

## اثر میدان مغناطیسی عمودی بر خواص الکترونی و تراپردی نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبلی

رضا کلامی<sup>۱\*</sup> و سید احمد کتابی<sup>۲</sup>

۱- دانشکده فیزیک، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران

۲- دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان، ایران

(تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۳/۲۸؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۸/۸)

چکیده: در این مقاله، اثر اعمال میدان مغناطیسی عمودی بر خواص الکترونی و تراپردی سه گروه از نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبلی بررسی شد. نانو نوارهای سیلیسین مورد مطالعه دارای ۵ الی ۷ اتم سیلیکون در عرض می باشند که گافهای نواری متفاوتی دارند. میدان مغناطیسی عمودی با قدرت های ۰/۱، ۰/۲ و ۰/۳ الکترون ولت به نانو نوارها اعمال شد. با اعمال میدان مغناطیسی عمودی، تغییراتی در آرایش الکترونی نانو نوار به وجود آمد، در نتیجه خواص الکترونی و تراپردی نانو نوارها نظیر طیف گسیل، ساختار نواری و مشخصه جریان-ولتاژ تغییر یافت. نتایج نشان داد که اعمال میدان مغناطیسی عمودی به نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبلی که تحت اختلاف پتانسیل الکتریکی قرار گرفته اند باعث افزایش جریان عبوری می شود. محاسبات با استفاده از تقریب تنگ بست به همراه فرمول بندی تابع گرین غیرتعادلی انجام شد.

واژه های کلیدی: سیلیسین، میدان مغناطیسی عمودی، ساختار نواری، طیف گسیل الکترونی، مشخصه جریان-ولتاژ.

\* مسئول مکاتبات، پست الکترونیکی: re.kalami@semnan.ac.ir

## Effect of Vertical Magnetic Field on the Electronic and Transport Properties of Armchair Silicene Nanoribbons

R. Kalami<sup>1\*</sup> and S. A. Ketabi<sup>2</sup>

1- Faculty of Physics, Semnan University, Semnan, Iran  
2- School of Physics, Damghan University, Damghan, Iran

### ABSTRACT

In this paper, the electronic and transport properties of three groups of armchair Silicene nanoribbons were investigated in the presence of a vertical magnetic field. The Silicene nanoribbons were modeled with  $N=5-7$  silicon atoms in width, each having different band gaps. Vertical magnetic field with strengths of  $h=0.1$  eV,  $0.2$  eV, and  $0.3$  eV were applied to the nanoribbons. By applying a vertical magnetic field, changes were observed in the electronic arrangement of the nanoribbons. As a result, the electronic and transport properties of nanoribbons such as emission spectrum, band structure, and current-voltage (I-V) characteristics were changed. The results indicated that applying a vertical magnetic field to the armchair silicene nanoribbons subjected to electric potential difference enhances the current. To extract the electronic and transport properties of the nanoribbons, a tight-binding model coupled with the non-equilibrium Green's function formalism was employed.

**Keywords:** Silicene, Vertical magnetic field, Band structure, Electronic transmission spectra, Current-voltage characterization.

### ۱- مقدمه

سیلیسین<sup>۱</sup> یک ماده دو بعدی جدید است که توجه محققان بسیاری را به سبب خواص الکترونی، تراپردی و ترموالکتریکی منحصر به فردش به خود جلب کرده است (۱ و ۲). سیلیسین و گرافین<sup>۲</sup> ساختارهای شبیه به هم دارند با این تفاوت که ساختار سیلیسین دارای چین خوردگی می باشد و همین باعث ایجاد خواص الکترونی متفاوت در سیلیسین می گردد (۳). در ساختار سیلیسین، اتم های سیلیکون در دو زیرشبهه به فاصله عمودی  $0.46 \text{ \AA}$  نسبت به هم قرار گرفته اند (۴). نانو نوارهای سیلیسین لبه زیگزاگ<sup>۳</sup> و لبه دسته مبللی<sup>۴</sup> دو نوع از نانو نوارهای سیلیسین هستند (۵). نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبللی با توجه به تعداد اتم های در عرض نانو نوار ( $N$ ) به سه دسته تقسیم می شوند. نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبللی با عرض های  $N=3p$  و  $N=3p+1$  نیم رسانا هستند و نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبللی با عرض  $N=3p-1$  رفتاری کاملاً فلزی از خود نشان می دهد که در همه آن ها  $p$  عدد صحیح می باشد (۶ و ۷). امروزه یکی از مهم ترین مقوله ها برای بهبود عملکرد قطعات نیم رسانای

