

اثرات کرنش تک محوری بر ویژگی های ترابرد الکترونی بوروفن B_{12} هیدروژنه: مطالعه ای بر پایه محاسبات ابتدا به ساکن

منصوره پشنگ پور

گروه فیزیک، واحد اسلامشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، اسلامشهر، ایران

پست الکترونیکی: m.pashangpour@iaui.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۴/۰۸/۰۸؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۴/۱۰/۰۱)

چکیده:

در این پژوهش، تأثیر کرنش تک محوری بر ویژگی های ساختاری و ترابرد الکترونی بوروفن B_{12} خالص و سه ساختار هیدروژنه از آن، با استفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT) بررسی شده است. بوروفن B_{12} یکی از پیکربندی های دو بعدی سنتز شده از اتم های بور است که در فرآیند سنتز، به دلیل عدم تطابق میان شبکه بوروفن و زیرلایه، ممکن است تحت تأثیر درجاتی از کرنش های کوچک قرار گیرد. همچنین، هیدروژنه سازی می تواند موجب پایداری ساختاری آن شود. در این راستا، تأثیر همزمان اعمال کرنش های تک محوری کششی و فشاری کوچک و هیدروژنه سازی بر ساختار نواری، چگالی جزیی حالت های الکترونی و مشخصه های جریان-ولتاژ بوروفن بررسی شده است. نتایج نشان می دهد که ویژگی های تراپردی بوروفن خالص و هیدروژنه نه تنها وابستگی جهت دار دارند بلکه این رفتار ناهمسانگرد، با کرنش قابل تنظیم است. بررسی مشخصه های جریان-ولتاژ (I-V) ساختارهای مورد مطالعه در ولتاژهای سویدگی کمتر از ۱۷ نشان می دهد که اعمال کرنش بر میزان ناهمسانگردی جریان تأثیرگذار است. نسبت ناهمسانگردی جریان بوروفن خالص در ولتاژ سویدگی ۱۷، برابر ۰/۷۴ به دست آمده است که با هیدروژنه سازی، تغییرات محسوسی داشته و در یکی از ساختارهای بررسی شده، رفتار جریان، همسانگرد شده است. همچنین مقایسه نسبت پواسون در دو راستای آرمچیر و زیگزاگ نشان می دهد که هیدروژنه سازی موجب نرم شدن ساختارهای هیدروژنه در راستای آرمچیر، نسبت به بوروفن خالص، شده است. قابلیت تنظیم رفتار I-V با اعمال کرنش های کوچک، بیانگر پتانسیل بالای این ساختارها برای استفاده در نسل آینده دستگاه های الکترونیکی نوآورانه است.

واژه های کلیدی: نظریه تابعی چگالی، ترابرد الکترونی، بوروفن، بوروفن، کرنش.

۱. مقدمه

رانجان و همکارانش بوروفن آزاد و پایدار از نوع B_{12} و χ_3 را با استفاده از روش لایه برداری فاز مایع سونوشیمیایی تولید کردند [۷]. ویژگی کمبود الکترون در اتم های بور، زمینه ساز تنوع ساختاری آلوتروپ های بوروفن شده است. از لحاظ نظری، امکان تشکیل فازهای مختلفی از بوروفن با غلظت و توزیع های متفاوت از حفره های شش گوشه در شبکه مثلثی آن وجود دارد که برخی از این فازها تاکنون بر روی زیرلایه های فلزی سنتز شده اند [۸، ۹]. عواملی همچون نوع و جهت گیری زیرلایه، شرایط رشد و میزان تطابق ساختاری میان زیرلایه و

بوروفن، صفحه دوبعدی متشکل از اتم های بور، به دلیل خواص فیزیکی منحصر به فرد خود، از جمله رفتار فلزی [۱] و ساختار نواری دیراک گونه [۲، ۳]، توجه گسترده ای را به خود جلب کرده است [۴]. نخستین بار در سال ۲۰۱۵، دو گروه تحقیقاتی مستقل موفق شدند بوروفن را در شرایط خلأ فوق العاده بالا و با بهره گیری از روش رشد اپیتاکسی پرتوی مولکولی بر روی زیرلایه $Ag(111)$ سنتز کنند [۵، ۶]. سپس در سال ۲۰۱۹،

تک‌لایه بوروفن، می‌توانند به تشکیل ساختارها و خواص گوناگونی در بوروفن منجر شوند. عدم تطابق شبکه‌ای بوروفن با زیرلایه و جنس زیرلایه، تعیین کننده اندازه و نوع کرنش (کششی یا فشاری) ایجاد شده در فرآیند سنتز هستند. بنابراین، امکان کنترل ویژگی‌های ساختاری و عملکردی بوروفن از طریق بهینه‌سازی شرایط سنتز وجود دارد، به نحوی که می‌توان بوروفن را با تنظیم دقیق پارامترهای رشد برای کاربردهای مختلف فناوریانه آماده‌سازی کرد.

وجود پیوندهای غیراشباع در ساختار بوروفن، یکی از چالش‌های اساسی در استفاده این ماده به صورت آزاد است؛ مسئله‌ای که باعث ناپایداری آن در غیاب زیرلایه می‌گردد [۱۰-۱۲]. به عنوان یک راهکار، عامل‌دارسازی شیمیایی به عنوان روشی مؤثر برای پایدارسازی بوروفن پیشنهاد شده است [۴، ۱۳]. این فرآیند با پر کردن حالت‌های نیمه‌اشغال شده p_z به تثبیت ساختار بوروفن کمک می‌کند. در این راستا، هیدروژنه کردن به عنوان یک روش پیشنهادی برای افزایش پایداری این ماده مطرح شده است. برای نخستین بار، بوروفن هیدروژنه شده (بوروفین) از طریق جذب اتم‌های هیدروژن بر سطح تک‌لایه بوروفن، در شرایط خلأ فوق‌العاده بالا سنتز شد [۱۴]. نتایج مطالعات نشان می‌دهد که بوروفین از نرخ اکسیداسیون کمتری برخوردار بوده و در مقایسه با بوروفن، پایداری بسیار بیشتری در برابر تماس با هوا دارد. همچنین، پیش‌بینی شده است که فرآیند هیدروژنه‌سازی تأثیر قابل ملاحظه‌ای بر ویژگی‌های ساختاری، الکترونیکی و تراپردی بوروفین دارد [۱۷-۱۵].

در سال ۲۰۲۲، کانگ و همکارانش با بهره‌گیری از محاسبات ابتدا به ساکن، فازهای پایدار بوروفین آزاد با پیکربندی‌های β_p ، β_r و α را بررسی کردند [۱۸]. نتایج حاصل از این مطالعه نشان داد که پایداری ساختاری بوروفین تحت تأثیر انرژی هیبریداسیون میان اوربیتال‌های p_z اتم‌های B و اوربیتال s اتم H تعیین می‌شود. در ادامه، در سال ۲۰۲۳ چن و همکارانش با استفاده از محاسبات اصول اولیه، موفق به پیش‌بینی دو ساختار مستقل پایدار از بوروفین β_p با یک و دو اتم هیدروژن در هر سلول واحد شدند [۱۹]. تحلیل‌های آن‌ها نشان داد که هر دو ساختار از پایداری دینامیکی برخوردار بوده

و رفتار ابرسانایی از خود بروز می‌دهند. علاوه بر این، ویژگی‌های الکترونی و تراپردی بوروفین، مشابه بوروفن، ناهمسانگرد بوده و قابلیت تنظیم از طریق اعمال کرنش را دارد [۱۳، ۱۵، ۱۸]. در ادامه این مطالعات، در پژوهش حاضر، سه ساختار آزاد از بوروفین β_p با فرمول شیمیایی B_3H_3 ، که پیش‌تر توسط چن و کانگ و همکارانشان معرفی شده‌اند، به منظور بررسی دقیق ویژگی‌های تراپرد الکترونی و تأثیر اعمال کرنش تک محوری، مورد بررسی قرار گرفته‌اند. برای این منظور، مقاله حاضر به صورت زیر سازمان‌دهی شده است: در بخش نخست، تنظیمات مربوط به شبیه‌سازی‌ها بر اساس نظریه تابعی چگالی مطرح شده است. در ادامه، نتایج مربوط به خواص ساختاری و الکترونی ساختارهای مورد بررسی گزارش شده‌اند. سپس، ساختار نواری و ویژگی‌های تراپرد الکترونی بوروفن β_p خالص و سه پیکربندی منتخب از بوروفین، تحت تأثیر کرنش‌های تک‌محوری کوچک بررسی شده‌اند. در پایان، نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که ناهمسانگردی در ساختار و تراپرد الکترونی بوروفین β_p ، از طریق هیدروژنه‌سازی و اعمال کرنش تک‌محوری، قابل کنترل و تنظیم بوده و این قابلیت می‌تواند در مهندسی ویژگی‌های بوروفن برای کاربردهای فناوریانه مورد بهره‌برداری قرار گیرد.

۲. جزئیات شبیه‌سازی

در این بخش، ساختار و ویژگی‌های الکترونی بوروفن β_p تک‌لایه و سه پیکربندی هیدروژنه آن با بهره‌گیری از نظریه تابعی چگالی (DFT) بررسی شده است. محاسبات با استفاده از بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو (Quantum ESPRESSO) انجام شده است [۲۰]. شبه‌پتانسیل‌های مورد استفاده از نوع NC هستند. تابعی انرژی تبادلی-همبستگی، PBE و تقریب مورد استفاده، تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) است [۲۱]. برای نمونه‌برداری از ناحیه بریلوئن، شبکه نقاط k با استفاده از تقسیم‌بندی Monkhorst-Pack به صورت $15 \times 20 \times 1$ انتخاب شد [۲۲]. همچنین انرژی قطع برای بسط تابع موج برابر با $Ry \ 60$ در نظر گرفته شد. به منظور شبیه‌سازی بوروفن تک‌لایه، سلول واحدی به شکل راست‌گوشی شامل پنج اتم بور طراحی شده است (شکل ۱).

