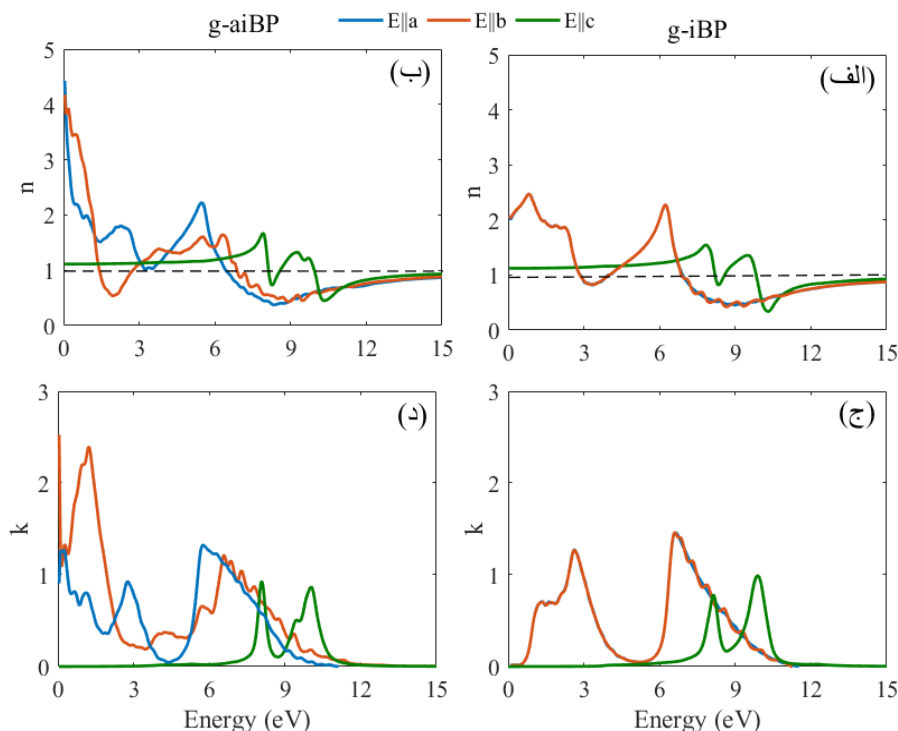
کمیت نوری دیگر، رسانندگی نوری ( $\sigma = \frac{\omega}{4\pi} \text{Im}(\varepsilon)$ )

است که به قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک بستگی دارد و گذار الکترون‌ها را با جذب فوتون از حالت‌های اشغال شده نوار ظرفیت در زیر تراز فرمی به اولین حالت‌های اشغال نشده نوار رسانش در بالای تراز فرمی بیان می‌کند. گذار بین نواری از یک مقدار آستانه آغاز می‌شود که با گاف نواری برابر است. همانطور که در شکل‌های ۹. الف و ۹. ب مشاهده می‌شود، مقدار آستانه برای  $g\text{-aiBP}$  و  $g\text{-iBP}$  به ترتیب صفر و  $0.8 \text{ eV}$  در راستای  $a$  و  $b$  است. کاهش و افزایش رسانندگی نوری با افزایش انرژی فوتون فرودی، نشان دهنده لبه‌های جذب است. هر دو ساختار در راستای  $c$  تقریباً رفتار نوری یکسانی دارند. لبه جذب در این راستا حدود  $7 \text{ eV}$  است همچنین رسانندگی نوری برای انرژی‌های بیشتر از  $10.9 \text{ eV}$ ، ناچیز بوده و در هر سه راستا همگرا می‌شود. در گستره‌هایی از انرژی فوتون که رسانندگی نوری و ضریب خاموشی ناچیز هستند موج الکترومغناطیس از داخل بلور به راحتی منتقل می‌شود. موج الکترومغناطیس در محیط  $g\text{-aiBP}$  در بازه‌های انرژی  $5-4 \text{ eV}$ ،  $5-4 \text{ eV}$  (نور سبز، آبی و بنفش از طیف نور مرئی) و  $0-7 \text{ eV}$  به ترتیب در راستاهای  $a$  و  $b$  و  $c$  منتقل می‌شود در حالی که در محیط  $g\text{-iBP}$  در بازه‌های انرژی  $0.8 \text{ eV}$ ،  $0-5 \text{ eV}$  در راستاهای  $a$  و  $b$  و  $0-7 \text{ eV}$  در راستای  $c$  کاملاً انتقال می‌یابد.

