

# Graphene Boron Nitride electronic structure in the framework of Realistic Tight binding Model

Rouhollah Gholami<sup>1,2,\*</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Razi University, Kermanshah, Iran

<sup>2</sup> Department of Physics, Ilam University, Ilam, Iran

Received: 14.10.2021    Revised: 08.11.2021    Accepted: 23.11.2021

Doi link: [10.22055/jrmb.2022.17348](https://doi.org/10.22055/jrmb.2022.17348)

## Abstract

Here in this study, an accurate realistic tight binding model has been used to investigate the electronic band structure of graphene on the top of hexagonal boron nitride substrate. Based on the density functional theory (DFT), the possibility of graphene growth on a lattice-matched hexagonal boron nitride substrate has been investigated. Up to the fifth neighbor approximation, the electronic band structure of this lattice has been reproduced by fitting the tight binding hopping parameters to the DFT band structure data. Our results show that the interlayer effects are relatively weak and so, the electronic band structure of single-layer graphene is almost preserved. Due to the inequality of the carbon subsites of this system, a small gap is opened at the Dirac points of the graphene band-structure, which can be used to generate field effect transistors.

**Keywords:** Realistic Tight binding Model, Bilayers Graphene, Boron Nitride

---

\*Corresponding Author: [r.gholami@ilam.ac.ir](mailto:r.gholami@ilam.ac.ir)

## ساختار بانندی گرافن بورن نیتريد در چارچوب مدل تنگ بست واقعي

روح الله غلامی<sup>\*۱،۲</sup>

<sup>۱</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه رازی، کرمانشاه، ایران

<sup>۲</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ایلام، ایلام، ایران

دریافت: ۱۴۰۰/۰۷/۲۲ ویرایش نهائی: ۱۴۰۰/۰۸/۱۷ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۹/۰۲

Doi link: [10.22055/jrmb.2022.17348](https://doi.org/10.22055/jrmb.2022.17348)

### چکیده

در این مقاله با استفاده از یک مدل تنگ بست واقع گرایانه و دقیق، ساختار الکترونیکی تک لایه گرافن رشد یافته بر بستر یک زیر لایه بورن نیتريد، مورد مطالعه قرار گرفته است. برای این منظور با انجام محاسبات مبتنی بر نظریه تابعی چگالی، امکان رشد گرافن بر زیر لایه بورن نیتريد در یک شبکه منطبق بر هم، مورد بررسی قرار گرفته است. ساختار الکترونیکی این شبکه از برازش پارامترهای تنگ بست تا همسایه پنجم، با داده‌های تابعی چگالی محاسبه شده است. در این شبکه ساختار الکترونیکی گرافن تا حدود زیادی حفظ شده است. نتایج نشان می‌دهد، اثرات بین لایه‌ای نسبتاً ضعیف است. یک گاف کوچک حدود ۰٫۲ الکترون ولت در اثر معادل نبودن جایگاه‌های کربنی در ساختار گرافنی ایجاد شده است که می‌توان با اعمال یک ولتاژ گیت از آن برای ایجاد ترانزیستورهای اثر میدان استفاده کرد.

**کلیدواژه‌گان:** مدل تنگ بست واقعي، گرافن دو لایه، بورن نیتريد

### مقدمه

خود همراه است [۱۱-۱۳]. شبکه دو بعدی لانه زنبوری (شش‌گوش) از اتم‌های کربن یکسان در گرافن، ایجاب می‌کند در انرژی‌های پایین، شبه‌ذرات درون گرافن مانند فرمیون‌های نسبیتی بدون جرم دیراک رفتار کنند [۲]. این ویژگی بی‌نظیر همانند آنچه در فیزیک ذرات انرژی بالا برای ذرات بدون جرم اتفاق می‌افتد، موجب اثرات غیر معمولی، مثل پارادوکس تونل زنی کلین، می‌گردد [۱۴]. این اثر باعث می‌شود که الکترون‌های دیراک از هر سد پتانسیل و با هر عرض و طولی کاملاً عبور کنند. علیرغم چگالی صفر حامل‌های بار در سطح فرمی (شش نقطه دیراک) این ساختار موجب می‌شود که یک رسانندگی کمینه ذاتی وجود داشته باشد و لذا با قطع ولتاژ گیت، جریان عبوری قطع نگردد. برای رفع این مشکل در ترانزیستورهای اثر

با ساخت گرافن [۱]، فیزیک مواد دو بعدی هم از دید نظری و هم دیدگاه فناوری، مورد توجه ویژه‌ای قرار گرفته است [۲-۵]. به دنبال ساخت گرافن، مواد دو بعدی متنوعی از قبیل بورن نیتريد هگزگونال h-BN چند لایه و تک لایه (گرافن سفید)،  $MoS_2$  و سایر مواد دوبعدی با تکنیک مشابهی ساخته شدند [۵-۱۰]. سهولت ساخت ورقه‌های گرافنی در اندازه‌های میکرومتری به همراه تحرک پذیری بسیار زیاد حامل‌های بار باعث گردیده است که این ماده به لحاظ کاربردی جایگزین مناسبی برای ترانزیستورهای سیلیکونی و استفاده در ترانزیستورهای اثر میدان (FET) باشد. با این حال، ساخت ترانزیستورهای پایه گرافنی با دشواری‌های ذاتی مکانیک کوآنتومی ناشی از ساختار

\* نویسنده مسئول: r.gholami@ilam.ac.ir



میدان پایه گرافنی، لازم است که با شکستن تقارن شبکه، شبه ذرات را با ایجاد یک گاف انرژی، جرم دار نمود [۱۶-۱۵]. یکی از راه های ایجاد گاف در گرافن، رشد آن روی زیر لایه بورن نیتريد است. برخلاف گرافن، بورن نیتريد هگزاگونال، یک عایق با گاف مستقیم بزرگ است (۵.۶ الکترون ولت) و تطابق زیادی از لحاظ شبکه با گرافن دارد و بنابراین به عنوان یک گیت دی الکترونیک، زیر لایه استثنایی برای گرافن محسوب می شود [۱۵].

از طرفی دیگر، در گرافن تک لایه، پیش بینی می شود که اثرات همبستگی الکترونیکی مانند ابرسانی، در نزدیکی نقاط تکینگی وان هوف، قابل ملاحظه باشد [۱۷-۱۸]. پیشرفت های اخیر در ایجاد عایق مات و در پی آن ایجاد ابرسانی غیر معمول در گرافن دولایه چرخیده، دریچه های نو و هیجان انگیز به این مباحث باز کرده است و مطالعات زیادی در این باب آغاز گردیده است [۱۹]. بررسی ساختارهای دولایه متعدد هر کدام می تواند در چیدن تکه های مفقوده این پازل مؤثر باشد. مطالعات نظری در کنار پیشرفت های اخیر در صنعت ساخت مواد دوبعدی، افق های بسیار روشنی را بر روی فیزیک این مواد گشوده است. این موضوع باعث شده است در کنار گرافن دولایه سایر ساختارهای شبه گرافنی دولایه، مانند بورن نیتريد هگزاگونال دولایه یا گرافن تک لایه و دو لایه بر بستر بورن نیتريد هگزاگونال تک لایه و یا چند لایه نیز مورد توجه باشند [۲۰]. ساختارهای گرافنی دولایه  $AA$  معمولاً از لحاظ انرژی نسبت به حالت های  $AB$  ناپایدارترند و به صورت طبیعی به ندرت ایجاد می شوند و بنابراین به لحاظ نظری، کمتر مورد توجه بوده اند. با این وجود، اینگونه ساختارها ویژگی های منحصر به فردی از خود نشان می دهند و گزینه های مناسبی جهت مشاهده برخی رفتارهای جمعی الکترونی هستند [۲۱-۲۳].

