

Study of the Influence of Structural Defects on Mechanical and Electrical Properties of β_{12} Borophene

Rana Alizadeh Vajary¹, Sahar Izadi Vishkayi^{1,2}, and Meysam Bagheri Tagani ^{*,1}

¹ Department of Physics, Computational Nanophysics Laboratory (CNL), University of Guilan, Rasht, Iran

² School of Nano Science, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), Tehran, Iran

Received: 11.12.2017 Final revised: 07.05.2019 Accepted: 26.06.2019

Doi: [10.22055/JRMBS.2019.14904](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2019.14904)

Abstract

Borophene is a monolayer of boron atoms with many allotropes. The electrical and mechanical properties of β_{12} borophene are investigated using density functional theory. β_{12} borophene has an orthorhombic lattice with five boron atoms in a unit cell. We calculated the critical strain and ultimate stress of the sheet. The calculated critical strain is 0.18% in the x-direction with the ultimate stress of 18.87 N/m while the critical strain is 10% and 12% for uniaxial strain along y and the biaxial strain, respectively. Young's modulus of the sheet is 180 N/m in the x-direction and 203 N/m along the y one. Structural defects reduce the mechanical ability of the sheet, and this reduction is strongly dependent on the position of the removed atoms and their density.

Keywords: density functional theory, β_{12} borophene, critical strain, ideal strength, Young's modulus

* Corresponding Author: m_bagheri@guilan.ac.ir



مطالعه تأثیر نقص ساختاری بر خصوصیات مکانیکی و الکترونی بورفین

 β_{12} رعنا علیزاده واجاری¹، سحر ایزدی ویشکایی^{1,2}، میثم باقری تاجانی^{1*}¹گروه فیزیک، آزمایشگاه محاسباتی نانو، دانشکده علوم پایه، دانشگاه گیلان، ایران²پژوهشکده علوم نانو، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی، تهران، ایران

دریافت: 1396/09/20 ویرایش نهایی: 1398/02/17 پذیرش: 1398/04/05

Received: 11.12.2017 Final revised: 07.05.2019 Accepted: 26.06.2019

Doi: [10.22055/JRMBS.2019.14904](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2019.14904)

چکیده

بورفین ساختار دو بعدی بورن است که خود نیز تنوع ساختاری بسیار زیادی دارد. در این مقاله ساختار بورفین β_{12} و خواص مکانیکی و الکترونی آن مورد بحث قرار می‌گیرد. بورفین β_{12} یک ساختار مکعب مستطیلی با تعداد 5 اتم در سلول واحد می‌باشد. در این مقاله خواص مکانیکی و الکترونی ورقه بورفین بدون نقص و ورقه بورفین دارای دررفتگی با کمک نظریه تابعی چگالی مورد مطالعه قرار می‌گیرد و کرنش بحرانی و تنش نهایی ساختار محاسبه می‌شود. مقدار کرنش بحرانی در راستای X برابر با 18% و تنش نهایی آن 18/87 N/m شد که این مقدار حداکثر کششی است که جسم مورد نظر می‌تواند تحمل کند و مقدار کرنش بحرانی برای راستای تک محوری Y و دو محوری X-Y به ترتیب برابر 10% و 12% و تنش نهایی آنها نیز 14/82 N/m و 17/46 N/m به دست آمدند. همچنین ضریب یانگ در راستای X برابر با 180 N/m و در راستای Y برابر با 203 N/m محاسبه شدند. بررسی ما نشان می‌دهد که دررفتگی باعث کاهش قابلیت مکانیکی می‌شود و این کاهش به نوع و مکان اتم حذف شده به شدت وابسته است.

کلیدواژه‌گان: محاسبات اصول اولیه، بورفین β_{12} ، کرنش بحرانی، تنش نهایی، ضریب یانگ

مقدمه

الکترون‌های بی‌جرم و فرمیون‌های دیراک، در آن گردیده است، انقلابی بزرگ در دنیای ماده چگال ایجاد نمود. کشف گرافن راه را برای بررسی نظری و تجربی به منظور یافتن مواد دو بعدی جدید باز نمود که این اتفاق منجر به سنتز موفقیت آمیز سلیکون دو بعدی، سیلیسن [5]، ژرمانیوم دو بعدی، ژرمانن [6]، و قلع دو بعدی، استانن [7]، گردید. به تازگی عضوی جدید به خانواده مواد دو بعدی تک عنصره اضافه گردیده است که بر خلاف مواد قبلی به ستون سوم جدول

