

بررسی تابع موج حالت جایگزیده در نانونوار فسفرین دولایه

مسعوده رفیع^۱، محسن دایی محمد^۱، مهدی زادسرا^۱ و مرتضی سلطانی^۲

۱. گروه فیزیک، دانشکده مهندسی کامپیوتر، واحد نجف آباد، دانشگاه آزاد اسلامی، نجف آباد

۲. دانشکده فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان

E-mail: m.daeimohammad@pco.iaun.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۱/۰۹/۲۷؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۱/۱۰/۲۴)

چکیده:

در این پژوهش، ابتدا ساختار یک نانونوار فسفرین دولایه معرفی می‌شود. سپس، برای ساختار ساده‌سازی شده‌ی این سامانه در حضور تهی‌جا تابع موج جایگزیده‌ای که منشأ توپولوژیک دارد به شکل تحلیلی بررسی می‌شود و نتایج تحلیلی با روش عددی مقایسه می‌شود. در محاسبه عددی چگالی احتمال جایگزیده (LDOS) از رهیافت لاندائز-بوتیکر استفاده می‌شود. در آخر برای فسفرین دولایه، با لحاظ کردن پارامترهای بیشتر، تابع موج و انرژی حالت جایگزیده در حضور تهی‌جا به روش عددی گزارش شده است.

واژه‌های کلیدی: فسفرین دولایه، حالت جایگزیده، تهی‌جا

۱. مقدمه

چین‌خوردگی دارد. ۲- ساختار شش‌ضلعی آن منتظم نیست و همین باعث تفاوت (ناهمسانگردی) در جملات برهم‌کنش می‌شود.

این ناهمسانگردی به قدری زیاد است که منجر به گذار فاز لیفشیتز^۱ در این ساختار می‌شود و در نتیجه این ساختار گاف انرژی در حالت کپه‌ای دارد.

در مرجع [۳] اثبات شده است که یک نانونوار فسفرین با لبه‌های زیگزاگ یک نوار انرژی شبه یک‌بعدی جایگزیده در لبه‌ها دارد که توسط ثابت توپولوژیک عدد چرخش^۲ محافظت می‌شود. وجود این حالت‌های لبه‌ای شبه یک‌بعدی در ناحیه گاف توجهات زیادی را به خود معطوف کرده است. خواص ترابردی این حالت‌های لبه‌ای برای ساخت سامانه‌های ترموالکترونیک مورد توجه قرار گرفته است [۴ و ۵].

امروزه ساختارهای تک‌لایه و چندلایه با مواد مختلف مانند کربن و سیلیس و فسفر و ... در آزمایشگاه‌ها ساخته می‌شود که معروف‌ترین و اولین ماده‌ای که ساخته شده، گرافین است. گرافین، یک ساختار تک‌لایه از کربن با ساختار لانه‌زنبوری است که امروزه یکی از پرکاربردترین مواد مصنوعی است که در آزمایشگاه ساخته شده است. پس از گرافین، تلاش برای ساخت مواد دوبعدی تک‌لایه منجر به ساخت مواد تک‌لایه با ساختار لانه‌زنبوری با اتم‌هایی غیر از کربن شد که به عنوان نمونه می‌توان به سیلیسن، فسفرین و بروفن اشاره کرد [۱ و ۲]. ساختار فسفرین مانند ساختار گرافین لانه‌زنبوری است ولی دو تفاوت اساسی با گرافین دارد: ۱- این ساختار مسطح نیست و

۱. Lifshitz

۲. Winding number

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{(i,j)(i',j')} t_i^{\parallel} \left(\hat{C}_{i,j}^{\dagger A(\tau)(B(\tau))} \hat{C}_{i',j'}^{\dagger B(\tau)(A(\tau))} \right) \\
 & + \sum_{(i,j)(i',j')} t_i^{\perp} \left(\hat{C}_{i,j}^{\dagger A(B)} \hat{C}_{i',j'}^{\dagger B(A)} \right) \\
 & + \sum_{(i,j)} \epsilon_{i,j} \left(\hat{C}_{i,j}^{\dagger A(\tau)(B(\tau))} \hat{C}_{i,j}^{\dagger A(B(\tau))} \right), \quad (1)
 \end{aligned}$$