مدل مرسوم برای بررسی خواص فیزیکی همه این ساختارها چه در انرژی های پایین و چه در انرژی های بالاتر، استفاده از هامیلتونی مؤثر است. بررسی دقیق ساختار نواری این مواد از دید مدل تنگ بست، در نزدیکی نقاط دیراک (انرژی های کم) و یا در نزدیکی نقاط تکینگی وان هف مستلزم یک مدل تنگ بست واقع بینانه است. بیشتر مدل های موجود، با نگاه به اهمیت رفتارهای شبه ذرات در انرژی های پایین و در پیرامون نقاط دیراک، به یک مدل تنگ بست کمینه با پارامترهای جهش در تقریب نزدیکترین همسایه اکتفا نموده اند [۲۴-۱۶]. در این مقاله با معرفی یک مدل تنگ بست واقع بینانه تا تقریب پنجمین همسایه به بررسی ساختار الکترونیکی اینگونه مواد پرداخته شده است. برای حالت های گرافن دو لایه و نیز گرافن بر بستر بورن نیتريد، پارامترهای تنگ بست مربوطه نیز از برازش داده های به دست آمده از نظریه تابعی چگالی و مدل تنگ بست محاسبه شده است.

### هامیلتونی مؤثر

در این بخش به معرفی مدل تنگ بست واقع گرایانه برای برخی از ساختارهای دو لایه ای شش گوش تا همسایه پنجم، پرداخته شده است. ساختارهای دولایه ای که از دو اتم یکسان تشکیل شده اند مانند گرافن دولایه، در دو حالت  $AA$  و  $AB$  تشکیل می شود. ساختارهایی که اتم های غیر یکسان دارند مانند بورن نیتريد، لایه بندی های متنوع تری دارند [۲۴]. بسیاری از خواص الکترونیکی این ساختارها ناشی از نوارهای  $\pi$  و  $\pi^*$  می باشند. این نوارها معمولاً با یک مدل تنگ بست که پارامترهای آن از برازش با داده هایی که از نتایج تجربی یا محاسبات ابتدا به ساکن نظریه تابعی چگالی به دست آمده اند، قابل توصیف است [۲۵]. جهش الکترون های

$$\eta(\vec{k}) = e^{2i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_1} + e^{2i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_2} + e^{2i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_3} \quad ۶$$

$$\xi(\vec{k}) = \gamma^*(\vec{k})\eta(\vec{k}) - \gamma(\vec{k}) \quad ۷$$

درایه‌های غیر قطری  $H_{12} = H_{21}^\dagger$  هامیلتونی بین لایه‌ای می‌باشند. این عناصر در حالت  $AA$  ساختار هامیلتونی شبه‌گرافنی مشابه رابطه ۲ دارند با این تفاوت که به جای پارامترهای جهش درون لایه‌ای  $t_n^{ii}$ ، پارامترهای جهش بین لایه‌ای  $t_n^{ij}$  ( $i \neq j$ ) قرار می‌گیرد، که در آن  $n$  شماره همسایه اول تا پنجم می‌باشد:

$$H_{ij} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\alpha_i \alpha_j}(\vec{k}) & \Gamma_{\alpha_i \beta_j}(\vec{k}) \\ \Gamma_{\alpha_i \beta_j}^*(\vec{k}) & \varepsilon_{\beta_i \beta_j}(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad ۸$$

شکل شبه‌گرافنی ماتریس تبادل بین لایه‌ای در حالت برهم چینش  $AA$  باعث می‌شود در این ساختارها در نقطه دیراک گاف ایجاد نشود. در حالت  $AB$ ، این ماتریس‌های برهم‌کنش بین لایه‌ای، هرمیتی نیستند و به شکل کلی زیر می‌باشند

$$H_{ij} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\alpha_i \alpha_j}(\vec{k}) & \Gamma_{\alpha_i \beta_j}^*(\vec{k}) \\ \Gamma_{\alpha_i \beta_j}^*(\vec{k}) & \Gamma_{\alpha_i \beta_j}(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad ۹$$

### ساختارهای دولایه $AA'$ و $AA$

ساختارهای دو لایه به صورت طبیعی بر هم چینش‌هایی متنوعی دارند. معروف‌ترین این لایه‌بندی‌ها عبارتند از بر هم چینش  $AA$  و بر هم چینش  $AB$  که در آنها به ترتیب اتم‌های لایه فوقانی دقیقاً بالای اتم‌های لایه پایین قرار می‌گیرند و یا نصف آنها بر هم منطبق است و نصف دیگر در فضای خالی بالای مرکز شش گوش‌ها واقع هستند. چرخش این لایه‌ها از این وضعیت‌ها باعث ایجاد شبکه‌های موسوم به الگوی مویر می‌گردد که دارای تعداد بسیار زیادی از اتم‌ها در سلول یک‌ه خود است [۱۹]. در ساختارهای شش گوش  $AA$  همان‌طور که پیشتر هم بیان شد بر هم چینش لایه‌ها به گونه‌ای است که اتم‌های لایه

بین جایگاهی رفتار پراکندگی نوارها در نزدیکی نقاط دیراک را کنترل می‌کند در حالی که جهش‌های درون جایگاهی مسئول شکستن تقارن الکترون-حفره می‌باشند. بنابراین برای بررسی دقیق ساختار نواری این مواد لازم است تا مدل تنگ بست را تا تقریب چندین همسایه گسترش داد. در همه این ساختارها، شکل کلی هامیلتونی به صورت ماتریس  $4 \times 4$  زیر است:

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \quad ۱$$

که در آن هر یک از درایه‌های ماتریس فوق در واقع خود یک ماتریس  $2 \times 2$  می‌باشند. ماتریس‌های  $H_{11}$  و  $H_{22}$  هامیلتونی شبه‌گرافنی هر کدام از لایه‌های فوقانی و زیرین می‌باشند. شکل کلی ماتریس‌های  $H_{11}$  و  $H_{22}$  به صورت زیر است:

$$H_{ii} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\alpha_i \alpha_i}(\vec{k}) & \Gamma_{\alpha_i \beta_i}(\vec{k}) \\ \Gamma_{\alpha_i \beta_i}^*(\vec{k}) & \varepsilon_{\beta_i \beta_i}(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad ۲$$

که در آن  $i = 1, 2$  شاخص لایه و  $\alpha_i$  و  $\beta_i$  دو اتم واقع در جایگاه‌های غیر یکسان ساختار شش گوش لایه  $i$  ام هستند. عناصر قطری ماتریس در رابطه ۲ در زیر داده شده‌اند:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\alpha_i \alpha_i}(\vec{k}) &= \varepsilon_{\alpha_i}^{on} + 2t_2^{ii} [\cos \vec{k} \cdot (\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_2) \\ &+ \cos \vec{k} \cdot (\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_3) + \cos \vec{k} \cdot (\vec{\delta}_2 - \vec{\delta}_3)] \\ &+ 2t_3^{ii} [\cos 3\vec{k} \cdot \vec{\delta}_1 + \cos 3\vec{k} \cdot \vec{\delta}_2 + \cos 3\vec{k} \cdot \vec{\delta}_3] \end{aligned} \quad ۳$$

عناصر غیر قطری رابطه ۲ به صورت زیر می‌باشند:

$$\Gamma_{\alpha_i \beta_i}(\vec{k}) = t_1^{ii} \gamma(\vec{k}) + t_3^{ii} \eta^*(\vec{k}) + t_4^{ii} \xi(\vec{k}) \quad ۴$$

که در رابطه ۴ توابع  $\gamma(\vec{k})$ ،  $\eta(\vec{k})$  و  $\xi(\vec{k})$  در زیر تعریف شده‌اند:

$$\gamma(\vec{k}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_2} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_3} \quad ۵$$

یکانی  $U^\dagger H U$  به دو بخش با تقارن آینه‌ای زوج و فرد بلوک قطری نمود [۲۲]:

۱۱

$$H = \begin{pmatrix} H^- & 0 \\ 0 & H^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} - H_{12} & 0 \\ 0 & H_{11} + H_{12} \end{pmatrix}$$