دو بعدی، مهندسی گاف نواری<sup>۵</sup> می باشد (۸-۱۱). تغییر در گاف نواری می تواند یک موفقیت تلقی شود، زیرا با این کار جریان در ماده مورد مطالعه تحت کنترل قرار می گیرد (۱۲ و ۱۳). می توان برای تغییر گاف نواری و با توجه به نوع ساختار مورد نظر، فرآیندهایی نظیر افزودن ناخالصی به ماده، اعمال میدان الکتریکی یا مغناطیسی خارجی، ایجاد کرنش و ایجاد نواقص یا پادنقطه های کوانتومی را مورد توجه قرار داد (۱۴-۲۰).

همچنین ساختار نواری بسیاری از مواد دو بعدی مثل سیلیسین دارای نوارهای خاصی مثل نوارهای مسطح<sup>۶</sup> و نوارهای دیراک<sup>۷</sup> می باشند. نوارهای مسطح نوارهایی هستند که در آن جرم مؤثر الکترون طبق نظریه نواری بزرگ می باشد. همچنین در آن ها انرژی با تغییر تکانه شبکه تغییر نمی کند. در واقع الکترون ها در این نوارها جایگزیده خواهند بود. نوارهای مسطح را می توان با روش هایی مثل افزودن ناخالصی به ماده ایجاد کرد (۲۱-۲۳). از آنجایی که انرژی جنبشی الکترون در نوار مسطح صفر می شود، برهم کنش کولنی بحرانی می شود و باعث ایجاد حالت های جالبی در ماده مانند فرومغناطیس و

خاص نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبلی بوده است. در کار حاضر هر سه گروه عرض‌ها مورد بررسی و مقایسه قرار گرفته‌اند. لذا به نظر می‌رسد مطالعه تأثیر میدان مغناطیسی عمودی بر خواص الکترونی و تراپردی هر سه گروه از نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبلی با تقریب تنگ بست از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است که در این کار به آن پرداخته‌ایم.

در مطالعه حاضر نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبلی با عرض ۷ و ۶ و  $N=5$  اتم سیلیکون بررسی می‌شوند. ما با استفاده از روش تابع گرین غیرتعدالی و مدل تنگ بست، خواص الکترونی و تراپردی این نانو نوارها را بررسی کرده‌ایم. شکل (۱-الف) نانو نوار سیلسن لبه دسته مبلی را از زاویه بالا با عرض‌های مختلف نشان می‌دهد که به دو الکتروود از جنس خودش متصل است. شکل (۱-ب) نانو نوار سیلسن لبه دسته مبلی را از زاویه روبرو نشان می‌دهد.

در بخش بعدی با فرمول‌بندی تابع گرین غیر تعادلی، معادلات مربوط به خواص الکترونی و تراپردی نظیر ساختار نواری<sup>۱۱</sup>، چگالی حالت‌های الکترونی<sup>۱۲</sup>، طیف گسیل<sup>۱۳</sup> و مشخصه جریان-ولتاژ<sup>۱۴</sup> استخراج می‌شود. همچنین در بخش سوم نتایج مربوط به این فرمول‌بندی‌ها، در نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبلی در غیاب و در حضور میدان مغناطیسی عمودی در عرض‌های مختلف ارائه خواهد شد.