β_{12} با فرمول شیمیایی B_4H_4 مطالعه شده است که نسبت ۲ به ۵ اتم هیدروژن به اتم بور را نشان می‌دهد. در سه پیکربندی بوروفین، سلول واحد حاوی دو اتم هیدروژن اضافی نسبت به ساختار اولیه است (شکل ۲). این سه ساختار از بوروفین با نام‌های uu ، ud و udh معرفی شده‌اند. در هر سه ساختار، یک اتم هیدروژن بالای اتم بوری که در مرکز شش‌گوشی‌های پر قرار گرفته، واقع شده است. در ساختار بوروفین uu (یک اتم هیدروژن دیگر بالای (پایین) پیوند بور-بور شش‌گوشی خالی در راستای آرمچیر قرار دارد. در ساختار بوروفین udh این اتم هیدروژن در پایین پیوند بور-بور شش‌گوشی پر در راستای آرمچیر قرار گرفته است. در شکل ۲، نمای بالا و جانبی سه ساختار بوروفین مورد مطالعه مشاهده می‌شود.

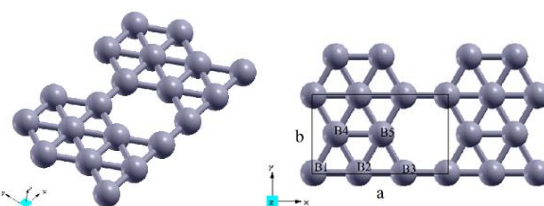
۳. نتایج خواص ساختاری و الکترونی بوروفن β_{12} هیدروژنه

پس از بهینه‌سازی کامل ساختارها و کاهش نیروها به مقادیر تعادلی از مرتبه $10^{-7} \frac{eV}{\text{\AA}}$ ، پارامترهای سلولی بوروفن β_{12} به‌دست آمده‌اند که تطابق خوبی با داده‌های تجربی نشان می‌دهند [۲۳]. در جدول ۱، اطلاعاتی از جمله ثابت‌های شبکه، طول پیوندهای B-H و B-B، فاصله نسبی اتم‌های H و B، انرژی هم‌دوسی (E_c) و انرژی هیدروژناسیون (E_{hyd}) برای صفحات بوروفن خالص و هیدروژنه‌شده پس از واهلش کامل گزارش شده است. مقادیر انرژی هم‌دوسی (E_c) و انرژی هیدروژناسیون (E_{hyd}) مطابق با روابط (۱) و (۲) محاسبه می‌شوند:

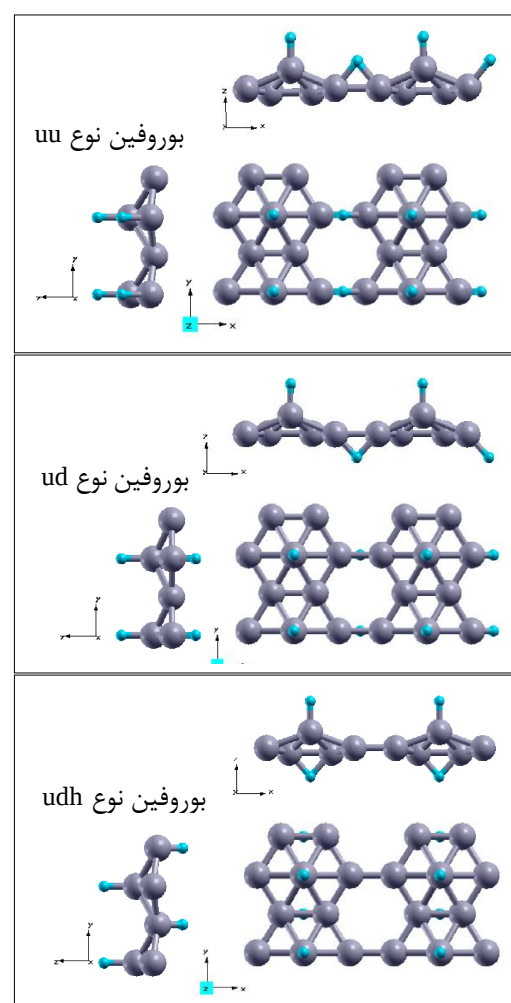
$$E_c = \frac{E_{borophane} - (\Delta E_B + 2E_H)}{\gamma} \quad (1)$$

$$E_{hyd} = \frac{E_{borophane} - (E_{borophane} + 2E_H)}{\gamma} \quad (2)$$

که در آن E_B ، E_H ، $E_{borophane}$ ، $E_{borophane}$ به‌ترتیب، انرژی کل ساختار اولیه بوروفن خالص، انرژی کل ساختار بوروفین، انرژی اتم هیدروژن ایزوله و انرژی اتم بور ایزوله هستند. بر اساس مقایسه انرژی هم‌دوسی، ساختار بوروفین β_{12} نوع udh در میان سه پیکربندی بررسی‌شده، از نظر ترمودینامیکی پایدارترین حالت تلقی می‌شود.



شکل ۱. شکل سمت راست: سلول واحد بوروفن و نمای بالا و شکل سمت چپ: نمای سه‌بعدی از آن. کره‌های خاکستری اتم‌های بور را نشان می‌دهند. اتم‌های بور در یک صفحه قرار گرفته‌اند. در راستای محور x (آرمچیر) زنجیره مستقیمی از اتم‌های بور دیده می‌شود.



شکل ۲. از بالا به پایین، نمای بالا و جانبی از پیکربندی‌های هیدروژنه بوروفن (بوروفین) نوع uu ، ud و udh . کره‌های خاکستری و آبی به ترتیب اتم‌های بور و هیدروژن را نشان می‌دهند.

همچنین، یک خلاء $2.0 \text{\AA}$ در راستای عمود بر صفحه تک‌لایه برای حذف برهم‌کنش‌های بین لایه‌های موازی مجاور در نظر گرفته شده است. در این پژوهش، سه ساختار آزاد از بوروفین

جدول ۱. ثابت‌های شبکه (a و b)، طول پیوندهای B-H/B-B (d_{B-H}/d_{B-B})، انرژی همدوسی (E_c بر حسب eV) و انرژی هیدروژناسیون (E_{Hyd} بر حسب eV بر اتم) صفحات بوروفن β_{12} خالص و هیدروژنه شده.

پیکربندی	a (Å)	b (Å)	d_{B-H} (Å)	d_{B-B} (Å)	E_c (eV/atom)	E_{Hyd} (eV/atom)
بوروفن β_{12}	۵/۰۷	۲/۹۲۳	-	۱/۷۱۴ - ۱/۶۴۱ - ۱/۶۸۹ - ۱/۶۹۹	-	-
بوروفین uu	۵/۱۲	۲/۸۳۹	۱/۲۰۷ - ۱/۳۳۳	۱/۸۵۹ - ۱/۶۹۱ - ۱/۸۵۵ - ۱/۶۱۲	-۴/۲۵۱	-۰/۷۵۹
بوروفین ud	۵/۰۷	۲/۹۰	۱/۲۱۲ - ۱/۳۶۱	۱/۸۵۶ - ۱/۶۳۵ - ۱/۷۰۰ - ۱/۸۰۴ - ۱/۶۶۱	-۴/۲۸۳	-۰/۷۲۶
بوروفین udh	۵/۰۹	۲/۸۷۹	۱/۲۰۹ - ۱/۳۵۷	۱/۸۲۸ - ۱/۶۴۶ - ۱/۷۰۴ - ۱/۸۴۷ - ۱/۶۵۳	-۴/۳۹۴	-۰/۸۶۹

جدول ۲. مقایسه انرژی کل و درصد سهم اوربیتال‌های اتم‌های B و H در چگالی حالات الکترونی در انرژی فرمی.

پیکربندی	انرژی کل (Ry)	اتم	p_x (%)	p_y (%)	p_z (%)	s (%)
بوروفن β_{12}	-۳۰/۷۴۸۵	B1(B3)	۴/۴	۲/۸	۱۴/۸	۰/۰۴
		B2	۰/۰۷	۰/۰۴	۳/۰	۰/۰۶
		B4(B5)	۲/۹	۳/۴	۱۹/۴	۰/۱
بوروفین uu	-۳۳/۰۴۵۳	B1(B3)	۰/۴	۳/۴	۵/۵	۰/۸
		B2	۱/۳	۵/۴	۲/۱	۰/۰۴
		B4(B5)	۲/۰	۲/۴	۲۴/۱	۲/۹
		H_{top}	-	-	-	۶/۳
		$H_{between}$	-	-	-	۱/۵
بوروفین ud	-۳۳/۰۲۲۷	B1(B3)	۳/۹	۲/۲	۷/۴	۰/۴
		B2	۰/۶	۲/۱	۲/۱	۰/۰۴
		B4(B5)	۵/۷	۲/۱	۲۰/۶	۰/۷
		H_{top}	-	-	-	۸/۰
		$H_{between}$	-	-	-	۰/۸
بوروفین udh	-۳۳/۰۹۷۶	B1(B3)	۰	۱۱	۱۹/۲	۰/۴
		B2	۳/۱	۰/۷	۰/۱	۰/۰۲
		B4(B5)	۰	۱۰/۴	۶/۱	۰/۴
		H_{top}	-	-	-	۰/۴
		$H_{between}$	-	-	-	۰/۵

چن و همکارانش هم در سال ۲۰۲۳ با بررسی طیف فونونی، نشان داده بودند که این پیکربندی از لحاظ دینامیکی پایدار است [۱۹].

با جذب اتم‌های هیدروژن، ساختار الکترونی و نواری بوروفن β_{12} دستخوش تغییرات قابل توجهی می‌شود. در جدول ۲، درصد سهم اوربیتال‌های مختلف در انرژی فرمی گزارش شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود در پیکربندی بوروفین نوع udh سهم اوربیتال‌های p_z و p_y در انرژی فرمی قابل توجه است و انرژی کل، کمترین مقدار را دارد.

در شکل ۳، ساختار نواری بوروفن β_{12} مشاهده می‌شود. نواری‌های انرژی در نزدیکی سطح فرمی، بدون ایجاد شکاف انرژی، از این ناحیه عبور می‌کنند که نشان‌دهنده رفتار فلزی این ماده است. در نقطه Γ شکاف انرژی کوچکی مشاهده می‌شود. همان‌طور که در نمودار چگالی حالات جزئی (PDOS) دیده می‌شود (شکل ۳)، سهم قابل توجهی از ویژگی‌های رسانی بوروفن β_{12} مربوط به الکترون‌های فعال در نزدیکی سطح فرمی است که بیشتر در اوربیتال p_z قرار دارند.