میزان بازتابش امواج الکترومغناطیس فرودی بر دو فاز  $g\text{-BP}$ ، در شکل‌های ۱۰. الف و ۱۰. ب نشان داده شده است. برای انرژی‌های بیشتر از انرژی پلاسمونی، میزان بازتابش به سرعت کاهش می‌یابد در حالی که نور با انرژی کمتر از انرژی پلاسمون‌ها، بیشترین بازتاب از سطح را دارد. برای  $g\text{-aiBP}$ ، بازتابش نور مرئی با قطبش در راستای  $a$  کمتر از ۲۰ درصد است در حالی که در راستای  $b$  نور سرخ، نارنجی تقریباً ۵۰ درصد، زرد ۳۰ درصد و نور سبز کمتر از ۲۰ درصد بازتاب می‌شوند. بازتابش نور آبی و بنفش در راستای  $b$  صفر است. با

ریشه‌ها تغییر علامت  $Re(\varepsilon)$  از منفی به مثبت است و  $Im(\varepsilon)$  نیز مقادیر کوچکی دارد. مکان دسته دوم از صفرهای قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک با مکان شاخص‌ترین قله‌های طیف اتلاف انرژی یکسان است و انرژی برانگیختگی‌های پلاسمونی (برانگیختگی‌های دسته جمعی چگالی بار الکتریکی) دستگاه را نشان می‌دهد (در جدول‌های ۲ و ۳ با اعداد پر رنگ نشان داده شده است). در انرژی‌های بیشتر از انرژی پلاسمونی، اتلاف انرژی به مقدار صفر می‌رسد. نور با انرژی کمتر از انرژی پلاسمون‌ها، از سطح بازتاب می‌شود و با انرژی بیشتر از انرژی پلاسمون‌ها، از ماده عبور می‌کند. انرژی پلاسمون‌های حجمی برای  $g\text{-aiBP}$ ،  $8/88$  و  $2/24$ ،  $9/01$  و  $10/45$  الکترون ولت و برای  $g\text{-iBP}$ ،  $3/38$ ،  $9/12$  و  $3/38$ ،  $9/12$  و  $10/40$  الکترون ولت به ترتیب در راستاهای  $a$  و  $b$  و  $c$  به دست آمده است.

ضریب شکست و ضریب خاموشی (قسمت‌های حقیقی و موهومی ضریب شکست مختلط) از دیگر ویژگی‌های نوری هستند که نمودار آنها در شکل ۸ نشان داده شده است. ضریب شکست استاتیک  $g\text{-iBP}$  در راستای  $a$  و  $c$  به ترتیب  $1/9$  و  $1/12$  است. همان طور که در هر دو نمودار ضریب شکست (شکل‌های ۸. الف و ۸. ب مشاهده می‌شود ضریب شکست در برخی گستره‌های انرژی از یک کوچک‌تر است. در این نواحی، اتلاف انرژی الکترون‌ها بیشینه است. ضریب خاموشی معیاری برای بررسی میزان جذب موج الکترومغناطیسی توسط یک ماده است. در گستره‌ای که ضریب خاموشی کوچک است موج الکترومغناطیس به آسانی از بلور عبور می‌کند ولی در بازه‌های انرژی که ضریب خاموشی، مقادیر بزرگ‌تری دارد موج الکترومغناطیس به سختی به داخل بلور نفوذ پیدا می‌کند و در نتیجه به سرعت در داخل آن میرا و خاموش می‌شود (شکل‌های ۸. ج و ۸. د). همان طور که در نمودارهای ضریب خاموشی مشاهده می‌شود در طیف نور مرئی برای راستای  $a$  بلور  $g\text{-aiBP}$ ، رنگ‌های سرخ، نارنجی و زرد کمترین میرایی و رنگ‌های آبی و بنفش بیشترین میرایی را دارند در حالی که در راستای  $b$  رنگ سرخ بیشترین و رنگ‌های سبز، آبی و بنفش کمترین میرایی را دارا هستند. در راستای  $a$  و  $b$  بلور  $g\text{-iBP}$ ،