که در این رابطه عملگرهای $(A(B))^{(i,j)}$ ، عملگرهای فنا در مکان i و j برای اتم A (B) هستند. باید توجه داشت که در ساختارهای لانه‌زنبوری چون ساختار سلول واحد دو اتم دارد (گرچه اتم‌ها از یک جنس هستند)، بنابراین برای برچسب زدن آنها از اتم‌های نوع A و B استفاده می‌کنیم. در این هامیلتونی نیز، برای هر لایه دو نوع اتم لحاظ می‌شود. در شکل ۲ اگر اتم‌های نوع اول از نوع A باشند، آنگاه اتم‌های ردیف دوم در همان زیگزاگ نوع B می‌باشند. در این هامیلتونی، پرش‌های 2 درون شبکه‌ای با t^{\perp} و پرش‌های بین شبکه‌ای با t^{\perp} نشان داده شده است.

لازم به ذکر است که نامگذاری نوع A و B کاملاً قراردادی است. تأکید ما به این نامگذاری به این علت است که حالت‌های جایگزیده روی اتم‌های نوع B و یا روی اتم‌های نوع A غیرصفرند که ما از این مسئله در بخش بعدی استفاده می‌کنیم.

۳. محاسبه تحلیلی حالت جایگزیده

ما در این بخش برای ساده‌سازی مسئله و رسیدن به نتایج تحلیلی قابل ارائه، هامیلتونی متناظر شکل ۱ را ساده‌سازی می‌کنیم. به عبارتی در ابتدا بزرگ‌ترین پرش درون لایه‌ای (t_2) و t_1 و بزرگ‌ترین پرش بین لایه‌ای (t_{11}) را در نظر می‌گیریم. مسئله‌ای که در این بخش بررسی می‌شود در شکل ۲ آورده شده است که در آن یک نانونوار فسفرین دولایه رسم شده است. مطابق شکل یکی از اتم‌های لایه بالا کنده شده است که با علامت \times مشخص شده و تنها سه جمله پرش t_1

ساختارهای لانه‌زنبوری علاوه بر داشتن حالت‌های لبه‌ای، حالت‌های جایگزیده در اطراف تهی‌جا نیز دارند. در مقاله [۱] با استفاده از زنجیره‌ای از تهی‌جا، یک نوار ناخالصی در فسفرین ایجاد شده است که در ساختارهای ترموالکتریک از آن استفاده شده است. اخیراً ساختار فسفرین دولایه در مقالات [۲ و ۶] گزارش شده است.

با توجه به کاربردها و اهمیت نظری حالت‌های جایگزیده در حضور تهی‌جا، تعمیم محاسبه این حالت‌ها برای فسفرین دولایه می‌تواند جالب توجه باشد. در ادامه، ابتدا ساختار فسفرین دولایه و هامیلتونی آن معرفی می‌شود. سپس برای ساختار ساده شده فسفرین دولایه محاسبه تحلیلی حالت‌های جایگزیده صورت می‌گیرد و در نهایت برای بررسی درستی محاسبات تحلیلی و همچنین لحاظ کردن بقیه جملات هامیلتونی، همین محاسبات به شکل عددی بررسی می‌شود. محاسبات عددی به روش لاندائر-بوتیکر^۱ انجام می‌گیرد.

۲. ساختار فسفرین دولایه

ساختار فسفرین تک‌لایه، یک ساختار لانه‌زنبوری است که برخلاف ساختار گرافین مسطح نیست و یک چین‌خوردگی دارد. ساختار فسفرین دولایه به نحوی است که این چین‌خوردگی‌ها داخل یکدیگر قرار می‌گیرند. طرحواره‌ای از فسفرین دولایه از بالا و پایین در شکل ۱ نشان داده شده است [۸-۶].

در بررسی ساختارها برای انرژی فرمی می‌توان از مدل بستگی قوی استفاده کرد. ساختار بستگی قوی متناظر با فسفرین دولایه در شکل ۱ نشان داده شده است. مقدار عددی جملات بستگی قوی در جدول ۱ لحاظ شده است [۸].