الکترونیکی این ماده است. دوم آن‌که، هیبریداسیون اوربیتال‌های s و p بور، ماهیتی جهت‌دار دارد و در امتداد زنجیره‌ها، یعنی راستای آرمچیر، هم‌پوشانی قوی‌تر و باندهای پهن‌تر ایجاد می‌کند. در حالی که در راستای عمود بر آن، یعنی راستای زیگزگ، هم‌پوشانی ضعیف‌تر و باندهای باریک‌تر شکل می‌گیرد. این دو سازوکار در کنار یکدیگر، منجر به ناهمسانگردی الکترونی و رسانشی می‌شوند. این ناهمسانگردی‌ها تأثیر قابل توجهی بر رفتار ترابردی و پاسخ آن به عوامل خارجی مانند کرنش داشته و این ماده را به گزینه‌ای مناسب برای کاربرد در نانوالکترونیک تبدیل کرده است.

برای مطالعه ویژگی‌های ترابرد الکترونی تک‌لایه بوروفن، از نرم‌افزار WanT استفاده شده است [۲۶]. این نرم‌افزار مبتنی بر بازنمایی توابع وانیر (Wannier Functions) با بیشترین جایگزیدگی است که امکان مدل‌سازی ترابرد الکترونی در مقیاس نانو را فراهم می‌سازد. در برنامه WanT، محاسبه جریان عبوری سامانه بر اساس فرمول لاندور-بوتیکر [۲۷] و از طریق رابطه:

$$I(V_b) = \frac{2e}{h} \int_{\mu_L}^{\mu_R} T(E, V_b) [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)] dE \quad (3)$$

انجام می‌شود. در این رابطه، μ_L ، μ_R و V_b به ترتیب، پتانسیل الکتروشیمیایی الکتروود چپ، پتانسیل الکتروشیمیایی الکتروود راست، ولتاژ سویدگی و تابع توزیع فرمی هستند. در این رابطه $T(E, V)$ ، تابع انتقال است و مطابق رابطه فیشر-لی [۲۸]:

$$T(E, V) = \text{Tr}(\Gamma_L G_C^r \Gamma_R G_C^a) \quad (4)$$

به دست می‌آید. هم‌چنین $\Gamma_{\{L,R\}}$ ، که بیانگر جفت‌شدگی بین الکتروودهای چپ و راست با بخش رسانا است، از طریق رابطه:

$$(\Gamma_{\{L,R\}} = i(\Sigma_{\{L,R\}}^r - \Sigma_{\{L,R\}}^a)) \quad (5)$$

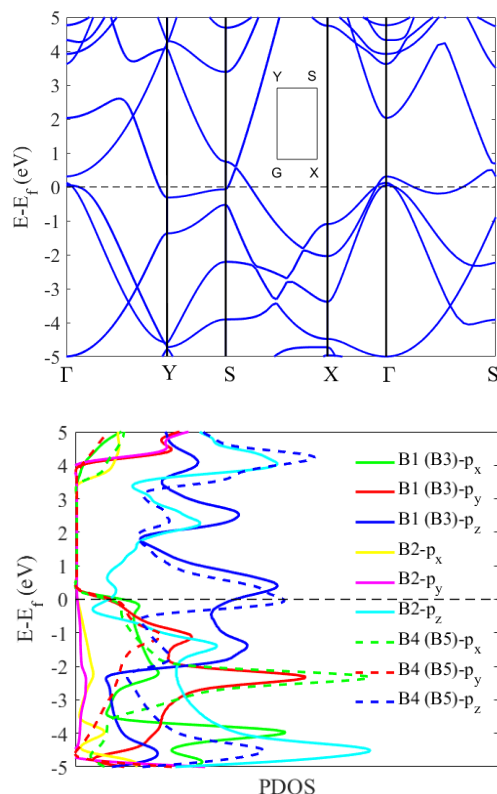
به دست می‌آید و به خودانرژی‌های پیش‌افتاده و پس‌افتاده وابسته است. کمیت‌های G_C^a و G_C^r نیز از رابطه:

$$[E \pm i\eta - H_C] G_C^{\{r,a\}}(E) = I \quad (6)$$

برای $\eta \rightarrow 0^+$ به دست می‌آیند که به ترتیب توابع گرین پس‌افتاده و پیش‌افتاده بخش رسانا هستند. هدایت سیستم نیز با استفاده از صورت‌بندی لاندور [۲۹]:

$$C(E, V) = \frac{2e^2}{h} T(E, V) \quad (7)$$

قابل محاسبه است.



شکل ۳. شکل بالا: ساختار نواری و شکل پایین: چگالی حالات جزئی بوروفن β_{12} . انرژی فرمی به صفر منتقل شده است.

شکاف بین پیوندهای σ و σ^* (ناشی از اوربیتال‌های هیبریدی sp^2) حدود ۳/۵ eV برآورد می‌شود. دو نقطه دیراک، یکی در مسیر $\Gamma-Y$ در انرژی ۲/۱۲ eV و دیگری در مسیر $S-X$ در انرژی ۰/۵۷ eV مشاهده می‌شود. هر دو مخروط دیراک متناظر با این نقاط، دارای کج‌شدگی هستند. این نوع کج‌شدگی در مخروط دیراک بوروفن β_{12} نیز مشاهده شده است [۲۴، ۲۵]. مقدار کج‌شدگی مخروط دیراک دوم، $\frac{m}{s} = 1/67 \times 10^6$ ، بیشتر از اولی، $\frac{m}{s} = 1/8 \times 10^6$ ، است. جهت‌گیری فضایی پیوندها و آرایش الکترونی در بوروفن β_{12} ، منجر به بروز ویژگی‌های ناهمسانگرد در آن می‌شود. ناهمسانگردی الکترونی در بوروفن β_{12} ، از دو سازوکار بنیادی ناشی شده است. نخست آن‌که، برخلاف گرافن که دارای تقارن شش‌گوش کامل و همسانگرد است، تقارن شبکه بوروفن β_{12} به دلیل وجود حفره‌های شش‌گوشی و زنجیره‌های خطی، کاهش یافته و از نوع تقارن مستطیلی است؛ موضوعی که در راستاهای مختلف، رسانش متفاوتی ایجاد می‌کند. همین تقارن پایین‌تر نسبت به گرافن، باعث ناهمسانگردی مکانیکی و

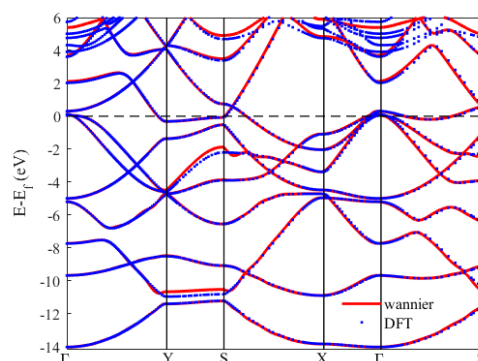
ناشی از اصلاح ساختار نواری و کاهش چگالی حالات در نزدیکی سطح فرمی است. این تغییرات، موجب کاهش جریان در محدوده ولتاژهای کمتر از ۱ V در پیکربندی‌های مورد مطالعه شده‌اند. کاهش جریان در راستای x برای بوروفین‌های نوع udh و ud au تقریباً مشابه است، در حالی که کاهش جریان در راستای y برای بوروفین نوع ud بیش از سایر ساختارها مشاهده می‌شود. بنابراین،

پس از هیدروژنه‌سازی، چگالی جریان در راستای y ($J_y = \frac{I_y}{a}$) نسبت به چگالی جریان راستای x ($J_x = \frac{I_x}{b}$) کاهش بیشتری نشان می‌دهد؛ به طوری که مقدار ناهمسانگردی جریان، $\eta = \frac{J_x}{J_y}$ ، در ولتاژ ۱V به ترتیب برای بوروفین‌های نوع ud au و udh مقادیر ۰/۶۵، ۰/۹۹ و ۰/۸۰ و برای بورفن خالص مقدار ۰/۷۴ به دست آمده است. با توجه به این که هر چقدر این نسبت به عدد یک نزدیک‌تر باشد، ناهمسانگردی کمتر خواهد بود، بیشترین ناهمسانگردی جریان متعلق به بوروفین نوع uu است. هم‌چنین چگالی جریان در بوروفین نوع ud، تقریباً همسانگرد ($J_x \approx J_y$) است. بنابراین، فرآیند هیدروژنه‌سازی، افزون بر افزایش پایداری ساختاری بوروفن، امکان تنظیم و کنترل ناهمسانگردی جریان را نیز فراهم می‌آورد. در بخش‌های بعدی، تأثیر کرنش‌های تک‌محوری کششی و فشاری کوچک بر ساختار نواری و چگالی جریان بوروفن β_{12} خالص و ساختارهای هیدروژنه‌شده بررسی می‌شود.

۴. ساختار نواری و ترابرد الکترونی بوروفن β_{12}

خالص تحت تأثیر کرنش‌های تک‌محوری کوچک

در این بخش، اثر کرنش تک‌محوری بر ساختار نواری و مشخصه‌های ترابرد الکترونی بوروفن β_{12} خالص مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور، کرنش‌های کششی و فشاری با مقادیر ۲٪ و ۸٪ بر سلول واحد راست‌گوشی اعمال شده‌اند. انتخاب مقادیر کرنش تک‌محوری ۲٪ و ۸٪ بر اساس محدوده کرنش الاستیک گزارش‌شده [۳۱، ۳۲] برای بوروفن β_{12} انجام شده است. این انتخاب امکان بررسی دو رژیم خطی، کرنش کوچک و کرنش بزرگ‌تر (نزدیک به حد بالای پایداری مکانیکی) را فراهم می‌کند. کرنش به صورت زیر تعریف می‌شود:



شکل ۴. ساختار نواری حاصل از محاسبات DFT و توابع وانیر

جهت تحلیل مشخصه‌های جریان-ولتاژ در راستای x و y، دستگاهی متشکل از یک ناحیه مرکزی رسانا از جنس بوروفن خالص و دو الکترود متصل به چپ و راست، با جنسی مشابه ناحیه مرکزی، مورد نیاز است. برای سامانه‌های توده‌ای، محاسبات ترابرد کوانتومی همدوس در کد WantT تحت عنوان «محاسبات تراپردی توده‌ای» انجام می‌شود که در آن جنس الکترودها و ناحیه مرکزی یکسان است. در این چارچوب، نیازی به انتخاب الکترود وجود ندارد و الکترودها به صورت صریح تعریف نمی‌شوند [۲۶]. هم‌چنین، در محاسبات تراپردی توده‌ای، ترابرد محاسبه‌شده متناظر با رسانش کوانتومی همدوس سامانه بوده و تنها به ساختار نواری آن وابسته است؛ بنابراین، انتخاب یک سلول واحد برای توصیف کامل کانال‌های رسانش کافی است. برای این منظور، چهارده تابع وانیر انتخاب شده است که هشت تابع از نوع σ (ناشی از پیوندهای sp^2) در مرکز پیوندهای B-B، پنج تابع از نوع p_z روی اتم‌های B، و یک تابع از نوع s روی اتم B واقع در مرکز شش‌گوشی پُر قرار دارند. در شکل ۴، ساختار نواری به دست آمده از توابع وانیر انتخاب شده با ساختار نواری حاصل از محاسبات DFT مقایسه شده است.

