

## بررسی خواص مکانیکی و ترابرد الکترونی اکسید بوروفین گرافین گونه تحت کرنش‌های کوچک

منصوره پشنگ پور

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

پست الکترونیکی: poor@iaau.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۸/۱۱/۲۲؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۹/۰۲/۱۷)

### چکیده

به تازگی فاز گرافین گونه از اتم‌های بور روی زیر لایه (۱۱۱) Al سنتز شده است، این ماده دو بعدی که بدون زیر لایه ناپایدار است پس از ترکیب با اکسیژن به ساختار پایداری تبدیل می‌شود. در پژوهش حاضر، خواص مکانیکی و انتقال الکترونی اکسید بوروفین گرافین گونه ( $g-B_2O$ ) در چارچوب نظریه تابعی چگالی و تابع گرین غیر تعادلی مطالعه شده است. برای این منظور چگالی حالات کلی و جزئی، ساختار نوارهای انرژی، چگالی بار، ثابت‌های کشسانی، مدول یانگ، نسبت پواسون، رسانش کوانتومی و نمودارهای جریان-ولتاژ در کرنش‌های کوچک تک محوری و دو محوری محاسبه شده‌اند. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که  $g-B_2O$  فلز است و نقاط دیراکی با رابطه پاشندگی در مکان‌هایی بالاتر و پایین‌تر از تراز فرمی دارد. علاوه بر این نمودارهای جریان-ولتاژ، رفتار اهمی این ماده را نشان می‌دهد. نمودارهای جریان-ولتاژ نشان می‌دهد که کرنش مثبت باعث می‌شود چگالی جریان در جهت آرمچیر ( $I_x$ ) کاهش و در جهت زیگززاگ ( $I_y$ ) نسبت به حالت بدون کرنش افزایش یابد. کرنش‌های مثبت دو محوری و تک محوری در جهت آرمچیر تقریباً با رفتاری مشابه، بیشترین تغییرات را در  $I_x$  و  $I_y$  ایجاد کرده‌اند. کرنش منفی نیز در جهت زیگززاگ بیشترین افزایش  $I_y$  را سبب شده است. کرنش منفی تک محوری در جهت آرمچیر و دو محوری تقریباً با رفتاری مشابه، بیشترین (کمترین) تغییرات در  $I_x$  ( $I_y$ ) را ایجاد کرده است. چگالی جریان ناهمسانگرد در راستاهای زیگززاگ و آرمچیر و همچنین قابلیت کنترل این ناهمسانگردی توسط کرنش‌های مثبت و منفی، استفاده از این ماده دو بعدی را در ادوات نانوالکترونیکی مناسب می‌سازد.

واژه‌های کلیدی: اکسید بوروفین گرافین گونه، نظریه تابعی چگالی، چگالی حالات، مدول یانگ، انتقال الکترونی

### ۱. مقدمه

جمله ترابرد الکترونی بالا و سختی مکانیکی، مورد توجه بسیاری از محققین و پژوهشگران قرار گرفت. پس از این کشف بزرگ، پژوهش‌های نظری و تجربی گسترده‌ای برای دستیابی به مواد دو بعدی جدید آغاز شد و با این تلاش‌ها اعضای دیگری از مجموعه مواد دو بعدی نظیر سیلیسین [۲]، ژرمانین

با ساخت موفقیت‌آمیز گرافین در سال ۲۰۰۴ [۱] دریچه‌ای به دنیای مواد دو بعدی باز شد. گرافین که یک شبه فلز با رابطه پاشندگی خطی در نزدیک تراز فرمی و فرمیون‌های دیراک بدون جرم است به دلیل ویژگی‌های منحصر به فرد خود از

تک محوری و دو محوری بر انتقال الکترونی این ماده و میزان ناهمسانگردی در چگالی‌های جریان بررسی می‌شود. بخش‌های بعدی به مراحل محاسبات ساختار الکترونی و سپس به نتایج آن و خواص مکانیکی اختصاص دارد. پس از آن مراحل محاسبات انتقال الکترونی و نتایج آن ارائه خواهد شد. با توجه به نتایج به دست آمده در ناهمسانگردی چگالی جریان این ماده و تغییرات آن با اعمال کرنش، این ماده قابلیت استفاده در ادوات نانوالکترونیکی را خواهد داشت.

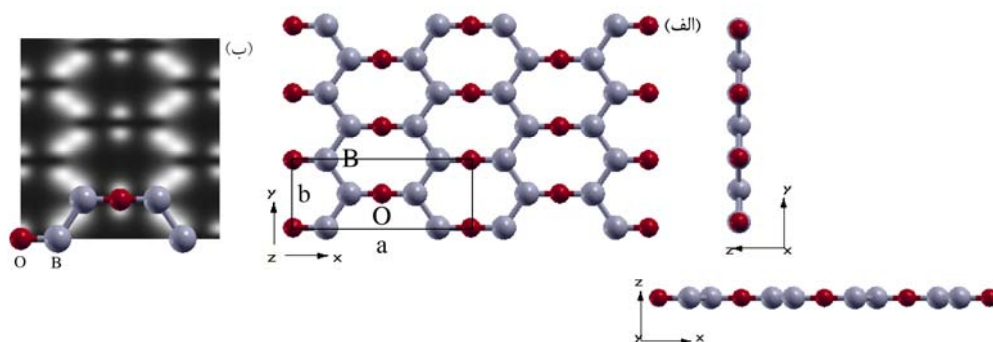
## ۲. مراحل محاسبات ساختار الکترونی

در این بخش به بررسی ویژگی‌های مکانیکی و الکترونی ساختار  $g\text{-B}_2\text{O}$  می‌پردازیم. بررسی خواص مکانیکی و ساختار الکترونی بر اساس نظریه تابعی چگالی با اعمال تقریب شیب تعمیم‌یافته توسط کد PWscf از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو [۲۵] و محاسبات مربوط به رسانش کوانتومی توسط بسته محاسباتی WanT [۲۶] انجام شده‌است. گروه تقارنی  $g\text{-B}_2\text{O}$ ،  $C_{mmm}$  است. سلول واحد، ارتورومبیک (راست‌لوزی ساده) و شامل چهار اتم بور و دو اتم اکسیژن است (شکل ۱. الف). ثابت‌های شبکه پس از واهلش کامل سلول و مکان اتم‌ها،  $a = 7.211 \text{ \AA}$ ،  $b = 2.111 \text{ \AA}$  و  $c = 2.0 \text{ \AA}$  به دست آمده‌اند که با نتایج پژوهش قبلی مطابقت دارد [۲۷]. خلاصه بین صفحات بوروفین در جهت محور Z به منظور حذف برهم‌کنش لایه‌های موازی بوروفین،  $2.0 \text{ \AA}$  در نظر گرفته شده‌است.