که در آن  $U$  عملگر تقارن آینه‌ای است و به صورت  $U = \begin{pmatrix} I & I \\ I & -I \end{pmatrix}$  تعریف می‌شود. هامیلتونی‌های زوج و فرد هر کدام یک گرافن تک‌لایه را توصیف می‌کنند که با شاخص تقارن آینه‌ای زوج و فرد توصیف می‌شوند. تقسیم ساختار نواری این شبکه‌ها به دو بخش زوج و فرد علاوه بر ساده‌سازی ریاضی دستاوردهای دیگری نیز دارد. شبه‌ذرات در این ساختارها علاوه بر دستوارگی معروف با یک عدد کوآنتومی مرتبط با تقارن آینه‌ای موسوم به شاخص مخروطی (شکل ۱) توصیف می‌شوند [۲۲]. این ویژگی باعث ایجاد رفتارهای منحصر به فردی در این نوع برهم‌چینش‌ها دارد و سبب می‌گردد که شبه‌ذرات در این ساختارها رفتار جمعی متفاوتی از خود نشان دهند. به‌ویژه اینکه می‌توان نشان داد که این عدد کوآنتومی در حین تونل‌زنی کلین ناورد باقی می‌ماند، به عبارتی دیگر پدیده‌هایی مثل تونل‌زنی کلین و جفت‌شدگی ابررسانایی در بین شبه‌ذرات هر کدام از این بخش‌های زوج و فرد به صورت مجزا اتفاق می‌افتد [۲۱-۲۲].

### گرافن دولایه $AA$

گرافن دو لایه خالص در دو حالت  $AA$  و  $AB$  (برنالی) امکان رشد دارد. به صورت طبیعی حالت  $AB$  انرژی تشکیل کمتری لازم دارد. اما با این حال شواهد تجربی نیز از تشکیل گرافن دولایه  $AA$  نیز گزارش شده است. بسیاری از مطالعات نظری بر حالت  $AB$  تمرکز دارد با این حال گرافن در حالت  $AA$  خواص

فوقانی و تحتانی انطباق کامل دارند. از آنجایی که در این قبیل مواد تا حدود زیادی ساختار الکترونیکی شبکه گرافن تک لایه حفظ می‌شود، توجه خود را روی این ساختارها متمرکز می‌کنیم. چنانچه اتم‌های دوگانه داخل سلول یکه هر کدام از لایه‌ها، با هم یکسان باشند، مانند گرافن دولایه، در آن صورت تنها یک حالت  $AA$  امکان پذیر است. در ساختارهایی مانند بورن نیتريد که از دو اتم غیر یکسان در سلول یکه خود برخوردار هستند بسته بر نحوه قرار گرفتن اتم‌ها بر روی هم، دو حالت موسوم به  $AA'$  و  $AA''$  امکان پذیر است که به ترتیب در اولی اتم‌های یکسان در بالای هم قرار دارند ولی در دیگر حالت، اتم‌های بورن بر بالای اتم‌های نیتروژن قرار دارند. همچنین ممکن است در یک ساختار اتم‌ها یک لایه یکسان باشند ولی اتم‌های لایه دیگر یکسان نباشند. یک نمونه از این گونه ساختارها گرافن تک لایه بر روی بستر بورن نیتريد شش گوش تک لایه است. در این بخش نگاهی به ساختار الکترونی این قبیل مواد می‌اندازیم. برای هر سه نمونه بیان شده یعنی گرافن دولایه، بورن نیتريد دولایه و گرافن رشد یافته بر زیر لایه بورن نیتريد در حالت برهم‌چینش  $AA$ ، هامیلتونی سیستم را می‌توان به صورت کلی زیر نوشت:

۱۰

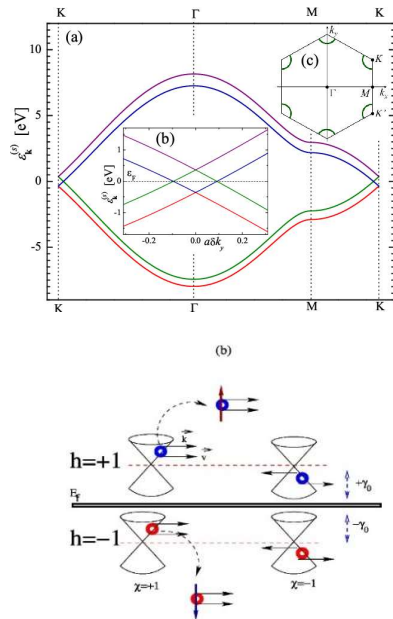
$$H = \begin{array}{c|c|c} \alpha_1 & \begin{array}{cc} E_1 & \Gamma_0(\vec{k}) \end{array} & \begin{array}{cc} \varepsilon_1 & \Gamma_1(\vec{k}) \end{array} \\ \hline \beta_1 & \begin{array}{cc} \Gamma_0^*(\vec{k}) & E_2 \end{array} & \begin{array}{cc} \Gamma_1^*(\vec{k}) & \varepsilon_2 \end{array} \\ \hline \alpha_2 & \begin{array}{cc} \varepsilon_1 & \Gamma_1(\vec{k}) \end{array} & \begin{array}{cc} E_3 & \Gamma_0(\vec{k}) \end{array} \\ \hline \beta_2 & \begin{array}{cc} \Gamma_1^*(\vec{k}) & \varepsilon_2 \end{array} & \begin{array}{cc} \Gamma_0^*(\vec{k}) & E_4 \end{array} \end{array}$$

در حالت کلی برای تمام ساختارهای دولایه  $AA$  که در آنها لایه‌های بالا و پایین یکسان هستند. به خاطر وجود تقارن آینه‌ای  $AA$  نسبت به صفحه‌ای که از مرکز و موازی لایه‌های بالا و پایین می‌گذرد معادله ۱ تحت تبدیل شاخص لایه  $1 \leftrightarrow 2$  ناورد است و بنابراین داریم  $H_{11} = H_{22}$  و همچنین  $H_{12} = H_{21}$  می‌باشد. این قبیل هامیلتونی را می‌توان تحت تبدیل

۱۶

$$E^{\pm}(\vec{k}) = \pm\gamma_0 + (-1)^l t_1^{\pm} |f(\vec{k})|$$

رابطه بالا برای بخش‌های زوج و فرد تابع پراکندگی انرژی گرافن دولایه، در شکل الف و در نزدیکی نقاط دیراک این رابطه به صورت نمادین در شکل اب رسم شده است. مخروط‌های دیراک علاوه بر دستوارگی معروف خود با یک عدد کوانتومی دیگری  $h = \pm 1$  توصیف می‌شوند که به شاخص مخروطی موسوم هستند. این مخروط‌ها به اندازه  $\gamma_0$  بالا و پایین سطح فرمی قرار دارند. بنابراین گرافن دو لایه  $AA$  یک فلز خود آلاینده (self-doped) است و شکل خاص سطح فرمی آن (well nested) باعث رفتارهای منحصر به فردی در آن می‌شود [۲۳].



شکل ۱. قاب بالا ساختار باند بخش زوج و فرد گرافن دولایه را نشان می‌دهد. در قاب پایین، مخروط‌های دیراک برای بخش‌های زوج و فرد ساختار نواری مشاهده می‌شود. این مخروط با یک عدد کوانتومی اضافه مربوط به تقارن آینه‌ای  $h = \pm 1$  توصیف می‌شوند.

