

# Electronic transport properties of doped graphene-like borophene by ab initio calculations

Mansoureh Pashangpour<sup>1,\*</sup>, Somayeh Fotoohi<sup>2</sup>

Department of Physics, Islamshahr Branch, Islamic Azad University, Islamshahr, Iran<sup>1</sup>

Department of Electrical Engineering, Islamshahr Branch, Islamic Azad University,  
Islamshahr, Iran<sup>2</sup>

Received: 14.07.2019    Final revised: 17.03.2021    Accepted: 26.04.2021

DOI: [10.22055/JRMBS.2021.16784](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.16784)

## Abstract

In this paper, the electronic transport properties of graphene-like borophene as well as its doped structures with boron, carbon and nitrogen atoms are investigated using the density functional theory. Total and partial density of states, band structure, charge density, quantum conductance and current-voltage characteristic of these structures have been studied and compared. The results indicate that graphene-like borophene is a metal, and has a Dirac point with a linear dispersion relation similar graphene. Our investigations demonstrate that the Dirac point is in upper place than the Fermi level, and the doping can affect the location of Dirac point. Moreover, the current-voltage characteristics show Ohmic behavior of these structures. In doped graphene-like borophene structures, boron atoms are formed ionic bonds. In all considered structures, the current density along zigzag and armchair directions exhibit an anisotropic behavior. By 90° rotation of graphene-like borophene sheet with carbon atom, its current is controlled and this material can be used to design nanoelectronic switches. The current control with C atom doping can be used in this two-dimensional material to design nanoelectronic switches.

**Keywords:** Graphene-like Borophene, Density functional theory, Density of states, Quantum transport

---

\*Corresponding Author: poor@iaau.ac.ir



## مطالعه تأثیر آرایش بر خواص ترابرد الکترونی بوروفین گرافین گونه با محاسبات ابتدا به ساکن

منصوره پشنگ پور<sup>1\*</sup>، سمیه فتوحی<sup>2</sup>

<sup>1</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، واحد اسلامشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، اسلامشهر، ایران

<sup>2</sup>گروه مهندسی برق، دانشکده فنی و مهندسی، واحد اسلامشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، اسلامشهر، ایران

دریافت: 1398/04/23 ویرایش نهایی: 1399/12/27 پذیرش: 1400/02/06

DOI: [10.22055/JRMBS.2021.16784](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.16784)

### چکیده

در این مقاله، بوروفین گرافین گونه که اخیراً ساخت تجربی آن روی زیر لایه (111) AI گزارش شده است و سه ساختار آلییده آن با بور، کربن و نیتروژن از طریق نظریه تابعی چگالی مطالعه شده است. چگالی حالات کلی و جزئی، ساختار نوارهای انرژی، چگالی بار، رسانش کوآنتمی و نمودارهای جریان-ولتاژ این ساختارها بررسی و مقایسه شده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که بوروفین گرافین گونه فلز است و همانند گرافین، نقطه دیراکی با رابطه پاشندگی خطی داشته که در مکانی بالاتر از تراز فرمی قرار دارد و آرایش آن با اتم‌های بور، کربن و نیتروژن باعث جابه‌جایی مکان نقطه دیراک می‌گردد. اتم‌های بور در بوروفین آرایش شده درگیر پیوندهای یونی می‌شوند. همچنین نتایج نشان می‌دهد که نمودارهای جریان-ولتاژ ساختارهای مورد مطالعه رفتار اهمی دارند. چگالی جریان ناهمسانگرد در دو راستای زیگزآگ و آرمچیر با قابلیت کنترل جریان توسط آرایش، استفاده از این ماده دو بعدی را در طراحی سوپ‌های نانو الکترونیک ممکن می‌سازد.

**کلیدواژگان:** بوروفین گرافین گونه، نظریه تابعی چگالی، چگالی حالات، انتقال الکترونی

### مقدمه

که در سال 2015 به‌طور تجربی در شرایط خلأ کامل روی زیر لایه (111) Ag رشد داده شده است [6]. ساختارهای دو بعدی مختلفی از بوروفین در شکل‌های مثلثی چروکیده و همچنین با حفره‌های ششگوشی مشاهده شده است [7]. مشابه دیگر مواد دو بعدی، بوروفین نیز خواص الکترونیکی، مکانیکی، ابرسانایی و رسانش گرمایی جالب توجه‌ای از خود نشان می‌دهد که از آن جمله می‌توان به‌خصوصیت فلزی و مکانیکی با ناهمسانگردی بالا، رسانش گرمایی و دمای ابرسانایی پایین اشاره نمود [8-12]. مطالعات روی خواص مکانیکی بوروفین نشان می‌دهد که این ساختار در یک

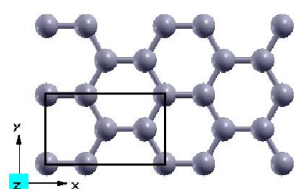
ساختارهای دو بعدی در دهه گذشته مورد توجه بسیاری از محققین و پژوهشگران قرار گرفته‌اند. گرافین شبه‌فلزی با فرمیون‌های بدون جرم، یکی از این مواد دو بعدی است که قابلیت رسانش الکتریکی بسیار خوبی دارد و گزینه مناسبی برای کاربرد در قطعات نانو الکترونیکی است. پس از گرافین [1] به تدریج مواد دو بعدی عنصری دیگری مانند فسفرین [2]، ژرمانین [3]، سیلیسین [4]، استانین [5]، بوروفین [6] و ... سنتز و مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. در این میان بوروفین، تک لایه‌ای از اتم‌های بور، ساختار دو بعدی جدیدی است

