

بررسی اثرات همبستگی الکترونی در نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی

فرشاد باقرپور^۱ و بهرام عابدی روان^۲

۱. دانشکده فیزیک، دانشگاه گیلان، رشت

۲. دانشکده علوم پایه، دانشگاه هوایی شهید ستاری، تهران

پست الکترونیکی: fbagherpour@msc.guilan.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۶/۰۹/۰۹؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۷/۰۴/۱۹)

چکیده

در این پژوهش، در ابتدا با استفاده از محاسبات اصول اولیه و در چارچوب نظریه تابعی چگالی، ساختار الکترونی نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی به ازای پهناهای مختلف، مورد بررسی قرار می‌گیرد. نتایج حاصل از ساختار نواری نانونوارهای دسته‌مبلی، وجود یک گاف نواری مستقیم را نشان می‌دهد، که با افزایش پهنای نانونوار به صورت نوسانی کاهش می‌یابد. در توصیف دلایل اصلی مؤثر در نظم الکترونیکی و مغناطیسی مواد و همچنین در شدت اثرات همبستگی الکترونی، برهم‌کنش کولنی مؤثر میان الکترون‌های موضعی، نقش اساسی را ایفا می‌کند. بدین منظور در ادامه پوشش‌دهی برهم‌کنش کولنی را با استفاده از محاسبات اصول اولیه و تقریب فاز تصادفی مقید (cRPA) در نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی بررسی نموده و مقادیر کمیت‌های برهم‌کنش کولنی مؤثر (U هابارد) را برای آنها مورد محاسبه قرار می‌دهیم. مقادیر این کمیت‌ها برای نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی، قابل توجه بوده و بیشتر از سیلیسین اولیه است، که دلالت بر شدت اثرات همبستگی الکترونی در آنها دارد. با توجه به شدت اثرات محدودیت کوانتومی متفاوت در این دسته از نانونوارها، مقادیر کمیت‌های برهم‌کنش کولنی مؤثر درون-جایگاهی، مشابه نتایج حاصل از ساختار نواری آنها بوده و با افزایش پهنای نانونوار به طور نوسانی کاهش می‌یابد. از طرفی به ازای اتم‌های موجود در لبه‌های نانونوار، کمیت‌های برهم‌کنش کولنی مؤثر درون-جایگاهی، مقادیر بیشتری را نسبت به اتم‌های درونی داشته، که نشان دهنده پوشش‌دهی کمتر برهم‌کنش کولنی میان الکترون‌های موضعی، در لبه‌های نانونوار است. در پایان نتایج حاصل از بررسی کمیت‌های برهم‌کنش کولنی مؤثر برون جایگاهی، نشان می‌دهند که برهم‌کنش کولنی در فواصل کوتاه، به طور ضعیف پوشش داده شده و در فواصل دورتر در حدود ۱۲ آنگستروم پوشش داده نمی‌شود، که با محاسبات اصول اولیه صورت گرفته در مورد دستگاه‌هایی با ابعاد پایین، مطابقت دارد. این پوشش‌دهی کم به طور خاص در فواصل دورتر، می‌تواند وجود تصحیحات شبه‌ذره ای قابل توجه در تقریب GW و انرژی پیوندی اکسیتونی بزرگ را در نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی توضیح دهد.

واژه‌های کلیدی: تقریب cRPA، U هابارد، نظریه تابعی چگالی، نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی، همبستگی الکترونی

۱. مقدمه

سهم بسیاری از پژوهش‌ها را به خود اختصاص داده است [۱] و [۲]. با این حال گرافن مغناطیسی نبوده و فاقد انرژی گاف نواری است، که این قضیه کاربردهای عملی آن را با چالش‌هایی

گرافن ماده منحصربفردی است، که در یک دهه گذشته با توجه به مزیت‌های بزرگ آن بر مواد معمول در صنعت الکترونیک،

صفحات در جهات خاص و تشکیل نانونوارهای^۷ باریک با پهنای زیر ۱۰۰ آنگستروم است [۱۷-۲۴]. در این حالت، اثرات محدودیت کوانتومی^۸ و حالت‌های لبه‌ای^۹، نقش اساسی را در خواص این دستگاه‌های شبه یک‌بعدی ایفا می‌کنند. گاف نواری ظاهر شده در این نانونوارها، به وسیله تغییر در پهنای آنها قابل تنظیم بوده و به ویژگی‌هایی نظیر نوع لبه‌ها و پهنای نانونوار بستگی دارد. در واقع، کاهش ابعاد موجب افزایش همبستگی^{۱۰} الکترون-الکترون و به طبع آن افزایش انرژی گاف نواری شده است. با توجه به ساختار لبه‌ای نانونوارهای سیلیسین، آنها را به دو دسته زیگزاگ^{۱۱} و دسته‌مبلی^{۱۲} تقسیم می‌کنند. از طرفی تمام پیوندهای آویخته موجود در لبه نانونوارهای مورد بررسی به وسیله اتم‌های هیدروژن، منقطع و اثرناپذیر شده‌اند، که این امر باعث پایداری، افزایش جزئی انرژی گاف نواری و کاهش عرض مؤثر نانونوارهای سیلیسینی می‌شود. در این پژوهش ابتدا ساختار الکترونی نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی، بر مبنای محاسبات اصول اولیه^{۱۳} و در چارچوب نظریه تابعی چگالی^{۱۴} مورد بررسی قرار گرفت. نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی با توجه به شکل لبه و ساختار نواری الکترونی شان به سه دسته تقسیم می‌شوند، که ساختار هر سه نوع آن در شکل یک قابل مشاهده است. نتایج ساختار الکترونی این نانونوارها مشابه با بررسی‌های صورت گرفته قبلی، نشان می‌دهد که برخلاف سیلیسین اولیه، نوارها در اطراف انرژی فرمی از هم فاصله گرفته و یک گاف نواری مستقیم را شکل می‌دهند، که با افزایش پهنای نانونوار به صورت نوسانی و با یک الگوی دوره‌ای کاهش می‌یابد [۲۱ و ۲۲].