حالت‌های لبه‌ای و ساختار نواری این سامانه به طور مفصل در مقاله [۹] بررسی شده است و خوانندگان علاقمند به بررسی دقیق‌تر می‌توانند به این مرجع مراجعه کنند.

با توجه به شکل ۱ و همچنین جدول ۱ می‌توان هامیلتونی را به شکل زیر نوشت:

^۱ Landauer-Buttiker
۲. Hopping

جدول ۱. ۱۰ پارامتر پرش درون لایه‌ای و ۵ پارامتر پرش بین لایه‌ای فسفرین دولایه که در شکل ۱ نشان داده شده‌اند [۸].

i	t_i^{\parallel}	$d_i (A^{\circ})$	i	t_i^{\parallel}	$d_i (A^{\circ})$	i	t_i^{\perp}	$d_i (A^{\circ})$
۱	-۱/۴۸۶	۲/۲۲	۶	۰/۱۸۶	۴/۲۳	۱۱	۰/۵۲۴	۳/۶۰
۲	۳/۷۲۹	۲/۲۴	۷	-۰/۰۶۳	۴/۳۷	۱۲	۰/۱۸۰	۳/۸۱
۳	-۰/۲۵۲	۳/۳۱	۸	۰/۱۰۱	۵/۱۸	۱۳	-۰/۱۲۳	۵/۰۵
۴	-۰/۰۷۱	۳/۳۴	۹	-۰/۰۴۲	۵/۳۷	۱۴	-۰/۱۶۸	۵/۰۸
۵	۰/۰۱۹	۳/۴۷	۱۰	۰/۰۷۳	۵/۴۹	۱۵	۰/۰۰۵	۵/۴۴

t_1 و t_2 رسم شده است. حالت جایگزیده در این سامانه ساده

شده را می‌توان با در نظر گرفتن شرایط زیر به دست آورد:

$$\langle B | \psi_{Loc} \rangle = 0, \quad (2)$$

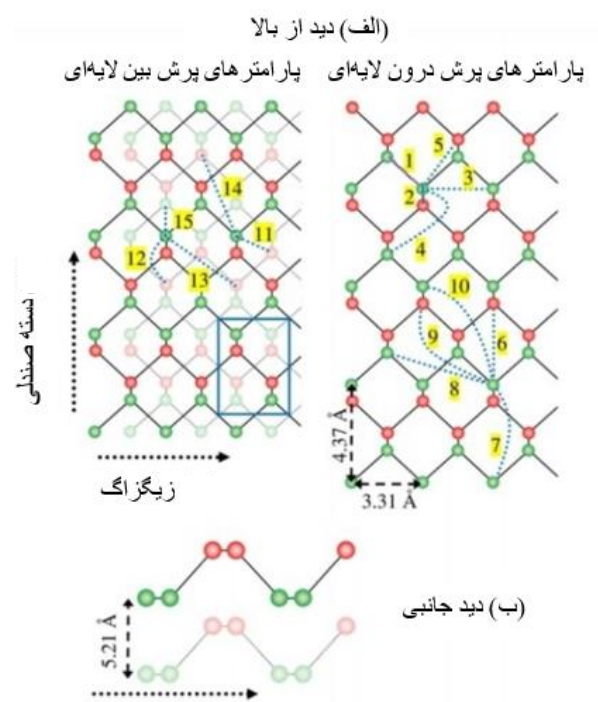
$$\hat{H} | \psi_{Loc} \rangle = 0, \quad (3)$$

این دو شرط از تعمیم تابع موج حالت‌های جایگزیده برای فسفرین تک‌لایه به دست آمده است که در مقاله [۱۰] به طور کامل در مورد آن بحث شده است. در واقع شرط‌های (۲) و (۳) تعمیم مدل S-S-H هستند. به طور کلی برای سامانه‌هایی که تقارن حفره-ذره دارند، اگر قرار باشد که یک حالت جدید ناشی از وجود ناخالصی در آن ایجاد شود، اولاً باید انرژی آن دقیقاً صفر باشد و ثانیاً با توجه به صفر بودن انرژی، نشان داده می‌شود که لزوماً باید در یک زیرفضا، تابع موج صفر باشد تا شرط مورد نظر برآورده شود. وجود این دو شرط تضمین می‌کند که حالت جایگزیده از برهم‌نهی حالت‌های کپه‌ای نیست و یک حالت جدید انرژی در سامانه خلق می‌شود.