\* نویسنده مسئول: poor@iiu.ac.ir

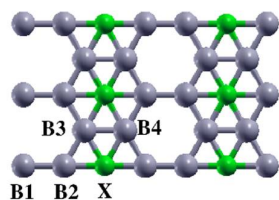


### مراحل محاسبات ساختار الکترونی

محاسبات ساختار الکترونی بر اساس نظریه تابعی چگالی با تقریب گرادیان تعمیم یافته توسط کد محاسباتی کوآنتوم اسپرسو [17] و محاسبات مربوط به رسانش کوآنتومی توسط کد WanT [18] انجام شده است. سلول واحد، ارتورومبیک (راست لوزی ساده) و شامل چهار اتم بور در نظر گرفته شده است (شکل الف). ثابت‌های شبکه  $a=5/079\text{\AA}$ ،  $b=2/93\text{\AA}$  و  $c=20\text{\AA}$  به دست آمده‌اند که با نتایج تحقیق قبلی مطابقت دارد [19]. خلأ بین صفحات بوروفین در جهت محور Z به منظور حذف برهم‌کنش لایه‌های موازی بوروفین  $20\text{\AA}$  در نظر گرفته شده است. انرژی قطع  $50\text{Ryd}$  و سلول بندی ناحیه اول بریلئون  $1 \times 20 \times 16$  انتخاب شده‌اند [20]. واهلش کامل شبکه و مکان اتم‌ها تا نیروی  $10^{-3} \frac{eV}{\text{\AA}}$  انجام شده است. فاصله اتم‌های بور با نزدیکترین همسایه خود  $1/693\text{\AA}$  به دست آمده است.



الف



ب

شکل 1. الف: دید از بالای بوروفین گرافین گونه خالص و سلول واحد آن. ب: دید از بالای بوروفین گرافین گونه آرایش شده که X نشانگر اتم بور، کربن یا نیتروژن در ساختار آلایده است.

راستا سخت و در راستای دیگر شکننده است [9 و 12]. با توجه به خواص جالب بوروفین، این ماده قابلیت استفاده در ادوات نانوالکترونیک خواهد داشت. ساختار دیگری از بوروفین که به شکل لانه زنبوری (بوروفین گرافین گونه) است در سال 2018 روی زیر لایه  $\text{Al}(111)$  در آزمایشگاه سنتز شد [13]. این شکل از بوروفین، به دلیل الکترون پذیری بالای بور بدون زیرلایه ناپایدار است. آرایش بوروفین گرافین گونه مانند ساختارهای دو بعدی دیگر می‌تواند بر خواص فیزیکی و شیمیایی بوروفین تأثیر گذاشته و باعث پایداری آن شود. نتایج پژوهش شاهرخی در سال 2019 نشان می‌دهد که ساختار بوروفین گرافین گونه با آرایش فلوئور و کلر پایدار است [14]. در پژوهش‌های دیگر نیز پایداری و خواص ترابرد الکترونی بوروفین گرافین گونه با آرایش اکسیژن [15]، هیدروژن و فلوئور [16] بررسی شده است. از آنجائی که اتم‌های کربن و نیتروژن در جدول مندلیف در همسایگی اتم بور قرار دارند، گزینه‌های مناسبی برای افزودن به این ماده دو بعدی هستند.

بنابراین در این پژوهش ساختار الکترونی و خواص انتقال الکترونی بوروفین گرافین گونه بدون و با آرایش بور، کربن و نیتروژن با استفاده از نظریه تابعی چگالی بررسی و مقایسه خواهد شد. همچنین تأثیر آرایش بر عملکرد و تغییر میزان ناهمسانگردی در انتقال الکترونی بوروفین گرافین گونه بررسی می‌شود. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که چگالی جریان در دو راستای زیگزاگ و آرمجیر برای ساختارهای مورد مطالعه، ناهمسانگرد است. همچنین نوع آرایش، روی مقدار چگالی جریان در این دو راستا و میزان ناهمسانگردی آن تأثیر گذار می‌باشد. از این قابلیت می‌توان در طراحی سوپرجای نانوالکترونیک استفاده نمود.

حفره‌های شش‌گوشی در ساختار بوروفین گرافین‌گونه (شکل الف 1) فضای مناسبی برای آرایش آن با اتم‌های کوچک است. در این پژوهش، هدف بررسی ویژگی‌های الکترونیکی و انتقالی ساختار بوروفین گرافین‌گونه خالص و آلیاژ با اتم‌های کربن، بور و نیتروژن (شکل 1ب) است. در شبیه‌سازی‌ها، سلول واحد ارتورومبیک شامل چهار اتم بور برای بوروفین گرافین‌گونه و یک اتم بور (کربن و یا نیتروژن) به‌عنوان آرایش در نظر گرفته شده است.