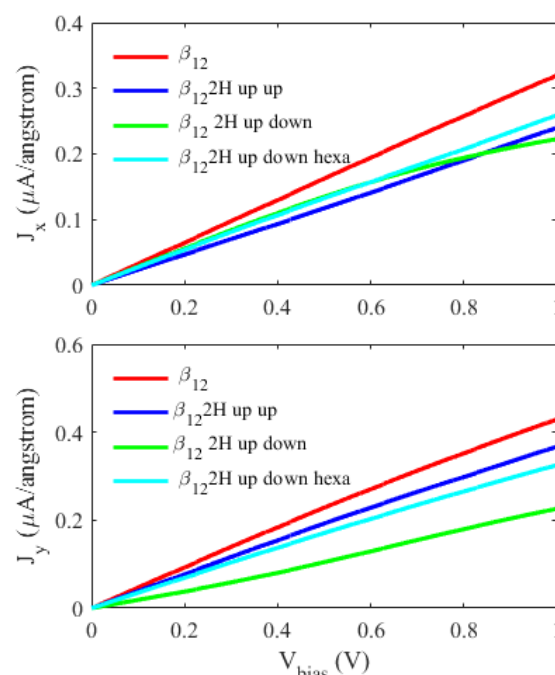
مشخصه جریان-ولتاژ (I-V) برای بوروفن β_{12} خالص و ساختارهای هیدروژنه‌شده، تفاوت‌های قابل ملاحظه‌ای در رفتار تراپردی این سامانه‌ها نشان می‌دهد (شکل ۵). ناهمسانگردی جریان در راستاهای x (آرمچیر) و y (زیگزاک) در تمامی پیکربندی‌های مورد بررسی، به جز بوروفین نوع ud، مشاهده شده است. نمودار I-V برای بوروفن β_{12} ، دارای شیب زیاد و تقریباً خطی است که بیانگر رفتار فلزی آن است. در مقابل، پس از فرآیند هیدروژنه‌سازی، منحنی I-V دستخوش تغییراتی می‌شود که عمدتاً

جابه‌جایی عرضی محدودتری در جهت زیگزاگ ایجاد می‌شود. در مقابل، در جهت زیگزاگ که نسبت پواسون آن $(\nu_{zigzag} = -\frac{\epsilon_{armchair}}{\epsilon_{zigzag}})$ برابر ۰/۲۱ است، پیوندها زاویه‌دارتر و بازتر هستند و هم‌پوشانی اوربیتال‌ها کمتر است؛ بنابراین، انعطاف‌پذیری و جابه‌جایی عرضی در جهت آرمچیر بیشتر خواهد بود. این تفاوت می‌تواند نقش مؤثری در پاسخ الکترونی بوروفن تحت اعمال کرنش داشته باشد.

با اعمال کرنش کششی و فشاری به بوروفن β_{12} خالص، ساختار نواری دست‌خوش تغییر می‌شود (شکل ۶). افزایش کرنش در راستای x از ۸٪ به ۸٪ منجر به کاهش مقدار شکاف انرژی در نقطه Γ می‌شود و نقطه دیراک در مسیر $\Gamma-Y$ ($S-X$) را به تراز فرمی نزدیک (دور) می‌کند. هم‌چنین، نوارهای انرژی در راستاهای $\Gamma-X$ و $Y-S$ به تراز فرمی نزدیک‌تر شده و تخت‌تر می‌شوند. افزایش کرنش در راستای x، نوارهای انرژی در راستای $S-X$ را به تراز فرمی نزدیک و در راستای $\Gamma-S$ را از تراز فرمی دور می‌کند. در مقابل، افزایش کرنش در راستای y منجر به افزایش مقدار شکاف انرژی در نقطه Γ شده و نقاط دیراک در مسیرهای $\Gamma-Y$ و $S-X$ را به تراز فرمی نزدیک می‌کند. هم‌چنین نوارهای انرژی در راستای $\Gamma-X$ و $Y-S$ از تراز فرمی دورتر شده و شیب بیشتری پیدا می‌کنند. این تغییرات در ساختار نواری، ناشی از اعمال کرنش، منجر به تغییر مشخصه‌های جریان-ولتاژ ($I-V$) نیز می‌شوند.

محاسبات مشخصه‌های $I-V$ در راستاهای x و y در کد WanT، تحت عنوان «محاسبات ترابردی» توده‌ای انجام می‌شود. در این روش، جنس الکترونها و ناحیه مرکزی یکسان و از جنس بوروفن β_{12} خالص است؛ از این‌رو، نیازی به انتخاب صریح الکترونها وجود ندارد. مطالعه خواص ترابرد الکترونی در نرم‌افزار WanT بر پایه توابع وانیر (WFs) با بیشترین جایگزیدگی استوار است [۲۶، ۳۰].

در شکل ۷، اثر کرنش‌های تک‌محوری کششی و فشاری در راستاهای a و b بر چگالی جریان عبوری در راستاهای x و y تا ولتاژ ۱ V برای بوروفن β_{12} خالص نشان داده شده است. افزایش کرنش در راستای x از ۸٪ به ۸٪ منجر به کاهش



شکل ۵: نمودار جریان-ولتاژ در راستای x و y برای بوروفن β_{12} خالص و هیدروژنه‌شده. بیشترین ناهمسانگردی جریان متعلق به بوروفین نوع uu می‌باشد. چگالی جریان برای بوروفین نوع uu و تقریباً همسانگرد است.

$$\epsilon = \frac{l - l_0}{l_0} \quad (8)$$

که در آن l ثابت شبکه اولیه و l_0 ثابت شبکه تحت تأثیر کرنش است. در روند اعمال کرنش تک‌محوری، کرنش محوری در امتداد جهت a (جهت b) اعمال شده و سپس واهلش شبکه در امتداد جهت b (جهت a) انجام گرفته است تا مؤلفه تنش جانبی در جهتی که کرنش بر آن اعمال نشده است، به کمتر از ۰/۰۰۱ GPa برسد. در نتیجه، با اعمال کرنش کششی (ϵ_a) (ϵ_b) در جهت a (جهت b)، تک‌لایه بوروفن β_{12} خالص تحت تأثیر کرنش فشاری ϵ_b (ϵ_a) در جهت b (جهت a) قرار می‌گیرد.

در راستای x (جهت آرمچیر) در بوروفن β_{12} خالص، پیوندهای بین اتمی به صورت زنجیره‌ای، مستقیم و متراکم آرایش یافته‌اند و اوربیتال‌های σ و π هم‌پوشانی بیشتری دارند؛ از این‌رو، ساختار در جهت (a) سخت‌تر از جهت (b) است. نسبت پواسون در جهت آرمچیر $(\nu_{armchair} = -\frac{\epsilon_{zigzag}}{\epsilon_{armchair}})$ ۰/۱۷ است که نشان می‌دهد در اثر کرنش طولی در این راستا،

راستای y (J_y) دارد که بیانگر ناهمسانگردی هدایت الکترونی در ساختار دولایه بوروفن در مواجهه با کرنش است. با افزایش کرنش در راستای x ، در ولتاژ 1 V ، میزان ناهمسانگردی چگالی جریان ($\eta = \frac{J_x}{J_y}$) برای بوروفن β_p خالص از مقدار 0.95 در کرنش 8% به مقدار 0.50 در کرنش 8% افزایش می‌یابد. در مقابل، با افزایش کرنش در راستای y ، این میزان ناهمسانگردی از مقدار 0.55 در کرنش 8% به مقدار 0.93 در 8% کاهش پیدا می‌کند (هر چقدر این نسبت از عدد یک فاصله بیشتری داشته باشد، ناهمسانگردی بیشتر است). تفاوت در حساسیت به کرنش راستاهای x و y ، بر خواص بلوری و ناهمسانگردی ذاتی این ماده دلالت دارد. این ناهمسانگردی در مشخصه جریان-ولتاژ و تغییرات آن در اثر اعمال کرنش‌های کششی و فشاری، در فازهای دیگر بوروفن [۱۳، ۱۵]، بوروفن هیدروژنه [۱۳، ۱۶] و همچنین در سایر مواد دوبعدی، از جمله فسفید بور دوبعدی [۳۳] و اکسید بوروفن گرافن‌گونه [۱۲] نیز گزارش شده است.

۵. ساختار نواری و ترابرد الکترونی بوروفن β_p هیدروژنه uu و ud تحت تأثیر کرنش‌های تک محوری کوچک

در این بخش، ابتدا ساختار نواری بوروفن β_p هیدروژنه شده نوع uu و ud (بوروفین uu و ud) و سپس مشخصه‌های جریان-ولتاژ آنها تحت کرنش‌های تک‌محوری بررسی و مقایسه می‌شوند. در این دو پیکربندی، دو اتم H در امتداد زنجیره اتم‌های بور، در راستای x قرار دارند. یک اتم H با اتم بور واقع در مرکز شش‌گوشی پیوند برقرار می‌کند و در نتیجه اوربیتال p_z این اتم بور را درگیر می‌سازد؛ اتم H دیگر نیز در بالای پیوند میان دو اتم بور متعلق به شش‌گوشی خالی قرار می‌گیرد (شکل ۲).