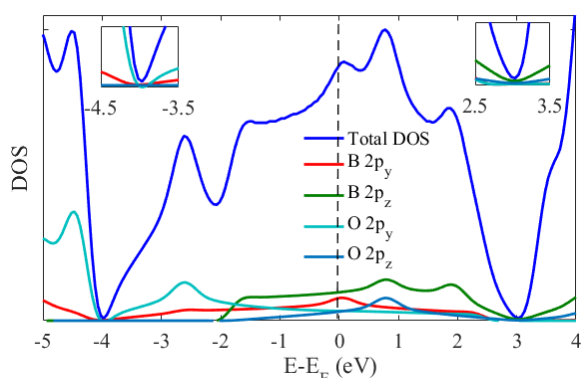
انرژی قطع  $5.0 \text{ Ry}$  و تقسیم‌بندی فضای وارونه  $24 \times 20 \times 1$  انتخاب شده است [۲۸]. واهلش کامل شبکه و مکان اتم‌ها تا نیروی  $10^{-3} \frac{eV}{\text{Å}}$  انجام شده است. زاویه بین پیوندها  $\angle OBB = 124/42^\circ$  و  $\angle BBB = 111/17^\circ$  به دست آمده‌اند که از زاویه  $120^\circ$  در بوروفین گرافین‌گونه کمی انحراف نشان می‌دهد. طول پیوند B-O،  $1.34 \text{ \AA}$ ، کوتاه‌تر از طول پیوند B-B،  $1.704 \text{ \AA}$ ، است بنابراین ساختار  $g\text{-B}_2\text{O}$  در جهت a (جهتی که پیوند B-O قرار دارد) سخت‌تر از جهت b (جهتی که پیوند B-B قرار دارد) است. علاوه بر ناهمسانگردی در شکل

[۳]، فسفرین [۴]، h-BN [۵]،  $\text{MoS}_2$  [۶] و ... معرفی شدند. به تازگی ساختار دو بعدی تازه‌ای از اتم بور، بوروفین، در دو آزمایشگاه مستقل و در شرایط خلأ کامل روی زیر لایه (۱۱۱) Ag رشد داده شده‌است [۷ و ۸]. تاکنون فازهای دو بعدی مختلفی از بوروفین در شکل‌های مثلثی چروکیده و همچنین با حفره‌های شش‌گوشی سنتز شده‌اند [۸-۱۳]. بوروفین نیز مشابه مواد دو بعدی دیگر خواص اپتیکی، الکترونیکی، مکانیکی، ابرسانایی و رسانش گرمایی جالبی از خود نشان می‌دهد که از آن جمله می‌توان به ناهمسانگردی بالا در خواص مکانیکی [۱۴-۱۷]، ناهمسانگردی در رسانش گرمایی [۱۸] و [۱۹] و همچنین دمای ابرسانایی پایین [۲۰ و ۲۱] اشاره کرد. بررسی ناهمسانگردی مکانیکی بوروفین و پاسخ آن به کرنش اعمالی نشان می‌دهد که این ساختار در یک راستا سخت و در راستای دیگر شکننده است [۱۵ و ۱۶]. استحکام مکانیکی بوروفین و خواص جالب دیگر آن، قابلیت استفاده این ماده را در ادوات نانوالکترونیک ایجاد کرده است.

اخیراً در سال ۲۰۱۸ ونبین و همکارانش، فاز دیگری از بوروفین به شکل یک ساختار بلوری لانه زنبوری همانند گرافین (بوروفین گرافین‌گونه) را روی زیر لایه (۱۱۱) Al سنتز کردند [۲۲]. این فاز از بوروفین، به دلیل الکترون‌پذیری بالای بور در مقایسه با کربن بدون زیر لایه ناپایدار است، اما بوروفین گرافین‌گونه مانند دیگر ساختارهای دو بعدی تمایل به ترکیب با اکسیژن دارد و پژوهش‌های اخیر چنگ یانگ و همکارانش در سال ۲۰۱۹ نشان می‌دهد که اکسید بوروفین گرافین‌گونه ( $g\text{-B}_2\text{O}$ )، بدون زیر لایه پایدار است و ناهمسانگردی مکانیکی بالایی دارد [۲۳]. میزان ناهمسانگردی مکانیکی و خواص الکترونیکی مواد می‌تواند با اعمال کرنش خارجی تغییر کند. نتایج پژوهش فیض‌آبادی و همکارش نشان می‌دهد که توسط کرنش محوری کششی (فشاری)، جریان انتقالی از نانولوله‌های کربنی افزایش (کاهش) می‌یابد [۲۴]. لذا در این پژوهش با استفاده از نظریه تابعی چگالی با تقریب گرادیان تعمیم یافته و تابع گرین غیر تعادلی، خواص مکانیکی و انتقال الکترونی  $g\text{-B}_2\text{O}$  مورد مطالعه قرار می‌گیرد و تأثیر کرنش‌های کوچک



شکل ۱. (الف) نمای بالا و نمای جانبی g-B<sub>2</sub>O و سلول واحد آن و (ب) تصویر شبیه‌سازی STM از g-B<sub>2</sub>O.



شکل ۲. مقایسه نمودار چگالی حالات کل و چگالی جزئی p<sub>y</sub> و p<sub>z</sub> اتم‌های O و B. انرژی فرمی به صفر انتقال داده شده است.

که مخروط دیراک بالای (پایین) تراز فرمی توسط اوربیتال‌های p<sub>z</sub> (p<sub>y</sub>) ایجاد شده است (شکل ۳). در تشکیل مخروط دیراک بالای تراز فرمی، سهم عمده مربوط به اوربیتال p<sub>z</sub> اتم B و پس از آن اوربیتال p<sub>z</sub> اتم O است در حالی که در تشکیل مخروط دیراک پایین تراز فرمی، سهم عمده مربوط به اوربیتال p<sub>y</sub> اتم O و پس از آن اوربیتال p<sub>y</sub> اتم B است. همان‌طوری که در شکل ۲ مشاهده می‌شود تراز فرمی اوربیتال‌های p<sub>z</sub> و p<sub>y</sub> اتم‌های B و O را قطع می‌کند و سهم عمده چگالی حالات الکترونی نزدیک تراز فرمی، مربوط به اوربیتال‌های p<sub>z</sub> و p<sub>y</sub> است. درصد سهم هر یک از اوربیتال‌های اتم‌های B در چگالی حالات الکترونی در تراز فرمی در جدول ۱ آمده است.