بوروفین گرافین‌گونه خالص در فاصله کمتری نسبت به تراز فرمی قرار دارد.

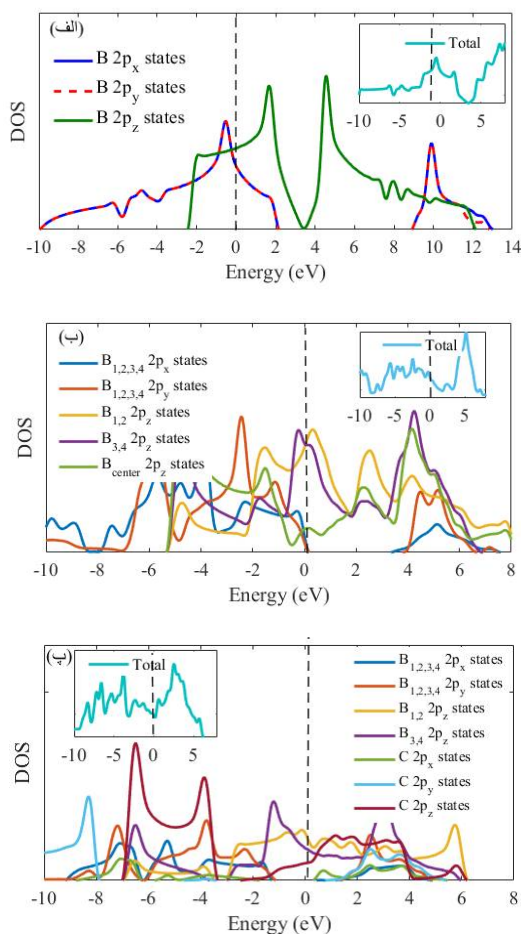
مطابق شکل نمودار چگالی حالات جزئی بوروفین گرافین‌گونه با آرایش بور (شکل 2ب) درمی‌یابیم که نقطه دیراک توسط اوربیتال‌های pz (بین  $\pi$  و  $\pi^*$ ) تشکیل شده است. نقطه دیراک وسط گاف میان  $\sigma$  و  $\sigma^*$  قرار گرفته است. همچنین تراز فرمی بر لبه اوربیتال  $\sigma$  منطبق است (شکل 2ب). مطابق شکل نمودار چگالی حالات جزئی بوروفین گرافین‌گونه با آرایش بور (شکل 2پ)، اوربیتال  $\sigma$  پایین تر از تراز فرمی قرار گرفته و تراز فرمی به اوربیتال  $\sigma^*$  نزدیک شده است.

## نتایج ساختار الکترونی بوروفین گرافین‌گونه خالص و با آرایش

شکل 2 چگالی حالات کل بوروفین گرافین‌گونه خالص و همچنین دارای آرایش کربن، بور و نیتروژن را نشان می‌دهد. همچنین در این شکل چگالی حالات جزئی برای اوربیتال‌های px، py و pz نشان داده شده است.

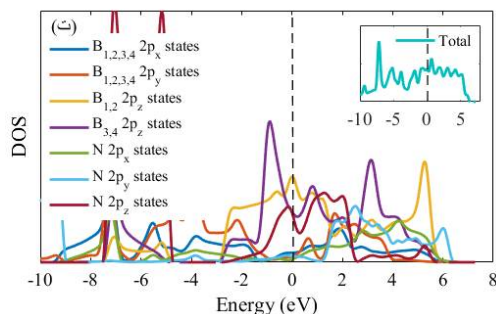
شکل 3 ساختار نوارهای انرژی بوروفین گرافین‌گونه خالص و با آرایش را نشان می‌دهد. با توجه به ساختار نوارهای انرژی بوروفین گرافین‌گونه، نقطه دیراک به‌اندازه  $3/44\text{eV}$  بالاتر از تراز فرمی و در مسیر تقارنی  $\Gamma - Y$  تشکیل شده است. نمودار PDOS متناظر با آن نشان می‌دهد که مخروط دیراک توسط اوربیتال‌های pz (بین  $\pi$  و  $\pi^*$ ) ایجاد شده است (شکل الف 3). همان طوری که در شکل الف-2 مشاهده می‌شود تراز فرمی اوربیتال‌های  $\sigma$  را قطع می‌کند.

مطابق شکل 2، برای ساختارهای بوروفین گرافین‌گونه با آرایش بور، کربن و نیتروژن نقطه دیراک، به‌ترتیب در انرژی  $1/2\text{eV}$ ،  $0/32\text{eV}$ ،  $1/84\text{eV}$  و بالاتر از تراز فرمی نیز مشاهده می‌شود و نکته قابل توجه آن است که نقطه دیراک در ساختارهای با آرایش نسبت به نقطه دیراک