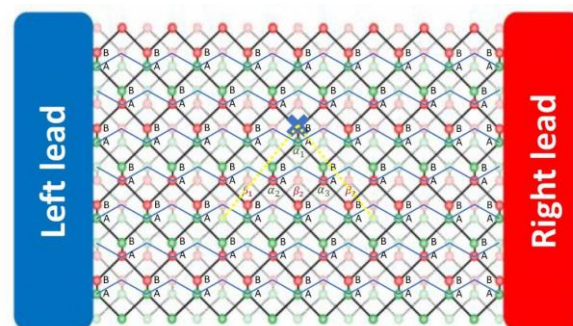
باید توجه داشت که در شرط (۲)، با توجه به لانه‌زنبوری بودن ساختار باید اتم‌ها را به دو دسته A و B تقسیم کرد که در شکل ۲ مشخص شده است. به دلیل این که تهی‌جا در زیرفضای B است، تابع موج متناظر باید در زیرفضای A غیر صفر باشد. با توجه به این دو شرط می‌توان نشان داد که تنها اتم‌های شماره دار در شکل ۲ تابع موج غیر صفر دارند.

برای ادامه محاسبات تابع موج را به شکل زیر در نظر می‌گیریم:

$$| \psi_{Loc} \rangle = \sum_i \alpha_i | A_i \rangle + \beta_i | B_i \rangle, \quad (4)$$



شکل ۱. (الف) ۵ پارامتر پرش بین لایه‌ای و ۱۰ پارامتر پرش درون لایه‌ای در ساختار بلوری فسفرین دولایه از دید بالا (ب) ساختار بلوری فسفرین دولایه از دید جانبی [۸].



شکل ۲. طرحواره‌ای از مسئله نانونوار در حضور تهی‌جا.

است، غیرصفر است. بنابراین، تابع موج را با اضافه کردن شرط بهنجارش برای تعیین α_1 می‌توان به شکل دقیق محاسبه کرد. نکته مهم دیگر آن است که تابع موج جایگزیده در هر دو لایه بالایی و پایینی غیرصفر می‌شود. در بخش بعدی نشان می‌دهیم که محاسبات عددی، نتایج را تأیید می‌کند. همچنین با اضافه کردن دیگر جملات پرش هامیلتونی، نقطه صفر انرژی جابه‌جا می‌شود.

۴. محاسبات عددی

برای انجام محاسبات عددی برای مسئله شکل ۱، می‌توان از رهیافت لاندائر - بوتیکر که یک فرمول‌بندی کلی برای تمام هامیلتونی‌های شبه یک‌بعدی است، استفاده کرد. در این رهیافت سامانه را به سه ناحیه هدایتگر^۱ چپ و هدایتگر راست و سامانه مرکزی تقسیم می‌کنیم و با استفاده از روش بازگشتی می‌توانیم تابع گرین ناحیه مرکزی را با دقت بالایی محاسبه کنیم [۱]. تابع گرین برای هر سامانه کوانتومی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$(\hat{H} - E\hat{I})\hat{G}_E = \hat{I}, \quad (12)$$

از تابع گرین، می‌توان اطلاعات مفیدی به دست آورد. به عنوان مثال در شکل ۲ می‌توان ترابرد سامانه را حساب کرد. البته با توجه به تعریف تابع گرین داریم:

$$\hat{G}_E = \frac{\hat{I}}{\hat{H} - (E + io^+)\hat{I}}, \quad (13)$$

که در مخرج این رابطه، io^+ برای به دست آوردن تابع گرین تأخیری، اضافه شده است. با توجه به این رابطه، می‌توان نشان داد که چگالی حالت‌های جایگزیده از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\rho_i(E) = \pi \text{Im} \langle i | \hat{G}_E | i \rangle = \pi \text{Im} G_E(i, i), \quad (14)$$

در رابطه بالا $G_E(i, i)$ تابع گرین ناحیه مرکزی با انرژی E و مکان i و $\rho_i(E)$ چگالی حالت‌های جایگزیده (LDOS)^۲ بر حسب انرژی است.