شکل ۸. (الف) و (ب) ضریب شکست، (ج) و (د) ضریب خاموشی برای g-iBP و g-aiBP

## ۶ محاسبات رسانش کوانتمی و نتایج آن برای g-BP

محاسبات رسانش کوانتمی با بهره‌گیری از بسته محاسباتی Want انجام شده است [۲۳]. در این بسته محاسباتی با به کارگیری فرمول‌بندی لانداور [۲۴] رسانش کل دستگاه توسط

رابطه  $G(E, V) = \frac{re^2}{h} T(E, V)$  محاسبه می‌شود. در این

رابطه  $T(E, V)$  تابع عبور است و از فرمول فیشر لی  $T(E, V) = Tr(\Gamma_L G_C^r \Gamma_R G_C^a)$  محاسبه می‌شود.  $G_C^r$  و  $G_C^a$

که از معادله  $[\omega \pm i\eta - H] G_C^{\{r,a\}}(\omega) = I$  در حالت  $\eta \rightarrow 0^\pm$  به دست می‌آیند، توابع گرین پیشرو و پسروی رسانا هستند.

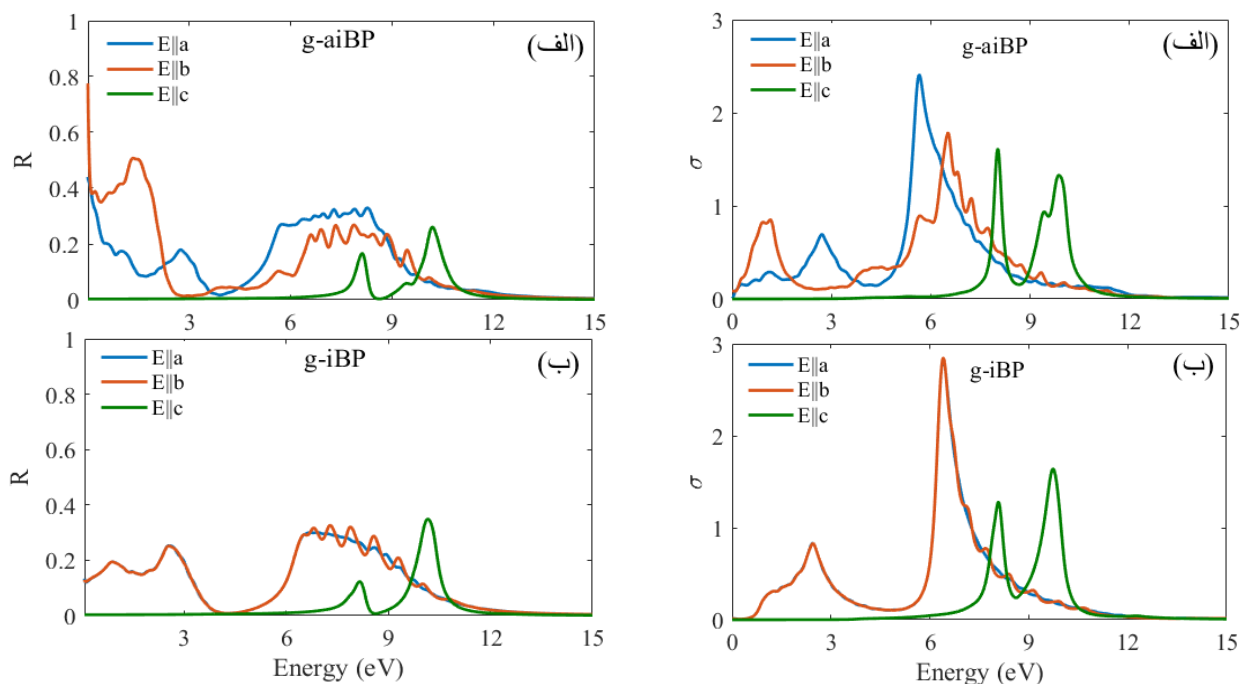
$\Gamma_{\{L,R\}}$  که به خودانرژی‌های پیشرو و پسرو وابسته است  $(\Gamma_{\{L,R\}} = i(\Sigma_{\{L,R\}}^r - \Sigma_{\{L,R\}}^a))$  جفت‌شدگی رسانا