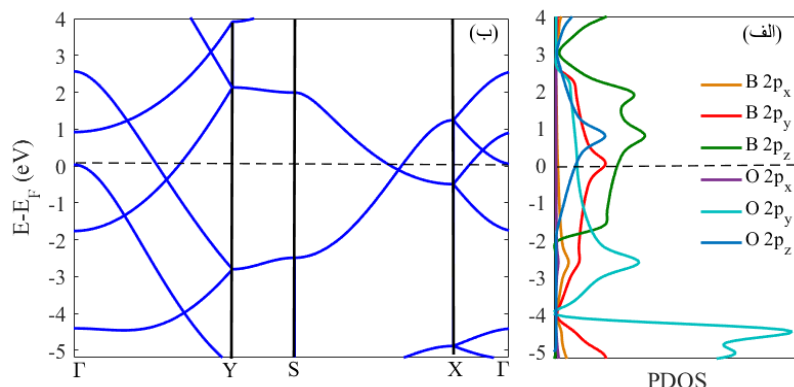
نوار انرژی g-B<sub>2</sub>O در دو طرف نقطه S و نقطه Γ مسطح شده است که باعث ایجاد قله‌های وان-هوف در نمودار PDOS در طرفین انرژی فرمی شده است. نوارهای انرژی که

ساختار g-B<sub>2</sub>O، نتایج نشان می‌دهد که در خصوصیات مکانیکی و انتقال الکترونی نیز ناهمسانگردی وجود دارد. در شکل ۱. ب نیز تصویر شبیه‌سازی STM از g-B<sub>2</sub>O نشان داده شده است.

### ۳. نتایج ساختار الکترونی اکسید بوروفین

#### گرافین‌گونه

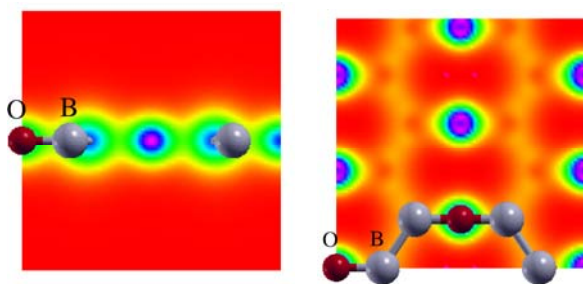
در شکل ۲ چگالی حالات کل g-B<sub>2</sub>O و چگالی حالات جزئی برای اوربیتال‌های p<sub>y</sub> و p<sub>z</sub> اتم‌های O و B مشاهده می‌شوند. شکل ۳. الف و ۳. ب نیز ساختار نوارهای انرژی و چگالی حالات جزئی g-B<sub>2</sub>O را نشان می‌دهد. در ساختار نوارهای تبهگنی دوگانه در مسیر SX و SY مشاهده می‌شود. نوارهای تبهگن در مسیر YΓ و XΓ تبهگنی خود را از دست داده باز می‌شوند و هر یک به دو نوار جدا از هم تبدیل می‌شوند. نقاط دیراکی که از تقاطع این نوارها در مسیر YΓ ایجاد می‌شود توسط تقارن‌های موجود به طور مجزا محافظت می‌شوند [۲۹]. با توجه به ساختار نوارهای انرژی، دو نقطه دیراک یکی به اندازه ۳/۲ eV بالاتر از تراز فرمی و دیگری ۳/۹ eV پایین‌تر از تراز فرمی و در مسیر تقارنی Γ-Y تشکیل شده که مخروط‌های دیراک وابسته به آنها کج‌شدگی ذاتی دارند، به عبارت دیگر محورشان نسبت به راستای z انحراف دارد. تحقیقات اخیر نشان می‌دهد در ساختار بوروفین Pmmn ۸ نیز چنین کج‌شدگی مشاهده شده و توسط میدان الکتریکی خارجی قابل تغییر است [۳۰]. نمودار PDOS متناظر با آن نشان می‌دهد



شکل ۳. (الف) چگالی جزئی g-B<sub>2</sub>O و (ب) ساختار نوارهای انرژی g-B<sub>2</sub>O. انرژی فرمی به صفر انتقال داده شده است.

جدول ۱. مقایسه درصد سهم هر یک از اوربیتال‌های اتم‌های B در چگالی حالات الکترونی در تراز فرمی.

اوربیتال	s	p <sub>x</sub>	p <sub>y</sub>	p <sub>z</sub>
B اتم‌های (%)	۲/۸	۱/۳	۳۵/۶	۴۴/۸
O اتم‌های (%)	۰/۰۲	۰/۰۲	۷/۹	۷/۲



شکل ۴. چگالی بار g-B<sub>2</sub>O در صفحه (۰۰۱) و در صفحه (۰۱۰).

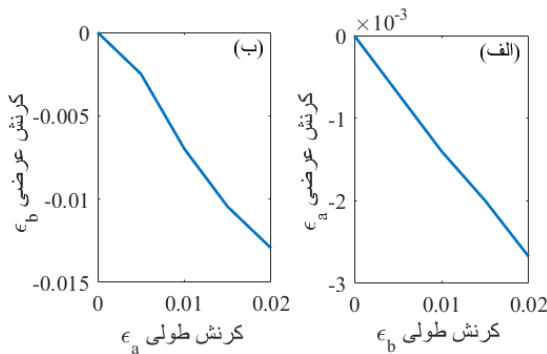
وارد بر آنها به صفر می‌رسد. برای محاسبه ثابت‌های کشسانی از دو روش انرژی کل حالت پایه و رابطه تنش- کرنش می‌توان استفاده کرد که در پژوهش حاضر، روش دوم به کار رفته است. نمودارهای تنش- کرنش به دست آمده (شکل ۵) ناهمسانگردی در دو راستای شبکه و سختی این ساختار در راستای a نسبت به راستای b را نشان می‌دهد.

شیب نمودارهای تنش- کرنش، ثابت‌های کشسانی مستقل را تعیین می‌کند (  $C_{\alpha\beta} = \frac{\partial \sigma_\alpha}{\partial \varepsilon_\beta} \Big|_{\varepsilon=0}$  ) [۳۱]. برای این منظور از روابط  $\sigma_1 = C_{11}\varepsilon_1$  و  $\sigma_2 = C_{22}\varepsilon_2$  در نمودارهای مربوط به کرنش تک محوری،  $\sigma_1 + \sigma_2 = (C_{11} + C_{22} + 2C_{12})\varepsilon$  در نمودار کرنش دو محوری و از  $\sigma = 4C_{44}\varepsilon$  در نمودار کرنش برشی برای

نزدیک انرژی فرمی همدیگر را قطع کرده‌اند مربوط اوربیتال‌های p<sub>y</sub> و p<sub>z</sub> اتم‌های B و O هستند. شکل ۴، چگالی بار در صفحات (۰۰۱) و (۰۱۰) را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود توزیع بار اطراف اتم‌های اکسیژن تقریباً متقارن و در اطراف اتم‌های بور نامتقارن است.