## ۲- مواد و روش تحقیق

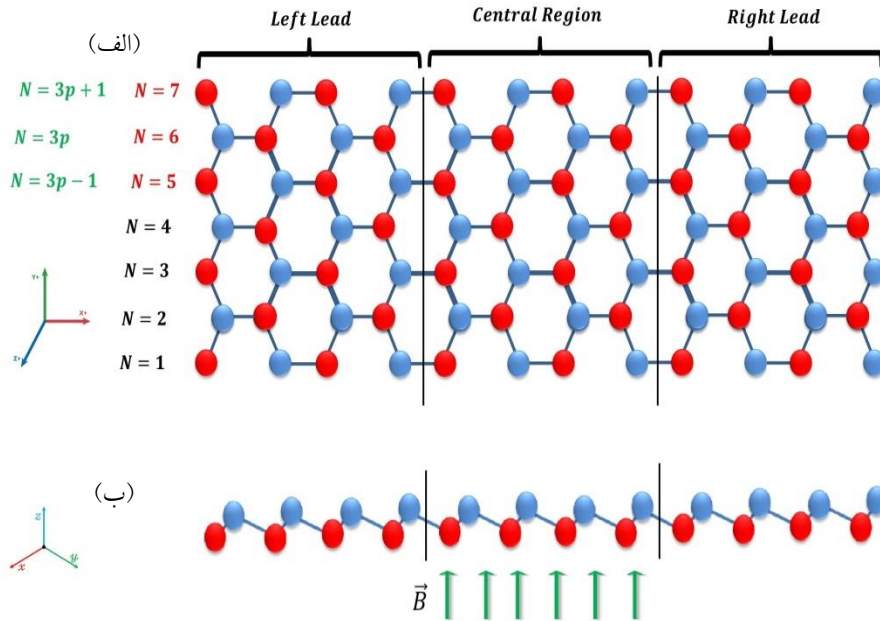
در این بخش با استفاده از رهیافت تابع گرین غیر تعادلی و تقریب تنگ بست، مدل محاسباتی و فرمول‌بندی مورد نظر ارائه می‌شود. ماتریس هامیلتونی ناحیه مرکزی نانو نوار سیلیسین با استفاده از تقریب تنگ بست به صورت زیر نوشته می‌شود (۳۸):

$$H_C = \varepsilon_0 \sum_i c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha} + t \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + i \frac{\lambda_{so}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} v_{ij} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} - i \frac{2}{3} \lambda_{Ra} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mu_{ij} c_{i\alpha}^\dagger (\vec{\sigma} \times \vec{d}_{ij}^0)^z c_{j\beta} - \vec{\sigma} \cdot \vec{h} \sum_i c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha} \quad (1)$$

ابرسانایی می‌شود (۲۷-۲۴). نوارهای دیراک و نوارهای مسطح مانند دو روی یک سکه عمل می‌کنند و خواص کاملاً متفاوتی دارند. در نوارهای دیراک جرم مؤثر الکترون بسیار کوچک می‌باشد و انرژی جنبشی الکترون‌ها در این نوار به بیشترین مقدار خود می‌رسد. این ویژگی جالب باعث انتقال بسیار زیاد و غیر عادی الکترون‌ها از نوار ظرفیت به نوار رسانش خواهد شد (۲۸).

اعمال میدان مغناطیسی تبدالی به ساختارهای دو بعدی باعث شکاف انرژی اسپین‌های بالا و پایین شده و خواص الکترونی نانو نوارها را تغییر می‌دهد (۳۲-۲۹). با اعمال میدان مغناطیسی به نانو نوار گرافین و سیلیسین لبه زیگزاگ خواص الکترونی و ترموالکتریکی سامانه دچار تغییر می‌شود (۳۵-۳۳). وقتی یک میدان مغناطیسی تبدالی ضعیف به صورت موازی به نانو نوار سیلیسین لبه زیگزاگ اعمال شود، جریان اسپین قطبیده در نانو نوار ایجاد می‌شود و اسپین‌های بالا و پایین در خلاف جهت هم به حرکت در می‌آیند (۳۴). اگر میدان مغناطیسی تبدالی به صورت عمود بر نانو نوار سیلیسین لبه زیگزاگ اعمال شود، نانو نوار می‌تواند به عنوان یک اسپین فیلتر کامل یا قطبش اسپین کامل عمل کند (۳۵). در مقاله آقایی‌منش و همکاران مشخص شد اگر میدان مغناطیسی عمودی به نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبلی با عرض  $N=3p+1$  اعمال شود، گاف نواری کاهش یافته و تغییرات قابل ملاحظه‌ای در چگالی حالت‌های الکترونی رخ می‌دهد (۳۶).