ساختارهای نواری بوروفین uu و ud تحت تأثیر کرنش تغییر می‌کنند و نوارهای انرژی جابه‌جا می‌شوند (شکل ۸). در حالت بدون کرنش، سه نقطه دیراک در انرژی‌های 1.11 eV ، 0.49 eV و -0.57 eV قرار دارند. کمترین کج‌شدگی مخروط

چگالی جریان جریان در راستای x (J_x)، به‌ویژه در ناحیه ولتاژهای بالا می‌شود. این رفتار می‌تواند ناشی از کاهش چگالی حالات در نوار رسانش، افزایش شکاف انرژی و کاهش شیب نوارهای انرژی در راستاهای $\Gamma-X$ و $Y-S$ در نزدیکی تراز فرمی باشد که در نهایت به تضعیف انتقال الکترونی در این راستا منجر می‌شود. هم‌چنین، با افزایش کرنش در راستای x ، مقدار شکاف انرژی در نقطه Γ کاهش می‌یابد.

افزایش کرنش در راستای y از 8% به 8% ، منجر به کاهش J_x می‌شود. این کاهش می‌تواند ناشی از بسته‌شدن جزئی نوار رسانش و کاهش چگالی حالات در انرژی‌های مؤثر در فرایند انتقال باشد. هم‌چنین، با افزایش کرنش در راستای y ، مقدار شکاف انرژی در نقطه Γ افزایش می‌یابد. تغییرات J_y در اثر اعمال کرنش‌های کششی و فشاری در راستای y مشابه تغییرات J_x در اثر اعمال کرنش‌های کششی و فشاری در راستای x است. با افزایش کرنش در راستای y ، نوارهای انرژی در مسیرهای $S-X$ و $\Gamma-Y$ از تراز فرمی دورتر می‌شوند که این امر به کاهش چگالی جریان J_y منجر می‌شود.

دلیل فیزیکی این تغییرات را می‌توان در تغییر فاصله بین اتم‌های بور در اثر اعمال کرنش و در نتیجه، تغییر میزان هم‌پوشانی اوربیتال‌های s و p بررسی کرد. کشیده‌شدن (کرنش مثبت) یا فشردشدن (کرنش منفی) شبکه، به‌ترتیب موجب افزایش یا کاهش فاصله بین اتم‌های بور می‌شود که کاهش یا افزایش هم‌پوشانی میان اوربیتال‌های همسایه را در پی دارد و به‌طور مستقیم بر پهنای باند و موقعیت نوارهای انرژی اثر می‌گذارد. با کاهش هم‌پوشانی، پهنای باند کاهش می‌یابد و احتمال گشوده‌شدن شکاف انرژی افزایش پیدا می‌کند. در مقابل، با افزایش هم‌پوشانی، پهنای باند افزایش می‌یابد و موقعیت نقاط دیراک تغییر می‌کند. از آنجا که نقاط دیراک حاصل تقارن خاص شبکه و برهم‌کنش میان اوربیتال‌ها هستند، اعمال کرنش می‌تواند تقارن شبکه را تغییر دهد یا بشکند و در نتیجه به جابه‌جایی یا حذف این نقاط منجر شود. هم‌چنین، تغییر ساختار نواری در اثر کرنش موجب تغییر چگالی حالات می‌شود که این موضوع بر جریان الکترونی در راستاهای مختلف تأثیرگذار است.

افزایش کرنش کششی در راستای x تأثیر کمتری بر جریان در

بوروفین و تغییر زاویه‌های پیوندی، انعطاف‌پذیری آن در برابر کرنش افزایش یافته و ساختار نرم‌تر می‌شود. در ساختار نواری بوروفین ud که در شکل ۱۰ مشاهده می‌شود، افزایش کرنش در راستای x (y) باعث تخت‌تر شدن نوار انرژی نزدیک تراز فرمی در مسیر $Y-S$ ($S-X$) می‌شود که این امر به کاهش چگالی جریان J_x (J_y) منجر می‌گردد (شکل ۱۱). همچنین، با افزایش کرنش در راستای x نوارهای انرژی در مسیر $\Gamma-Y$ به تراز فرمی نزدیک‌تر می‌شوند که در نتیجه $\times$ جریان J_y افزایش می‌یابد. در مقابل، با افزایش کرنش در راستای y، نوارهای انرژی نزدیک به تراز فرمی در مسیر $\Gamma-X$ به یکدیگر نزدیک‌تر می‌شوند که در پی آن، چگالی جریان J_x افزایش می‌یابد. افزون بر این، در کرنش ۸٪- راستای y، شکاف نواری ایجاد شده در مسیر $\Gamma-X$ منجر به کاهش قابل ملاحظه چگالی جریان J_x شده است.

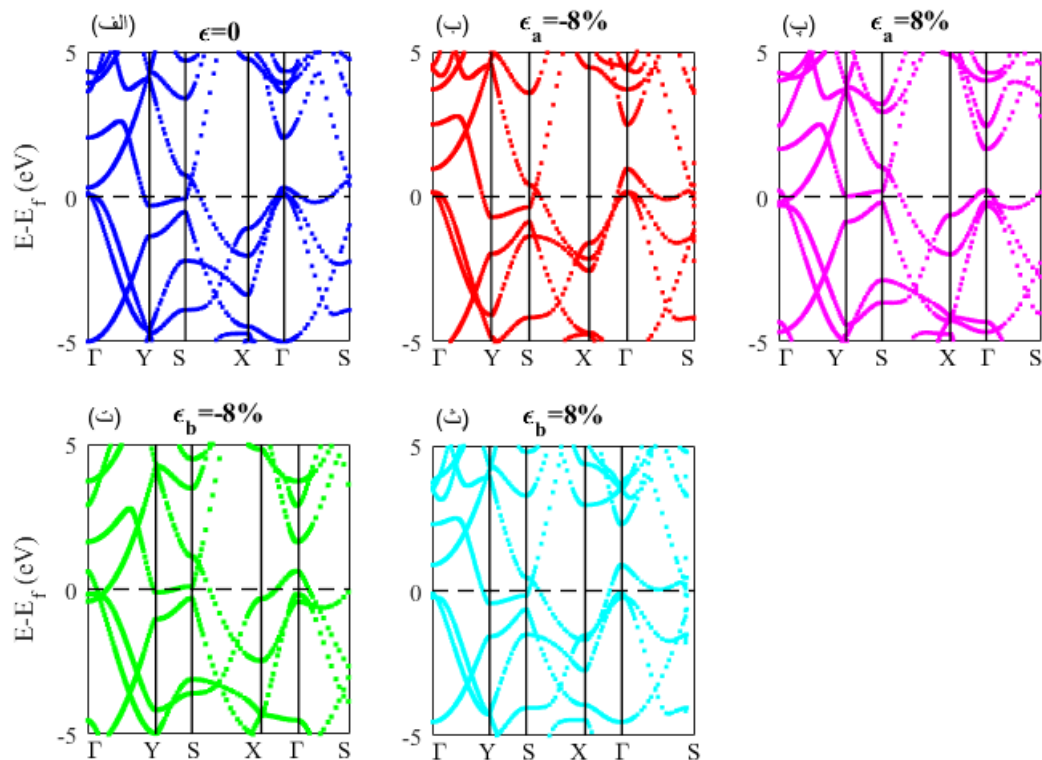
۶. ساختار نواری و ترابرد الکترونی بوروفن β_{12} هیدروژنه udh تحت تأثیر کرنش‌های تک‌محوری کوچک

در این بخش، تأثیر کرنش بر ساختار نواری و مشخصه جریان-ولتاژ بوروفین udh بررسی شده است. در ساختار بوروفین udh، اتم‌های هیدروژن در دو موقعیت جذبی غیرهم‌ارز قرار می‌گیرند: یک اتم هیدروژن بر روی اتم بور مرکزی حلقه شش‌گوشی و اتم هیدروژن دیگر بر روی موقعیت پل B-B، بین دو اتم بور در امتداد بردار شبکه a سلول واحد، جذب شده‌اند. در شکل ۱۲، ساختار نواری بوروفین udh نشان داده شده است. در این ساختار، یک نقطه دیراک در انرژی ۱ eV و در مسیر $\Gamma-Y$ مشاهده می‌شود که با افزایش کرنش در راستای x و y، به تراز انرژی فرمی نزدیک می‌شود. سرعت فرمی متوسط و کج‌شدگی مخروط دیراک برای بوروفین udh در جدول ۳ گزارش شده‌اند. در حالت بدون کرنش، کج‌شدگی مخروط دیراک $v_t = 1/10 \times 10^6 \frac{m}{s}$ و سرعت فرمی متوسط $1/53 \times 10^6 \frac{m}{s}$ محاسبه شده است. با افزایش کرنش در راستای x (y) از ۸٪- به ۸٪+، کج‌شدگی مخروط دیراک و سرعت فرمی متوسط افزایش (کاهش) یافته‌اند.

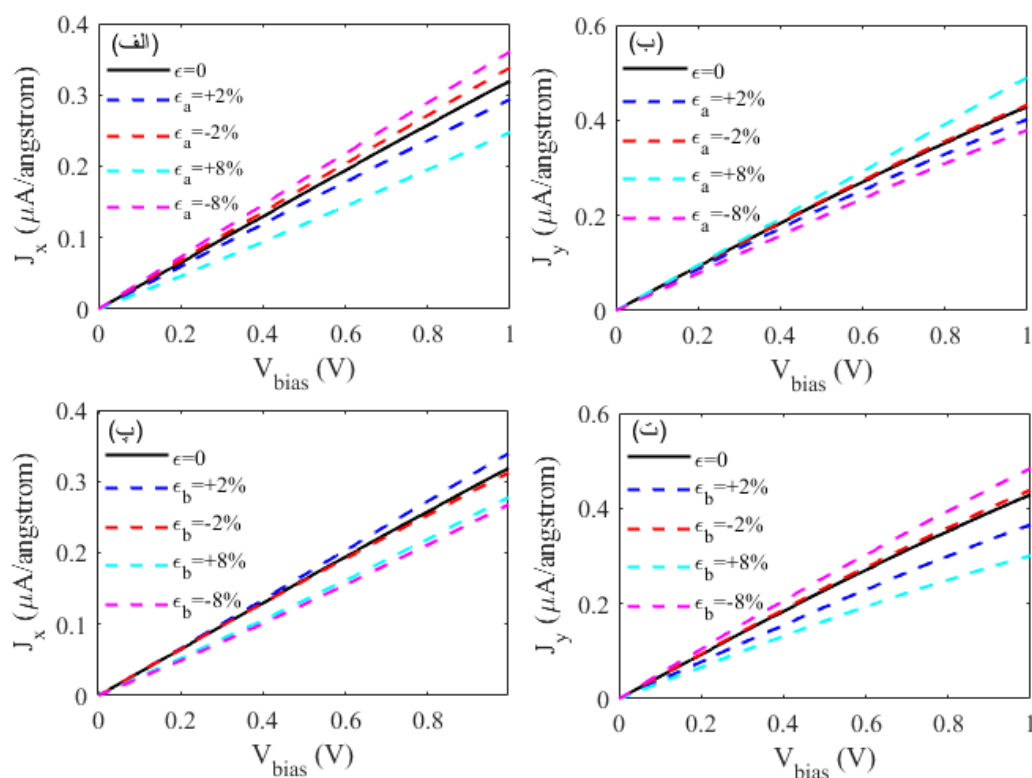
دیراک $(v_t = 0.22 \times 10^6 \frac{m}{s})$ مربوط به نخستین نقطه دیراک است که در مسیر $\Gamma-Y$ واقع شده است. سرعت فرمی متوسط در این مسیر، $1/96 \times 10^6 \frac{m}{s}$ است.