#### ۴. نتایج خواص مکانیکی g-B<sub>2</sub>O تحت کرنش‌های کوچک

در این بخش خواص مکانیکی g-B<sub>2</sub>O با اعمال کرنش‌های کوچک (ناحیه کشسانی) تک محوری، دو محوری و برشی بررسی شده است. کرنش،  $\varepsilon_L = \frac{L-L_0}{L_0}$ ، تغییر طول نسبت به طول اولیه تعریف می‌شود که شاخص L راستای اعمال کرنش، L<sub>۰</sub> طول اولیه و L طول پس از اعمال کرنش است. با اعمال کرنش‌های طولی تک محوری  $\varepsilon_a = \frac{a-a_0}{a_0}$  و  $\varepsilon_b = \frac{b-b_0}{b_0}$ ، تنش (σ) در راستای عرضی به ترتیب σ<sub>a</sub> و σ<sub>b</sub> ایجاد می‌شود که توسط واهلش سلول در راستای عرضی به صفر رسانده می‌شود. در مورد کرنش‌های دو محوری (ε<sub>a</sub> = ε<sub>b</sub>) و برشی نیز پس از اعمال کرنش، با واهلش مکان اتم‌های سلول، نیروی



شکل ۶. نمودار (الف) کرنش عرضی در راستای a بر حسب کرنش طولی (کرنش اعمالی) در راستای b و (ب) کرنش عرضی در راستای b بر حسب کرنش طولی (کرنش اعمالی) در راستای a.

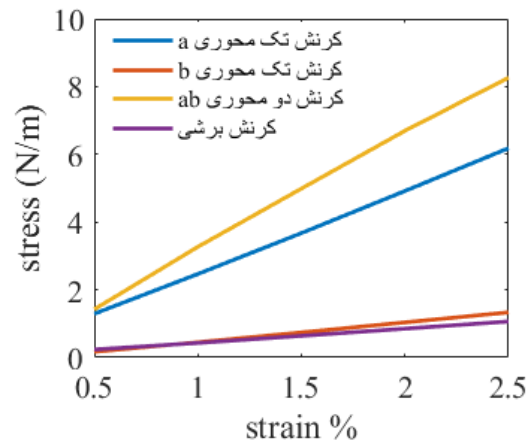
دارد. از آنجایی که از دو طریق متفاوت نسبت‌های پواسون محاسبه شده و نتایج یکسانی به دست آمده است، درستی ثابت کشسانی  $C_{11}$  به دست آمده در این پژوهش تأیید می‌شود. از طرف دیگر، همان‌طوری که در شکل ۷ مشاهده می‌شود، شیب خطوط در هر دو نمودار از یک کوچک‌تر است؛ بنابراین نسبت‌های پواسون این ماده از یک بزرگ‌تر نخواهند بود در حالی که در پژوهش زونگ و همکارانش یکی از نسبت‌های پواسون بزرگ‌تر از یک به دست آمده است ( $\nu_a = 1/41$ ).

مدول یانگ و نسبت پواسون وابسته به زاویه قطبی  $\theta$ ، راستای دلخواه نسبت به جهت a، از رابطه‌های زیر قابل محاسبه هستند:

$$Y(\theta) = \frac{\Delta}{C_{11}s^4 + C_{22}c^4 + \left(\frac{\Delta}{C_{22}} - 2C_{12}\right)c^2s^2}, \quad (1)$$

$$\nu(\theta) = \frac{\left(C_{11} + C_{22} - \frac{\Delta}{C_{22}}\right)c^2s^2 - C_{12}(s^4 + c^4)}{C_{11}s^4 + C_{22}c^4 + \left(\frac{\Delta}{C_{22}} - 2C_{12}\right)c^2s^2}, \quad (2)$$

که در آن  $\Delta = C_{11}C_{22} - C_{12}^2$ ،  $s = \sin(\theta)$  و  $c = \cos(\theta)$  هستند. نمودارهای مدول یانگ و نسبت پواسون وابسته به  $\theta$ ، با توجه به ثابت‌های کشسانی به دست آمده، در شکل ۷ نمایش داده شده است که به وضوح ناهمسانگردی مکانیکی این ماده را در جهت‌های مختلف نشان می‌دهد.



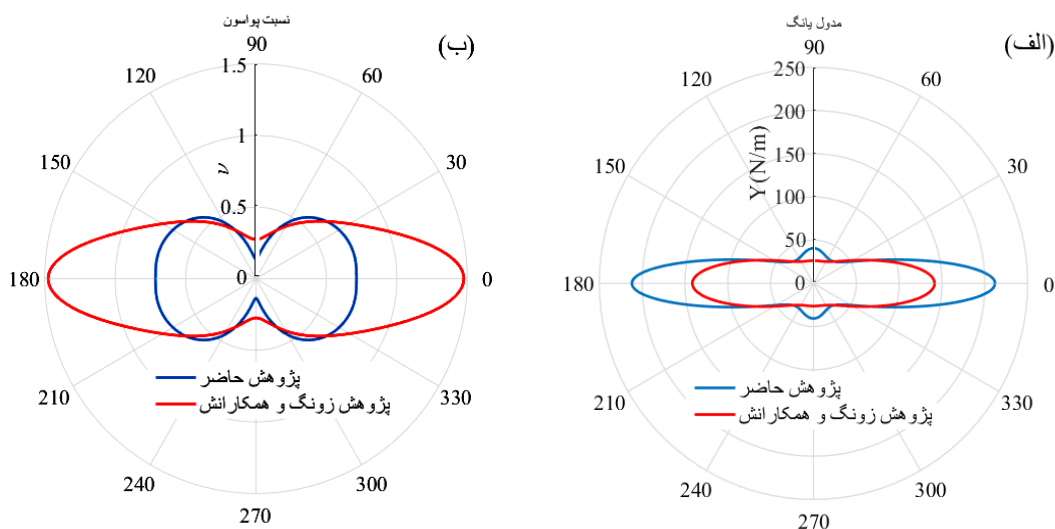
شکل ۵. نمودارهای تنش-کرنش  $g\text{-B}_2\text{O}_3$  با اعمال کرنش‌های کوچک (ناحیه کشسانی) تک محوری (a,b)، دو محوری (ab) و برشی.