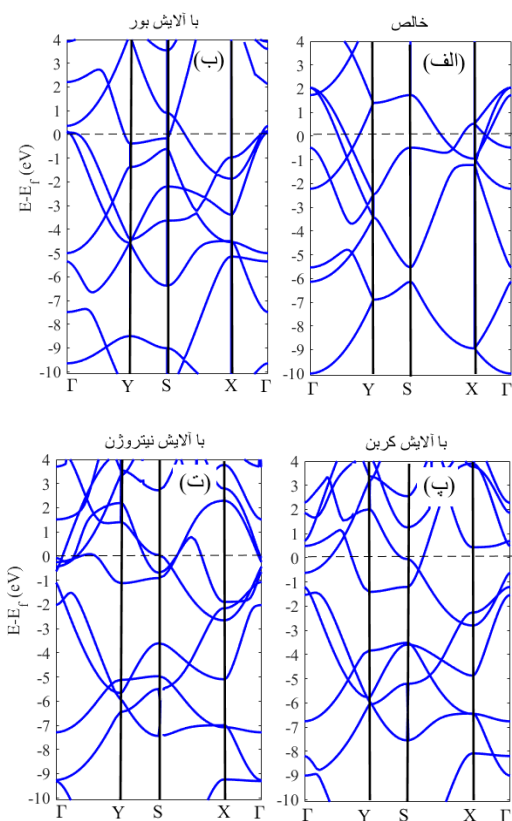
جدول 1. درصد سهم اوربیتال‌های pz در چگالی حالات الکترونی در تراز فرمی

ساختار	B1(B2)	B3(B4)	آرایش
بوروفین گرافین گونه	9,7%	9,7%	-
بوروفین گرافین گونه با آرایش بور	17%	17%	3,8%
بوروفین گرافین گونه با آرایش کربن	23,2%	15,4%	10,2%
بوروفین گرافین گونه با آرایش نیتروژن	15,8%	9,6%	9,6%



شکل 2. نمودار چگالی حالات جزئی بوروفین گرافین گونه الف: خالص ب: آرایش شده با بور، پ: آرایش شده با کربن و ت: آرایش شده با نیتروژن. انرژی فرمی به صفر انتقال داده شده است.

سهم عمده چگالی حالات الکترونی بوروفین گرافین گونه با آرایش بور، کربن و نیتروژن در نزدیک تراز فرمی، مربوط به اوربیتال‌های pz است در حالی که برای بوروفین گرافین گونه بدون آرایش، هر سه اوربیتال px، py و pz در اطراف تراز فرمی توزیع شده‌اند. درصد سهم هر یک از اوربیتال‌های px، py و pz در چگالی حالات الکترونی در تراز فرمی برای اتم B بوروفین گرافین گونه بدون آرایش به ترتیب 7,1%، 7,1% و 9,7% می‌باشد (جدول 1). درصد سهم اوربیتال pz برای اتم B شماره 1 (2، 3 و 4) در ساختار آلئیده با بور، 17% است. این سهم برای ساختار آلئیده با کربن برای اتم B شماره 1 (2) و 3 (4) به ترتیب 23,2% و 15,4% و برای ساختار آلئیده با نیتروژن برای اتم B شماره 1 (2) و 3 (4) به ترتیب 15,8% و 9,6% می‌باشد. همچنین درصد سهم اوربیتال pz اتم بور، کربن و نیتروژن در ساختار آلئیده به ترتیب 3,8%، 10,2% و 9,6% است. سهم اوربیتال‌های px، py در ساختارهای آلئیده مطالعه شده در مقایسه با سهم اوربیتال pz ناچیز است.

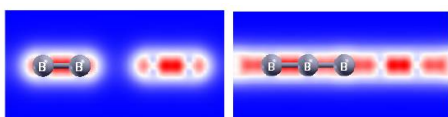


شکل 3. ساختار نواری بوروفین گرافین گونه الف: خالص. ب: آرایش شده با بور، پ: آرایش شده با کربن و ت: آرایش شده با نیتروژن. انرژی فرمی به صفر انتقال داده شده است.

با توجه به ساختار نواری بوروفین گرافین گونه، نوار انرژی در دو طرف نقطه S، مسطح شده است که باعث ایجاد دو پیک وان-هوف را در نمودار PDOS در طرفین انرژی فرمی شده است. ساختار نواری و چگالی

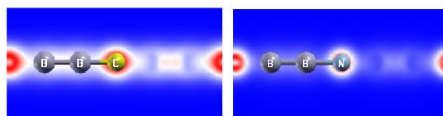
نواحی قرمز رنگ، بیشترین چگالی بار و نواحی آبی رنگ، کمترین چگالی بار را مشخص می‌کنند.

شکل 4، چگالی بار در صفحه (001) و شکل 5 چگالی بار در صفحه (010) را برای ساختارهای بوروفین گرافین خالص و آلایش شده با اتم‌های بور، کربن و نیتروژن را نشان می‌دهند. همان‌طور که مشاهده می‌شود توزیع بار برای بوروفین گرافین گونه خالص در طول پیوندهای B-B به شکل متقارن است در صورتی که با آلایش، توزیع بار پیوندهای B-B در اطراف محل آلایش نامتقارن شده است. چگالی بار بر اساس چگالی بار لایه ظرفیت، با استفاده از روش لودین محاسبه شده است.



ب

الف



ت

پ

شکل 5، چگالی بار بوروفین گرافین گونه در صفحه (010) الف: خالص ب: آلایش شده با بور، پ: آلایش شده با کربن و نیتروژن. نواحی قرمز رنگ، بیشترین چگالی بار و نواحی آبی رنگ، کمترین چگالی بار را مشخص می‌کنند.