با الکترودهای چپ و راست را بیان می‌کند. جریان عبوری از دستگاه با فرمول لانداور-بوتیکر

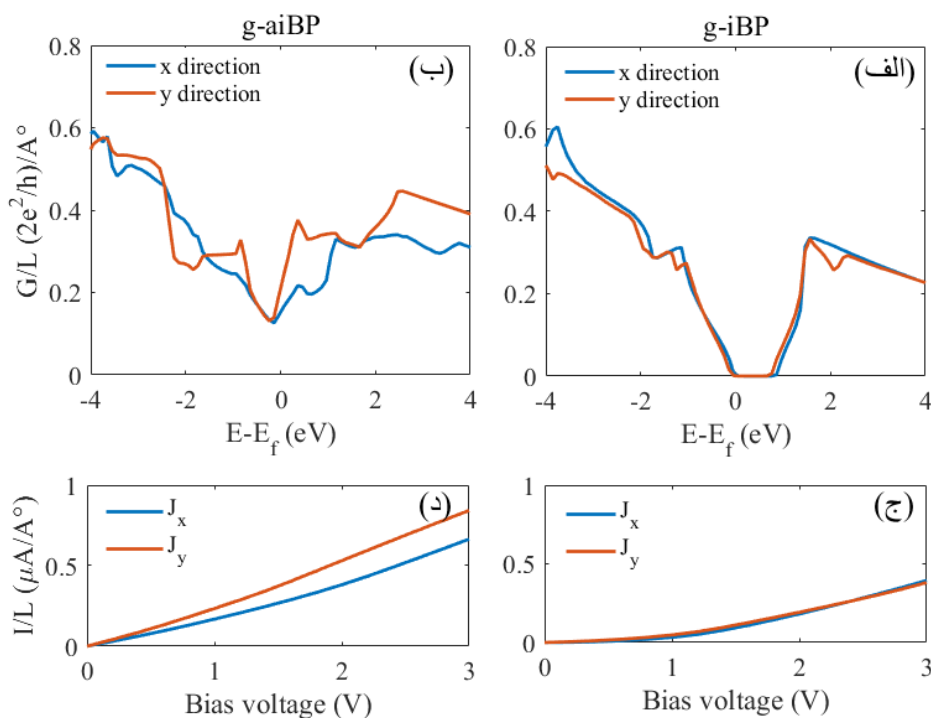
به  $I(V_b) = \frac{re}{h} \int T(E, V_b) [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)] dE$

دست می‌آید که  $V_b$  ولتاژ سوئیچده،

توجه به نتایج قسمت‌های قبل (بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک و رسانندگی نوری) می‌توان گفت در راستای b، نور سرخ و نارنجی تقریباً ۵۰ درصد جذب، نور زرد ۷۰ درصد جذب و نور سبز ۸۰ درصد عبور می‌کند. همچنین نور آبی و بنفش ۱۰۰ درصد انتقال از داخل ماده را دارند. تمام نور مرئی با قطبش در راستای c نیز از داخل ماده عبور می‌کند. برای g-iBP، نور مرئی با قطبش در راستای a و b، حدود ۲۰ درصد بازتاب می‌کند و بیشتر ۸۰ درصد مابقی، جذب می‌شود. فاز g-iBP نیز مانند g-aiBP در مقابل نور مرئی قطبیده در راستای c شفاف بوده و میزان بازتاب و جذب آن صفر است. با در نظر گرفتن این که هر دو فاز برای نور قطبیده در راستای عمود بر سطح نانولایه شفاف هستند از آنها می‌توان در سلول‌های خورشیدی به عنوان لایه شفاف ضد بازتاب استفاده کرد. با توجه به ویژگی‌های نوری ناهمسانگرد و عبور/جذب/بازتاب انتخابی موج الکترومغناطیسی در دو بلور مورد مطالعه g-BP، این ماده به عنوان گزینه‌ای مناسب در ساخت ادوات نانوالکترونیک نوری پیشنهاد می‌شود.



شکل ۹. مقایسه رسانندگی نوری برای (الف) g-iBP و (ب) g-aiBP. شکل ۱۰. مقایسه ضرایب بازتابش برای (الف) g-iBP و (ب) g-aiBP.