به منظور بررسی دقیق‌تر دستگاه‌های با ابعاد پایین، به خصوص در خواص جذب نوری آنها، اثرات بس‌ذره‌ای مانند همبستگی الکترون-الکترون و برهم‌کنش‌های میان زوج

مواجه می‌سازد. با الهام از خواص منحصر بفرد گرافن، دیگر مواد دوبعدی تک‌لایه مثل سیلیسین^۱ مورد توجه محققان قرار گرفت. معادل ساختار گرافن، بر پایه سیلیکون با نام سیلیسین به وسیله گازمن وری^۲ و لی یان وون^۳ در سال ۲۰۰۷ معرفی و برای نخستین بار نیز به صورت تجربی در سال ۲۰۱۰ توسط گروه لالمی^۴ تولید شد [۳-۱۰]. در سیلیسین مشابه گرافن، پاشندگی خطی ساختار نواری در نزدیکی نقاط دیراک، به خواص منحصر بفردی در آن منجر شده است. با این حال مزیت سیلیسین نسبت به گرافن، وجود انرژی گاف نواری است، که به منظور کاربردهای آینده به خصوص در نانوالکترونیک، اهمیت فراوانی دارد و مورد دیگر سازگاری با صنعت الکترونیک مبتنی بر سیلیکون بوده، که این صنایع را از تغییر سریع در پایه ماده مورد استفاده یعنی سیلیکون، بی‌نیاز خواهد کرد. با این حال مطالعات بیشتری در مورد سیلیسین و مشتقات آن مورد نیاز بوده و در این بین بررسی اثرات بس‌ذره‌ای، که نقش زیادی در تعیین خواص فیزیکی آنها بازی می‌کنند، تا حدودی مغفول مانده است.

به علاوه برخلاف گرافن، سیلیسین پایدار دارای اندکی حالت خمش^۵ با ترکیبی از هیبریداسیون‌های SP^2/SP^3 بوده و کاملاً تخت نیست [۱۱]، که این مورد امکان تغییر الگوی پاشندگی الکترون‌ها و باز کردن انرژی گاف نواری را فراهم نموده است [۱۲ و ۱۳]. مورد قابل توجه دیگر در مورد سیلیسین، تحرک‌پذیری حامل‌ها و سرعت فرمی بالای آن بوده، که مقادیر آن قابل قیاس با گرافن و خیلی بزرگتر از سیلیکون است [۱۴ و ۱۵]. هر چند میزان انرژی گاف نواری در سیلیسین، به علت بزرگ‌تر بودن اثر جفت‌شدگی اسپین-مدار، بیشتر از گرافن بوده [۱۶]، ولی هنوز به میزان قابل توجه صنایع الکترونیک نرسیده است. با این حال، یکی از روش‌های مؤثر پیشنهادی برای ایجاد و افزایش انرژی گاف نواری، برش این

۷. Nanoribbons

۸. Quantum confinement

۹. Edge states

۱۰. Corolation

۱۱. Zigzag

۱۲. Armchair

۱۳. Ab initio

۱۴. Density functional theory

۱. Silicene

۲. Guzman-Verri

۳. Lew Yan Voon

۴. Lalmi

۵. Buckling

۶. Hybridisation

پیدا کرده و از این طریق به حداقل انرژی می‌رسند. اگر یک بار آزمون مثبت را در داخل یک دستگاه بس الکترونی قرار دهیم، الکترون‌ها در اطراف این بار مثبت جمع شده و این باعث حداقل شدن انرژی کل خواهد شد. در واقع انرژی پتانسیل منفی، افزایش انرژی جنبشی ناشی از تجمع الکترون‌ها را در اطراف بار آزمون خنثی می‌کند. در نهایت تجمع الکترون‌ها در اطراف بار آزمون موجب می‌شود تا برهم‌کنش مؤثر میان بار آزمون و الکترونی که به اندازه کافی بیرون از محدوده تجمع الکترون‌ها قرار گرفته، بسیار ضعیف‌تر از برهم‌کنش کولنی ساده شود و به عبارت دیگر برهم‌کنش کولنی پوشش داده می‌شود. اگر به جای بار مثبت، یک الکترون را به عنوان بار آزمون در نظر بگیریم، که در یک دستگاه الکترونی قرار گرفته، دیگر الکترون‌ها دفع شده و یک پوشش دهی حفره ایجاد می‌شود، که به طور مشابه برهم‌کنش کولنی ساده را استتار می‌کند. اگر دو الکترون را در درون یک جایگاه بدون سایر الکترون‌ها در نظر بگیریم، برهم‌کنشی که این دو ذره با هم دارند را با V نشان داده و به اصطلاح به آن برهم‌کنش ساده می‌گویند. اما در واقعیت و در حضور الکترون‌های دیگر، این دو همدیگر را دفع و ایجاد الکترون-حفره نموده و به نوعی در دستگاه ایجاد قطبش می‌کنند (وابستگی مقادیر کمیت برهم‌کنش کولنی مؤثر U و W به قطبش‌پذیری). بنابراین در اطراف این دو ذره، حفره‌هایی شکل خواهد گرفت، که آنها را استتار نموده و به عبارتی ایجاد شبه‌ذره می‌نمایند. برهم‌کنش این شبه‌ذرات، به دلیل کاهش بار مؤثر آنها نسبت به حالت قبل کاهش چشمگیری داشته و در نتیجه آن برهم‌کنش V کاهش می‌یابد. نکته قابل توجه در این قضیه، این است که کدام دسته از الکترون‌ها در این استتار نقش دارند. در این حالت الکترون‌ها را می‌توان به دو دسته الکترون‌های درونی و الکترون‌های ظرفیت تقسیم نمود. اگر تنها اثرات استتار الکترون‌های مرکزی در نظر گرفته شود، برهم‌کنش کولنی مؤثر U مورد محاسبه قرار گرفته است. ولی اگر اثرات استتاری کل الکترون‌ها لحاظ شود، در این صورت برهم‌کنش کولنی مؤثر W محاسبه شده است. می‌توان

الکترون و حفره^۱، تحت عنوان اثرات اکسیتونی^۲ قابل چشم‌پوشی نیست [۲۵-۳۱]. با در نظر گرفتن تصحیحات شبه‌ذره‌ای^۳ در چارچوب تقریب GW، شاهد انرژی گاف نواری در حدود ۱/۶ الکترون ولت در نانونوار با پهنای ۱۱/۶ آنگستروم (V-ASiNR) هستیم [۲۵]، که نسبت به میزان ۰/۵۸ الکترون ولت حاصل از تقریب LDA افزایش قابل توجهی یافته است. وجود چنین مواردی، بررسی نقش برهم‌کنش کولنی مؤثر^۴ را در این دسته از نانونوارها و اثر تغییر در پهنای آنها را جذاب خواهد نمود. همچنین، اثرات محدودیت کوانتومی باعث کاهش پوشش دهی^۵ برهم‌کنش کولنی میان الکترون و حفره شده و منجر به یک انرژی پیوندی اکسیتونی^۶ بزرگ در آنها می‌شود. طبق محاسبات صورت گرفته قبلی، انرژی پیوندی اکسیتونی در نانونوار دسته‌مبلی سیلیسینی برابر ۱/۰۶ الکترون ولت بوده [۲۵]، که بزرگ‌تر از مقدار آن در نانونوار گرافنی معادل است و دلیل این قضیه به قوی‌تر بودن تصحیحات شبه‌ذره‌ای اربیتال‌های π و π^* بر می‌گردد [۳۲ و ۳۳]. برهم‌کنش کولنی مؤثر میان الکترون‌های موضعی^۷ در ساخت یک هامیلتونی کوانتوم دوم کلی برای مواد با پایه سیلیسینی و همچنین بررسی دلایل مؤثر در نظم الکتریکی و مغناطیسی آنها مهم است. در این مقاله، ما عناصر برهم‌کنش کولنی مؤثر را برای نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی به ازای پهنای مختلف مورد ارزیابی قرار می‌دهیم، که تاکنون صورت نگرفته است.