محاسبه ثابت‌های کشسانی مستقل استفاده شده است. در پژوهش حاضر، چهار ثابت مستقل  $C_{11}$ ،  $C_{22}$ ،  $C_{12}$  و  $C_{44}$  به ترتیب  $234/8 \text{ N/m}$ ،  $45 \text{ N/m}$ ،  $32/1 \text{ N/m}$  و  $11/09 \text{ N/m}$  به دست آمده‌اند که به غیر از  $C_{12}$ ، نتایج به دست آمده با پژوهش زونگ و همکارانش که ثابت‌های کشسانی را از طریق نمودار انرژی-کرنش به ترتیب  $237/41 \text{ N/m}$ ،  $44/13 \text{ N/m}$  و  $65/11$  و  $11/45 \text{ N/m}$  به دست آورده‌اند، مطابقت دارد [۲۳]. اگر ثابت کشسانی  $C_{12}$  با کرنش دو محوری، بدون واهلش اتم‌ها محاسبه شود با نتایج پژوهش زونگ مطابقت خواهد داشت که البته بدون واهلش اتم‌ها نتایج صحیح نیست. نتایج در جدول ۲ آورده شده است.

مدول یانگ  $g\text{-B}_2\text{O}_3$  در دو راستای a و b با استفاده از روابط  $Y_a = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{22}}$  و  $Y_b = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{11}}$  به ترتیب  $211/9 \text{ N/m}$  و  $40/6 \text{ N/m}$  و نسبت پواسون نیز با استفاده از روابط  $\nu_a = \frac{C_{12}}{C_{11}}$  و  $\nu_b = \frac{C_{12}}{C_{22}}$  به ترتیب  $0/71$  و  $0/14$  به دست آمده است. نسبت پواسون از شیب نمودار کرنش عرضی بر حسب کرنش طولی ( $\nu_l = -\frac{\epsilon_t}{\epsilon_l}$ ) (شکل ۶) هم قابل محاسبه است. از این روش مقادیر به دست آمده برای نسبت پواسون در راستای a و b به ترتیب  $0/698$  و  $0/133$  است که با نسبت‌های حاصل از ثابت‌های کشسانی به دست آمده توافق

جدول ۲. مقایسه ثابت‌های کشسانی مستقل (بر حسب N/m)، مدول‌های یانگ (بر حسب N/m) و نسبت‌های پواسون در دو راستای a و b برای g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> محاسبه شده در پژوهش حاضر و پژوهش زونگ و همکارانش [۲۳].

روش	$C_{11}$	$C_{22}$	$C_{12}$	$C_{44}$	$Y_a$	$Y_b$	$\nu_a$	$\nu_b$
پژوهش حاضر	۲۳۴/۸	۴۵	۳۲/۱	۱۱/۰۹	۲۱۱/۹	۴۰/۶	۰/۷۱	۰/۱۴
پژوهش زونگ و همکارانش	۲۳۷/۴۱	۴۴/۱۳	۶۵/۱۱	۱۱/۴۵	۱۴۱/۳۵	۲۶/۲۷	۱/۴۸	۰/۲۷



شکل ۷. مقایسه (الف) مدول یانگ و (ب) نسبت پواسون وابسته به  $\theta$  برای g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> پژوهش حاضر و پژوهش زونگ و همکارانش [۲۳].

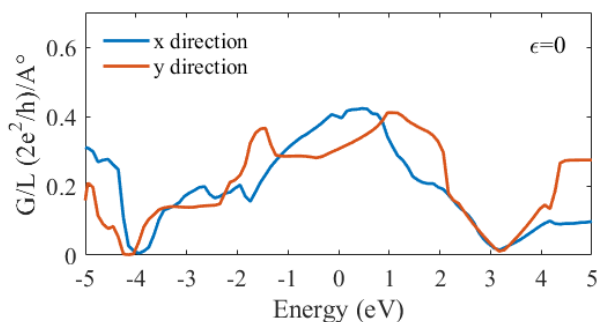
### ۵. مراحل محاسبات رسانش کوانتومی

محاسبات رسانش کوانتومی توسط بسته محاسباتی WanT انجام شده است.

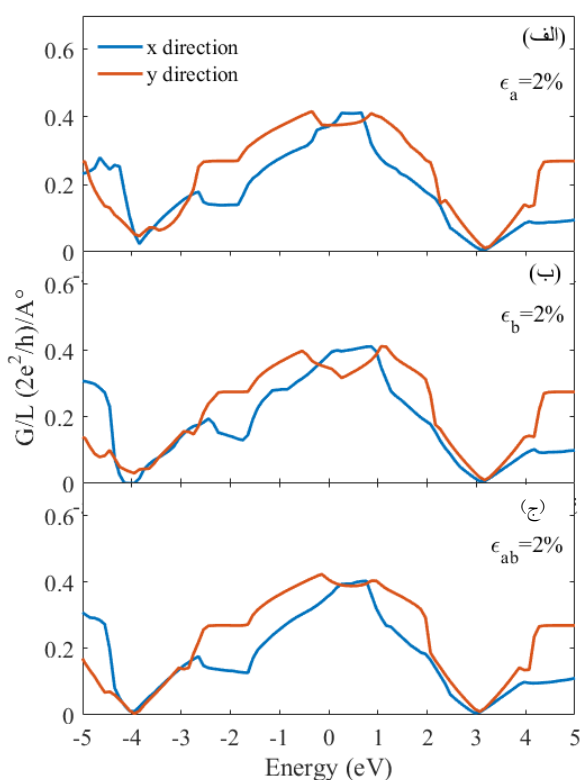
در این کد رسانش کل سیستم،  $G(E, V)$ ، با استفاده از فرمول‌بندی لانداور [۳۲] توسط رابطه  $G(E, V) = \frac{re}{h} T(E, V)$  محاسبه می‌شود که  $T(E, V)$  تابع عبور است و با استفاده از فرمول فیشر-لی  $T(E, V) = Tr(\Gamma_L G_C^r \Gamma_R G_C^a)$  به دست می‌آید. توابع گرین پیشرو و پسروی رسانا هستند که از معادله  $[\omega \pm i\eta - H] G_C^{\{r,a\}}(\omega) = I$  در حالت  $\eta \rightarrow 0^{\pm}$  به دست می‌آیند.  $\Gamma_{\{L,R\}}$  نیز جفت‌شدگی رسانا به الکترودها را بیان می‌کند که به خودانرژی‌های پیشرو و پسرو وابسته است  $(\Gamma_{\{L,R\}} = i(\Sigma_{\{L,R\}}^r - \Sigma_{\{L,R\}}^a))$

جریان عبوری از سیستم با فرمول لانداور-بوتیکر  $I(V_b) = \frac{re}{h} \int T(E, V_b) [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)] dE$  به