شکل ۱۱. (الف) و (ب) نمودارهای رسانش کوانتمی در راستای x و راستای y بر حسب انرژی و (ج) و (د) نمودارهای چگالی جریان در راستای x و راستای y بر حسب ولتاژ سوئیچ برای g-iBP و g-aiBP.

فازهای همسانگرد و ناهمسانگرد از بوروفسفین گرافین گونه با استفاده از نظریه تابعی چگالی و محاسبات ابتدا به ساکن بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد فاز ناهمسانگرد بوروفسفین گرافین گونه، شبه فلز و و فاز همسانگرد، نیمه رسانا با گاف انرژی ۰/۹ الکترون ولت است. بیشترین مدول یانگ فاز ناهمسانگرد در راستای زیگزگام مقدار ۱۴۷/۹ و برای فاز همسانگرد در راستای آرمچیر مقدار ۱۴۲/۴ به دست آمده است. نسبت پواسون در فاز همسانگرد بیشتر از نسبت پواسون در فاز ناهمسانگرد برای هر دو راستا است. با استفاده از تقریب فاز تصادفی، ویژگی‌های نوری این دو ساختار مانند طیف اتلاف انرژی، ضریب شکست، ضریب خاموشی، رسانندگی نوری و ضریب بازتابش بررسی شده‌اند. انرژی پلاسمون‌های حجمی برای فاز ناهمسانگرد ۸/۸۸ و ۲/۲۴ الکترون ولت در راستای آرمچیر و ۹/۰۱ الکترون ولت در راستای زیگزگام و برای فاز همسانگرد، ۳/۳۸ و ۹/۱۲ الکترون ولت در هر دو راستا به دست آمده است. هر دو فاز g-BP در مقابل نور مرئی قطبیده در راستای عمود بر نانولایه شفاف هستند. با توجه به عبور/ جذب/ بازتابش گرینشی موج الکترومغناطیسی در دو بلور مورد مطالعه، این ماده به عنوان گزینه‌ای مناسب در ساخت ادوات نانوالکترونیک نوری پیشنهاد می‌شود. در ویژگی‌های انتقال الکترونی فاز همسانگرد، رفتار اهمی و همسانگردی در مشخصه جریان-ولتاژ پس از ولتاژ سوئیده آستانه ۰/۹ ولت مشاهده می‌شود. چگالی جریان عبوری از فاز همسانگرد در هر دو راستا از چگالی جریان فاز ناهمسانگرد کمتر است. همچنین سرعت فرمی بالای حامل‌های بار فاز ناهمسانگرد بوروفسفین  $(7/05 \times 10^5 \text{ m/s})$ ، ناهمسانگردی در ویژگی‌های انتقال الکترونی آن و رفتار اهمی هر دو فاز، قابلیت استفاده از این ماده را در ادوات نانوالکترونیک فراهم می‌سازد.

دیراک و  $\mu_L$  ( $\mu_R$ ) پتانسیل الکتروشیمیایی الکتروود چپ (راست) هستند. شکل ۱۱، نتایج محاسبات رسانش کوانتمی g-BP برای انتقال الکترون در راستای x (آرمچیر) و y (زیگزگام) را نشان می‌دهد. با توجه به نمودار رسانش کوانتمی g-aiBP، کمترین مقدار رسانش برای هر دو راستای x و y، نزدیک تراز فرمی در نقطه دیراک است. همچنین رسانش در اطراف تراز فرمی برای راستای x کمتر از راستای y است. نکته حایز اهمیت آن که رفتار رسانش g-aiBP در دو راستای x و y متفاوت است که ناهمسانگردی انتقال الکترونی این ماده را نشان می‌دهد. در نمودار جریان-ولتاژ نیز رفتار اهمی و ناهمسانگردی در چگالی جریان عبوری از g-aiBP مشاهده می‌شود. چگالی جریان عبوری از g-aiBP در راستای x  $(J_x = \frac{I_x}{b})$  کمتر از راستای y  $(J_y = \frac{I_y}{a})$  به دست آمده است.