### روش محاسبات رسانش کوانتومی

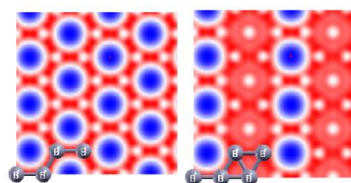
محاسبات مربوط به رسانش کوانتومی توسط کد WanT انجام شده است. در این کد رسانش کل سیستم بر اساس فرمولبندی لاندائور با توجه به تابع عبور،  $T(E_f)$ ، قابل محاسبه است [22]:

$$C = \frac{2e^2}{h} T(E_f) = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}(\Gamma_L G_C^r \Gamma_R G_C^a)$$

حالات به‌دست آمده برای بوروفین گرافین گونه با آلایش بور، توافق خوبی با نتایج پژوهش علیزاده و اجاری و همکارانش دارد [21].

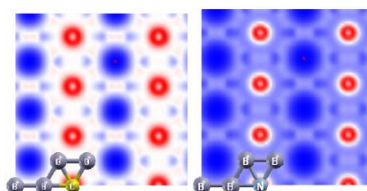
ساختار بوروفین گرافین گونه، نسبت به اتم‌های ناخالصی بور و کربن، الکترون گیرنده و نسبت به اتم ناخالصی نیتروژن، الکترون دهنده است. مقدار بار  $0/021 e^-$  و  $0/006 e^-$  به ترتیب از اتم‌های بور و کربن به سلول واحد بوروفین گرافین گونه منتقل می‌شود در حالی که با آلایش نیتروژن، بار  $0/134 e^-$  از سلول واحد بوروفین گرافین گونه به اتم نیتروژن انتقال می‌یابد. انرژی فرمی بوروفین گرافین گونه بدون آلایش  $-4/2350 \text{ eV}$  است که با آلایش بور، کربن و نیتروژن به ترتیب به  $-2/9679 \text{ eV}$ ،  $-2/7247 \text{ eV}$ ،  $-3/2779 \text{ eV}$  تغییر می‌کند.

انرژی جذب  $E_{cl} = E_{Total} - (E_{g-borophene} + E_{center-atom})$  برای بوروفین گرافین گونه با آلایش بور، کربن و نیتروژن به ترتیب  $-8/39 \text{ eV}$ ،  $-7/61 \text{ eV}$  و  $-4/51 \text{ eV}$  به‌دست آمده است که مقدار بالای انرژی جذب، نشانگر پایداری ساختارهای آلییده می‌باشد.



ب

الف

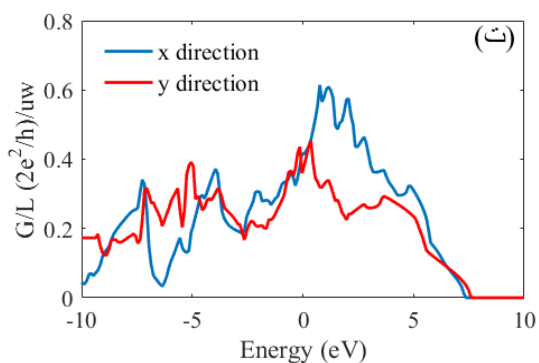
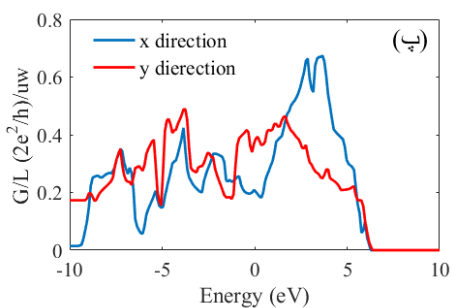
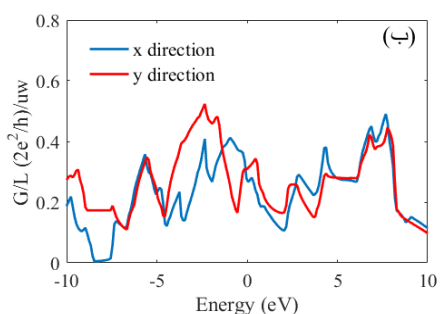
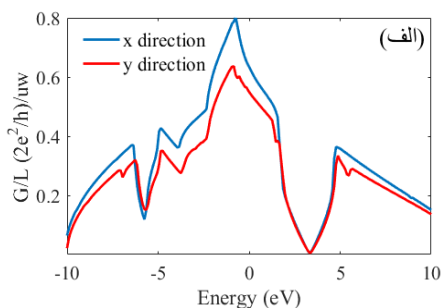


ت

پ

شکل 4، چگالی بار الف: بوروفین گرافین گونه خالص ب: آلایش شده با بور، پ: آلایش شده با کربن و نیتروژن در صفحه (001).

از جهت  $y$  (زیگزاگ) به دست آمده است.



شکل 6. رسانش کوآنتمی بوروفین گرافین گونه (الف) خالص (ب) آرایش شده با بور، (پ) آرایش شده با کربن و (پ) آرایش شده با نیتروژن. انرژی فرمی به صفر انتقال داده شده است.  $uw$  (unit cell width) طول سلول واحد در راستای عمود بر انتقال است.