با توجه به شکل تابع موج معادله (۴) و با توجه به این که حالت جایگزیده اطراف تهی‌جا یک تک‌حالت است که ربطی به حالت‌های کپه‌ای ندارد و به عبارتی چگالی حالت انرژی آن به

در این معادله $\langle A_{(r)i} | A_{(r)i} \rangle = C_{(r)A_i}^\dagger | 0 \rangle$ اتم نوع A در لایه بالایی (پایینی) است که شماره آن در شکل (۲) آمده است. در این شکل، اتم‌های نوع A همچنین t_{11} (خطوط آبی) نشان داده شده است. نقطه‌چین‌های زرد رنگ ناحیه‌ای را نشان می‌دهد که تابع موج جایگزیده در آن غیرصفر می‌شود. با توجه به معادله (۴) به سادگی می‌توان روابط زیر را برای حالت جایگزیده به دست آورد:

$$t_1 a_1 + t_r a_r = 0 \rightarrow a_r = -\frac{t_1}{t_r} a_1, \quad (5)$$

$$t_1 a_1 + t_r a_r = 0 \rightarrow a_r = -\frac{t_1}{t_r} a_1, \quad (6)$$

معادلات ردیف بعدی در لایه بالایی را نیز می‌توان به طریق مشابه به دست آورد. برای لایه پایینی با توجه به معادله‌های (۵) و (۶) و شکل ۲ نشان داده می‌شود که:

$$\beta_1 t_1 + \alpha_r t_{11} = 0 \rightarrow \beta_1 = \frac{t_{11}}{t_r} \alpha_1, \quad (7)$$

$$\beta_1 t_1 + (\alpha_r + \alpha_r) t_{11} = 0 \rightarrow \beta_1 = \frac{2t_{11}}{t_r} \alpha_1, \quad (8)$$

$$\beta_r t_1 + \alpha_r t_{11} = 0 \rightarrow \beta_r = \frac{t_{11}}{t_r} \alpha_1, \quad (9)$$

معادلات ردیف‌های بعدی را نیز می‌توان به شکل بازگشتی به دست آورد. سه ضریب α_1 نیز با استفاده از شرط بهنجارش محاسبه می‌شود. نکته مهم آن است که تابع موج به دست آمده کاملاً جایگزیده است و از تابع موج در ردیف‌های شماره ۴ به بعد به سادگی می‌توان صرفنظر کرد. به عبارتی برای ردیف n ام می‌توان نشان داد که:

$$\alpha_i \propto \left(\frac{t_1}{t_r} \right)^n \alpha_1, \quad (10)$$

$$\beta_i \propto \left(\frac{t_{11}}{t_r} \right)^n \alpha_1, \quad (11)$$

بنابراین می‌توان تابع موج را برای تمام اتم‌های ردیف‌های بعد نیز به دست آورد. البته همان‌گونه که در شکل ۲ نشان داده شده است، تابع موج در یک ناحیه محدود که توسط نقطه‌چین مشخص شده

۱. Lead

۲. Local Density Of States

صورت $\delta(E)$ است، بنابراین انتظار داریم که $\rho_i(E)$ حاصله با نتایج عددی از رابطه زیر پیروی کند:

$$\rho_{iA}(E) = |\alpha_i|^2 \delta(E), \quad (15)$$

$$\rho_{iA}(E) = |\beta_i|^2 \delta(E), \quad (16)$$

با روشن کردن جملات پرش t_1 ، t_2 و t_3 ، محاسبات عددی شکل ۲ را نتیجه می‌دهد. شکل ۳ نشان می‌دهد که در انرژی صفر ρ_i یک قله تیز به ارتفاع زیاد دارد که نسبت ارتفاع قله‌ها با نسبت β_i و α_i های به دست آمده در معادله‌های (۵) تا (۹) منطبق است.

همانگونه که در شکل ۳ دیده می‌شود تابع $\rho_i(E)$ یک تابع تیز است که تقریباً همان تابع دلتای دیراک است.