نمودار رسانش کوانتمی g-iBP نشانگر همسانگردی انتقال الکترونی این ماده است؛ به عبارت دیگر رسانش در اطراف تراز فرمی برای راستای x و y یکسان است. کمترین مقدار رسانش برای هر دو راستای x و y، صفر و تا محدوده ۰/۹ eV بالاتر از تراز فرمی ادامه دارد. همان طور که در مشخصه جریان ولتاژ مشاهده می‌شود تا ولتاژ سوئیده ۰/۹ V، مقدار جریان بسیار ناچیز و نزدیک صفر است که به دلیل وجود شکاف انرژی ۰/۹ eV در ساختار نواری آن است. پس از ولتاژ سوئیده ۰/۹ V رفتار اهمی و همسانگردی در مشخصه جریان-ولتاژ g-iBP مشاهده می‌شود. چگالی جریان عبوری از g-iBP در هر دو راستا از چگالی جریان g-aiBP کمتر است.

## ۷. نتیجه گیری

در این پژوهش ویژگی‌های مکانیکی، نوری و انتقال الکترونی

## مراجع

- Science 306 (2004) 666.
- X R Hu, J M Zheng, and Z Y Ren, *Front. Phys.* 13

- K S Novoselov, A K Geim, S V Morozov, D Jiang, Y Zhang, S V Dubonos, I V Grigorieva, A A Firsov,

- Wan *J. Phys. Chem. Lett.* **10**, 21 (2019) 6656.
16. Z Zhu, X Cai, C Niu, C Wang and Y Jia, *Appl. Phys. Lett.* **109** (2016) 153107.
  17. P Giannozzi, et al., *J. Phys. Condens. Matter* **21** (2009) 395502 .
  18. H J Monkhorst, J D Pack, *Phys. Rev. B* **13** (1976) 5188.
  19. T Farajollahpour, Z Faraei, and S A Jafari, *Phys. Rev. B* **99** (2019) 235150.
۲۰. ر ابراهیمی جابری، ج نعمت‌اللهی، ه قراگوزلو، س جلالی اسدآبادی، م جمال، مجله پژوهش فیزیک ایران ۱۹ (۱) (۱۳۹۸) ۳۷.
20. R Ebrahimi-Jaberi, J Nematollahi, H Gharagozloo, S Jalali-Asadabadi, M Jamal, *Iran. J. Phys. Res.* **19**, 1 (2019) 37.
  21. Z Wang, T Lü, H Wang, et al., *Front. Phys.* **14** (2019) 33403.
  22. C A Draxl, J O Sofo, *Computer Physics Communications* **175** (2006) 1.
  23. A Ferretti, B Bonferroni, A Calzolari, and M Buongiorno Nardelli, <http://www.wannier-transport.org>.
  24. S Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems", Cambridge university press, (1997).
  - (2017) 137302.
  3. G Liu, X L Lei, M S Wu, B Xu, and C Y Ouyang, *J. Phys.: Condens. Matter* **26** (2014) 355007.
  4. G Liu, S B Liu, B Xu, C Y Ouyang, H Y Song, S Guan, and S A Yang, *J. Phys. Chem. Lett.* **6** (2015) 4936.
  5. K Watanabe, T Taniguchi, and H Kanda, *Nat. Mater.* **3** (2004) 404.
  6. Q H Wang, K Kalantar-Zadeh, A Kis, J N Coleman, and M S Strano, *Nat. Nano technol.* **7** (2012) 699.
  7. A J Mannix, et al., *Science* **350** (2015) 1513.
  8. B Feng, J Zhang, Q Zhong, et al., *Nature Chem.* **8** (2016) 563.
  9. Z Zhang, Y Yang, G Gao, B I Yakobson, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015) 13022.
  10. W Xiaojun, D Jun, Z Yu, Z Zhiwen, Y Jinlong, and C Z Xiao, *ACS Nano* **6**, 8 (2012) 7443.
  11. Z Zhang, E S Penev, B I Yakobson, *Chem. Soc. Rev.* **46**, 22 (2017) 6746.
  12. L Kong, K Wu, and L Chen, *Front. Phys.* **13**, 3 (2018) 138105.
  13. X Liu, Z Zhang, L Wang, B I Yakobson, and M C Hersam, *Nat. Mater.* **17**, 9 (2018) 783.
  14. W Li, L Kong, C Chen, J Gou, S Sheng, W Zhang, H Li, L Chen, P Cheng, K Wu, *Science Bulletin* **63** (2018) 282.
  15. Y Zhang, J Kang, F Zheng, P Gao, S Zhang, and L