بوروفین گرافین‌گونه (g-B) با فونون‌های آکوستیکی عرضی و خارج از صفحه (ZA و TA) منفی، ساختاری ناپایدار است. با اکسید شدن الکترون از اتم‌های اکسیژن به اتم‌های بور منتقل می‌شود و ابعاد ساختار g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> هم نسبت به ساختار g-B در راستای a افزایش (۴۳ درصد) و در راستای b کاهش (۴ درصد) می‌یابد. محاسبات فونونی g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> در تحقیق زونگ و همکارانش نشان می‌دهد همه بسامدهای فونونی (اپتیکی و آکوستیکی) مثبت است که نشانگر پایدار شدن ساختار g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> است [۲۳]. این طور به نظر می‌رسد بسامدهای فونونی (شامل سه شاخه آکوستیکی و شش شاخه اپتیکی) افزایش پیدا کرده‌اند که سه مد فونونی توسط اتم اکسیژن به ساختار نواری فونونی اضافه شده است. شاخه فونونی مربوط به ZA که در اطراف نقطه  $\Gamma$  درجه دوم است در مسیر  $\Gamma X$  تقریباً صاف شده و بر جایگزیدگی این مد فونونی و نیمه عمر بالای آن دلالت دارد.



شکل ۸. نمودار رسانش کوانتومی در راستای x و راستای y بر حسب انرژی برای g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> بدون کرنش.



شکل ۹. نمودار رسانش کوانتومی در راستای x و راستای y بر حسب انرژی برای g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> با کرنش (الف) تک محوری ۲ درصد در جهت a، (ب) تک محوری ۲ درصد در جهت b و (ج) دو محوری ۲ درصد.

نسبت چگالی جریان جهت x به چگالی جریان جهت y  $(I_x / I_y)$ ، معیار مناسبی برای تشخیص میزان ناهمسانگردی جریان است هر چه این نسبت از یک دورتر باشد، میزان ناهمسانگردی جریان بیشتر خواهد بود. در طراحی سویچ نانوالکترومکانیکی، رفتار متفاوت نسبت  $I_x / I_y$  حالت‌های

دست می‌آید که  $\mu_L$  (پتانسیل الکتروشیمیایی الکتروود چپ (راست)،  $V_b$  ولتاژ سویدگی (بایاس) و  $f$  تابع توزیع فرمی است.

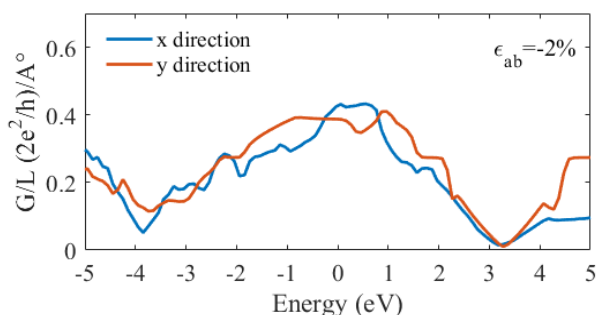
## ۶. نتایج رسانش کوانتومی g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

در این بخش با استفاده از توابع وانیر و فرمول‌بندی لانداور، رسانش کوانتومی g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> برای انتقال الکترون در راستای x و y بدون و با کرنش محاسبه شده است. با توجه به شکل ۸، کمترین مقدار رسانش کوانتومی g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> بدون اعمال کرنش، اطراف نقطه دیراک و بیشترین مقدار رسانش کوانتومی نزدیک تراز فرمی برای جهت x است. نکته قابل توجه آن که رفتار رسانش g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> در دو جهت x و y متفاوت است که نشانگر ناهمسانگردی انتقال الکترونی این ماده مانند دیگر ترکیبات بوروفن است [۳۳].

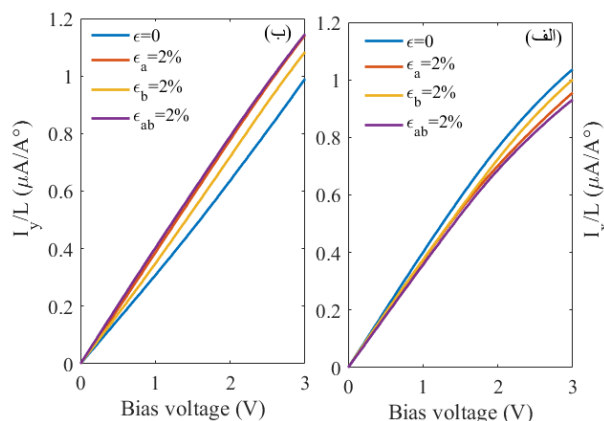
با توجه به شکل ۹، ناهمسانگردی در رسانش در دو جهت x و y با اعمال کرنش از بین نرفته است. نمودارهای جریان-ولتاژ در شکل ۱۰ نیز نتایج به دست آمده در ناهمسانگردی رسانش این ساختار را تأیید می‌کنند.

همان‌طور که در شکل ۱۱ مشاهده می‌شود نمودارهای جریان-ولتاژ رفتار اهمی این ماده را نشان می‌دهد. کرنش مثبت باعث کاهش چگالی جریان در جهت x ( $I_x$ ) و افزایش جریان در جهت y ( $I_y$ ) نسبت به حالت بدون کرنش شده است. کرنش‌های دو محوری و تک محوری a تقریباً با رفتاری مشابه، بیشترین تغییرات را در  $I_x$  و  $I_y$  ایجاد کرده‌اند که در طراحی سویچ نانوالکترومکانیکی بر پایه g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> مهم است.

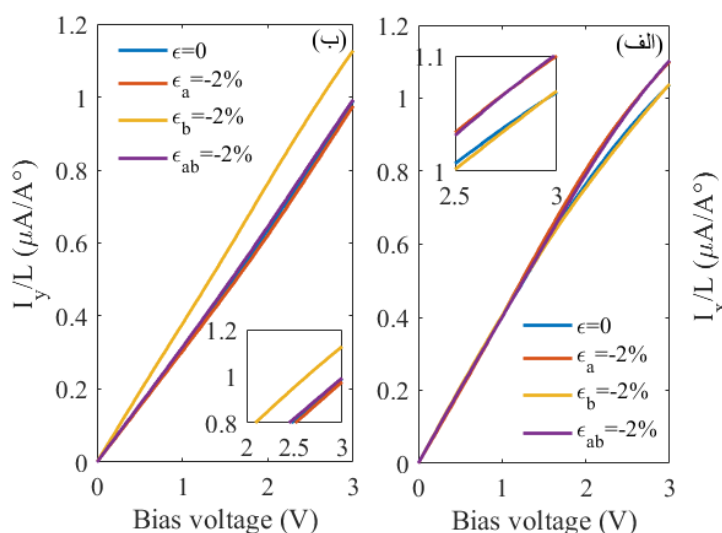
با توجه به شکل ۱۱، ناهمسانگردی در رسانش در دو جهت x و y با اعمال کرنش منفی نیز وجود دارد. همان‌طور که در شکل ۱۲ مشاهده می‌شود، کرنش منفی تغییر ناچیزی در  $I_x$  برای ولتاژهای کمتر از ۲ ولت داشته‌است در حالی که کرنش منفی در راستای b بیشترین افزایش  $I_y$  را سبب شده‌است. کرنش‌های منفی دو محوری و تک محوری a تقریباً با رفتاری مشابه، بیشترین (کمترین) تغییرات در  $I_x$  ( $I_y$ ) را ایجاد کرده‌اند.