که  $G_C^{\{r,a\}}$  توابع گرین پیشرو و پسروی رسانا هستند.

توابع گرین پیشرو و پسرو سیستم از معادله زیر به دست

$$\text{می آید: } \omega \rightarrow 0^\pm [\omega \pm i\eta - H]G_C^{\{r,a\}}(\omega) = I$$

جفت شدگی رسانا به الکترودها را بیان می کند

که به خودانرژی های پیشرو و پسرو وابسته است:

$$(\Gamma_{\{L,R\}} = i\Sigma_{\{L,R\}}^r - \Sigma_{\{L,R\}}^a)$$

به منظور محاسبه جریان عبوری از سیستم، فرمول

لانداور-بوتیکر،

$$I(V_b) = \frac{2e}{h} \int T(E, V_b) [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)] dE$$

، استفاده شده است که در آن ولتاژ بایاس،

$$f(E - \mu_{\{L,R\}}) = \frac{1}{1 + e^{(E - \mu_{\{L,R\}})/k_B T}}$$

دیراک می باشند.  $\mu_L$   $\mu_R$  پتانسیل الکتروشیمیایی

الکتروود راست (چپ) است.

نتایج رسانش کوآنتمی بوروفین گرافین گونه

بدون و با آرایش

در این بخش با استفاده از توابع وانیر و فرمولبندی

لانداور، رسانش کوآنتمی بوروفین گرافین گونه خالص

و با آرایش برای انتقال الکترون در راستای  $x$  و  $y$  محاسبه

شده است.

با توجه به شکل 6، کمترین مقدار رسانش کوآنتمی برای

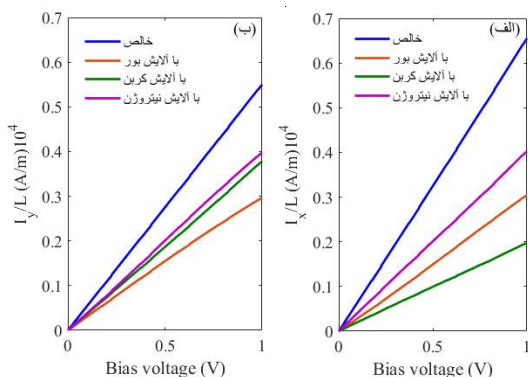
بوروفین گرافین گونه خالص اطراف نقطه دیراک است و

همچنین بیشترین مقدار رسانش کوآنتمی برای هر دو

جهت انتقال، نزدیک تراز فرمی می باشد. قابل ذکر است

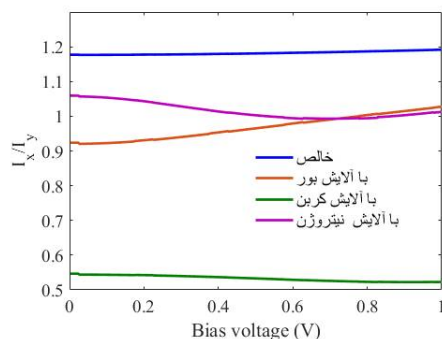
که مقدار رسانش کوآنتمی در جهت  $x$  (آرمچر) بیشتر





شکل 7. نمودار چگالی جریان در راستای الف: x و ب: y برحسب ولتاژ بایاس برای بوروفین گرافین‌گونه خالص، آلیش شده با بور، کربن و نیتروژن.

ناهمسانگردی در  $I_x$  و  $I_y$  بوروفین گرافین‌گونه و بوروفین گرافین‌گونه با آلیش کربن دیده می‌شود ولی نوع ناهمسانگردی این دو ساختار با یکدیگر متفاوت است.



شکل 8. نمودار نسبت چگالی جریان در راستای x به y برحسب ولتاژ بایاس برای بوروفین گرافین‌گونه خالص، آلیش شده با بور، کربن و نیتروژن.

در شکل 8، نسبت  $I_x / I_y$  در محدوده ولتاژ بایاس 0-1 ولت نشان داده شده است. این نسبت می‌تواند معیار سنجش میزان ناهمسانگردی در دو جهت x و y باشد. مقدار این نسبت هر چقدر از یک فاصله بیشتری داشته باشد میزان ناهمسانگردی نیز بیشتر خواهد بود. نسبت  $I_x / I_y$  برای بوروفین گرافین‌گونه خالص و با آلیش کربن در محدود ولتاژ مورد مطالعه، مقدار تقریباً ثابتی به ترتیب 1/2 و 0/5 است. این دو ساختار

در هر چهار ساختار مورد مطالعه، مقدار رسانش در نقطه دیراک کمینه موضعی دارد. نکته قابل توجه آنکه رفتار رسانش بوروفین گرافین‌گونه خالص و دارای آلیش در دو جهت x و y متفاوت است که نشاگر ناهمسانگردی خواص انتقالی این ساختارها است. رسانش بوروفین گرافین‌گونه با آلیش کربن اطراف تراز فرمی در جهت y تقریباً دو برابر رسانش در جهت x است. نتایج به دست آمده برای رسانش بوروفین گرافین‌گونه با آلیش بور با نتایج پژوهش شوکلا [23]، توافق خوبی دارد.