کشف گرافن در سال 2004 به عنوان یک ماده دو بعدی، دنیای جدیدی را در فیزیک ماده چگال آشکار نمود [1]. گرافن به سبب ویژگی‌های ممتاز خود از جمله رسانش الکترونی بالستیک [2]، رسانندگی گرمایی بالا [3] و سختی زیاد [4]، توجه بسیار زیادی را به خود جلب کرده است. علاوه بر این، وجود ساختار نواری خطی در مجاورت تراز فرمی که منجر به ظهور

*نویسنده مسئول: M_bagheri@guilan.ac.ir

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

این مقاله تحت مجوز کربنیو کامنز تخصصی 4.0 بین‌المللی می‌باشد



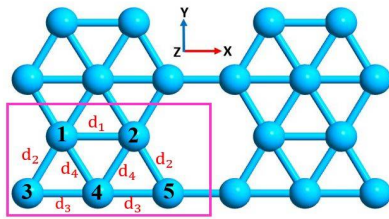
مندلیف اختصاص دارد. بورفین یک ورقه دو بعدی از اتم‌های بورن است که به تازگی توسط دو گروه مستقل سنتز شده است [9 و 8]. نتایج ارائه شده در این کارها یک واقعیت عجیب و جالب را نمایان می‌کند. در اینجا، ما با ماده‌ای سر و کار داریم که بر خلاف نمونه‌های قبلی دارای ساختار اتمی یکسان و بی‌همتایی نیست. نتایج تجربی گزارش شده حکایت از سنتز حداقل سه فاز متفاوت از بورفین دارد. سه فاز که شامل فاز نواری موسوم به $2Pmmn$ ، فاز χ_3 و فاز β_{12} می‌باشد. نکته جذاب در گزارشات اولیه از نتایج سنتز این است که بر خلاف دو فاز آخر، فاز نواری دارای کمی برآمدگی است به طوری که ساختار کاملاً هموار ندارد.

در دو سال گذشته تحقیقات متنوعی بر روی خصوصیات الکتریکی، مکانیکی، و مغناطیسی ورقه‌های بورفین صورت گرفته است [10-14] و نتایج نشان داده است که ورقه‌های بورفین دارای قابلیت مکانیکی ناهمسانگرد می‌باشند [10]. علاوه بر این، ما نشان دادیم که ناهمسانگردی در رفتار الکتریکی این ورقه‌ها نیز به خوبی قابل مشاهده است [11]. علاوه بر این، قابلیت این مواد برای استفاده در باتری‌های شارژ پذیر لیتیومی مورد کنکاش قرار گرفته است [12]. ابرسانایی در این ورقه‌های دو بعدی هم موضوع جذاب دیگری است که محققین بررسی‌هایی روی آن انجام داده‌اند [13]. ما به تازگی نشان داده‌ایم که نانو نوارهای این ماده از نظر مغناطیسی دارای رفتاری بسیار عجیب و جذاب هستند [15 و 14]. نتایج ما نشان می‌دهد که بعضی از این نانو نوارها دارای یک ناهمسانگردی اسپینی در آرایش لبه‌ها می‌باشند که این چنین رفتاری قبلاً در نانو نوارهای گرافنی مشاهده نشده بود. این ناهمسانگردی اسپینی نشان می‌دهد که بورفین مورد نظر می‌تواند در اسپینترونیک دارای کاربردهای بسیار مهمی باشد.