شکاف انرژی که در حالت بدون کرنش در مسیر $\Gamma-X$ وجود دارد، با اعمال کرنش ۸٪ در راستای x (و ۸٪- در راستای y) افزایش یافته، اما در کرنش ۸٪- در راستای x (و ۸٪ در راستای y) از بین می‌رود. این تغییرات در نوارهای انرژی موجب روند کاهشی (افزایشی) در چگالی جریان J_x و روند افزایشی (کاهشی) در چگالی جریان J_y می‌گردد (شکل ۹). تأثیر کرنش بر ساختار نواری بوروفین ud تقریباً مشابه بوروفین uu است. در هر دو پیکربندی، یک نقطه دیراک در مسیر $\Gamma-Y$ مشاهده می‌شود که با اعمال کرنش، جابه‌جا می‌شود. در حالت بدون کرنش، بوروفین ud دارای یک نقطه دیراک در انرژی ۰.۳۱ eV است که کمترین کج‌شدگی مخروط دیراک را به اندازه $v_t = 3 \times 10^3 \frac{m}{s}$ نشان می‌دهد. سرعت فرمی متوسط در این حالت برابر با $2/77 \times 10^6 \frac{m}{s}$ است که از سرعت فرمی متوسط برای بوروفین uu در مسیر $\Gamma-Y$ بیشتر است.

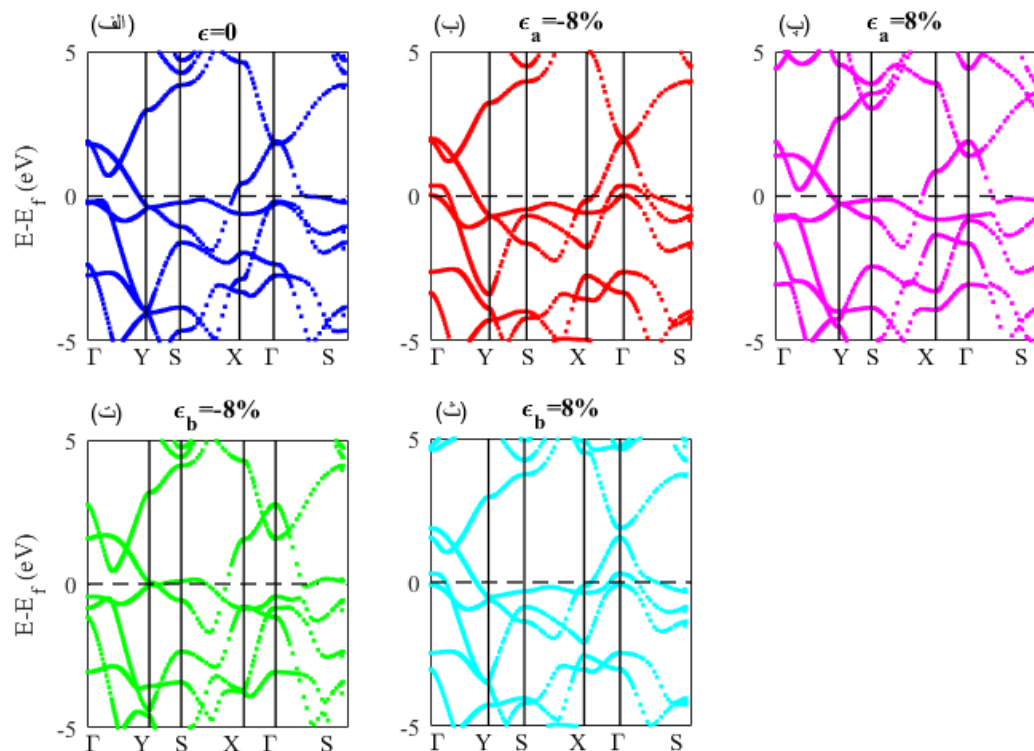
با افزایش کرنش در راستای x، میزان ناهمسانگردی چگالی جریان $(\eta = \frac{J_x}{J_y})$ برای بوروفین ud از مقدار ۱/۳۲ در کرنش ۸٪- به مقدار ۰/۴۸ در کرنش ۸٪+ افزایش می‌یابد. در مقابل، با افزایش کرنش در راستای y، این میزان ناهمسانگردی چگالی جریان از مقدار ۰/۴۴ در کرنش ۸٪- به مقدار ۱/۱۵ در کرنش ۸٪+ می‌رسد (هر چقدر این نسبت از عدد یک بیشتر فاصله داشته باشد، ناهمسانگردی بیشتر است). برای بوروفین نوع ud، مقدار ناهمسانگردی جریان در ولتاژ ۱ V مقدار ۰/۹۹ و نسبت پواسون در راستاهای آرمچر و زیگزگ به ترتیب ۰/۲۵ و ۰/۲۴ به‌دست آمده است که بیانگر همسانگردی نسبی رسانشی و مکانیکی این ساختار است. در مقایسه با بوروفن خالص، پیکربندی‌های هیدروژنه مورد مطالعه نرم‌تر هستند. این رفتار به جابه‌جایی جزئی اتم‌های بور در راستای z پس از جذب اتم هیدروژن نسبت داده می‌شود (شکل ۲). این جابه‌جایی‌ها، سبب زاویه‌دار شدن پیوندها می‌شوند و با چروکیده شدن ساختار



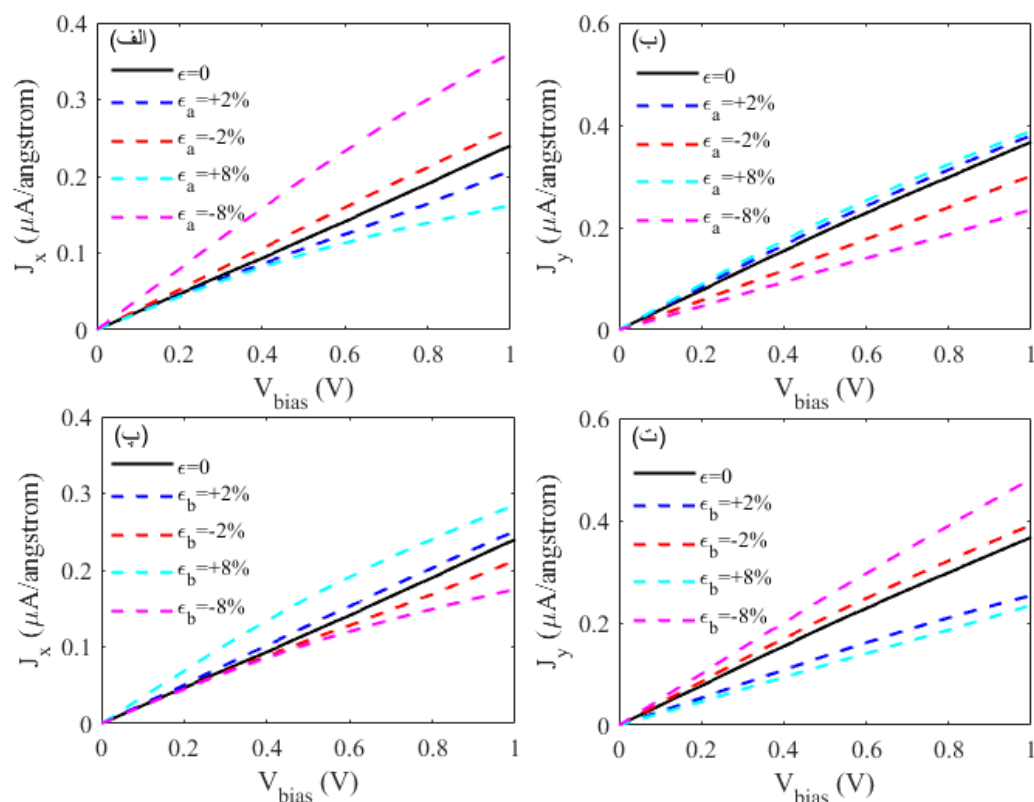
شکل ۶: ساختار نواری بوروفن β_{P} خالص تحت تأثیر کرنش‌های تک‌محوری در جهت x و y. انرژی فرمی به صفر منتقل شده است.



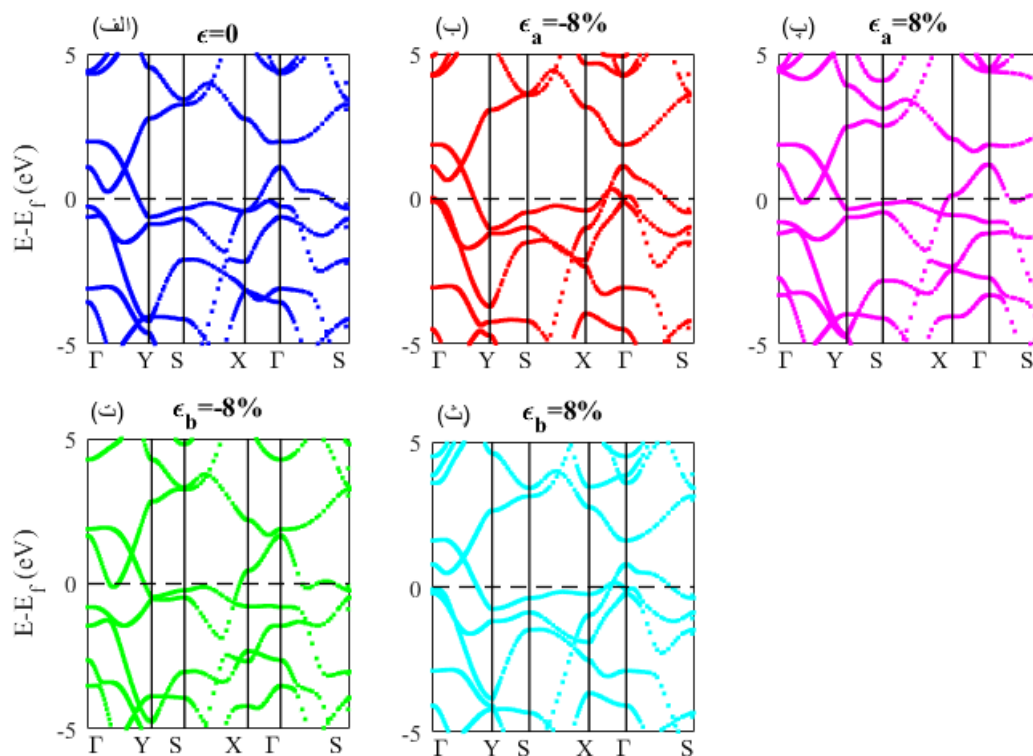
شکل ۷: نمودار جریان-ولتاژ در راستای x و y برای بوروفن β_{P} خالص تحت تأثیر کرنش‌های تک‌محوری در جهت x و y.