تقارن آینه‌ای در حالت گرافن دو لایه  $AB$  وجود ندارد و بنابراین نمی‌توان هامیلتونی آنرا به راحتی

منحصر به فردی از خود نشان می‌دهد [۲۳-۲۱]. در این ساختار از تقارن آینه‌ای می‌توان استفاده نمود و هامیلتونی بخش زوج و فرد را به وسیله رابطه ذیل نوشت:

۱۲

$$H^{\pm} = \begin{pmatrix} \varepsilon_c^{\pm}(\vec{k}) & \Gamma^{\pm}(\vec{k}) \\ \Gamma^{\pm*}(\vec{k}) & \varepsilon_c^{\pm}(\vec{k}) \end{pmatrix}$$

رابطه بالا بدین معنی است که طیف انرژی (نوارهای ظرفیت و رسانش) این ساختار به دو بخش زوج و فرد تقسیم می‌شود و به راحتی می‌توان آن را به صورت تحلیلی زیر به دست آورد:

۱۳

$$E^{\pm}(\vec{k}) = \varepsilon_c^{\pm}(\vec{k}) + (-1)^l |\Gamma^{\pm}(\vec{k})|$$

که در آن  $l = 1, 2$  همین‌طور توابع شکلی درون جایگاهی و بین جایگاهی  $\varepsilon_c^{\pm}(\vec{k})$  و  $\Gamma^{\pm}(\vec{k})$  با روابط زیر تعریف می‌شوند

۱۴

$$\begin{aligned} \varepsilon_c^{\pm}(\vec{k}) = & \pm\gamma_0 + 2t_2^{\pm} \left[ \cos \vec{k} \cdot (\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_2) \right. \\ & \left. + \cos \vec{k} \cdot (\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_3) + \cos \vec{k} \cdot (\vec{\delta}_2 - \vec{\delta}_3) \right] \\ & + 2t_5^{\pm} \left[ \cos 3\vec{k} \cdot \vec{\delta}_1 + \cos 3\vec{k} \cdot \vec{\delta}_2 + \cos 3\vec{k} \cdot \vec{\delta}_3 \right] \end{aligned}$$

۱۵

$$\Gamma^{\pm}(\vec{k}) = t_1^{\pm} \gamma(\vec{k}) + t_3^{\pm} \eta^*(\vec{k}) + t_4^{\pm} \xi(\vec{k})$$

در روابط بالا پارامترهای جهش باز آرایشی شده در واقع پارامترهای تنگ بست، انتگرال‌های جهش بین اربیتال‌های پیوندی و ضد پیوندی لایه‌های بالا و پایین هستند و به صورت  $t_n^{\pm} = t_n^{ii} \pm t_n^{jj}$  تعریف می‌شوند. این پارامترها را می‌توان با برازش داده‌های تابعی چگالی برای بخش‌های زوج و فرد ساختار نواری به دست آورد. در تقریب نزدیک‌ترین همسایه اول رابطه ۱۳ به شکل زیر تبدیل می‌شود

به دنبال بررسی حالت‌های با بر هم‌چینش  $AA$  و  $AA'$  هستیم.

### بورون نیتريد دولایه $AA$ و $AA'$

در حالت  $AA$  اتم‌های بورن بر روی هم و اتم‌های نیتروژن نیز بر روی هم واقع هستند. لذا هامیلتونی این ساختار نیز مانند گرافن دو لایه  $AA$  می‌باشد. از این رو می‌توان هامیلتونی این ساختار را هم مانند گرافن دو لایه به صورت تحلیلی به دو بخش زوج و فرد تقسیم نمود. تفاوت اساسی در این ساختار نسبت به حالت گرافن دو لایه مربوط به اختلاف انرژی‌های بر جایگاهی است که منجر به ایجاد دو گاف نسبتاً بزرگ می‌گردد. در این حالت هامیلتونی کامل سیستم به صورت زیر است:

۱۹

$$H = \begin{array}{c|c} B_1 & \begin{array}{cc} \varepsilon_{0B}(\vec{k}) & \Gamma_0(\vec{k}) \\ \Gamma_0^*(\vec{k}) & \varepsilon_{0N}(\vec{k}) \end{array} \\ \hline N_1 & \begin{array}{cc} \varepsilon_{1B}(\vec{k}) & \Gamma_1(\vec{k}) \\ \Gamma_1^*(\vec{k}) & \varepsilon_{1N}(\vec{k}) \end{array} \\ \hline B_2 & \begin{array}{cc} \varepsilon_{0B}(\vec{k}) & \Gamma_0(\vec{k}) \\ \Gamma_0^*(\vec{k}) & \varepsilon_{0N}(\vec{k}) \end{array} \\ \hline N_2 & \begin{array}{cc} \varepsilon_{1B}(\vec{k}) & \Gamma_1(\vec{k}) \\ \Gamma_1^*(\vec{k}) & \varepsilon_{1N}(\vec{k}) \end{array} \end{array}$$

که در آن برای ساده نویسی، به جای اندیس درایه‌ها در ماتریس‌های ۲ و ۸ از نمایش ساده‌تری اما در همان معنا استفاده شده است. این هامیلتونی را نیز مانند قبل می‌توان با استفاده از تقارن آینه‌ای به دو بورن نیتريد تک لایه با تقارن آینه‌ای زوج و فرد به شکل زیر تقسیم نمود:

۲۰

$$H^\pm = \begin{bmatrix} \varepsilon_{0B}(\vec{k}) \pm \varepsilon_{1B}(\vec{k}) & \Gamma_0(\vec{k}) \pm \Gamma_1(\vec{k}) \\ \Gamma_0^*(\vec{k}) \pm \Gamma_1^*(\vec{k}) & \varepsilon_{0N}(\vec{k}) \pm \varepsilon_{1N}(\vec{k}) \end{bmatrix}$$

ویژه‌مقادیر ماتریس بالا به سادگی به شکل زیر محاسبه می‌گردد:

۲۱

$$E^\pm(\vec{k}) = \varepsilon_0^\pm + (-1)^l \sqrt{(\varepsilon_g^\pm)^2 + |\Gamma^\pm|^2}$$

گرافن  $AA$  قطری نمود. با این حال چنانچه از جهش‌های بین لایه‌ای مربوط به جایگاه‌های متفاوت صرف‌نظر کنیم ( $t_1^{1,2} = t_3^{1,2} = t_4^{1,2} = 0$ ) به عبارت دیگر تنها درایه اول ماتریس ۹ را در نظر بگیریم، با تبدیل مشابه حالت گرافن دولایه  $AA$ ، می‌توان هامیلتونی آن را به صورت بلوک قطری با عناصر قطری زیر تبدیل نمود

$$H^\pm = \begin{pmatrix} \mp \gamma_0 & \Gamma(\vec{k}) \\ \Gamma^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad ۱۷$$

در تقریب نزدیکترین همسایه درون لایه‌ای (جهش مستقیم بین لایه‌ای)، اما با هر تقریب دلخواه درون لایه‌ای ترازهای بخش زوج و فرد این ساختار به صورت زیر به دست می‌آید:

۱۸

$$E^\pm(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left( \pm \gamma_0 + (-1)^l \sqrt{\gamma_0^2 + |\Gamma(\vec{k})|^2} \right)$$

### بورون نیتريد دولایه

بورن نیتريد موسوم به گرافن سفید نیز مانند گرافن از یک ساختار لانه زنبوری تشکیل شده است، با این تفاوت که به جای اتم‌های یکسان کربنی در گرافن، سلول یکه آن از دو اتم بور و نیتروژن تشکیل شده است. بور یک الکترون کمتر از کربن و نیتروژن یک الکترون بیشتر دارد، لذا واضح است که در حالت بورن نیتريد دولایه، انرژی حالت  $AA'$  به خاطر اختلاف الکترونگاتیو اتم‌ها از حالت  $AA$  کمتر باشد [۲۷-۲۶]. حالت  $AB$  نیز خود بسته به نحوه قرار گرفتن نوع آن دست اتم‌هایی که دقیقاً بر بالای هم قرار می‌گیرند سه حالت  $AB$ ،  $AB'$  و  $A'B$  دارد. محاسبات ابتدا به ساکن مبتنی بر نظریه تابعی چگالی نشان می‌دهد که انرژی در دو حالت  $AB$  و  $AA'$  به هم نزدیک هستند [۲۷ و ۲۶، ۱۶ و ۱۵]. با این وجود، در این مقاله ما