شکل ۱۱. نمودار رسانش کوانتومی در راستای x و راستای y بر حسب انرژی برای g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> با کرنش دو محوری ۲- درصد.



شکل ۱۰. نمودار چگالی جریان در راستای x و (ب) راستای y بر حسب ولتاژ بایاس برای g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> تحت کرنش ۲ درصد.

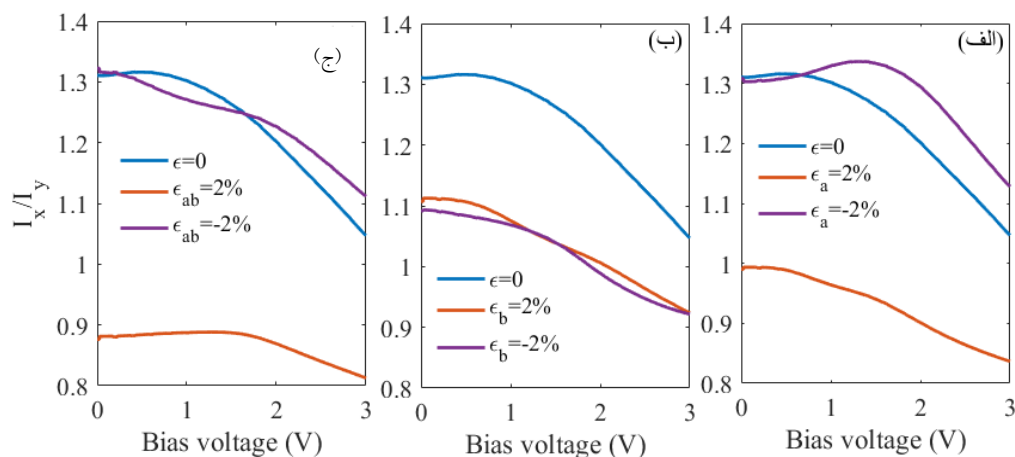


شکل ۱۲. نمودار چگالی جریان در (الف) راستای x و (ب) راستای y بر حسب ولتاژ سویدگی برای g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> تحت کرنش ۲- درصد.

دیگر در این بازه، ناهمسانگردی چگالی جریان مشاهده نمی‌شود. کرنش منفی نیز ناهمسانگردی مشابهی با حالت بدون کرنش دارد. بنابراین در بازه  $0 \sim 0.7$  V هیچ کدام از کرنش‌های مثبت و منفی نمی‌توانند عملکرد خوبی برای سویچ نانو الکترومکانیکی داشته باشند. در بازه  $0.7 \sim 3$  V نسبت ناهمسانگردی با اعمال کرنش مثبت از یک فاصله می‌گیرد و ناهمسانگردی در چگالی جریان‌ها ظاهر می‌شود. همچنین در این بازه، میزان ناهمسانگردی با اعمال کرنش منفی نسبت به حالت بدون کرنش بیشتر می‌شود. بنابراین در این بازه عملکرد سویچ با کرنش تک محوری a (مثبت و منفی) مناسب است.

تحت کرنش نسبت به حالت بدون کرنش از اهمیت خاصی برخوردار است. نتایج نشان می‌دهد کرنش مثبت دو محوری، بیشترین میزان ناهمسانگردی با رفتاری متفاوت را نسبت به حالت بدون کرنش دارد. پس از آن کرنش مثبت تک محوری a و b و کرنش منفی تک محوری b قرار دارند. در شکل‌های ۱۳، نسبت  $I_x/I_y$  با اعمال کرنش‌های تک محوری و دو محوری نشان داده شده است. نسبت  $I_x/I_y$  با اعمال کرنش در جهت a در شکل ۱۴ الف مشاهده می‌شود. این نسبت در ولتاژ سویدگی  $0 \sim 0.7$  V با اعمال کرنش مثبت تقریباً در مقدار یک ثابت می‌ماند؛ به عبارت





شکل ۱۳. نمودار نسبت چگالی جریان در راستای x به y بر حسب ولتاژ سویدگی با کرنش (الف) تک محوری در جهت a، (ب) تک محوری در جهت b و (ج) دو محوری.

دنبال کرنش‌هایی هستیم که نسبت به حالت بدون کرنش تغییر بیشتری در جریان‌ها ایجاد می‌کنند. نتایج نشان می‌دهد که کرنش‌های مثبت (مخصوصاً دو محوری) عملکرد بهتری برای این منظور از خود نشان می‌دهند.

#### ۷. نتیجه‌گیری

در این پژوهش بر پایه نظریه تابعی چگالی با اعمال تقریب گرادیان تعمیم یافته و تابع گرین غیر تعادلی به بررسی خواص مکانیکی، ساختار الکترونی و انتقال الکترونی اکسید بوروفین گرافین‌گونه پرداخته شد. همچنین تأثیر کرنش‌های کوچک تک محوری و دو محوری بر انتقال الکترونی این ساختار مطالعه شد. نتایج نشان می‌دهد این ساختار از لحاظ خواص مکانیکی در دو راستای شبکه ناهمسانگرد است و همچنین در راستای آرمچیر سخت در حالی که در راستای زیگزگاز شکننده است. مدول یانگ در دو راستای آرمچیر و زیگزگاز به ترتیب  $211/9 \text{ N/m}$  و  $40/6 \text{ N/m}$  و نسبت پواسون نیز به ترتیب  $0/71$  و  $0/14$  به دست آمده‌اند.