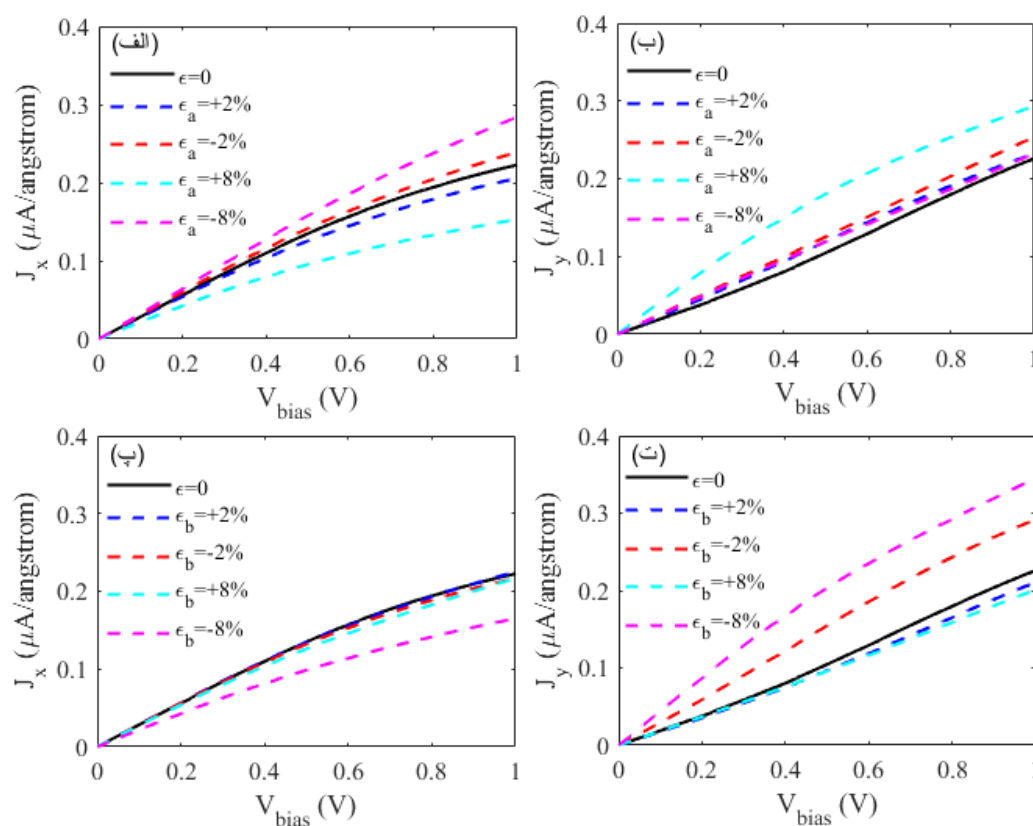
شکل ۸: ساختار نواری بوروفن uu تحت تأثیر کرنش‌های تک‌محوری در جهت x و y . انرژی فرمی به صفر منتقل شده است.



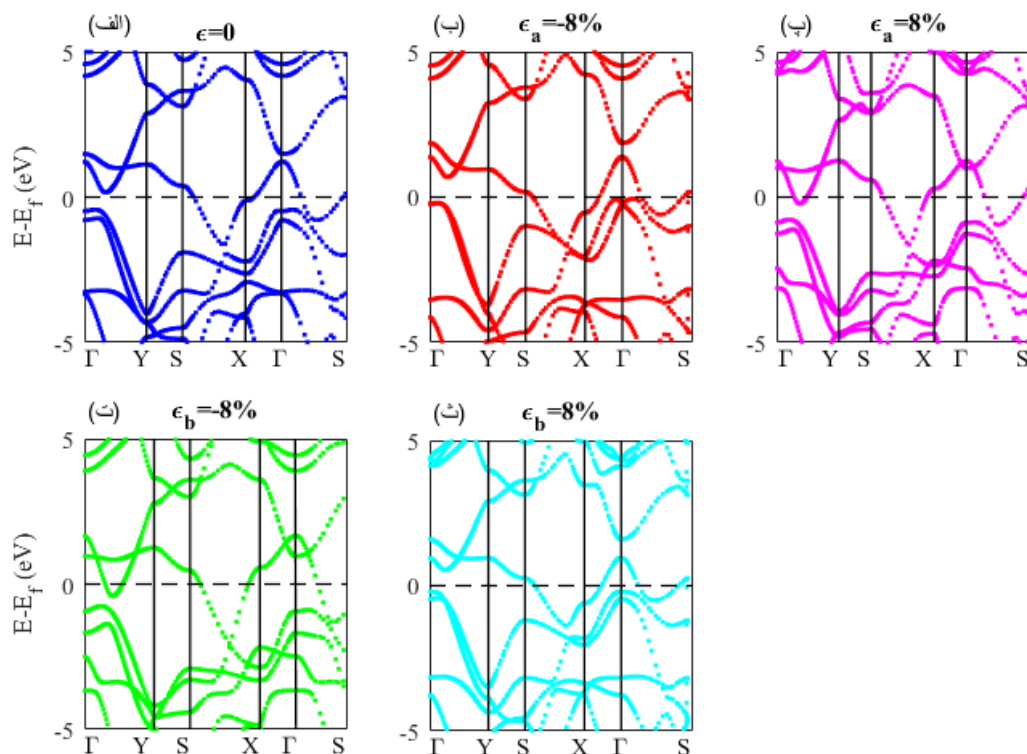
شکل ۹: نمودار جریان-ولتاژ در راستای x و y برای بوروفن uu تحت تأثیر کرنش‌های تک‌محوری در جهت x و y .



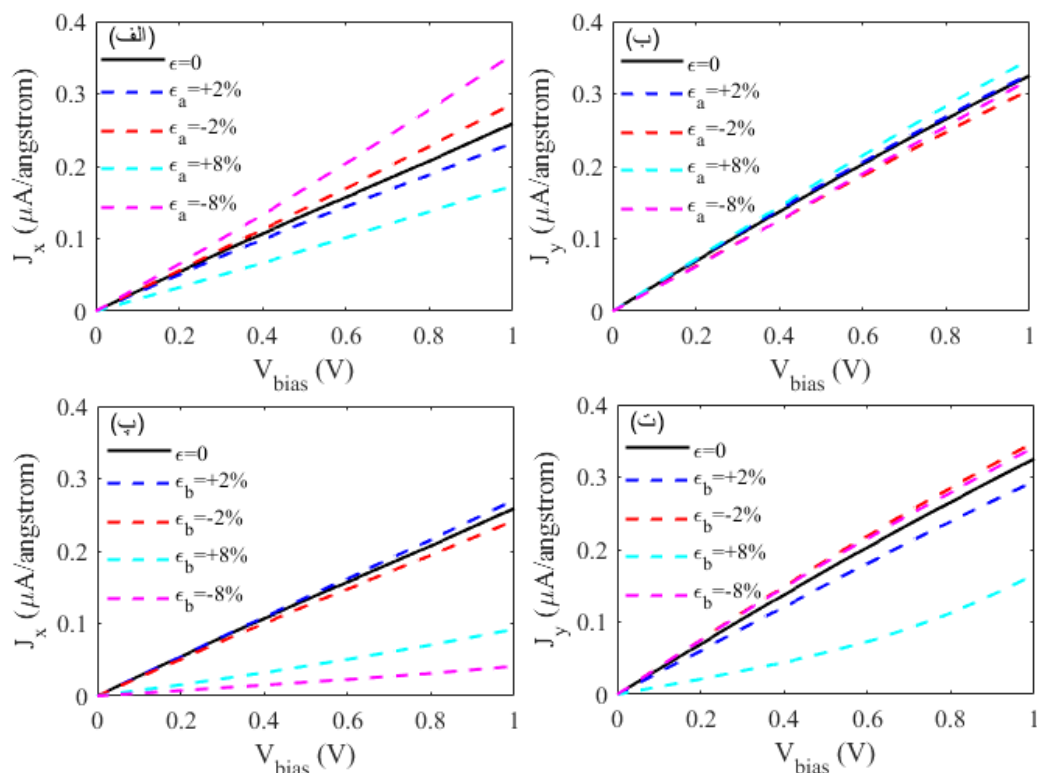
شکل ۱۰: ساختار نواری بوروفین ud تحت تأثیر کرنش‌های تک‌محوری در جهت x و y. انرژی فرمی به صفر منتقل شده است. در وضعیت بدون کرنش، مخروط دیراک مربوط به نقطه دیراک در انرژی ۰.۳ eV، کمترین کج‌شدگی در بین بوروفین‌های مورد مطالعه را دارد.



شکل ۱۱: نمودار جریان-ولتاژ در راستای x و y برای بوروفین ud تحت تأثیر کرنش‌های تک‌محوری در جهت x و y



شکل ۱۲: ساختار نواری بوروفین udh تحت تأثیر کرنش‌های تک‌محوری در جهت x و y. انرژی فرمی به صفر منتقل شده است.



شکل ۱۳: نمودار جریان-ولتاژ در راستای x و y برای بوروفین udh تحت تأثیر کرنش‌های تک‌محوری در جهت x و y.