به اهمیت این مواد در ساخت ترانزیستورهای پایه گرافنی، این ساختارها به صورت گسترده‌ای مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. همانند گرافن دولایه در اینجا نیز با توجه به پایداری حالت  $AB$ ، بیشتر مطالعات معطوف به این ساختار بوده است [۱۶] و تا جایی که نویسنده اطلاع دارد حالت  $AA$  به ندرت مورد توجه بوده است. علاوه بر این، در مورد همین حالت  $AB$  نیز علیرغم مطالعات زیاد مبتنی بر نظریه تابعی چگالی، بررسی ساختار نواری این مواد در چارچوب مدل تنگ بست به ندرت و تنها در انرژی‌های پایین پیرامون نقاط دیراک انجام شده است. دلیل این امر توجه ویژه این مقالات بر اثر میدان بر رفتار حامل‌های بار به منظور ایجاد گاف و کاربرد آن در ساخت ترانزیستور بوده است. بررسی دقیق ساختار نواری این مواد مستلزم مطالعاتی است مشابه آنچه که در مرجع [۲۵] در مورد گرافن دولایه صورت گرفته است. با توجه به پیشرفت‌های اخیر در صنعت ساخت مواد نانو، این امکان فراهم شده است که تمام فازهای ساختاری ممکن ماده را بتوان ایجاد نمود. همان‌طور که در مورد گرافن دولایه  $AA$  بحث شد، این ساختارها در ایجاد برخی خواص مهم مانند ابررسانایی نقش مهمی دارند. در این مقاله ما توجه خود را روی ساختار نواری این حالت از گرافن-بور نیتريد با به‌کارگیری مدل تنگ بست واقع‌گرایانه‌تری معطوف می‌کنیم. تعمیم این روش به حالت‌های دیگر گرافن بورن نیتريد نیز به آسانی ممکن است. هامیلتونی گرافن بورن نیتريد دولایه  $AA$  را می‌توان به صورت ماتریس زیر نوشت:

$$H = \begin{array}{c} B \\ N \\ C_A \\ C_B \end{array} \left[ \begin{array}{cc|cc} \varepsilon_B(\vec{k}) & \Gamma_B(\vec{k}) & \varepsilon_{BC_A}(\vec{k}) & \Gamma_{BC}(\vec{k}) \\ \Gamma_B^*(\vec{k}) & \varepsilon_N(\vec{k}) & \Gamma_{BC}^*(\vec{k}) & \varepsilon_{NC_B}(\vec{k}) \\ \varepsilon_{BC_A}(\vec{k}) & \Gamma_{BC}(\vec{k}) & \varepsilon_C(\vec{k}) & \Gamma_C(\vec{k}) \\ \Gamma_{BC}^*(\vec{k}) & \varepsilon_{NC_B}(\vec{k}) & \Gamma_C^*(\vec{k}) & \varepsilon_C(\vec{k}) \end{array} \right] \quad ۲۶$$

که در آن با تعریف  $\varepsilon_B^\pm = \varepsilon_{0B} \pm \varepsilon_{1B}$  و نیز  $\varepsilon_N^\pm = \varepsilon_{0N} \pm \varepsilon_{1N}$  داریم:

$$\varepsilon_0^\pm = \frac{\varepsilon_B^\pm + \varepsilon_N^\pm}{2} \quad ۲۲$$

$$\varepsilon_g^\pm = \frac{\varepsilon_B^\pm - \varepsilon_N^\pm}{2} \quad ۲۳$$

با این وجود تقارن آینه‌ای در حالت بر هم‌چینش  $AA'$  وجود ندارد. هامیلتونی این حالت را در تقریب نزدیکترین همسایه بین لایه‌ای (ولیکن هر تقریب دلخواه درون لایه‌ای)، می‌توان با جابه‌جایی درایه‌ها همانند حالت  $AA$  به صورت زیر نوشت:

$$H = \begin{array}{c} B_1 \\ N_1 \\ N_2 \\ B_2 \end{array} \left[ \begin{array}{cc|cc} E_B & \Gamma_1(\vec{k}) & t' & 0 \\ \Gamma_1^*(\vec{k}) & E_N & 0 & t' \\ t' & 0 & E_N & \Gamma_1(\vec{k}) \\ 0 & t' & \Gamma_1^*(\vec{k}) & E_B \end{array} \right] \quad ۲۴$$

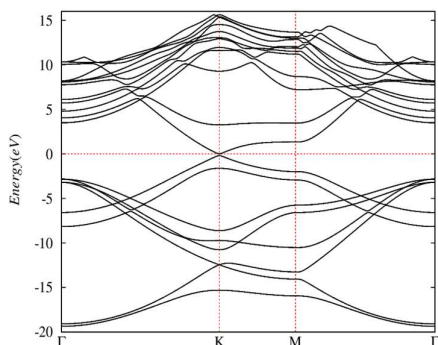
ویژه ماتریس بالا را می‌توان به صورت زیر محاسبه نمود:

$$E^\pm(\vec{k}) = \varepsilon_0 + (-1)^l \sqrt{\varepsilon_g^2 + (|\Gamma| \pm t')^2} \quad ۲۵$$

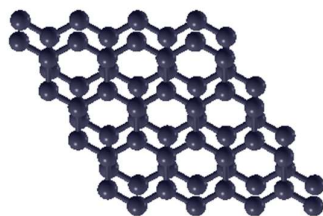
## گرافن تک لایه بر بستر بورن نیتريد شش گوش

این قبیل ساختارها نیز در سه حالت  $AA$  و  $AB$  و  $A'B$  امکان تشکیل دارند. در حالت  $AA$  یک اتم کربن بالای یک اتم بور و اتم کربن دیگر بر روی نیتروژن قرار دارد. در حالت  $AB$  یک اتم کربن بر روی اتم بور و کربن دیگر در فضای خالی بین شش گوش قرار می‌گیرد. ساختار  $A'B$  نیز مانند حالت  $AB$  می‌باشد با این تفاوت که اتم کربن روی نیتروژن قرار دارد در حالی که دیگر اتم کربن در بالای مرکز شش گوش قرار دارد. با توجه به نوع اتم‌ها (بور یک الکترون کمتر از کربن دارد) مشخص است که حالت  $AB$  از لحاظ انرژی کل ساختار پایداری بیشتری باشد [۱۶]. با توجه

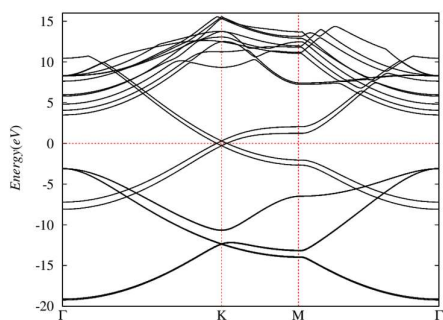




شکل ۳. ساختار نواری گرافن تک لایه بر بستر بورن نیتريد شش گوش تک لایه با استفاده از محاسبات DFT.



شکل ۴. ساختار اتمی گرافن دو لایه AA. اتم‌های لایه بالا درست روی اتم‌های لایه پایین قرار دارند.



شکل ۵. ساختار نواری گرافن دو لایه AA با استفاده از محاسبات ساختار نواری الکترونی DFT.

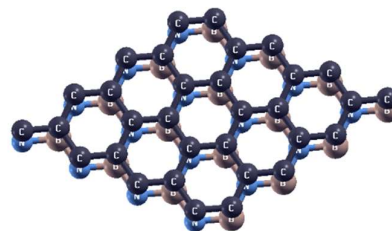
درایه‌های ماتریس بالا با روابط ۳ تا ۷ تعریف می‌شوند. رابطه ۲۶ را نمی‌توان به صورت تحلیلی حل نمود. برای قطری کردن این ماتریس می‌توان از محاسبات عددی کمک گرفت.

### بحث و نتایج

در این بخش با استفاده از محاسبات عددی و برازش داده‌های تنگ بست تا تقریب همسایه پنجم با محاسبات تابعی چگالی، ساختار نواری گرافن-بورن نیتريد، تا حد زیادی باز تولید گشته است. برای مقایسه بهتر و بررسی اثر زیر لایه بورن نیتريد بر ساختار نواری گرافن تک لایه، نتایج با گرافن دو لایه AA مقایسه شده است.