در فیزیک ماده چگال، مفهوم استتار یا پوشش‌دهی برای درک خواص فیزیکی مواد، از اهمیت بسزایی برخوردار است. به عنوان یک مثال می‌توان به ناپدید شدن چگالی حالات بر روی سطح فرمی در فلزات در تقریب هارتری فوک اشاره کرد، که پوشش‌دهی دینامیکی را در نظر نمی‌گیرد. هنگامی که دستگاهی از الکترون‌ها به وسیله یک پتانسیل خارجی استاتیک مختل می‌شود، الکترون‌ها با بازآرایی خود، آرایش جدیدی

۱. Hole

۲. Excitonic effects

۳. Quasiparticle correction

۴. Effective Coulomb interaction

۵. Screening

۶. Exciton binding energy

۷. Localized electrons

مقدار را داشته و به سمت داخل نانونوار، از مقادیر آنها کاسته می‌شود. برهم‌کنش کولنی در عایق‌های با ابعاد پایین نظیر نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی، در فواصل کوتاه به طور ضعیفی پوشش داده شده و در فواصل بلند، پوشش داده نمی‌شود، که این مورد می‌تواند وجود تصحیحات شبه‌ذره‌ای قابل توجه در تقریب GW و همچنین انرژی پیوندی اکسیتونی بزرگ [۲۵] را در این دسته از نانونوارها، توضیح دهد.

۲. روش تحقیق

در این مقاله، ابتدا محاسبات ساختار الکترونی در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو^۳ انجام شده است. به منظور شبیه‌سازی نانونوار دسته‌مبلی سیلیسینی منزوی با طول نامتناهی، از یک سلول واحد اورتورومبیک^۴ نوع p و با ثابت شبکه^۵ ۳/۸۶ آنگستروم استفاده شده و فضای خالی^۵ ۲۰ آنگستروم میان سلول‌های واحد همسایه برای جلوگیری از برهم‌کنش میان نانونوارها و تصاویر دوره‌ای در نظر گرفته شده است. مطابق با بررسی‌های پیشین، نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی، به سه گروه $N_a = 3p, 3p+1, 3p+2$ تقسیم می‌شوند (N_a معرف تعداد اتم‌های سیلیکون موجود در راستای پهنای نانونوار) که ما برای پوشش آنها چهار نمونه را انتخاب نموده و بدین منظور در شکل ۱، سلول واحد نانونوارهای ASiNR - $N_a = 4, 5, 6, 7$ نشان داده شده است. در ابتدا همه مکان‌های اتمی و ثابت‌های شبکه بهینه‌سازی می‌شوند، به طوری که نیروی وارد بر هر اتم کمتر از مقدار 0.05 eV/\AA شود. همچنین انتخاب نقاط k با در نظرگیری ۴۰ نقطه بین نقاط Γ و X از منطقه بریلوئن و در جهت دوره‌ای نانونوار به صورت $(1 \times 1 \times 40)$ انجام پذیرفته است.

در بخش دوم به منظور به دست آوردن کمیت‌های برهم‌کنش کولنی استتاری از اصول اولیه، باید محاسبات DFT و cRPA انجام گیرد. محاسبات مربوط به حالت پایه به صورت جداگانه توسط کد Fleur^۵ بر مبنای روش امواج تخت بهبود

گفت که کمیت U مربوط به محاسبه اثرات استتار جزئی بوده و کمیت W مربوط به اثرات استتاری کل الکترون‌هاست، که طبیعتاً انتظار مقدار کمتری برای کمیت W می‌رود. هر چقدر رسانش و قطبش‌پذیری در یک دستگاه بیشتر باشد، گذار الکترون‌ها و در نتیجه آن اثرات استتاری بیشتر نمود پیدا کرده و به طبع آن می‌توان انتظار مقادیر U و W کمتری را داشت. با محاسبه این مقادیر و اطلاع از نسبت U/t (پهنای نواری در اطراف انرژی فرمی بوده و از روی ساختار نواری قابل رؤیت است) می‌توان به میزان همبستگی موجود در دستگاه پی برده و از کارآمد بودن تقریب مورد استفاده برای دستگاه خود اطلاع حاصل نمود. اگر این نسبت کوچک‌تر از یک باشد، دستگاه دارای همبستگی ضعیفی است و اگر بیشتر از یک باشد، اثرات همبستگی در دستگاه قوی بوده و تقریب‌های تک ذره‌ای نظیر DFT نتایج درستی برای این دستگاه‌ها به دست نمی‌دهد [۳۴ و ۴۳]. در واقع همبستگی الکترونی، نشان دهنده برهم‌کنش میان الکترون‌ها در ساختار الکترونی یک دستگاه کوانتومی است و تعیین می‌کند که چه مقدار، حرکت یک الکترون، تحت تأثیر حرکت جمعی الکترون‌های دیگر موجود در شبکه قرار دارد. از این رو در ادامه به منظور بررسی نقش برهم‌کنش کولنی مؤثر در نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی، مقادیر کمیت‌های برهم‌کنشی درون-جایگاهی^۱ استتاری جزئی (U) و کامل (W)، با استفاده از تقریب فاز تصادفی مقید^۲ (cRPA) مورد محاسبه قرار گرفت. ابتدا این محاسبات برای گرافن و سیلیسین صورت پذیرفت، که مقادیر حاصل تطابق خوبی را با نتایج گزارش شده قبلی نشان می‌دهد [۳۵]. نتایج حاصل از این محاسبات برای نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی نشان می‌دهد که کمیت‌های برهم‌کنش کولنی استتاری درون-جایگاهی در آنها، بیشتر از مقدار آن در سیلیسین اولیه بوده و به پهنای نانونوار بستگی دارد. همچنین نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که مقادیر این کمیت‌ها، برای اتم‌های موجود در لبه نانونوار به دلیل شدت اثرات محدودیت کوانتومی مؤثر بر پوشش‌دهی الکترونی، بیشترین