تقریب تنگ بست<sup>۸</sup> که اساس آن معادله شرودینگر است، روشی برای محاسبه ساختار نواری الکترونی با استفاده از مجموعه تقریبی توابع موج بر پایه برهم‌نهی توابع موج برای اتم‌های جدا شده واقع در هر صفحه اتمی است (۳۷). محاسباتی که تا به حال در خصوص خواص الکترونی و ترموالکتریکی نانو نوارهای سیلیسین تحت تأثیر میدان مغناطیسی انجام گرفته است، عمدتاً با روش نظریه تابعی چگالی<sup>۹</sup> بوده است که در مقاله حاضر برای استخراج نتایج دقیق مبتنی بر رویدادهای فیزیکی سامانه از تقریب تنگ بست و روش تابع گرین غیر تعادلی<sup>۱۰</sup> استفاده شده است. علاوه بر این، در بررسی‌های پیشین تمرکز به طور عمده بر روی یک عرض



شکل ۱- طرحی از یک نانو نوار سیلیسین لبه دسته میلی ساده (الف) در صفحه x-y و (ب) در صفحه y-z که ناحیه مرکزی آن تحت تأثیر میدان مغناطیسی عمودی قرار گرفته است.

$$H_{\gamma} = \varepsilon_0 \sum_i c_{i\alpha}^{\dagger} c_{i\alpha} + t \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i\alpha}^{\dagger} c_{j\alpha} + i \frac{\lambda_{SO}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} v_{ij} c_{i\alpha}^{\dagger} \sigma_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} - i \frac{2}{3} \lambda_{Ra} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mu_{ij} c_{i\alpha}^{\dagger} (\vec{\sigma} \times \vec{d}_{ij}^0)_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} \quad (2)$$

$$H_{C\gamma} = t \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i\alpha}^{\dagger} c_{j\alpha} + i \frac{\lambda_{SO}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} v_{ij} c_{i\alpha}^{\dagger} \sigma_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} - i \frac{2}{3} \lambda_{Ra} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \tau_{ij} c_{i\alpha}^{\dagger} (\vec{\sigma} \times \vec{d}_{ij}^0)_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} \quad (3)$$

که در این روابط  $\gamma = L, R$  می‌باشد.

به دلیل نادیده گرفتن پراکندگی‌های غیر کشسان، برای محاسبه جریان از رابطه لاندور-بوتیکر تحت ولتاژ اعمالی  $V$  استفاده می‌کنیم که به صورت زیر نوشته می‌شود (۴۰):

$$I(V) = \frac{2e}{h} \int T(E) [f_L^{\mu}(E) - f_R^{\mu}(E)] dE \quad (4)$$

که در آن  $f_{L(R)} = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - \mu_{L(R)}}{k_B T}}}$  تابع توزیع فرمی دیراک

که جمله اول انرژی جایگاهی را نشان می‌دهد. جمله دوم برهمکنش همسایه اول در شبکه شانه عسلی سیلیسین را توصیف می‌کند که در آن  $t = -1/6 \text{ eV}$  می‌باشد. جمله سوم و چهارم برهمکنش اتم‌ها با دومین همسایه نزدیک را نشان داده و به ترتیب بیانگر برهمکنش اسپین مدار ذاتی با  $\lambda_{so} = 3/9 \text{ meV}$  و راشبا با قدرت  $\lambda_{Ra} = 0/7 \text{ meV}$  هستند.  $\langle i, j \rangle$  جمع روی همسایه‌های اول،  $\langle\langle i, j \rangle\rangle$  بیانگر جمع روی همسایه‌های دوم و  $\alpha$  و  $\beta$  حالت اسپین هستند. اگر شش اتم همسایه نزدیک دوم ساعتگرد (پادساعتگرد) در جهت  $+z$  باشد  $v_{ij}$  برابر با  $1+(-1)$  خواهد بود.  $\mu_{ij}$  برابر با  $1+(-1)$  برای زیر شبکه‌های  $A(B)$  می‌باشد. همچنین  $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  ماتریس پائولی و  $\vec{d}_{ij}^0 = \vec{d}_{ij} / |\vec{d}_{ij}|$  که در آن برداری است که دو جایگاه  $i$  و  $j$  را در یک زیر شبکه به هم متصل می‌کند (۳۹). جمله پنجم انرژی تبدلی ناشی از اعمال میدان مغناطیسی به ناحیه مرکزی می‌باشد که در آن  $\vec{\sigma}$  ماتریس پائولی و  $|\hbar| = \frac{e\hbar}{2m} B$  می‌باشد. هامیلتونی الکترودهای راست و چپ و نیز هامیلتونی ناشی از برهم‌کنش الکترودها با ناحیه مرکزی به صورت زیر بیان می‌شود:

سیلیسین لبه دسته مبلی با عرض  $N=5$  ساختار نواری دستخوش تغییراتی می‌شود. همان‌طور که در شکل (۲-ب-د) نشان داده شده است، اعمال میدان مغناطیسی عمودی با قدرت‌های  $0/3\text{eV}$  و  $0/2\text{eV}$  و  $h=0/1\text{eV}$  نوارهای ظرفیت و رسانش را به هم نزدیک‌تر کرده و باعث تشکیل نقاط دیراک دیگر در ساختار نواری نانو نوار می‌شود. هر چه قدرت میدان مغناطیسی بیشتر باشد، فاصله نقاط دیراک از هم بیشتر خواهد شد. همچنین در غیاب میدان مغناطیسی یک نوار مسطح در فاصله انرژی  $2\text{eV}$  تا  $2\text{eV}$  وجود دارد، اما اعمال میدان مغناطیسی باعث تشکیل دو نوار مسطح در این بازه انرژی شده است. به نظر می‌رسد در نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبلی با عرض-های  $N=3p-1$  اعمال میدان مغناطیسی باعث افزایش نوارهای دیراک در نزدیکی سطح فرمی و همچنین افزایش نوارهای مسطح در فاصله دور از تراز فرمی خواهد شد. پس می‌توان اعمال میدان مغناطیسی را به‌عنوان یکی از روش‌های افزایش نوارهای دیراک و نوارهای مسطح در نظر گرفت.

شکل (۲-ه و ط) ساختار نواری نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبلی با عرض‌های  $7$  و  $6$  را نشان می‌دهد که دارای گاف‌های نواری به ترتیب حدود  $E_g=796\text{meV}$  و  $E_g=756\text{meV}$  می‌باشند و این نشان‌دهنده آن است که رفتار این نوع از مواد کاملاً نیم‌رسانا می‌باشد. اعمال میدان مغناطیسی با قدرت‌های مختلف به این نانو نوارها باعث کاهش گاف نواری و نزدیک شدن نوارهای ظرفیت و رسانش به هم خواهد شد. همچنین با اعمال میدان مغناطیسی عمودی تعداد نوارهای انرژی افزایش می‌یابد. مشابه ساختار نواری نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبلی با عرض  $N=5$ ، نوارهای مسطح با اعمال میدان مغناطیسی در نانو نوار با عرض  $N=7$  در بازه  $2\text{eV}$  تا  $2\text{eV}$  افزایش می‌یابد. نانو نوار با عرض  $N=6$  در غیاب میدان مغناطیسی فاقد نوار مسطح می‌باشد. با اعمال میدان مغناطیسی، در بازه مذکور کماکان نوار مسطح یافت نمی‌شود.

می‌توان نتیجه گرفت اعمال میدان مغناطیسی به نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبلی با عرض‌های  $N=3p-1$  و  $N=3p+1$  باعث