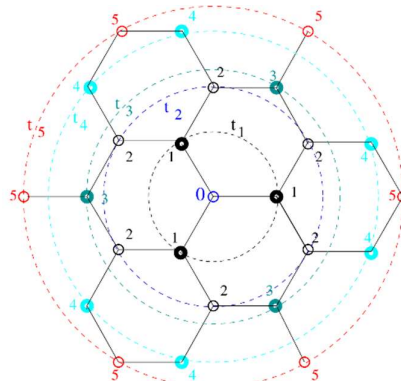
### محاسبات نظریه تابعی چگالی

در این بخش جذب گرافن بر بستر بور نیتريد به صورت برهم چینش AA (شکل ۲) و همچنین گرافن دولایه AA (شکل ۴) شبیه‌سازی شده است. برای این منظور، در چارچوب نظریه تابعی چگالی، محاسبات ابتدا به ساکن با استفاده از بسته محاسباتی کوآنتوم اسپرسو انجام گردیده است.



شکل ۲. ساختار اتمی گرافن تک لایه بر بستر بورن نیتريد شش گوش تک لایه AA.

آنگستروم محاسبه شده است. برای حالت جذب گرافن بر بستر بورن نیتريد، فواصل اتم‌های کربن-کربن و بورن-نیتروژن درون لایه‌ای برابر هم بوده و مقدار آن ۱٫۴۲۶ آنگستروم به‌دست آمده است که نشان می‌دهد از این لحاظ تفاوتی با گرافن دولایه ندارد. اما در مورد فواصل بین لایه‌ای، مقدار ۳٫۱۳۸ آنگستروم برای فاصله اتم‌های بور کربن و ۳٫۱۳۶ آنگستروم برای فاصله اتم‌های کربن و نیتروژن به‌دست آمده است که نشان می‌دهد نسبت به گرافن دولایه، لایه‌ها بیشتر جذب هم شده و مقدار اندکی در لایه‌ها اعوجاج دیده می‌شود. ساختار نواری به‌دست آمده از این محاسبات برای گرافن بورنیتريد و همچنین گرافن دولایه، به‌ترتیب در شکل‌های ۳ و ۵ داده شده است. نکته دیگر اینکه انرژی کل ساختار گرافن بورن نیتريد از گرافن دولایه  $AA$  پایین‌تر است که نشان می‌دهد این ماده از گرافن دولایه پایدارتر است. با توجه به ساختار انتخابی  $AA$  برای این ماده و همچنین اختلاف الکترونگاتیویتی و شعاع‌های اتمی بور و نیتروژن نسبت به اتم کربن، این نتیجه کاملاً قابل انتظار هستند. این موضوع باعث می‌شود تقارن جایگاهی اتم‌های کربن در لایه گرافنی، شکسته شود و این موضوع منجر به یک گاف کوچک به‌اندازه ۰٫۰۲ الکترون ولت در ساختار الکترونی گرافن در نقطه دیراک شده است. در مرجع [۱۵] بحث نسبتاً کاملی در مورد نقش زیر لایه بورنیتريد در ایجاد گاف در ساختاری نواری گرافن انجام شده است. در این مقاله برای همه حالت‌های ممکن ساختار اتمی این نوع سیستم، گاف ایجاد شده برحسب فاصله بین لایه‌ای مورد مطالعه قرار گرفته است (شکل ۴ از مرجع [۱۵]). نتایج این بخش به‌ازای فاصله بین لایه‌ای به‌دست آمده برای فاز  $AA$  (۳٫۱۴)



شکل ۶. در شکل شماتیک بالا، مکان همسایه‌های اول تا پنجم نسبت به دایره صفرم نشان داده شده است. جایگاه‌های دوگانه غیر یکسان، با دایره‌های توپر و توخالی رسم شده‌اند. همسایه‌های اول، سوم و چهارم از یک نوع (A) و همسایه صفرم، دوم و پنجم از نوع دیگر (B) هستند. انتگرال‌های پرش درون لایه‌ای بین دایره مرکزی صفرم و همسایه‌های اول تا پنجم با  $t_n$  نشان داده شده است که در آن  $n=1, \dots, 5$  شماره همسایه‌هاست. با توجه به تقارن ساختار  $AA$ ، انتگرال‌های پرش بین لایه‌ای نیز جایگاه مشابهی دارند. این پارامترهای بین لایه‌ای در اینجا با  $t'_n$  نام‌گذاری شده‌اند.

در این محاسبات، بسط تابع موج الکترون‌های ظرفیت بر اساس امواج تخت می‌باشد. محاسبه تابع‌های تبدلی-همبستگی در تقریب  $LDA$  بوده است، همچنین تصحیحات ناشی از برهم‌کنش واندروالس با به‌کارگیری  $grimme-d2$  اعمال گردیده است. مقدار انرژی قطع بسامد توابع موج تخت الکترون‌های لایه ظرفیت برابر با ۱۵۰ ریذبرگ در نظر گرفته شده است. برای ممانعت از برهم‌کنش بین لایه‌های تکرار شونده، خلأیی در حدود ۲۰ آنگستروم در نظر گرفته شده است. تعداد نقاط  $K$  برابر  $40 \times 40 \times 1$  در نظر گرفته شده است. بعد از انجام محاسبات، فواصل اتمی کربن‌های درون لایه‌ای برای گرافن دولایه برابر ۱٫۴۲۶ آنگستروم به‌دست آمده است همچنین فاصله بین لایه‌ای در این ساختار برابر مقدار ۳٫۴۶۴

جدول ۱. (گرافن-بورنیتريد) در این جدول انتگرال‌های پرش درون لایه‌ای و بین لایه‌ای ما بین اتم صفرم و همسایه‌های اول، سوم و چهارم داده شده است (جهش بین جایگاه‌های غیر یکسان نوع A و نوع B).  $t_n$  پارامتر جهش درون لایه‌ای و  $t'_n$  پارامترهای جهش بین لایه‌ای می‌باشد که در آن  $n$  شماره همسایه و  $N_0$  تعداد اتم‌های آن همسایه می‌باشد.

$n$	$N_0$	$t_n$	$t'_n$
۱	۳	-۲,۹۹	-۰,۰۸
۳	۳	-۰,۲۳	۰,۰۰
۴	۶	۰,۰۵	۰,۰۰

جدول ۲. (گرافن-بورنیتريد) در این جدول انتگرال‌های پرش درون لایه ای و بین لایه‌ای ما بین اتم صفرم و همسایه‌هایی دوم و پنجم داده شده است (جهش بین جایگاه‌های یکسان نوع A). همانند جدول شماره ۱، انتگرال‌های پرش درون و بین لایه‌های به ترتیب با  $t_n$  و  $t'_n$  نشان داده شده است.  $\mathcal{E}_\alpha^{on}$  انرژی بر جایگاهی اتم‌های کربن در جایگاه‌های غیر یکسان نوع A و نوع B و همچنین بور و نیتروژن می‌باشد (

$$(\alpha = N, B, C_A, C_B)$$

n	۰	۲	۵
$N_0$	۱	۶	۶
$t_n$	$\mathcal{E}_B^{on} = ۳,۴۴$	۰,۲۱	۰,۰۵
	$\mathcal{E}_N^{on} = -۱,۳۴$		
	$\mathcal{E}_{C_A}^{on} = ۰,۰۰$		
	$\mathcal{E}_{C_B}^{on} = -۰,۲۰$		
$t'_n$	-۰,۵۰	۰,۰۰	۰,۰۰

ساختار نواری حاصله از این برازش در شکل ۷ نشان داده شده است.

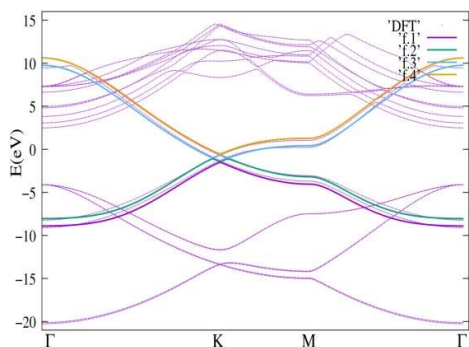
برای مقایسه بهتر و مشاهده اثر زیر لایه بورن نیتريد بر ساختار نواری گرافن، ساختار باند گرافن دولایه باز تولید شده از این روش، به‌ازای پارامترهای تنگ بست جدول شماره ۳ و ۴، در شکل ۸ داده شده است.