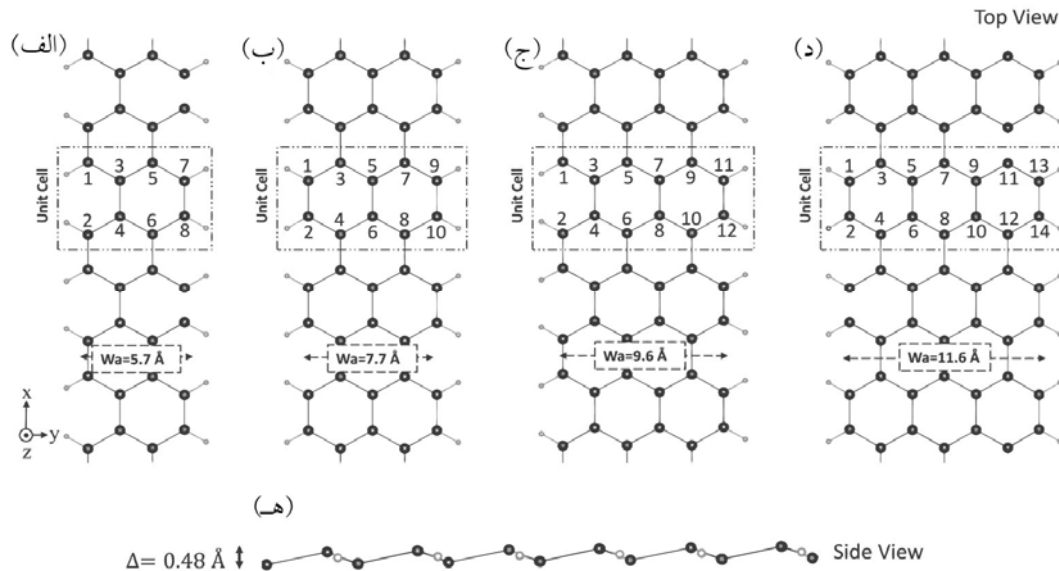
۳. www.quantum-espresso.org

۴. Orthorhombic

۵. www.flapw.de

۱. On-site

۲. Constrained random-phase approximation



شکل ۱. نمای بالا از نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی: (الف) $N_a = 4 - \text{ASiNR}$ ، (ب) $N_a = 5 - \text{ASiNR}$ ، (ج) $N_a = 6 - \text{ASiNR}$ ، (د) $N_a = 7 - \text{ASiNR}$. N_a معرف تعداد اتم‌های سیلیکون موجود در راستای پهنای نانونوار. مستطیل خط چین معرف سلول واحد اولیه، W_a پهنای نانونوار برحسب آنگستروم و جهت دوره‌ای در راستای محور x است. (ه) نمای کناری نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی با ضریب خمش Δ .

انجام محاسبات crPA در تعیین کمیت‌های برهم‌کنش کولنی مؤثر، استفاده می‌شود. کد Spex یک کد محاسباتی بر پایه نظریه اختلال بس‌ذره‌ای بوده، که از روش تمام الکترونی امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل استفاده می‌کند و این باعث فراهم شدن مجموعه پایه‌های دقیقی برای بررسی انواع مواد خواهد شد. اگر بخواهیم سازوکار محاسبه کمیت‌های برهم‌کنش کولنی مؤثر را در اینجا به طور خلاصه تشریح کنیم، از این قرار خواهد بود که در ابتدا با توجه به نوع الکترون‌ها، فضای هیلبرت تک‌ذره به دو قسمت r و z تقسیم شده و آنها را زیرفضاهای r و z می‌نامیم. این زیرفضاها به وسیله یک مجموعه از توابع واینر حداکثر موضعی (MLWFs) ساخته شده و با رابطه زیر معرفی می‌شوند،

$$\omega_{nR}^{\sigma}(r) = \frac{1}{N} \sum_k e^{-ik \cdot R} \sum_m T_{R, mn}^{\sigma}(k) \phi_{km}^{\sigma}(r), \quad (1)$$

که در آن N تعداد نقاط k ، $T_{R, mn}^{\sigma}$ ماتریس تبدیل واحد، ϕ_{km}^{σ} حالت‌های تک‌ذره کوهن-شم اسپین σ ، m نمایه نوارها و R بردارهای مکان اتمی در سلول واحد هستند. در چارچوب تقریب فاز تصادفی (RPA)، تابع قطبش به صورت زیر تعریف

یافته خطی با پتانسیل کامل^۱ (FLAPW) به عنوان یک روش ساختار نواری دقیق انجام می‌شود، که از تقریب گرادینان تعمیم یافته^۲ (GGA) برای تعیین سهم انرژی تبادل همبستگی^۳ استفاده می‌کند. در ورودی کد Fleur از یک عدد قطع اندازه حرکت خطی $G_{\max} = 4 \text{ bohr}^{-1}$ برای امواج تخت و اندازه حرکت زاویه‌ای $L_{\max} = 8$ در کره‌های مافین تین^۴، استفاده شده است. در این قسمت از یک مش‌بندی نقاط $K(1 \times 1 \times 16)$ و $(1 \times 16 \times 16)$ برای سلول واحد نانونوار دسته‌مبلی سیلیسینی و سیلیسین اولیه استفاده شده است. توابع واینر حداکثر موضعی^۵ (MLWFs) با استفاده از کد Wannier90 ساخته می‌شوند [۴۰] و [۴۱]. در نهایت عناصر ماتریس برهم‌کنش کولنی استتار شده با استفاده از کد Spex مبتنی بر تقریب crPA و از پایه‌های ترکیب شده با مقادیر عدد قطع $G_{\max} = 3 \text{ bohr}^{-1}$ و $L_{\max} = 4$ محاسبه می‌شود. در واقع محاسبات DFT انجام شده با کد Fleur، به عنوان یک ورودی برای کد Spex [۳۶-۳۸] به منظور

۱. Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave Method

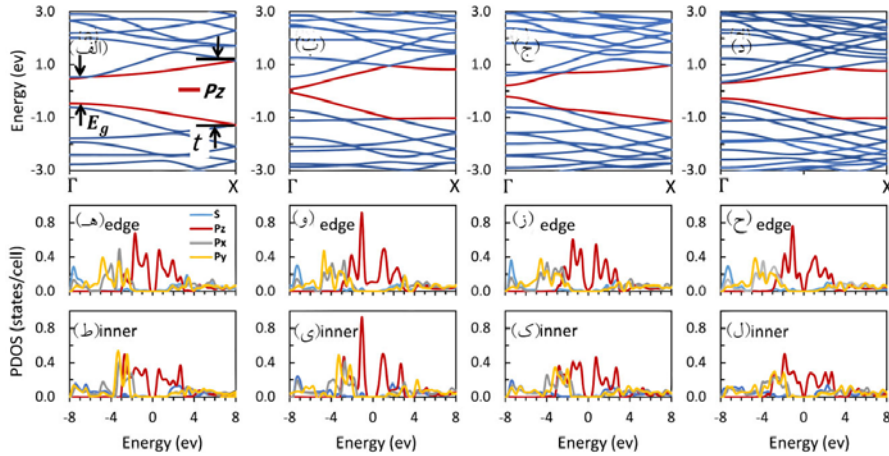
۲. Generalized gradient approximation

۳. Exchange-correlation energy

۴. Muffin-tin

۵. Maximally localized Wannier function

۶. Subspace



شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) (الف) تا (د) ساختار نواری، (ه) تا (ح) چگالی حالات تصویر شده (pdos) اتم‌های سیلیکون لبه و درون نانونوارهای به ترتیب $N_a = 4, 5, 6, 7$ - ASiNR.