برای الکترونها می‌باشد که در پتانسیل  $\mu_{L(R)} = E_F + (-) eV/2$  قرار گرفته‌اند. انرژی فرمی تعادلی است. همچنین چگالی حالت‌های الکترونی و تابع گسیل وابسته به انرژی از روابط زیر به دست می‌آیند:

$$\text{DOS}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{\text{Tr}[G(E)]\} \quad (5)$$

$$T(E) = \text{Tr}\left\{\Gamma_L G(E) \Gamma_R G^+(E)\right\} \quad (6)$$

$G(E)$  تابع گرین تأخیری ناحیه مرکزی و  $\Gamma$  تابع پهن شدگی می‌باشند که به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$G(E) = [(E + i\eta)I - H_c - \Sigma_L(E) - \Sigma_R(E)]^{-1} \quad (7)$$

$$\Gamma_{L(R)}(E) = i[\Sigma_{L(R)}(E) - (\Sigma_{L(R)}(E))^+] \quad (8)$$

که در آن  $\eta$  یک مقدار بسیار کوچک و  $I$  ماتریس یک‌ای در ابعاد هامیلتونی می‌باشد. همچنین  $\Sigma_{L(R)}(E)$  سلف انرژی الکتروندهای چپ و راست می‌باشد که با رابطه زیر تعریف می‌شود (۴۱):

$$\Sigma_{L(R)}(E) = H_{CL(R)} g_{L(R)} H_{L(R)C} \quad (9)$$

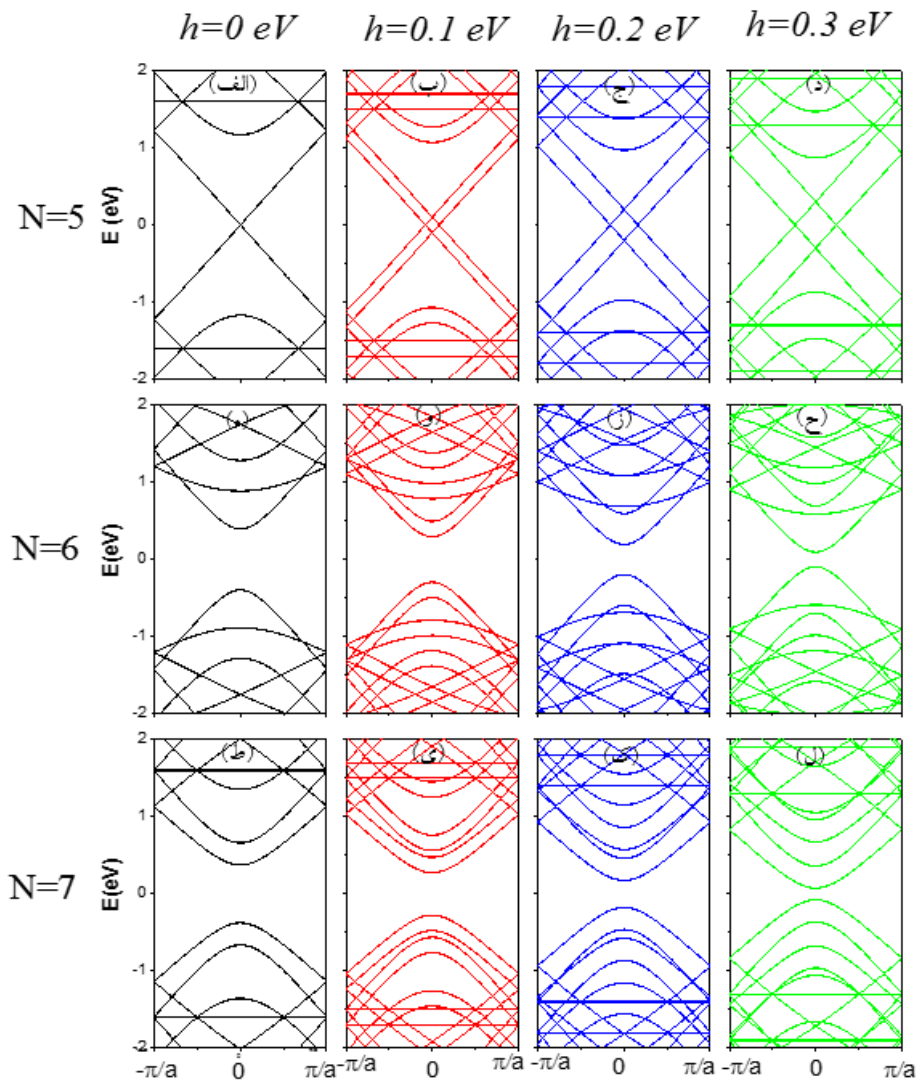
$g_{L(R)}(E)$  نیز تابع گرین سطحی تأخیری می‌باشد.

$$g_{L(R)}(E) = [(E + i\eta)I - H_{L(R)}]^{-1} \quad (10)$$

### ۳- نتایج و بحث

اعمال میدان مغناطیسی به ساختارهای دوبعدی باعث تغییر در ساختار نواری می‌شود (۲۹-۳۶). برای درک بهتر از تغییرات ساختار نواری سه گروه از نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبلی، ابتدا ساختار نواری این سه گروه در غیاب و در حضور میدان مغناطیسی عمودی باهم مقایسه می‌شوند.