آنگستروم) با این نمودار در توافق می‌باشد. در نمودار ارائه شده در این مرجع، همان‌طور که انتظار می‌رود با افزایش فاصله بین لایه‌ای مقدار این گاف برای هر سه حالت فاز ساختاری ممکن کاهش می‌یابد. به‌ازای همه فواصل، همواره گاف انرژی ایجاد شده فاز پایدارتر AB از دو حالت ممکن دیگر کمتر و فاز AA همواره بیشتر است. این مقدار به‌ازای فاصله بین لایه‌ای ذکر شده حدوداً یک سوم حالت AA می‌باشد. در فاصله محاسبه شده در این مرجع (۳,۲۲ آنگستروم) مقدار این گاف ۰,۵۹ الکترون ولت به‌دست آمده است. این گاف برای گرافن دولایه AB در صورت اعمال ولتاژ گیت در حدود ۲۵۰-۲۰۰ میلی الکترون ولت می‌باشد.

### برازش داده‌های مدل تنگ بست

پارامترهای تنگ بست را می‌توان از برازش داده‌های به‌دست آمده از محاسبات تابعی چگالی و مدل تنگ بست به‌دست آورد.

برای این منظور هامیلتونی رابطه ۲۶ به‌صورت عددی قطری گردیده است و نتایج آن با محاسبات تابعی چگالی مقایسه گشته است. این پارامترها، مطابق شکل شماره ۶، برای گرافن-بورن نیتريد AA، به‌ازای جهش‌های بین جایگاهی (جایگاه‌های غیر یکسان) و جهش‌های درون جایگاهی (جایگاه‌های یکسان) به‌ترتیب در جدول شماره ۱ و جدول شماره ۲ داده شده است.



شکل ۸. برازش داده‌های مدل تنگ بست (خطوط پر رنگ) با نتایج حاصل از DFT (خطوط کم رنگ) برای گرافن دولایه.

بررسی داده‌های DFT و مدل تنگ بست، نشان می‌دهند که در هر دو ساختار گرافن دولایه و بورن نیتراید، پارامترهای جهش درون لایه‌ای برای هر دو لایه پایین و بالا درست مانند گرافن تک‌لایه هستند [۲۵]. با این تفاوت که اختلاف انرژی‌های برجایگاهی باعث ایجاد یک گاف بزرگ در نوار بورن نیتراید و یک گاف انرژی کوچک به اندازه  $0.2$  الکترون ولت (در نقطه دیراک) در نوار گرافنی شده است. این گاف ناشی از شکسته شدن تقارن برجایگاهی کربن‌های مختلف است. تفاوت دیگر اینکه در گرافن-بورنیتراید پارامترهای جهش بین لایه‌ای قوی‌تر و دوربردتر از گرافن دولایه خالص می‌باشد که با توجه به شعاع‌های اتمی و فواصل جذب بین لایه‌ای منطقی به نظر می‌رسد.

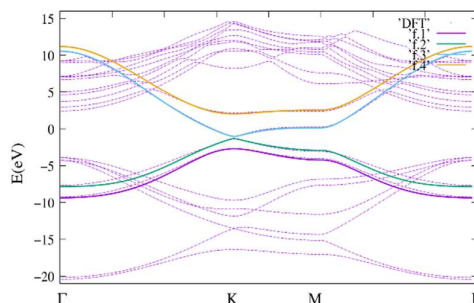
با توجه به اهمیت مطالعه گاف انرژی ایجاد شده، اغلب مطالعات انجام شده تا جایی که نویسنده مطلع است، بیشتر بر ارائه یک مدل تنگ بست در نزدیکی نقاط دیراک متمرکز بوده است برای نمونه مراجع [۱۵، ۲۴]. در این مراجع با ارائه یک مدل تنگ بست کمینه مبتنی بر تقریب نزدیکترین همسایه و پیش بینی انرژی برجایگاهی، در نزدیکی نقاط دیراک، ساختار نواری بر محاسبات تابعی چگالی برازش شده است. در این کار ما تلاش کرده‌ایم یک مدل تنگ بست واقع‌گرایانه‌تر تا تقریب همسایه پنجم ارائه دهیم. نتایج به دست آمده در

جدول ۳. (گرافن دو لایه AA) در این جدول انتگرال‌های پرش درون لایه‌ای و بین لایه‌ای ما بین اتم صفرم و همسایه‌های اول، سوم و چهارم داده شده است.  $t_n$  پارامتر جهش درون لایه‌ای و  $t'_n$  پارامترهای جهش بین لایه‌ای می‌باشد که در آن  $n$  شماره همسایه و  $N_0$  تعداد اتم‌های آن همسایه می‌باشد.

$n$	$N_0$	$t_n$	$t'_n$
۱	۳	-۲٫۹۹	-۰٫۰۸
۳	۳	-۰٫۲۳	۰٫۰۰
۴	۶	۰٫۰۵	۰٫۰۰

جدول ۴. (گرافن دو لایه AA) در این جدول انتگرال‌های پرش درون لایه‌ای  $t_n$  و بین لایه‌ای  $t'_n$  ما بین اتم صفرم و همسایه‌های صفرم، دوم و پنجم داده شده است (جایگاه‌های یکسان).

$n$	$N_0$	$t_n$	$t'_n$
0	۱	۰٫۰۰	-۰٫۳۰
2	۶	۰٫۲۱	۰٫۰۰
5	۶	۰٫۰۵	۰٫۰۰



شکل ۷. برازش داده‌های مدل تنگ بست (خطوط پر رنگ) با نتایج حاصل از DFT (خطوط کم رنگ) برای گرافن تک لایه بر بستر بورن نیتراید شش گوش.

این مقاله، دریافت‌های مقالات ذکر شده را تکمیل و تقویت کرده است.

یک نوار نسبتاً تخت پیرامون نقاط تکینگی گرافن در نزدیکی نقطه M وجود دارد که نشان می‌دهد اثرات همبستگی الکترونی در این ساختار نیز مانند گرافن خالص، ممکن است به ایجاد برخی خواص مهم فیزیکی مانند القا ابررسانی بیانجامد. از مقایسه ساختار نواری بخش گرافنی شکل ۴ با ساختارهایی مانند گرافن دولایه ایترکلیت شده (درج متناوب اتم‌ها) با فلزات قلیایی مانند لیتیم و کلسیم [۲۲]، به نظر می‌رسد تشابه‌های جالبی ممکن است وجود داشته باشد که نیازمند توجه بیشتر است. در ساختارهایی مانند گرافن دولایه ایترکلیت شده با لیتیم، این اتم با تزریق تک الکترون خود به اربیتال‌های کربنی، کاملاً یونیزه می‌شود و باند تخت بخش زوج ساختار نواری گرافن دولایه، بر سطح فرمی مماس می‌شود، اما از آنجا که تقارن اجازه جفت شدگی فونونی بیرون از صفحه را نمی‌دهد، برخلاف ایترکلیت با کلسیم، خاصیت ابررسانایی القا نمی‌شود (اربیتال فلزی کاملاً خالی می‌گردد). به نظر می‌رسد ایترکلیت کردن گرافن بورنیتراید با اتم‌های نظیر لیتیم رفتار مشابهی هم از دید ساختار شبکه‌ای و هم از نگاه ساختار الکترونی داشته باشد که نیازمند مطالعات فونونی و الکترونی مبتنی بر محاسبات تابعی چگالی است. چنانچه این پیش‌بینی درست باشد آنگاه با توجه به عدم وجود تقارن خارج از صفحه می‌توان انتظار القای ابررسانایی در این مواد را داشت.