نمود، که در آن پوشش‌دهی تمام الکترون‌ها در نظر گرفته خواهد شد ($P=P_z+P_r$).

$$W = [1 - vP]^{-1} v = [1 - UP_z]^{-1} USA, \quad (4)$$

کمیت U غیرموضعی بوده و با توجه به قطبش $P_r(r, r'; \omega)$ ، یک کمیت وابسته به بسامد است. عناصر ماتریس کولنی U در پایه توابع وانیر حداکثر موضعی (MLWF)، به صورت زیر تعریف خواهند شد،

$$U_{Rn \setminus n' \setminus n''}^{\sigma_1 \sigma_2} ; n \setminus n'' (\omega) = \omega_{n'R}^{\sigma_1} (r) \omega_{n''R}^{\sigma_2} (r) U(r, r'; \omega) \times \omega_{n''R}^{\sigma_2} (r') d^3 r d^3 r' \quad (5)$$

با توجه به این موارد، عناصر ماتریس کولنی مؤثر میانگین به وسیله رابطه زیر تعریف می‌شود، که در آن L تعداد اربیتال‌های موضعی بوده و به عنوان مثال دارای مقدار یک برای اربیتال P_z است.

$$U = 1/L \sum_m U_{Rmm}^{\sigma_1 \sigma_2} ; mm ; n \setminus n'' (\omega = 0), \quad (6)$$

۳. نتایج و بحث

در ابتدا ساختار الکترونی نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی به ازای پهناهای مختلف مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاصل از محاسبات LDA نشان دهنده وجود یک گاف نواری مستقیم در آنها است، که با افزایش پهنا نانونوار کاهش می‌یابد. در شکل ۲ (الف) تا (د) چهار نمونه از نتایج ساختار نواری

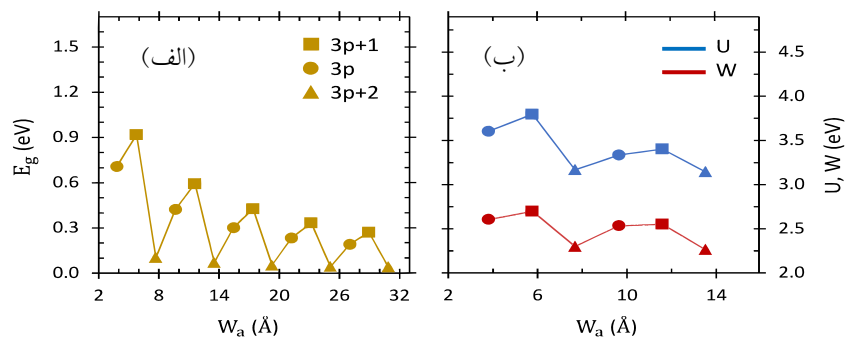
می‌شود، که در آن $\Delta_{km \cdot k'm'}^{\sigma} = f_{k'm'}^{\sigma} - f_{km}^{\sigma} - i\delta$ و $\in \sigma_{km}$ ویژه مقادیر کوهن-شم هستند،

$$P(r r'; \omega) = \sum_{\sigma} \sum_{k \setminus m} \sum_{k' \setminus m'}^{\text{occunocc}} \phi_{km}^{\sigma} (r) \phi_{k'm'}^{\sigma*} (r) \phi_{km}^{\sigma*} (r') \phi_{k'm'}^{\sigma} (r') \times \left[\frac{1}{\omega - \Delta_{km \cdot k'm'}^{\sigma}} - \frac{1}{\omega + \Delta_{km \cdot k'm'}^{\sigma}} \right], \quad (2)$$

ایده اساسی تقریب فاز تصادفی مقید (CRPA)، محاسبه برهم‌کنش کولنی مؤثر میان الکترون‌های موضعی (همبسته)، با استفاده از محدودسازی فرایندهای پوشش‌دهی که به طور صریح در هامیلتونی تأثیرگذار نیستند، است. برای این منظور، ماتریس قطبش کامل P به دو بخش تقسیم شده ($P=P_z+P_r$)، که در آن فقط شامل گذارهای میان حالت‌های P_z و P_r بقیه گذارها را در محاسبه برهم‌کنش کولنی مؤثر، شامل می‌شود. با این توصیفات، برهم‌کنش کولنی مؤثر، به وسیله معادله زیر تعریف خواهد شد،

$$U = [1 - vP_r]^{-1} v, \quad (3)$$

که در آن v ، برهم‌کنش کولنی ساده است. با استفاده از رابطه بالا می‌توان برهم‌کنش کولنی مؤثر میان الکترون‌های موجود در زیرفضای z یا همان کمیت U هابارد را محاسبه نمود و می‌توان برهم‌کنش کولنی استتاری کامل را نیز به وسیله رابطه زیر تعیین



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) روند تغییرات (الف) انرژی گاف نواری و (ب) کمیت‌های برهم‌کنش کولنی مؤثر میانگین U و W به ازای پهناهای متفاوت.

کوانتوم اسپرسو محاسبه شد. با توجه به این نمودار، اربیتال P_z اتم‌های موجود در لبه، سهم بیشتری را در چگالی حالات نسبت به اتم‌های درونی، در اطراف انرژی فرمی دارند. بنابراین می‌توان گفت، نوارهای اطراف انرژی فرمی در نمودار ساختار نواری شکل ۲ (الف) تا (د)، مربوط به اربیتال‌های P_z اتم‌های سیلیکون موجود در لبه و داخل نانونوار هستند. در واقع پیوندهای Si-Si موجود در لبه نانونوار به عنوان یک پتانسیل اختلالی درون جایگاهی در جهت انتقال الکترونی عمل کرده و از اثرات محدودیت کوانتومی در راستای پهناهای نانونوار اثر می‌پذیرند [۴۳].