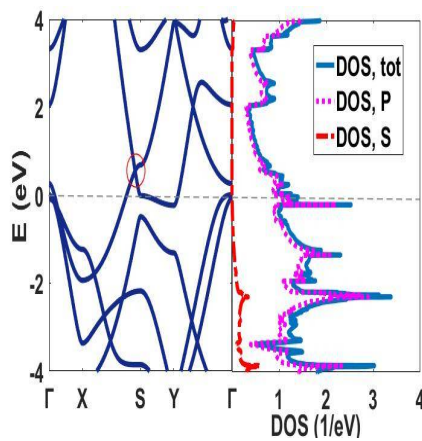
قابلیت مکانیکی ورقه‌های دو بعدی برای استفاده از آنها در صنعت الکترونیک بسیار حائز اهمیت است. در واقع، برای آنکه این مواد در صنعت مورد استفاده قرار بگیرند باید از استحکام مکانیکی قابل قبولی برخوردار باشند، به طوری که تنش ناشی از تفاوت در ثابت‌های شبکه ورقه دو بعدی و زیر لایه تأثیری مهم بر خصوصیات الکتریکی ورقه نگذارد. سنتز مواد دو بعدی فرآیندی پیچیده و سخت می‌باشد و به طور معمول، ماده حاصل از سنتز نمی‌تواند کامل و فاقد هر گونه نقصی باشد. از این رو، بررسی تأثیر نقص‌های نقطه‌ای یا دررفتگی‌ها بر رفتار مکانیکی و الکتریکی ورقه‌های دو بعدی دارای اهمیت فزاینده‌ای است. در این مقاله با کمک نظریه تابعی چگالی خصوصیات مکانیکی و الکتریکی ورقه‌های دو بعدی بورفین در فاز β_{12} را مورد کنکاش قرار می‌دهیم. با در نظر گرفتن مکان مختلف دررفتگی و چگالی مختلف برای توزیع دررفتگی، ضریب یانگ این ماده مورد بررسی قرار می‌گیرد. علاوه بر این، تأثیر این دررفتگی بر ساختار نواری و توزیع چگالی الکترون مورد مطالعه قرار خواهد گرفت. نتایج نشان می‌دهد که دررفتگی در بعضی از مکان‌ها بسیار مطلوبتر می‌باشد و تغییرات طول پیوند بین اتم‌ها به شدت به جهت نیروی اعمالی و تعداد پیوند بین اتم‌ها بستگی دارد. علاوه بر این، با کمک تابع جایگزیدگی الکترون به بررسی فیزیکی مشاهدات می‌پردازیم. بخش بعدی به ارائه روش محاسباتی اختصاص دارد. نتایج در بخش 3 بیان می‌گردد و در انتها چندین جمله به عنوان نتیجه‌گیری مطرح می‌شود.

روش محاسباتی

محاسبات با کمک نظریه تابعی چگالی و نرم‌افزار محاسباتی سیستا [16] انجام پذیرفته است. برای توصیف الکترون‌های هسته و برهم‌کنش‌های تبادلی-همبستگی از تقریب شیب تعمیم یافته با شیوه PBE [17] استفاده



شکل 1. ساختار ورقه بورفین β_{12} . سلول واحد آن به وسیله مستطیل مشخص شده است.



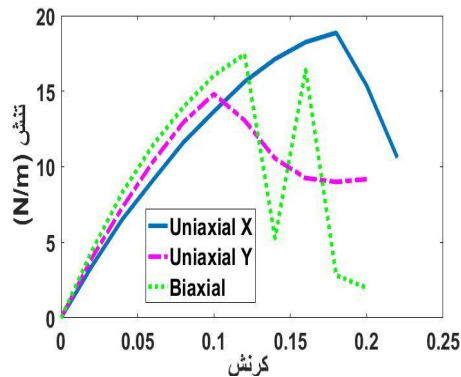
شکل 2. ساختار نواری و چگالی حالت‌ها نیز رسم گردیده است که نشان از فلز بودن ساختار دارد. تراز فرمی به عنوان صفر انرژی در نظر گرفته شده است.

برخلاف بورفین نواری، بورفین β_{12} یک فلز همسانگرد است، به طوری که نوارهای انرژی آن در مسیرهای مختلفی تراز فرمی را قطع کرده‌اند و رفتار فلزی در آن به خوبی مشاهده می‌گردد. در مورد بورفین نواری ما شاهد یک ناهمسانگردی الکتریکی می‌باشیم. به طوری که فقط در یک مسیر رفتار فلزی مشاهده می‌گردد [8]. سلول واحد ورقه بورفین مورد بررسی شامل 5 اتم بورن می‌باشد. ساختار سلول واحد به گونه‌ای است که می‌توان اتم‌های داخل آن را به سه دسته مختلف تقسیم نمود. این تقسیم‌بندی بر اساس تعداد پیوندهایی است که هر اتم با همسایه‌ها دارد. پیوند دو اتم با چهار پیوند، دو اتم با پنج پیوند و یک