### نتیجه‌گیری

در این مقاله با مرور برخی ساختارهای دو بعدی مهم، یک مدل هامیلتونی مؤثر مبتنی بر مدل تنگ بست واقع بینانه معرفی شده است. همچنین، امکان رشد و ساختار الکترونی تک‌لایه گرافن بر بستر زیر لایه

بورنیتراید، در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی کوآنتوم اسپرسو، مورد مطالعه قرار گرفت و نتایج با حالت گرافن دولایه مقایسه شده است. پارامترهای تنگ بست تا همسایه پنجم، از برازش داده‌های این مدل و محاسبات تابعی چگالی به دست آمده است و ساختار نواری این مواد با استفاده از این مدل، باز تولید شده‌اند. بررسی داده‌های DFT و مدل تنگ بست، نشان می‌دهند که در هر دو ساختار گرافن دولایه و بورن نیتراید، پارامترهای جهش درون لایه‌ای برای هر دو لایه پایین و بالا درست مانند گرافن تک لایه هستند. اختلاف انرژی‌های برجایگاهی باعث ایجاد یک گاف بزرگ در نوار بورن نیتريد و یک گاف انرژی کوچک به اندازه ۰٫۲ الکترون‌ولت (در نقطه دیراک) در نوار گرافنی شده است. این گاف ناشی از شکسته شدن تقارن برجایگاهی کربن‌های مختلف است. تفاوت دیگر اینکه در گرافن-بورنیتراید پارامترهای جهش بین لایه‌ای قویتر و دوربردتر از گرافن دولایه خالص می‌باشد. مقدار قابل چشم پوشی اعوجاج در لایه‌ها دیده می‌شود همچنین انرژی تشکیل بورن نیتريد از گرافن دولایه خالص AA کمتر است. با در نظر گرفتن شعاع‌های اتمی نیتروژن و بور و اختلاف الکترونگاتیویته این اتم‌ها نسبت به کربن و فواصل جذب بین لایه‌ای این نتایج منطقی به نظر می‌رسد.

### سپاسگزاری

نویسنده مقاله، مراتب قدردانی صمیمانه خود به خاطر حمایت‌های مالی و استفاده از امکانات دانشگاه ایلام، را اعلام می‌نماید. همچنین نویسنده، از راهنمایی‌ها، همفکری و کمک‌های جناب پروفیسور رستم مرادیان، نهایت سپاس و تقدیر خود را به عمل می‌آورد.

## مرجع‌ها

- [8] Q.H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J.N. Coleman, M.S. Strano, Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides, *Nature Nanotechnology* **7** (2012) 699-712. <https://doi.org/10.1038/nnano.2012.193>
- [9] Y. Zhang et al., Controlled Growth of High-Quality Monolayer WS<sub>2</sub> Layers on Sapphire and Imaging Its Grain Boundary, *ACS Nano* **7** (2013) 8963-8971. <https://doi.org/10.1021/nn403454e>
- [10] L. Song et al., Large scale growth and characterization of atomic hexagonal boron nitride layers, *Nano Letters* **10** (2010) 3209-3215. <https://doi.org/10.1021/nl1022139>
- [11] K.S. Novoselov et al., Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene, *Nature* **438** (2005) 197-200. <https://doi.org/10.1038/nature04233>
- [12] I. Meric et al., Current saturation in zero-bandgap, topgated graphene field-effect transistors, *Nature Nanotechnology* **3** (2008) 654-659. <https://doi.org/10.1038/nnano.2008.268>
- [13] J. Bai et al., Graphene nanomesh, *Nature Nanotechnology* **5** (2010) 190-194. <https://doi.org/10.1038/nnano.2010.8>
- [14] M. Katsnelson, K. Novoselov, A. Geim, Chiral tunneling and the Klein paradox in graphene, *Nature Physics* **2** (2006) 620-625. <https://doi.org/10.1038/nphys384>
- [15] G. Giovannetti, P.A. Khomyakov, G. Brocks, P.J. Kelly, J. van den Brink, Substrate-induced band gap in graphene
- [1] K.S. Novoselov et al., Electric field effect in atomically thin carbon films, *Science* **306** (2004) 666-669. [DOI: 10.1126/science.1102896](https://doi.org/10.1126/science.1102896)
- [2] A.K. Geim, K.S. Novoselov, The rise of graphene, *Nature Materials* **6** (2007) 183-191. <https://doi.org/10.1038/nmat1849>
- [3] J. Scott Bunch et al., Coulomb oscillations and Hall effect in quasi-2D graphite quantum dots, *Nano Letters* **5** (2005) 287-290. <https://doi.org/10.1021/nl048111+>
- [4] Y.B. Zhang, Y.W. Tan, H.L. Stormer, P. Kim, Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene, *Nature* **438** (2005), 201-204. <https://doi.org/10.1038/nature04235>
- [5] C.H. Park, L. Yang, Y.W. Son, M.L. Cohen, S.G. Louie, New generation of massless Dirac fermions in graphene under external periodic potentials, *Physical Review Letters* **101** (2008), 126804. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.126804>
- [6] D. Pacile, J.C. Meyer, C.O. Girit, A. Zettl, The two-dimensional phase of boron nitride: Few-atomic-layer sheets and suspended membranes, *Applied Physics Letters* **92** (2008) 133107. <https://doi.org/10.1063/1.2903702>
- [7] C.T. Pan et al., Nanoscale electron diffraction and plasmon spectroscopy of single- and few-layer boron nitride, *Physical Review B* **85** (2012). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.045440>

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.L081106>

[22] R. Gholami, R. Moradian, S. Moradian, W.E. Pickett, "Superconducting Symmetry Phases and Dominant bands in (Ca-) Intercalated AA- Bilayer Graphene" *arXiv preprint arXiv:1904.02814*

[23] A.O. Sboychakov, A.L. Rakhmanov, A.V. Rozhkov, F. Nori, Bilayer graphene can become a fractional metal, *Physical Review B* **103** (2021) L081106. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.L081106>

[24] R.M. Ribeiro, N.M.R. Peres, Stability of boron nitride bilayers: Ground-state energies, interlayer distances, and tight-binding description, *Physical Review B* **83** (2011) 235312. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.235312>

[25] J. Jung, A.H. MacDonald, Accurate tight-binding models for the  $\pi$  bands of bilayer graphene, *Physical Review B* **89** (2014) 035405. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.035405>

[26] G. Constantinescu, A. Kuc, T. Heine, Stacking in Bulk and Bilayer Hexagonal Boron Nitride, *Physical Review Letters* **111** (2013) 036104. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.036104>

[27] S.M. Gilbert *et al*, Alternative stacking sequences in hexagonal boron nitride, *2D Materials* **6** (2019) 021006. [DOI:10.1088/2053-1583/AB0E24](https://doi.org/10.1088/2053-1583/AB0E24)

on hexagonal boron nitride: Ab initio density functional calculations, *Physical Review B* **76** (2007) 073103. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.073103>

[16] J. Sławińska, I. Zasada, Z. Klusek, Energy gap tuning in graphene on hexagonal boron nitride bilayer system, *Physical Review B* **81** (2010), 155433. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.155433>

[17] A. Black-Schaffer, S. Doniach, Resonating valence bonds and mean-field d-wave superconductivity in graphite, *Physical Review B* **75** (2007) 134512. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.134512>

[18] R. Gholami, R. Moradian, S. Moradian, W.E. Pickett, Superconducting Phases in Lithium Decorated Graphene LiC<sub>6</sub>, *Scientific reports* **8** (2018) 13795. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-32050-9>

[19] Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang *et al.*, Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices, *Nature* **556** (2018) 43–50. <https://doi.org/10.1038/nature26160>

[20] G.X. Ni, H. Wang, B.Y. Jiang, *et al.*, Soliton superlattices in twisted hexagonal boron nitride, *Nature Communications* **10** (2019) 4360. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-12327-x>

[21] M. Sanderson, Y.S. Ang, C. Zhang, Klein tunneling and cone transport in AA-stacked bilayer graphene, *Physical Review B* **88** (2013) 245404.