در ادامه مقادیر کمیت‌های برهم‌کنش کولنی استتاری جزئی (U) و کامل (W)، برای سیلیسین و نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی مورد بررسی قرار خواهد گرفت. در واقع هدف، تعیین شدت مؤثر برهم‌کنش کولنی عمل‌کننده بر روی الکترون‌های اربیتال P_z اتم‌های سیلیکون موجود در شبکه است. می‌توان گفت مقادیر کمیت‌های برهم‌کنش مؤثر U و W به شدت اثرات استتاری الکترون‌های درونی و ظرفیت بستگی داشته و هر چقدر برهم‌کنش کولنی دو الکترون قرار گرفته در یک جایگاه، بیشتر پوشش یا استتار شود، مقادیر این کمیت‌ها بیشتر کاهش خواهد یافت. در جدول ۱ می‌توان مقادیر محاسبه شده کمیت‌های E_g ، W ، U ، V و $\frac{U}{t}$ را برای گرافن، سیلیسین و چهار نمونه از نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی و همچنین نتایج گزارش شده پیشین را به منظور مقایسه مشاهده نمود. با توجه به جدول ۱، با تغییر الگوی سیلیسین به سمت نانونوارهای

نانونوارهای $ASiNR$ - $N_a = 4, 5, 6, 7$ نمایش داده شده، که در همه آنها بیشینه نواری ظرفیت و کمینه نواری رسانش از هم فاصله گرفته و گاف نواری مستقیمی را در نقطه Γ از منطقه بریلون ایجاد نمودند. همچنین در شکل ۳ (الف) می‌توان روند تغییرات انرژی گاف نواری را به ازای پهناهای متفاوت مشاهده نمود، که از یک رفتار نوسانی با الگوی دوره‌ای $E_g(3p+1) > E_g(3p) > E_g(3p+2)$ پیروی می‌کنند (p عدد صحیح مثبت)، که معرف سه گروه مختلف از این دسته از نانونوارها، مشابه نانونوارهای گرافنی است [۲۱ و ۲۲]. مطابق با نتایج، بیشترین مقادیر انرژی گاف نواری در نانونوارهای گروه $3p+1$ و کمترین آن مربوط به گروه $3p+2$ است. دلیل این تفاوت و رفتار نوسانی، نوع ساختار لبه‌ای و پهناهای متفاوت این نانونوارها با یکدیگر بوده، که این مورد باعث بروز اثرات محدودیت کوانتومی متفاوتی در آنها شده است. در واقع، اتم‌های سیلیکون با چهار الکترون ظرفیت در نوار مشارکت می‌کنند. سهم اربیتال‌های S در نزدیک سطح فرمی خیلی کوچک بوده و اربیتال‌های P_z هستند که نقش اصلی را ایفا می‌کنند. در نانونوارهای دسته‌مبلی، هر اتم سیلیکون با سه اتم پیوند داشته و اربیتال‌های P_z تمام اتم‌های سیلیکون لبه و داخل نانونوار، در حالت‌های بیشینه نوار ظرفیت و کمینه نوار رسانش سهم هستند. در شکل ۲ (ه) تا (ح) نمودار چگالی حالات تصویر شده^۱ که نحوه توزیع چگالی حالات را در اطراف انرژی فرمی برای هر یک از اربیتال‌های اتمی نشان می‌دهد، را می‌توان دید، که با استفاده از بسته محاسباتی

۱. Projected density of states

جدول ۱. کمیت‌های برهم‌کنش کولنی استتاری درون- جایگاهی محاسبه شده برای گرافن، سیلیسین و نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی $N_a = 4, 5, 6, 7 - ASiNR$ و مقایسه با مقادیر گزارش شده پیشین.

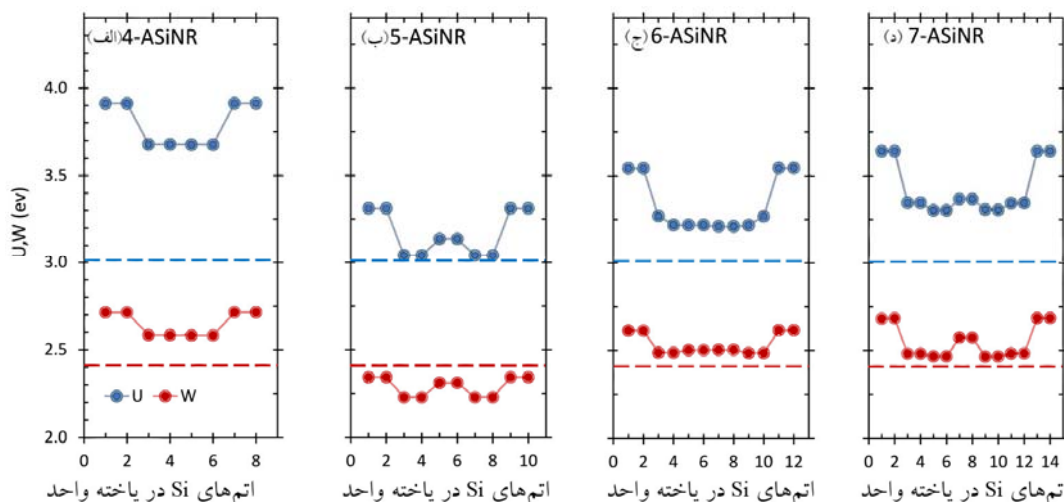
U/t	E_g -LDA (eV)	E_g -LDA-Calculated (eV)	W cRPA (eV)	W cRPA-Calculated (eV)	U cRPA (eV)	U cRPA-Calculated (eV)	V bare (eV)	V bare-Calculated (eV)	
۰٫۷۱	۰٫۰۰ [۴۲]	۰٫۰۰	۴٫۲ [۳۵]	۴٫۳	۸٫۷ [۳۵]	۸٫۸۰	۱۶٫۷ [۳۵]	۱۷٫۶۰	Graphene
۰٫۷۳	۰٫۰۰ [۴۲]	۰٫۰۰	-	۲٫۴۱	-	۳٫۰۱	-	۱۲٫۱۳	Silicene
۱٫۵۶	۰٫۹۵ [۳۹]	۰٫۹۲	-	۲٫۷۰	-	۳٫۷۹	-	۱۰٫۸۱	۴-ASiNR
۱٫۶۰	۰٫۰۹ [۳۹]	۰٫۱۰	-	۲٫۳۰	-	۳٫۱۷	-	۱۱٫۰۱	۵-ASiNR
۱٫۵۸	۰٫۴۶ [۳۹]	۰٫۴۲	-	۲٫۵۳	-	۳٫۳۳	-	۱۱٫۱۰	۶-ASiNR
۱٫۸۵	۰٫۵۷ [۳۹]	۰٫۵۹	-	۲٫۵۸	-	۳٫۴۵	-	۱۱٫۱۸	۷-ASiNR

نیمه‌رسانایی در آنها باید به کار بست. همچنین با افزایش پهنای نانونوار، به دلیل کاهش انرژی گاف نواری و در نتیجه آن افزایش اثرات استتاری، مقادیر کمیت‌های برهم‌کنش کولنی مؤثر روند کاهشی را نشان می‌دهند. در شکل ۳ می‌توان روند این تغییرات را به ازای نانونوارهای با پهنای مختلف، به خوبی مشاهده نمود، که مطابق با روند کاهشی انرژی گاف نواری در آنها است.