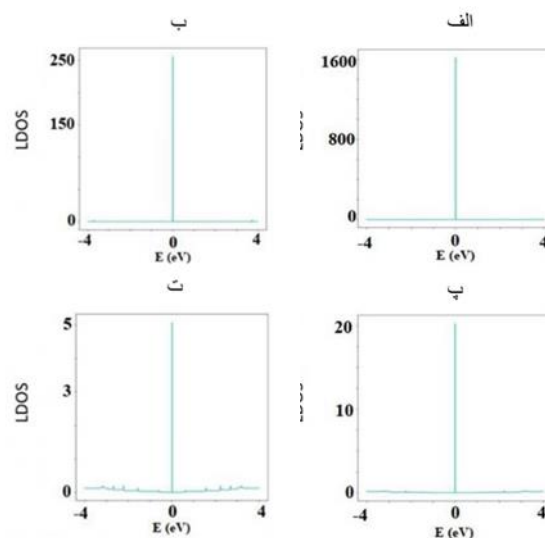
با توجه به معادله (۱۳) تعریف کلی تابع گرین به صورت

$$\hat{G} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum E_i \frac{|\psi_{E_i}\rangle \langle \psi_{E_i}|}{E - E_i + i\epsilon}$$

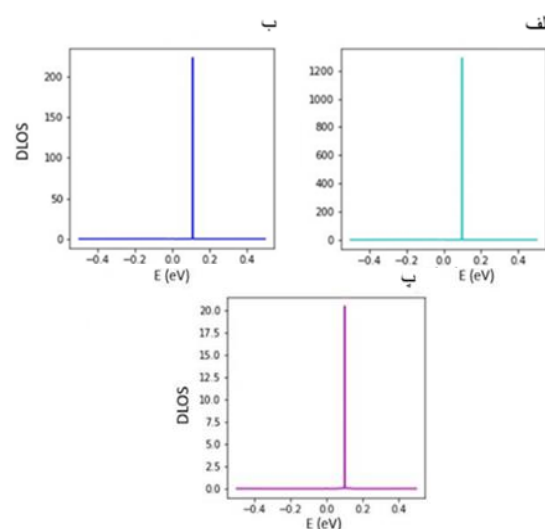
انرژی E_i است. در انجام محاسبات عددی $\epsilon \sim 10^{-4}$ در نظر گرفته می‌شود و حالت حدی معادله‌ی بالا لحاظ نمی‌شود. به همین دلیل در شکل (۳) تابع $\rho_i(E)$ یک پهن‌شدگی جزئی دارد. البته باید توجه داشت که ارتفاع قله‌های به دست آمده، با نسبت‌های معادلات (۵) تا (۹) باید مطابقت داشته باشد. همان‌گونه که از شکل‌های (۳ الف-ت) دیده می‌شود، نسبت‌های ذکرشده دقیقاً برآورده می‌شود.

در ادامه برای محاسبه اثرات دیگر جملات پرش، جمله t_4 را نیز روشن می‌کنیم. وجود جملات دیگر هامیلتونی، دو اثر مختلف می‌تواند داشته باشد. در مقاله [۹] اثبات شده است که بسیاری از جملات هامیلتونی (۱) تابع موج را عوض می‌کند ولی برای حالت جایگزیده شرط $\hat{H}|\psi_{Loc}\rangle = 0$ را تغییر نمی‌دهد. به عبارتی برای جملاتی مانند t_3 و t_{12} و روشن شدن آنها تنها شکل تابع موج را پیچیده‌تر می‌کند و انرژی حالت جایگزیده همچنان در صفر باقی می‌ماند ولی برطبق مقاله [۳] جمله t_4 انرژی حالت جایگزیده را تغییر می‌دهد. به همین دلیل در ادامه ما تنها جمله را روشن می‌کنیم.