شد. الکترون‌های ظرفیت با کمک پایه‌های محاسباتی DZP توصیف گردید. در این وضعیت هر اتم بورن توسط 13 اربیتال اتمی توصیف می‌گردد که این اربیتال‌ها از نوع s، p و d می‌باشند. انرژی قطع نیز برابر با 80 هارتری قرار داده شد. شرط همگرایی نیرو برابر با $0/0001 \text{ eV}/\text{\AA}$ انتخاب گردید. مقدار خلأ عمود بر صفحه بورفین برابر با 20 \AA انتخاب شد تا از برهم‌کنش یک ورقه با تصویر خود جلوگیری کنیم. ناحیه بریلوئن ورقه کامل با کمک $31 \times 41 \times 1$ نقطه مش‌بندی شد. برای بررسی نقش دررفتگی از شیوه ابرشبه استفاده نمودیم. در واقع با در نظر گرفتن ابرشبه‌هایی با ابعاد 2×2 ، 3×3 و 4×4 تأثیر دررفتگی را مورد مطالعه قرار دادیم. ابعاد مختلف ابرشبه هم‌ارز با چگالی‌های متفاوت برای غلظت دررفتگی در سامانه می‌باشد. کرنش به صورت $\frac{L-L_0}{L_0}$ تعریف می‌گردد که L_0 طول سلول واحد در راستای اعمال کرنش و قبل از اعمال آن و L اندازه آن پس از اعمال کرنش است. در محاسبه تنش، ما نتایج به دست آمده را در اندازه سلول واحد در راستای عمود بر ورقه ضرب کردیم و از این رو، واحد آن N/m می‌باشد.

نتایج

شکل 1 ساختار ورقه β_{12} ، ساختار نواری و چگالی حالت‌های آن را نشان می‌دهد. ثابت‌های شبکه برابر با $a = 5/15 \text{ \AA}$ و $b = 2/97 \text{ \AA}$ به دست آمد که مطابق با نتایج قبلی است [14 و 13، 9، 8]. ساختار نواری به وضوح نشان می‌دهد که بورفین مورد بررسی یک فلز است. علاوه بر این، مخروط دیراک در انرژی حدود 2 eV مشاهده می‌شود که با دایره قرمز نمایش داده شده است. وجود مخروط دیراک به تازگی در آزمایش انجام شده روی این ساختار تأیید گردیده است [18].



شکل 3. نمودار تنش برحسب کرنش بورفین β_{12} برای کرنش تک محوری و دو محوری، که در آن تنش نهایی با مستطیل در شکل مشخص شده است.

در ادامه به ازای کرنش‌های مختلف در راستاهای تک‌محوری X، Y و دو محوری X-Y مقدار تنش در هر راستا را برای ورقه کامل بورفین β_{12} به دست می‌آوریم و با کمک نمودار تنش برحسب کرنش که در شکل 3 رسم شده است مقدار تنش بحرانی، کرنش نهایی و همچنین ضریب یانگ (میزان سختی یک جسم) را محاسبه می‌کنیم. می‌دانیم با افزایش مقدار کرنش، مقدار تنش نیز افزایش پیدا می‌کند، زیرا این دو هم ارز هستند اما از یک مقدار مشخص کرنش، مقدار تنش کاهش می‌یابد که به آن نقطه، کرنش بحرانی و به تنش مد نظر، تنش نهایی می‌گویند. با کمک قسمت خطی نمودار تنش-کرنش، ضریب یانگ ساختار در شرایط مختلف محاسبه می‌گردد.