نمودارهای جریان-ولتاژ (شکل 7) نیز نتایج مشاهده شده در رسانش این ساختارها را تأیید می‌کنند. رفتار اهمی در نمودارهای جریان-ولتاژ این ساختارها مشاهده می‌شود. آلیش-چگالی جریان در هر دو جهت x و y را کاهش می‌دهد. با توجه به شکل 7، آلیش با بور (کربن) بیشترین تغییرات را در  $I_x I_y$  نسبت به ساختار خالص ایجاد کرده است. کمترین تغییرات در چگالی‌های جریان برای بوروفین گرافین‌گونه با آلیش نیتروژن مشاهده می‌شود. در محدوده ولتاژ بایاس 0 تا 1 ولت، نسبت چگالی جریان در جهت x به چگالی جریان در جهت y ( $I_x / I_y$ ) برای بوروفین گرافین‌گونه با شیب بسیار کم از 1/18 به 1/19 افزایش می‌یابد. این نسبت در بوروفین گرافین‌گونه با آلیش بور از 0/9 به 1/03 افزایش و برای آلیش با نیتروژن از 1/06 به 1/01 کاهش دارد و برای بوروفین گرافین‌گونه با آلیش کربن از 0/52 به 0/55 افزایش می‌یابد. میزان ناهمسانگردی در چگالی جریان و رسانش کوآنتمی در بوروفین گرافین‌گونه با آلیش کربن از دو آلیش دیگر بیشتر است. این ناهمسانگردی در چگالی جریان برای بوروفین گرافین‌گونه با آلیش بور و نیتروژن تقریباً ناچیز است. چگالی جریان به دست آمده برای بوروفین گرافین‌گونه با آلیش بور با نتایج پژوهش شوکلا [23]، توافق خوبی دارد.



و رسانش کوآنتومی در بوروفین گرافین گونه با آلایش کربن از دو ساختار آلاییده دیگر بیشتر می‌باشد. ناهمسانگردی در چگالی جریان برای بوروفین گرافین گونه با آلایش بور و نیتروژن تقریباً نامحسوس است. نمودارهای جریان-ولتاژ رفتار اهمی این ساختارها را نشان می‌دهد. نسبت  $I_x / I_y$  در ولتاژ باباس 1 ولت برای بوروفین گرافین گونه 1/19، بوروفین گرافین گونه با آلایش بور، کربن و نیتروژن به ترتیب 1/03، 1/055 و 1/01 است. آلایش باعث کاهش چگالی جریان در هر دو جهت x و y شده است. آلایش با بور بیشترین تغییرات را در  $I_y$  و آلایش با کربن بیشترین تغییرات را در  $I_x$  ایجاد کرده است. با توجه به نتایج به دست آمده از تأثیر آلایش بر ناهمسانگردی در انتقال الکترونی بوروفین گرافین گونه، این ماده قابلیت استفاده در سوئیچ نانوالکترونیکی را خواهد داشت.

ناهمسانگردی بالایی در انتقال الکترونی نسبت به دو ساختار دیگر از خود نشان می‌دهند. بوروفین گرافین گونه با آلایش بور و نیتروژن، در محدوده ولتاژ 0/1-6 ولت تقریباً ناهمسانگرد نیستند ولی در ولتاژهای پایین تر ناهمسانگردی ضعیفی از خود نشان می‌دهند. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که چگالی جریان در دو راستای زیگزاگ و آرمچیر برای ساختارهای مورد مطالعه، ناهمسانگرد است. همچنین نوع آلایش، روی مقدار چگالی جریان در این دو راستا و میزان ناهمسانگردی آن تأثیر گذار می‌باشد. از این قابلیت می‌توان در طراحی سوئیچ‌های نانوالکترونیک استفاده نمود. با مقایسه میزان ناهمسانگردی ساختارهای مورد مطالعه، بوروفین گرافین گونه خالص و با آلایش کربن، برای استفاده در سوئیچ‌های نانوالکترونیک مناسب خواهند بود.

## 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. [10.1126/science.1102896](https://doi.org/10.1126/science.1102896)
- [2] X. Hu, J. Zheng, Z. Ren, Strong interlayer coupling in phosphorene/graphene van der Waals heterostructure: A first-principles investigation, *Frontiers in Physics* **13** (2017) 137302. <https://doi.org/10.1007/s11467-017-0736-0>
- [3] G. Liu, S. Liu, B. Xu, C. Ouyang, H. Song, S. Guan, and S. Yang, Multiple Dirac Points and Hydrogenation-Induced Magnetism of Germanene Layer on Al (111) Surface, *Journal of Physical Chemistry Letters* **6** (2015). <https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.5b02413>
- [4] G. Liu, X. Lei, M. Wu, B. Xu, C. Ouyang, Comparison of the stability of free-standing silicene and hydrogenated silicene in oxygen: a first principles investigation, *Journal of Physics: Condensed Matter* **26** (2014) 355007. [DOI:10.1088/0953-8984/26/35/355007](https://doi.org/10.1088/0953-8984/26/35/355007)