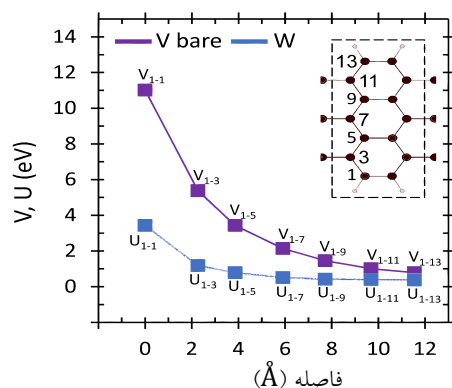
مطابق با این نمودار، کمترین و بیشترین مقادیر U و W ، به ترتیب مربوط به نانونوارهای گروه $3p+2$ و $3p+1$ است. این رفتار نوسانی مشابه با تغییرات انرژی گاف نواری، ناشی از سه نوع متفاوت از نانونوارهای دسته‌مبلی و اثرات محدودیت کوانتومی متفاوت در آنها است. علاوه بر این، به منظور مشاهده روند تغییرات کمیت‌های برهم‌کنش کولنی استتاری به ازای هر یک از اتم‌های موجود در راستای پهنای نانونوارهای $N_a = 4, 5, 6, 7 - ASiNR$ ، در شکل ۴ نشان داده شده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که مقادیر کمیت‌های برهم‌کنش کولنی مؤثر U و W برای اتم‌های سیلیکون موجود در لبه نانونوار نسبت به نواحی درونی، به ازای پهنای مختلف بیشتر بوده و به سمت داخل نانونوار، از مقادیر آنها کاسته می‌شود، که نشان دهنده پوشش‌دهی کمتر برهم‌کنش کولنی در لبه‌های نانونوار است. در واقع در لبه‌های نانونوار و نواحی نزدیک به آن اثرات محدودیت کوانتومی شدیدتر بوده و این قضیه باعث بروز اثرات همبستگی قوی در این نواحی شده است. این موضوع را می‌توان از مقادیر U و W بیشتر در لبه‌های

دسته‌مبلی، کمیت‌های برهم‌کنش کولنی استتاری در مقایسه با سیلیسین اولیه افزایش می‌یابند. در واقع، در مواد با ابعاد پایین، کاهش عدد هم‌آرایی اتم‌های سطحی را خواهیم داشت، که در نتیجه آن پوشش‌دهی برهم‌کنش کولنی دو الکترون قرار گرفته در یک جایگاه توسط الکترون‌های دیگر، نسبت به مواد حجمی کمتر شده و منجر به افزایش مقادیر کمیت‌های برهم‌کنش کولنی مؤثر خواهد شد. با توجه به جدول ۱ مقادیر حاصله برای گرافن تقریباً نزدیک به دو برابر سیلیسین است. می‌توان گفت، هر چقدر دستگاه هدایت الکتریکی بیشتری داشته باشد، اثرات استتاری بیشتر نمود پیدا کرده و مقدار کمیت برهم‌کنش کولنی ساده V بیشتر کاهش می‌یابد. ولی در مورد گرافن و سیلیسین، با توجه به گاف نواری کوچک سیلیسین این تفاوت چندان قابل توجه نیست. با این وجود دلیل اصلی این تفاوت زیاد در مقادیر کمیت‌های برهم‌کنشی استتاری، به تعداد الکترون‌های درونی^۱ بیشتر اتم‌های سیلیکون سازنده سیلیسین نسبت به اتم‌های کربن سازنده گرافن بر می‌گردد، که در نتیجه آن تعداد الکترون‌های بیشتری، دو الکترون قرار گرفته در درون یک جایگاه را استتار کرده و برهم‌کنش مؤثر بین آنها را بیشتر کاهش می‌دهند. از طرفی، نسبت U/t که میزان همبستگی موجود در دستگاه را مشخص می‌کند [۳۴]، در گرافن و سیلیسین نزدیک به یک و در نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی بیشتر از یک بوده (جدول ۱)، که نشان دهنده اهمیت اثرات همبستگی الکترونی در آنها است. بنابراین تقریب‌های دقیق‌تری را برای توصیف بهتر رفتار

۱. Core electron



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) کمیت‌های برهم‌کنش کولنی استتاری کامل (U) و جزئی (W) برای الکترون‌های اربیتال P_z اتم‌های سیلیکون نانونوارهای دسته‌مبلی (الف) ۴-ASiNR، (ب) ۵-ASiNR، (ج) ۶-ASiNR، (د) ۷-ASiNR. خطوط خط‌چین معرف مقادیر این کمیت‌ها برای سیلیسین اولیه است.



شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) کمیت‌های برهم‌کنش استتاری جزئی U_{1-n} و خالص V_{1-n} برای الکترون‌های P_z اتم‌های سیلیکون در نانونوار ۷-ASiNR بر اساس تابعی از فاصله جدایی اتم‌ها در امتداد محور y . شکل کوچک داخل نمودار، معرف سلول واحد نانونوار ۷-ASiNR است، که اتم‌ها در راستای پهنای نانونوار شماره‌گذاری شده‌اند.

آنها شاهد هستیم، که منجر به بروز اثرات اکسیتونی و شبه‌ذره‌ای قابل توجهی در آنها شده است [۲۵]. بنابراین ما عناصر ماتریس برهم‌کنش استتاری غیرموضعی^۱ (برون-جایگاهی) جزئی U_{1-n} و خالص V_{1-n} را برای نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی محاسبه نموده، که در شکل ۵ به عنوان نمونه برحسب تابعی از فاصله جدایی اتم‌ها در امتداد محور y برای نانونوار ۷-ASiNR رسم شده است.

نانونوار نتیجه گرفت. می‌توان گفت وجود همبستگی بیشتر موجب کمتر شدن اثرات استتاری نسبت به نواحی درونی و در نتیجه مقادیر بیشتر U و W در لبه‌های نانونوار شده است. در انتها، در مورد برهم‌کنش کولنی غیرموضعی بلندبرد در نانونوارهای سیلیسین بحث خواهیم نمود. پوشش‌دهی برهم‌کنش کولنی در ابعاد پایین و عایق‌های با اندازه محدود، نظیر سیلیسین، فلئوروسیلیسین و نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی غیرمعمول بوده و برهم‌کنش کولنی قابل توجهی را در

۱. Non-local (off-site) interactions matrix elements

لبه‌ای و پهنای متفاوت این نانونوارها با یکدیگر بوده، که این مورد باعث بروز اثرات محدودیت کوانتومی متفاوتی در آنها شده است.