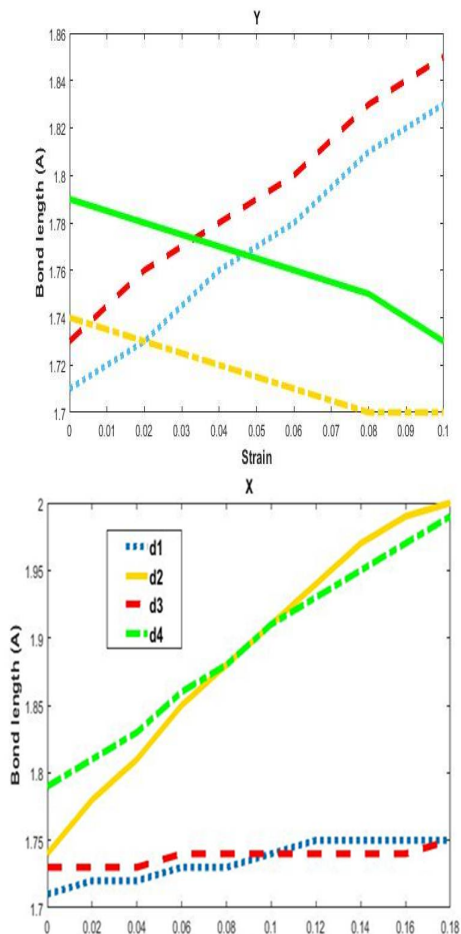
مقدار کرنش بحرانی برای راستای X برابر با 18% و استرس نهایی آن برابر با 18,87 N/m به دست آمد که این مقدار حداکثر کششی است که جسم مورد نظر می‌تواند تحمل کند. همچنین مقدار کرنش بحرانی برای راستای تک‌محوری Y و دو محوری X-Y به ترتیب برابر 10% و 12% و تنش نهایی آنها، به ترتیب، برابر با 14,82 N/m و 17,46 N/m به دست آمدند. در قیاس با مطالعات قبلی روی ساختار بورفین در فازهای

اتم با شش پیوند. می‌توان انتظار داشت که در مورد دررفتگی هم بیشترین تفاوت بین این سه دسته حائز اهمیت است.

در نمودار چگالی حالت (DOS) ورقه کامل بورفین β_{12} ، سهم ناشی از کل اتم‌های موجود در سلول واحد، برای تمام اربیتال‌ها را با خط و چگالی حالت کل اتم‌ها را فقط ناشی از اربیتال s و اربیتال p به ترتیب با خط چین و نقطه‌چین نشان می‌دهیم. طبق شکل 2، در نمودار ساختار نواری هر جا که تعداد نوارهای زیادتری وجود داشته باشد، در نمودار چگالی حالت آن، تعداد حالت بیشتری مشاهده می‌کنیم. قله‌های موجود در چگالی حالت‌ها معرف جایگزیدگی الکترون است. همان‌گونه که پیداست تعداد حالت‌های ناشی از اربیتال p خیلی بیشتر از اربیتال s است، چون اتم بورن دارای 5 الکترون می‌باشد ($2s^2 2s^2 1p^1$) و اربیتال p آن خالی است و الکترون‌ها در آن آزادی حرکت دارند. فلز بودن ساختار با توجه به صفر نشدن چگالی حالت‌ها در تراز فرمی (انرژی صفر) تأیید می‌گردد.

جدول 1. ضریب یانگ (Y) برحسب GPa.nm و انرژی بستگی (E) برحسب eV برای غلظت‌ها و مکان‌های مختلف در اتم بورن در شبکه بورفین.

اندازه ساختار	حذف اتم شماره 1			حذف اتم شماره 3			حذف اتم شماره 4		
	Y_x	Y_y	E	Y_x	Y_y	E	Y_x	Y_y	E
ابر شبکه 2x2	127	196	6,45	116	160	6,36	170	132	6,38
ابر شبکه 3x3	165	192	6,49	142	188	6,47	155	176	6,46
ابر شبکه 4x4	160	196	6,50	155	198	6,50	150	188	6,49



شکل 4. نمودار تغییر طول پیوند برحسب کرنش در راستای X و Y.

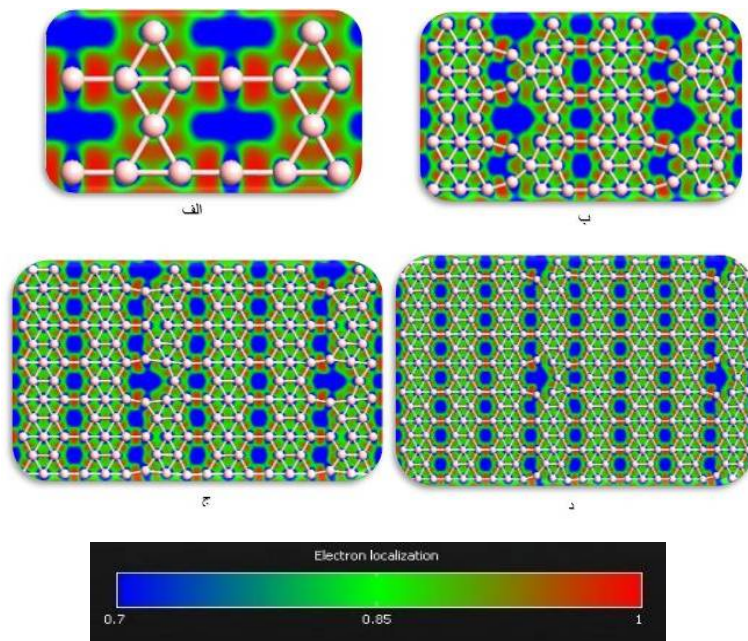
هرگاه ضریب یانگ در دو راستای X و Y با هم برابر نباشند، ناهمسانگردی ظاهر می‌شود. ناهمسانگردی نسبت ضریب یانگ کوچک‌تر به ضریب یانگ بزرگ‌تر در جهت X و Y است که عددی کوچکتر از یک به دست می‌آید. هرچه این عدد به یک نزدیک‌تر باشد ناهمسانگردی کم‌تر است. مطابق جدول 2 سختی ورقه کامل ابرشبه سه در سه بورفین β_{12} برابر 0,89 شد. که نشان می‌دهد ساختار مورد نظر از ساختارهایی دیگر مثل بورفین 8-Pmmn و بورفین نواری که به ترتیب برابر 0,79 و 0,43 هستند، ناهمسانگردی کمتری دارد و