## بحث و نتیجه‌گیری

در این تحقیق با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن، ساختار الکترونی و انتقالی بوروفین گرافین گونه بدون و با آلایش بور و کربن مورد بررسی قرار گرفت. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که نقطه دیراک بوروفین گرافین گونه، بالای انرژی فرمی قرار دارد و آلایش سبب می‌شود تا مکان نقطه دیراک به سمت انرژی فرمی جابه‌جا شود. همچنین، چگالی بار پیوندهای بور-بور در بوروفین گرافین گونه متقارن است ولی آلایش توازن بار را بهم می‌زند و پیوند کووالانسی تا حدودی یونی می‌شود. لایه بور در ساختار بوروفین گرافین گونه آلاییده با بور و کربن، الکترون‌گیرنده و در ساختار آلاییده با نیتروژن الکترون‌دهنده است. مقادیر انرژی جذب نشان می‌دهد که بوروفین گرافین گونه با آلایش بور پایدارتر از آلایش با کربن و نیتروژن است. رسانش بوروفین گرافین گونه دارای آلایش کربن در جهات x و y ناهمسانگرد است و این ناهمسانگردی در چگالی جریان

- [15] H. Yuan, C. Na, C. Chao, X. ShiYun & Z. JianWei, Tuning the electronic transport anisotropy in borophene via oxidation strategy, *SCIENCE CHINA Technological Sciences* **62** (2019) 799-810. <https://doi.org/10.1007/s11431-018-9385-x>
- [16] M. Pashangpour, Electronic transport properties of partially hydrogenated and fluorinated borophene, a DFT study, *Computational Materials Science* **168** (2019) 74-80. DOI: [10.1016/j.commatsci.2019.05.052](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.05.052)
- [17] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, et al. , *Journal of Physics: Condensed Matter* **21** (2009) 395502.
- [18] A. Ferretti, B. Bonferroni, A. Calzolari, M. Buongiorno Nardelli, <http://www.wannier-transport.org>.
- [19] C. Lee, B. Feng, M. D'angelo, R. Yukawa, R. Liu, T. Kondo, H. Kumigashira, I. Matsuda, and T. Ozaki, Peculiar bonding associated with atomic doping and hidden honeycombs in borophene, *Physical Review B* **97** (2018) 075430. DOI: [10.1103/PhysRevB.97.075430](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.075430)
- [20] H. Monkhorst, J. Pack: Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B* **13** (1976) 5188. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
- [21] R. Alizadeh Vajary, S. Izadi Vishkayi, M. Bagheri Tagani, Study of the Influence of Structural Defects on Mechanical and Electrical Properties of  $\beta_{12}$  Borophene, *Journal of Research on Many-body Systems* **9** 3 (2019) 40-48. [doi:10.22055/jrmbms.2019.14904](https://doi.org/10.22055/jrmbms.2019.14904)
- [22] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge university press, (1997).
- [23] V. Shukla, A. Grigoriev, N. Jena, R. Ahuja, Strain controlled electronic and transport anisotropies in two-dimensional borophene sheets, *Physical Chemistry Chemical Physics*.**20** (2018) 22952. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
- [5] J. Yuhara, Y. Fujii, K. Nishino, N. Isobe, M. Nakatake, L. Xian, A. Rubio, G. Lay, "Large area planar stanene epitaxially grown on Ag(1 1 1)". *2D Materials*. **5** 2 (2018) 025002.
- [6] A.J. Mannix, et al. Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs. *Science* **350** (2015) 1513. DOI: [10.1126/science.aad1080](https://doi.org/10.1126/science.aad1080)
- [7] L. Kong, K. Wu, L. Chen, Recent progress on borophene: Growth and structures, *Frontiers in Physics* **13** 3 (2018) 138105. <https://doi.org/10.1007/s11467-018-0752-8>
- [8] Z. Wang, T. Lü, H. Wang, et al., *Frontiers in Physics* **14** (2019) 33403. <https://doi.org/10.1007/s11467-019-0884-5>
- [9] V. Wang, W. Geng, Lattice defects and the mechanical anisotropy of borophene, *Journal of Physical Chemistry C* **121** 18 (2017) 10224. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b02582>
- [10] H. Xiao, W. Cao, T. Ouyang, S. Guo, C. He & J. Zhong, Lattice thermal conductivity of borophene from first principle calculation, *Scientific Reports volume 7* (2017) 45986. <https://doi.org/10.1038/srep45986>
- [11] E.S. Penev, A. Kutana, B.I. Yakobson, Can two dimensional boron superconduct? *Nano Letters* **16** 4 (2016) 2522-2526. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b00070>
- [12] H. Wang, Q. Li, Y. Gao, F. Miao, X. Zhou, X. Wan, Strain effects on borophene: Ideal strength, negative Poisson's ratio and phonon instability, *New Journal of Physics* **18** 7 (2016) 073016.
- [13] W. Li, L. Kong, C. Chen, J. Gou, S. Sheng, W. Zhang, H. Li, L. Chen, P. Cheng, K. Wu, Experimental realization of honeycomb borophene, *Science Bulletin* **63** (2018) 282-286.
- [14] M. Shahrokhi, Can fluorine, chlorine functionalization stabilize the graphene like borophene?, *Computational Materials Science* **156** (2019) 56-66. DOI: [10.1016/j.commatsci.2018.09.045](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.09.045)