در ادامه، شدت برهم‌کنش کولنی مؤثر را برای الکترون‌های اربیتال P_z اتم‌های سیلیکون نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی، با استفاده از محاسبات اصول اولیه مرتبط با تقریب فاز تصادفی مقید، تعیین نمودیم. مقادیر عناصر ماتریس کولنی در این نانونوارها، نسبت به سیلیسین اولیه بیشتر بوده و همچنین با افزایش پهنای نانونوار، روند کاهشی با یک الگوی دوره‌ای مشابه انرژی گاف نواری را نشان می‌دهند. از طرفی، مقادیر قابل توجه کمیت‌های برهم‌کنش کولنی درون-جایگاهی، نشان دهنده قوی بودن اثرات همبستگی الکترونی در نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی است. مطابق با نتایج به دست آمده، به دلیل شدت بیشتر اثرات محدودیت کوانتومی مؤثر بر اثرات استتاری در لبه‌های نانونوار، مقادیر کمیت‌های برهم‌کنش کولنی استتاری به ازای اتم‌های موجود در این ناحیه، نسبت به نواحی درونی نانونوار افزایش داشته است. در پایان نیز با توجه به مقادیر کمیت‌های U برون‌جایگاهی قابل توجه در نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی، ناشی از پوشش‌دهی غیرمعمول، می‌توان وجود تصحیحات شبه‌ذره‌ای در تقریب GW و انرژی پیوندی اکسیتونی بزرگ را در آنها توجیه نمود.

با توجه به نتایج به دست آمده، مقادیر کمیت‌های U برون‌جایگاهی مربوط به نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی، به دلیل اثرات محدودیت کوانتومی و به موجب آن پوشش‌دهی غیرمعمول، قابل توجه است، که این قضیه توافق خوبی با اثرات اکسیتونی قوی و تصحیحات GW قابل توجه مشاهده شده در نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی دارد [۲۵]. برهم‌کنش کولنی در فواصل کوتاه، به طور ضعیف پوشش داده شده و در فواصل دورتر در حدود ۱۲ آنگستروم پوشش داده نمی‌شود. بنابراین می‌توان گفت، تصحیحات شبه‌ذره‌ای بزرگ و انرژی پیوندی اکسیتونی قابل توجه به دست آمده در مطالعات پیشین در نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی، به پوشش‌دهی غیرمعمول برهم‌کنش کولنی در فواصل زیاد، بستگی دارد. نتایج برای دیگر نانونوارها، مشابه با نانونوار ذکر شده است.

۴. نتیجه‌گیری

به طور خلاصه، در ابتدا ساختار الکترونی نانونوارهای دسته‌مبلی سیلیسینی، با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان‌دهنده وجود یک گاف نواری مستقیم در آنها است، که با افزایش پهنای نانونوار، به صورت نوسانی و با یک الگوی دوره‌ای $E_g(3p+1) > E_g(3p) > E_g(3p+2)$ کاهش می‌یابد. دلیل این تفاوت و رفتار نوسانی نوع ساختار

مراجع

11. S Cahangirov *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 236804.
12. J Yan, Sh P Gao, R Stein, and G Coard, *Phys. Rev. B* **91** (2015) 245403.
13. N D Drummond, V Zolyomi, and V I Falko, *Phys. Rev. B* **85** (2012) 075423.
14. Z G Shao *et al.*, *J. Appl. Phys.* **114** (2013) 093712.
15. H Li *et al.*, *Eur. Phys. J. B* **85** (2012) 274.
16. C C Liu, W Feng, and Y Yao, *Phys. Rev. Lett.* **107** (2011) 076802.
17. P Padova *et al.*, *Nano Lett.* **12**, 11 (2012) 55005503.
18. G He, *Phys. Rev. B* **73** (2006) 035311.
19. M Ezawa and N Nagaosa, *Phys. Rev. B* **88** (2013) 121401.
20. S Cahangirov, M Topsakal, and S Ciraci. *Phys. Rev. B* **81** (2010) 195120.
1. A K Geim and K S Novoselov, *Nature Mater* **6** (2007) 183.
2. S D Sarma *et al.*, *Special Issue of Solid State Commun.* **143** (2007) 1.
3. G G Guzman-Verri and L L Y Voon, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 075131.
4. B Lalmi *et al.*, *Applied Physics Letters* **97** (2010).
5. P Vogt *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 155501.
6. Y Yamada-Takamura, and R Friedlein, *Science and Technology of Advanced Materials* **15** (2014) 064404.
7. A Fleurence *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 245501.
8. L Chen *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **109** (2012) 056804.
9. B Feng *et al.*, *Nano Lett.* **12** (2012) 3507.
10. L Meng *et al.*, *Nano Lett.* **13** (2013) 685.

- 83 (2011) 121101.
35. E Şaşıoğlu *et al.*, *Phys. Rev. B* **95** (2017) 060408.
36. C Friedrich, A Schindlmayr, and S Blügel, *Computer Physics Communicaons* **180** (2009) 347.
37. C Friedrich, S Blügel, and A Schindlmayr, *Phys. Rev. B* **81** (2010) 125102.
38. E Şaşıoğlu *et al.*, *Phys. Rev. B* **81** (2010) 054434.
39. S M Aghaei and I Calizoa, *Journal of Applied Physics* **118** (2015) 104304.
40. A A Mostofi *et al.*, *Comput. Phys. Commun.* **178** (2008) 685.
41. F Freimuth *et al.*, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 035120.
42. P Miro, A Martha, and T Heine, *Chem. Soc. Rev.* **43** (2014) 6537.
۴۳. ف باقرپور، «مطالعه اثرات همبستگی قوی در ترکیبات سیلیسن با استفاده از تقریبات بس‌ذره‌ای»، پایان‌نامه کارشناسی ارشد فیزیک، دانشگاه گیلان (۱۳۹۵).
21. S Cahangirov *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 236804.
22. Y Ding and J Ni, *Appl. Phys. Lett.* **95** (2009) 083115.
23. L Ma, J M Zhang, K W Xu, and V Ji, *Physica B* **425** (2013) 6671.
24. Q G Jiang *et al.*, *J. Mater. Chem. C* (2015) 3954.
25. W Wei and T Jacob, *Phys. Rev. B* **88** (2013) 045203.
26. K F Mak, J Shan, and T F Heinz, *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011) 046401.
27. W Wei and T Jacob, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 165444.
28. W Wei and T Jacob, *Phys. Rev. B* **87** (2013) 085202.
29. P Cudazzo *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **104** (2010) 226804.
30. M Bockstedte, A Marini, O Pankratov, and A Rubio, *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010) 026401.
31. L Wirtz, A Marini, and A Rubio, *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006) 126104.
32. D Prezzi *et al.*, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 041404.
33. L Yang, M L Cohen, and S G Louie, *Phys. Rev. Lett.* **101** (2008) 186401.
34. E Şaşıoğlu, C Friedrich, and S Blügel, *Phys. Rev. B*