مختلف می‌توان ادعا کرد که ناهمسانگردی مکانیکی کمتری در این ساختار در قیاس با فاز نواری مشاهده می‌گردد [8].

در این قسمت به بررسی ضریب یانگ بورفین در حضور دررفتگی تک اتم بورن می‌پردازیم. برای این کار ابر شبکه‌های 2×2 ، 3×3 و 4×4 را در نظر گرفته و یکی از اتم‌های شماره 1، 3 و یا 4 نشان داده شده در شکل 1 را حذف می‌کنیم. در واقع، سه غلظت دررفتگی متفاوت و برابر 5%، 2% و 1/25% را در نظر گرفتیم که چگالی احتمالی برای این نوع نقص‌های ذره‌ای است. برای محاسبه ضریب یانگ، کرنش در محدوده 2%- تا 2%+ با فاصله 0,005 اعمال گردید. جدول 1 مقدار ضریب یانگ به دست آمده به ازای غلظت‌های مختلف، نوع اتم دررفته و جهت را نشان می‌دهد. ضریب یانگ ورقه کامل بورفین را برای راستای X برابر با $Y_x = 180$ GPa.nm و برای راستای Y برابر با $Y_y = 203$ GPa.nm به دست آوردیم که تطابق خوبی با گزارش‌های قبلی دارد [18]. جدول 1 مقدار به دست آمده ضریب یانگ را در غلظت‌ها و مکان‌های مختلف دررفتگی نشان می‌دهد. آشکار است که غلظت و نوع اتم تأثیر شگرفی بر قابلیت مکانیکی ساختار دارد.

جدول 2. ضریب یانگ و سختی فازهای مختلف بورفین.

مختلف فازهای بورفین	Y_x (N/m)	Y_y (N/m)	سختی
بورفین β_{12}	180	202,67	0,89
بورفین 8Pmmn [19]	241,8	305,20	0,79
بورفین نواری [20]	389	166	0,43
بورفین χ_3 [21]	187,8	180,8	0,96



شکل 5. تابع جایگزیدگی ابرشبه‌ها در حالت نقص تک اتم بورفین β_{12} در حالت حذف اتم شماره 1 برای الف) ورقه یک در یک ب) ابرشبه دو در دو ج) ابرشبه سه در سه د) ابرشبه چهار در چهار.

بر جهت تنش افزایش و پیوندهای در جهت تنش کاهش یافته‌اند.

تابع جایگزیدگی ساختار با دررفتگی اتم شماره 1 در غلظت‌های مختلف در شکل 5 بررسی شده است. اگر توزیع الکترون بین دو اتم باشد، ناجایگزیده است و اگر روی اتم‌ها باشد جایگزیده می‌باشد. مشاهده می‌کنیم که در حالت حذف اتم شماره 1 در همه ابرشبه‌ها، الکترون بین اتم‌ها وجود دارد و در مکان اتم شماره 1 که حذف شده است، الکترون وجود ندارد و الکترون‌ها به‌مجاور حرکت می‌کنند. در ابرشبه 2×2 و 4×4 مشاهده می‌کنیم که بعد از حذف اتم شماره 1 ساختار پس از بهینه‌سازی نسبت به حالت اولیه خود تغییر می‌کند و اتم‌های اطراف اتم حذف شده حرکت می‌کنند و پیوندشان را با اتم کنار خود قطع می‌کنند.