هیدروژنه، توسط محاسبات ابتدا به ساکن - ۰۶/۴۰۱/۱۴۰/اس» می‌باشد که با حمایت مالی دانشگاه آزاد اسلامی واحد اسلامشهر به اجرا درآمده است، بدین‌وسیله از آن واحد دانشگاهی، تقدیر و تشکر به عمل می‌آید.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، با بهره‌گیری از نظریه تابعی چگالی، اثر کرنش‌های تک‌محوری بر ساختار نواری و ویژگی‌های ترابرد الکترونی سه پیکربندی متفاوت از بوروفین (udh و ud، uu) بررسی شد. هدف اصلی این مطالعه، شناخت دقیق رفتار رسانش الکترونی این ساختارها در مواجهه با تنش‌های مکانیکی و ارزیابی قابلیت آن‌ها برای تنظیم خواص رسانی برای کاربردهای نوین فناورانه بود.

نتایج به‌دست‌آمده نشان داد که پس از هیدروژنه‌سازی بوروفین β_p ، پیوندهای میان اتم‌های هیدروژن و بور موجب درگیری اوربیتال‌های p_z و σ شده و در نتیجه، جابه‌جایی نقاط دیراک، تغییر در شکاف‌های نواری و بازتوزیع نوارهای انرژی در مسیرهای مختلف رخ داده است. این بازآرایی نوارهای انرژی و رفتار ناهمسانگردی، ترابرد الکترونی و مشخصه‌های جریان-ولتاژ را نیز دستخوش تغییر کرده است؛ به‌طوری‌که مقدار ناهمسانگردی چگالی جریان در ولتاژ سویدگی ۱۷ برای بوروفین β_p خالص از مقدار ۰/۷۴ به مقادیر ۰/۶۵، ۰/۹۹ و ۰/۸۰ به ترتیب برای بوروفین‌های نوع uu، ud و udh تغییر می‌کند. بیشترین ناهمسانگردی چگالی جریان برای بوروفین نوع uu و بیشترین همسانگردی چگالی جریان برای بوروفین نوع ud به‌دست آمد. هم‌چنین، نتایج نشان داد مخروط‌های دیراک در ساختارهای مورد مطالعه داری کج شدگی هستند و کمترین کج شدگی همراه با بیشترین سرعت فرمی متوسط مربوط به بوروفین نوع ud است که از نظر پاسخ مکانیکی نیز ساختاری تقریباً همسانگرد دارد.

اعمال کرنش تک‌محوری در راستاهای x و y نیز موجب تغییرات قابل‌ملاحظه‌ای از جمله جابه‌جایی نوارهای انرژی، تغییر موقعیت نقاط دیراک و ظهور یا حذف شکاف‌های نواری در ساختار نواری شد. در ساختار بوروفین udh، کرنش‌های

جدول ۳: تغییرات سرعت فرمی و کج شدگی مخروط دیراک برای بوروفین udh با افزایش کرنش در راستای x (y) از ۸٪- به ۸٪.

ε_g	۸٪-	۰	۸٪
$\bar{v}_f(\frac{m}{s})$	$1/35 \times 10^6$	$1/53 \times 10^6$	$1/84 \times 10^6$
$v_f(\frac{m}{s})$	$0/97 \times 10^6$	$1/10 \times 10^6$	$1/32 \times 10^6$
ε_b	۸٪-	۰	۸٪
$\bar{v}_f(\frac{m}{s})$	$1/98 \times 10^6$	$1/53 \times 10^6$	$1/31 \times 10^6$
$v_f(\frac{m}{s})$	$1/44 \times 10^6$	$1/10 \times 10^6$	$0/94 \times 10^6$

شکاف انرژی در مسیر $Y-S$ با افزایش کرنش در راستای y کاهش یافته است، اما برای کرنش ۸٪-، شکاف انرژی دیگری در مسیر $\Gamma-X$ ظاهر می‌شود که این موضوع کاهش قابل ملاحظه جریان J_x را در این کرنش در نمودار I-V (شکل ۱۳) توضیح می‌دهد. برای کرنش ۸٪+ در مسیر $\Gamma-X$ نیز با وجود افزایش نوارهای انرژی، به دلیل ایجاد شکاف انرژی در نقطه Γ ، دسترسی حامل‌های بار به ترازهای انرژی بالاتر قطع شده و کاهش جریان J_x مشاهده می‌شود. هم‌چنین برای کرنش ۸٪+ در راستای y، شکاف انرژی ایجاد شده در مسیر $\Gamma-Y$ و شکاف در حال شکل‌گیری در مسیر $S-X$ منجر به کاهش قابل‌توجه جریان J_y در مشخصه I-V شده‌اند. با افزایش کرنش در راستای x، میزان ناهمسانگردی چگالی جریان $(\eta = \frac{J_x}{J_y})$ برای بوروفین udh از مقدار ۱/۱۱ در کرنش ۸٪- به مقدار ۰/۵۰ در کرنش ۸٪+ افزایش می‌یابد (هر چقدر این نسبت از عدد یک فاصله بیشتری داشته باشد ناهمسانگردی بیشتر است). برای کرنش ۸٪- در راستای y، این میزان ناهمسانگردی چگالی جریان ۰/۱۲ و برای کرنش ۸٪+ برابر ۰/۵۶ است که نسبت به وضعیت بدون کرنش (با میزان ناهمسانگردی ۰/۸۰) نشان‌دهنده تغییر در میزان ناهمسانگردی جریان است.

سپاسگزاری

تحقیق فوق برگرفته از طرح پژوهشی «بررسی ویژگی‌های الکترونی، مکانیکی، اپتیکی و ترابرد الکترونی بوروفین β_p

کوچک توانستند تغییرات موضعی در ساختار نواری ایجاد کرده و با شکل‌گیری شکاف‌های انرژی در مسیرهای خاص، جریان الکترونی را محدود کنند. به‌ویژه در کرنش‌های $\pm 8\%$ چگالی جریان دستخوش تغییرات قابل‌توجهی شد که نشان‌دهنده حساسیت بالای این ساختار به تنش‌های مکانیکی است. به‌طور خلاصه، نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که با انتخاب دقیق نوع پیکربندی بوروفن β_{12} هیدروژنه و اعمال کرنش‌های هدفمند،

مراجع

می‌توان میزان ناهمسانگردی و ویژگی‌های رسانشی بوروفین را به‌صورت کنترل‌شده تنظیم کرد. چنین قابلیت، بوروفین را به ماده‌ای مناسب برای طراحی در حوزه‌های نانو الکترونیک و سایر کاربردهای فناورانه تبدیل می‌کند. همچنین، امکان مهندسی و کنترل رفتار الکترونی از طریق عامل‌داری و اعمال کرنش، افق‌های تازه‌ای برای توسعه مواد هوشمند و قابل تنظیم در نسل آینده فناوری‌های نانو فراهم می‌سازد.

1. B Feng, J Zhang, R-Y Liu, et al., Phys. Rev. B 94 (2016) 041408.
2. B Feng, O Sugino, R-Y Liu, et al., Phys. Rev. Lett. 118 (2017) 096401.
3. B Feng, J Zhang, S Ito, et al., Adv Mater 30 (2018) 201704025.
4. OG Yildiz, AC Can, NS Peighambaroudost, U Aydemir, Small Struct 6 (2025) 202500186.
5. B Feng, J Zhang, Q Zhong, et al., Nat Chem 8 (2016) 563–568.
6. AJ Mannix, X-F Zhou, B Kiraly, et al., Science (2015) 1513–1516.
7. A Verma, DR Sahoo, Earthq Eng Struct Dyn 46 (2017) 1081–1098.
8. N Karmodak, ED Jemmis, BI Yakobson, Springer International Publishing, Cham (2021) 27–49.
9. X Liu, Z Zhang, L Wang, et al., Nat Mater 17 (2018) 783–788.
10. S Zarkar, S Gupta, B Kandasubramanian, J Nanoparticle Res 26 (2024) 207.
11. M Pashangpour, S Fotoohi, J Res Many-body Syst 11(2021) 1–10.
12. M Pashangpour, Iran J Phys Res 20 (2020).
13. V Ghaffari, M Ilkhani, M Pashangpour, Z Bagheri, (2021) Comput Mater Sci 200:110778.
14. Q Li, VSC Kolluru, MS Rahn, et al., Science 371 (2021) 1143–1148.
15. V Shukla, A Grigoriev, NK Jena, R Ahuja, Phys Chem Chem Phys 20 (2018) 22952–22960.
16. JE Padilha, RH Miwa, A Fazzio, Phys Chem Chem Phys 18 (2016) 25491–25496.
17. Yu M, Zhang Z, Guo W, (2021) J Phys Chem C 125:22917–22928.
18. Y Kang, X Ma, J Fu, et al., J Phys Chem Lett 13 (2022) 10222–10229.
19. Y-J Chen, H-Y Lu, F-L Shao, P Zhang, Phys Rev Mater 7 (2023) 034004.
20. P Giannozzi, S Baroni, N Bonini, et al., J Phys Condens Matter 21(2009) 395502.
21. JP Perdew, K Burke, M Ernzerhof, Phys Rev Lett 77 (1996) 3865–3868.
22. HJ Monkhorst, JD Pack, Phys Rev B 13 (1976) 5188–5192.
23. Z Xie, X Meng, X Li, et al., Research 2020 (2020).
24. T Farajollahpour, Z Faraei, SA Jafari, Phys Rev B 99 (2019) 235150.
25. SA Jafari, Iran J Phys Res 19 (2020).
26. A Calzolari, N Marzari, I Souza, M Buongiorno Nardelli, Phys Rev B 69 (2004) 35108.
27. R Landauer, M Büttiker, Phys Scr T9 (1985) 155–164.
28. DS Fisher, PA Lee, Phys Rev B 23 (1981) 6851–6854.
29. R Landauer, IBM J Res Dev 1 (1957) 223–231.
30. X Yang, Y Ding, J Ni, Phys Rev B 77 (2008) 41402.
31. B Mortazavi, O Rahaman, A Dianat, T Rabczuk, Phys Chem Chem Phys 18 (2016) 27405–27413.
32. L Shao, Y Li, Q Yuan, et al., Mater Res Express 4 (2017) 45020.
33. R Mondal, N Bedamani Singh, J Deb, et al., J Mol Graph Model 112 (2022) 108117.