کمترین مقدار رسانش کوانتمی  $g\text{-B}_2\text{O}$  بدون اعمال کرنش، اطراف نقطه دیراک و بیشترین مقدار رسانش کوانتمی نزدیک تراز فرمی در راستای x مشاهده شده است. نتایج نشان می‌دهد که  $g\text{-B}_2\text{O}$  بدون اعمال کرنش، به تنهایی ناهمسانگردی بالایی در چگالی جریان‌های  $I_x$  و  $I_y$  دارد و می‌تواند به عنوان

نوع ناهمسانگردی با اعمال کرنش تک محوری a مثبت ( $I_x/I_y < 1$ ) و منفی ( $I_x/I_y > 1$ ) با یکدیگر متفاوت است. در شکل ۱۴. b نسبت ناهمسانگردی جریان‌ها برای کرنش تک محوری b نشان داده شده است. هر دو کرنش مثبت و منفی تقریباً عملکرد مشابهی را نشان می‌دهند همچنین ناهمسانگردی آنها با حالت بدون کرنش متفاوت است. نوع ناهمسانگردی در بازه  $0-2 \text{ V}$  ( $I_x/I_y > 1$ ) با  $2-3 \text{ V}$  ( $I_x/I_y < 1$ ) متفاوت است. در همه ولتاژها، اعمال کرنش تک محوری b ناهمسانگردی را نسبت به حالت بدون برهم‌کنش تضعیف می‌کند ولی عملکرد آن به عنوان سویچ نانوالکترومکانیکی مناسب است.

شکل ۱۴. ج نیز تأثیر کرنش دو محوری بر نسبت ناهمسانگردی جریان‌ها را نمایش می‌دهد. با این که کرنش دو محوری منفی از ناهمسانگردی بالایی برخوردار است ولی به دلیل تشابه آن با حالت بدون کرنش نسبت به کرنش دو محوری مثبت، عملکرد چندان خوبی از خود نشان نمی‌دهد. رفتار کرنش دو محوری مثبت ( $I_x/I_y < 1$ ) با رفتار کرنش دو محوری منفی و حالت بدون کرنش ( $I_x/I_y > 1$ ) متفاوت است.  $g\text{-B}_2\text{O}$  بدون اعمال کرنش، به تنهایی ناهمسانگردی بالایی در چگالی جریان‌های  $I_x$  و  $I_y$  دارد و می‌تواند به عنوان سویچی که با تغییر ولتاژ سویدگی عمل می‌کند، مورد استفاده قرار گیرد؛ ولی در طراحی یک سویچ نانوالکترومکانیکی به

مشابه، بیشترین (کمترین) تغییرات  $I_x$  ( $I_y$ ) را ایجاد کرده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که کرنش‌های مثبت (مخصوصاً دو محوری) عملکرد بهتری در طراحی سویچ نانوالکترومکانیکی از خود نشان می‌دهند و با توجه به تأثیر کرنش بر ناهمسانگردی در انتقال الکترونی g-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>، این ماده قابلیت استفاده در ادوات نانوالکترونیکی را خواهد داشت.

سویچی که با تغییر ولتاژ سویدگی عمل می‌کند مورد استفاده قرار گیرد. نکته قابل توجه آن که رفتار ناهمسانگرد در خواص انتقالی و رسانش این ساختار در دو جهت x و y، با اعمال کرنش از بین نمی‌رود. کرنش مثبت باعث می‌شود چگالی جریان در جهت x کاهش یابد و چگالی جریان در جهت y نسبت به حالت بدون کرنش افزایش یابد. کرنش‌های منفی دو محوری و تک محوری در راستای آرمچیر تقریباً با رفتاری

## مراجع

- 16 4 (2016) 2522 .
21. R C Xiao, D F Shao, W J Lu, H Y Lv, J Y Li, and Y P Sun, *Appl. Phys. Lett.* **109** 12 (2016) 122604 .
22. 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.
23. C Zhong, W Wu, J He, G Ding, Y Liu, D Li, S A Yang, and G Zhang, *Nanoscale* **11** (2019) 2468.
۲۴. س فیض‌آبادی، ز کارگر، مجله پژوهش فیزیک ایران ۱۲، ۱ (۱۳۹۱) .
24. S Faizabadi and Z Kargar, *Iran. J. Phys. Res.* **12**, 1 (2012) 1.
25. P Giannozzi, et al., *J. Phys. Condens. Matter* **21** (2009) 395502.
26. A Ferretti, B Bonferroni, A Calzolari, and M Buongiorno Nardelli, <http://www.wannier-transport.org> .
27. C Lee, B Feng, M D'angelo, R Yukawa, R Liu, T Kondo, H Kumigashira, I Matsuda, and T Ozaki, *Phys. Rev. B* **97** (2018) 075430 .
28. H J Monkhorst, J D Pack, *Phys. Rev. B* **13** (1976) 5188 .
29. X Fan, D Ma, B Fu, C Liu, and Y Yao, *Phys. Rev. B* **98** (2018) 195437 .
30. T Farajollahpour, Z Faraei, and S A Jafari, *Phys. Rev. B* **99** (2019) 235150 .
۳۱. ر ابراهیمی جابری، ج نعمت‌اللهی، ه قراگوزلو، س جلالی اسدآبادی، م جمال، مجله پژوهش فیزیک ایران ۱۹، ۱ (۱۳۹۸) .
31. R Ebrahimi-Jaberi, J Nematollahi, H Gharagoozloo, S Jalali-Asadabadi, and M Jamal, *Iran. J. Phys. Res.* **19**, 1 (2019) 37.
32. S. Datta, "Electronic Transport in Mesoscopic Systems", Cambridge university press (1997).
33. M Pashangpour, *Comput. Mater. Sci.* **168** (2019) 74.
1. K S Novoselov, A K Geim, S V Morozov, D Jiang, Y Zhang, S V Dubonos, I V Grigorieva, and A A Firsov, *Science* **306** (2004) 666.
2. G Liu, X L Lei, M S Wu, B Xu, and C Y Ouyang, *J. Phys. Condens. Matter* **26** (2014) 355007 .
3. 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 .
4. X R Hu, J M Zheng, and Z Y Ren, *Front. Phys.* **13** (2017) 137302.
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, and 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, and 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. ZQ Wang, TY Lü, HQ Wang, et al, *Front. Phys.* **14** (2019) 33403 .
15. V Wang and W T Geng, *J. Phys. Chem. C* **121** (18) (2017) 10224.
16. H F Wang, Q F Li, Y Gao, F Miao, X F Zhou, and X G Wan, *New J. Phys.* **18** 7 (2016) 073016 .
17. Y X Liu, Y J Dong, Z Y Tang, X F Wang, L Wang, T J Hou, H P Lin, and Y Y Li, *J. Mater. Chem. C* **4** 26 (2016) 6380 .
18. H Xiao, W Cao, T Ouyang, S Guo, C He, and J Zhong, *Sci. Rep.* **7** (2017) 45986
19. B Peng, H Zhang, H Z Shao, Y F Xu, R J Zhang, and H Y Zhu, *J. Mater. Chem. C* **4** 16 (2016) 3592 .
20. E S Penev, A Kutana, and B I Yakobson, *Nano Lett.*