اما در ورقه 1×1 و 3×3 فقط ساختار کمی تغییر می‌کند ولی پیوند بین اتم‌ها شکسته نمی‌شود. ساختار نواری مربوط به حذف اتم شماره 1 در دو ابرشبه 3×3 و

از ساختار بورفین χ_3 که برابر $0/96$ به دست آمده است، ناهمسانگردتر است [3].

تغییرات طول پیوند ساختار به‌عنوان تابعی از کرنش در شکل 4 رسم شده است. مطابق شکل هنگام اعمال کرنش در راستای x ، با افزایش تدریجی مقدار آن، اندازه طول پیوند بین تمام اتم‌های موجود افزایش می‌یابد.

در مورد یک ورقه کامل شاهد افزایش دو درصدی پیوند d_1 در انتهای تنش نسبت به شروع و افزایش یک درصدی برای d_3 می‌باشیم. ولی برای d_2 ، 15% و برای d_4 ، 11% افزایش داریم. مشاهده می‌کنیم که افزایش طول در راستای عمود بر جهت تنش بسیار بیشتر از افزایش طول در جهت آن است. به‌طور مشابه هنگام اعمال تنش در راستای y ، با افزایش تدریجی مقدار کرنش، شاهد 7% افزایش طول پیوند d_1 و d_3 و کاهش دو درصدی در طول پیوند d_2 و کاهش سه درصدی d_4 هستیم. در واقع، واضح است که پیوندهای عمود

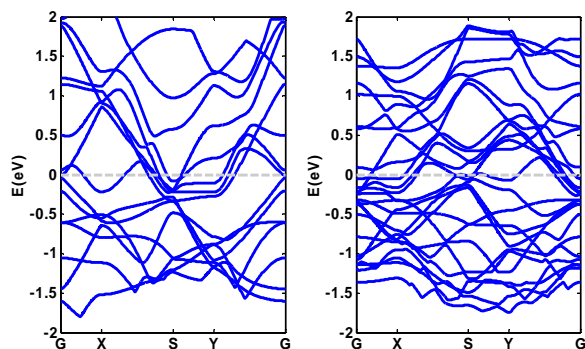
سپاس‌گزاری

این تحقیق قسمتی از طرح مورد حمایت صندوق حمایت از پژوهشگران با شماره 96006629 می‌باشد. نویسندگان دوم و سوم مقاله کمال تشکر خود را از صندوق ابراز می‌دارند.

مرجع‌ها

- [1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, Electric field effect in atomically thin carbon films, *Science* **306** (2004) 666-669.
- [2] K. Geim, Graphene: status and prospects, *Science* **324** (2009) 1530-1534.
- [3] A.A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, C.N. Lau, Superior thermal conductivity of single-layer graphene, *Nano Letter* **8** (2008) 902-907.
- [4] C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar, J. Hone, Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene, *Science* **321** (2008) 385-388.
- [5] P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M.C. Asensio, A. Resta, B. Ealet, G.L. Lay, Silicene: compelling experimental evidence for graphene-like two-dimensional silicon, *Physical Review Letter* **108** (2012) 155501-5.
- [6] M.E. Dávila, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, G. Le Lay, Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene, *New Journal of Physics* **16** (2014) 95002-85011.
- [7] F. Zhu, W-J. Chen, Y. Xu, C-L. Gao, D-D. Guan, C-H. Liu, D. Qian, S-C. Zhang, J-F. Jia, Epitaxial growth of two-dimensional stanine, *Nater Material* **14** (2015) 1020-1025.
- [8] A.J. Mannix, X-F Zhou, B. Kiraly, J.D. Wood, D. Alducin, B.D. Myers, X. Liu, B.L. Fisher, U. Santiago, J.R. Guest, M.J. Yacaman, A. Ponce, A.R. Oganov, M.C. Hersam, N.P. Guisinger, Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs, *Science* **350** (2015) 1513-1516.

در شکل 6 رسم شده است. علت انتخاب این آرایش انرژی بستگی بیشتر آنها می‌باشد. ساختار نواری نشان می‌دهد که نقص ساختاری تأثیری روی ماهیت فلزی ورقه بورفین ندارد. از این رو، بورفین را می‌توان به عنوان یک ماده دوبعدی با قابلیت فلزی قوی دانست که آن را در دنیای مواد دوبعدی متمایز می‌کند.