با افزودن این جمله، دوباره تابع چگالی اتم‌ها را در اطراف ناخالصی محاسبه کردیم که به نتایج شکل ۴ رسیدیم. مطابق شکل ۴ یک تابع موج جایگزیده داریم که تفاوت آن در این



شکل ۳. چگالی حالت‌های جایگزیده بر حسب انرژی برای اتم‌های مشخص شده در شکل ۲ در شرایطی که پرش t_4 خاموش است. نتایج عددی LDOS به شرح زیر است: (الف) $|\alpha_1|^2$ ، (ب) $|\alpha_2|^2$ ، $|\alpha_3|^2$ ، (پ) $|\beta_2|^2$ و (ت) $|\beta_1|^2$ ، نسبت ارتفاع شکل الف به ارتفاع شکل ب برابر $\left(\frac{t_1}{t_2}\right)^2$ است.



شکل ۴. چگالی حالت‌های جایگزیده بر حسب انرژی برای اتم‌های مشخص شده در شکل ۲ در شرایطی که پرش t_4 روشن است. نتایج عددی LDOS به شرح زیر است: (الف) $|\alpha_1|^2$ ، (ب) $|\alpha_2|^2$ ، $|\alpha_3|^2$ و (پ) $|\beta_2|^2$ ، نسبت ارتفاع شکل الف به ارتفاع شکل ب برابر $\left(\frac{t_1}{t_2}\right)^2$ است.

۵. جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

ما در این مقاله نشان دادیم که یک فسفرین دولایه حالت‌های جایگزیده در اطراف تهی‌جا دارد که در گاف انرژی ظاهر می‌شوند. با کمک محاسبات عددی، علاوه بر اثبات وجود این حالت‌ها، نتایج تحلیلی را مورد بررسی قرار دادیم و انرژی حالت جایگزیده را محاسبه کردیم.

بررسی حالت‌های پیچیده‌تر مانند تهی‌جاهایی با بیش از یک اتم و همچنین تهی‌جاهای دوره‌ای که منجر به نوار ناخالصی می‌شود توسط نویسندگان مقاله در دست بررسی است.

است که انرژی حالت جایگزیده دیگر برابر صفر نیست و به اندازه $\Delta E = 0.1 \text{ eV}$ جابه‌جا شده است. به عبارت دیگر اضافه کردن جملات جدید تنها باعث جابه‌جایی انرژی حالت جایگزیده می‌شود. به عبارتی وجود جملات دیگر هامیلتونی از لحاظ کمی ممکن است که شکل تابع موج جایگزیده را تغییر داده و انرژی را عوض کند؛ ولی نتیجه عددی نشان می‌دهد که از لحاظ کیفی اولاً تابع موج جایگزیده وجود دارد، ثانیاً فقط یک جابه‌جایی در انرژی صورت می‌گیرد.

استفاده از این حالت‌های جایگزیده، برای بررسی کاربردهای احتمالی مانند اتم‌های تک‌ترازه و دوترازه و همچنین بررسی نوارهای ناخالصی جالب توجه است.

مراجع

1. M Rezaei, H Karbaschi, M Amini M Soltani, and G Rashedi. *Nanotechnology Rep.* **32** (2021) 375704.
2. L Li, Y Yu, G J Ye, Q Ge, X Ou, H Wu, D Feng, X H Chen, and Y Zhang, *Nat. Nanotechnology* **9** (2014) 372.
3. M Ezawa, *New Journal of Physics* **16** (2014) 115004.
4. B Zhou, J Yuan, X Zhou, and B Zhou, *J. Phys.: Condens. Matter* **32** (2020) 435502.
5. W Lu, H Nan, J Hong, Y Chen, C Zhu, Z Liang, X Ma, Z Ni, C Jin, and Z Zhang, *Nano Res.* **7** (2014) 853.
6. L L Li, D Moldovan, W Xu, and F M Peeters, *Phys. Rev. B* **96** (2017) 155425.
7. A N Rudenko, S Yuan, and M I Katsnelson, *Phys. Rev. B* **92** (2015) 085419.
8. S Soleimanikahnoj, and I Knezevic, *J. Comput. Electron.* **16** (2017) 568.
9. S. Sodagar, H. Karbaschi, M. Soltani, and M. Amini, *Eur. Phys. J. Plus* **137**(2022) 722.
10. M Amini, M Soltani, and M Sharbafian, *Physical Review B* **99** (2019).