شکل 6. ساختار نواری ابرشیکه سه در سه (سمت چپ) و چهار در چهار (سمت راست) با حذف اتم شماره یک تراز فرمی به صورت خط چین نشان داده شده است. ماهیت فلزی ساختار به خوبی مشخص است.

نتیجه‌گیری

در این تحقیق به بررسی ساختار بورفین β_{12} و سپس دررفتگی اتم بورن در آن پرداختیم. با به دست آوردن کرنش بحرانی و تنش نهایی به حداکثر میزان کششی قابل تحمل برای بورفین β_{12} پی بردیم. با توجه به ساختار نواری و نمودار DOS به دست آمده نتیجه گرفتیم که بورفین β_{12} فلز می‌باشد و در همه حالات حذف تک اتم خاصیت فلزی خود را حفظ می‌کنند و با استفاده از انرژی بستگی و ضریب یانگ به دست آمده به این نتیجه رسیدیم که در حالتی که اتم‌های شماره 1 و 2 در سلول واحد حذف می‌شوند، ساختار پایدارتر است.

- Pmmn borophene, *RSC Advances*, **7** (2017) 8654-8660.
- [20] H.F. Wang, Q.F. Li, Y. Gao, F. Miao, X.F. Zhou, X.G. Wan, Strain effects on borophene: ideal strength, negative Poisson's ratio and phonon instability, *New Journal of Physics* **18** (2016) 073016-073022.
- [21] B. Peng, H. Zhang, H.Z. Shao, Z.Y. Ning, Y.F. Xu, H.L. Lu, D.W. Zhang, H.Y. Zhu, Stability and strength of atomically thin borophene from first principles calculations, *Material Research Letter* **5** (2017) 399-407.
- [9] B. Feng, J. Zhang, Q. Zhong, W. Li, S. Li, H. Li, P. Cheng, S. Meng, L. Chen, K. Wu, Experimental realization of two-dimensional boron sheets, *Nature Chemistry* **8** (2016) 563-568.
- [10] M.Q. Le, B. Mortazavi, T. Rabczuk, Mechanical properties of borophene films: a reactive molecular dynamics investigation, *Nanotechnology* **27** (2016) 445709-4457023.
- [11] S. Izadi Vishkayi, M. Bagheri Tagani, Current-Voltage Characteristics of Borophene and Borophane Sheets, *Physical Chemistry Chemical Physics* **19** (2017) 21461-21466.
- [12] X. Zhang, J. Hu, Y. Cheng, H.Y. Yang, Y. Yao, S.A. Yang, Borophene as an extremely high capacity electrode material for Li-ion and Na-ion batteries, *Nanoscale* **8** (2016) 15340-15347.
- [13] Y. Zhao, S. Zeng, J. Ni, Superconductivity in two-dimensional boron allotropes, *Physical Review B* **93** (2016) 014502-5.
- [14] S. Izadi Vishkaiy, M. Bagheri Tagani, Edge-Dependent Electronic and Magnetic Characteristics of Freestanding β 12-Borophene Nanoribbons, *Nano-micro Letter* **10** (2018) 14-27.
- [15] S. Izadi Vishkaiy, M. Bagheri Tagani, Freestanding χ_3 -borophene nanoribbons: a density functional theory investigation, *Physical Chemistry Chemical Physics* **20** (2018) 10493-10501.
- [16] E. Artacho, D. Sanchez-Portal, P. Ordejon, A. Garcia, J.M. Soler, Density-functional method for very large systems with LCAO basis sets, *International Journal of Quantum Chemistry* **65** (1997) 453-461.
- [17] P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, *Physical Review Letter* **77** (1996) 3865-3868.
- [18] B. Fen, O. Sugino, R-Y. Liu, J. Zhang, R. Yukawa, M. Kawamura, T. Imori, H. Kim, Y. Hasegawa, H. Li, L. Chen, K. Wu, H. Kumigashira, F. Komori, T-C. Chiang, S. Meng, I. Matsuda, Dirac Fermions in Borophene, *Physical Review Letter* **118** (2017) 096401-6.
- [19] J. Yuan, N. Yu, B.K. Xue, X. Miao, Ideal strength and elastic instability in single-layer 8-