شکل (۲-الف) ساختار نواری نانو نوار سیلیسین ساده لبه دسته مبلی با عرض  $N=5$  را نشان می‌دهد که در آن گاف نواری حدود صفر می‌باشد و بیان‌کننده آن است که این نوع نانو نوارها رفتار فلزی از خود بروز می‌دهند. این نتیجه با مطالعات قبلی نیز که عرض نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبلی برابر با  $N=3p-1$  بود، همخوانی دارد (۴۲). با اعمال میدان مغناطیسی در نانو نوار

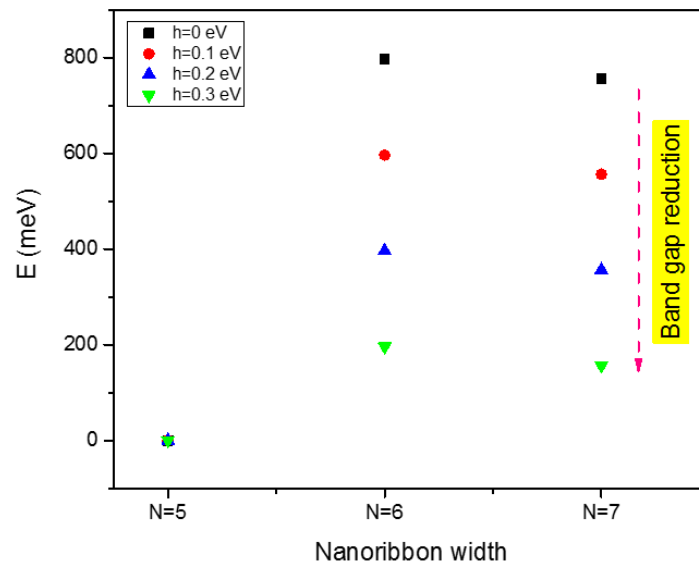


شکل ۲- ساختار نواری نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبللی در غیاب و در حضور میدان مغناطیسی عمودی با عرض  $N=5$  (الف)-(د)  $N=5$ ، (ه)-(ح)  $N=6$  و (ط)-(ج)  $N=7$ .

افزایش تعداد نوارهای مسطح خواهد شد ولی نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبللی با عرض  $N=3p$  در غیاب یا در حضور میدان مغناطیسی فاقد نوارهای مسطح می‌باشند. شکل (۳) مقادیر گاف نواری سه گروه از نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبللی را در غیاب میدان و در حضور میدان مغناطیسی با قدرت‌های  $0.1\text{eV}$  و  $0.2\text{eV}$  و  $0.3\text{eV}$  نشان می‌دهد. در نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبللی با عرض  $N=5$  پس از اعمال میدان مغناطیسی کماکان گاف نواری برابر با صفر می‌باشد ولی در نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبللی با عرض‌های ۷ و

افزایش تعداد نوارهای مسطح خواهد شد ولی نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبللی با عرض  $N=3p$  در غیاب یا در حضور میدان مغناطیسی فاقد نوارهای مسطح می‌باشند.

شکل (۳) مقادیر گاف نواری سه گروه از نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبللی را در غیاب میدان و در حضور میدان مغناطیسی با قدرت‌های  $0.1\text{eV}$  و  $0.2\text{eV}$  و  $0.3\text{eV}$  نشان می‌دهد. در نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبللی با عرض  $N=5$  پس از اعمال میدان مغناطیسی کماکان گاف نواری برابر با صفر می‌باشد ولی در نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبللی با عرض‌های ۷ و

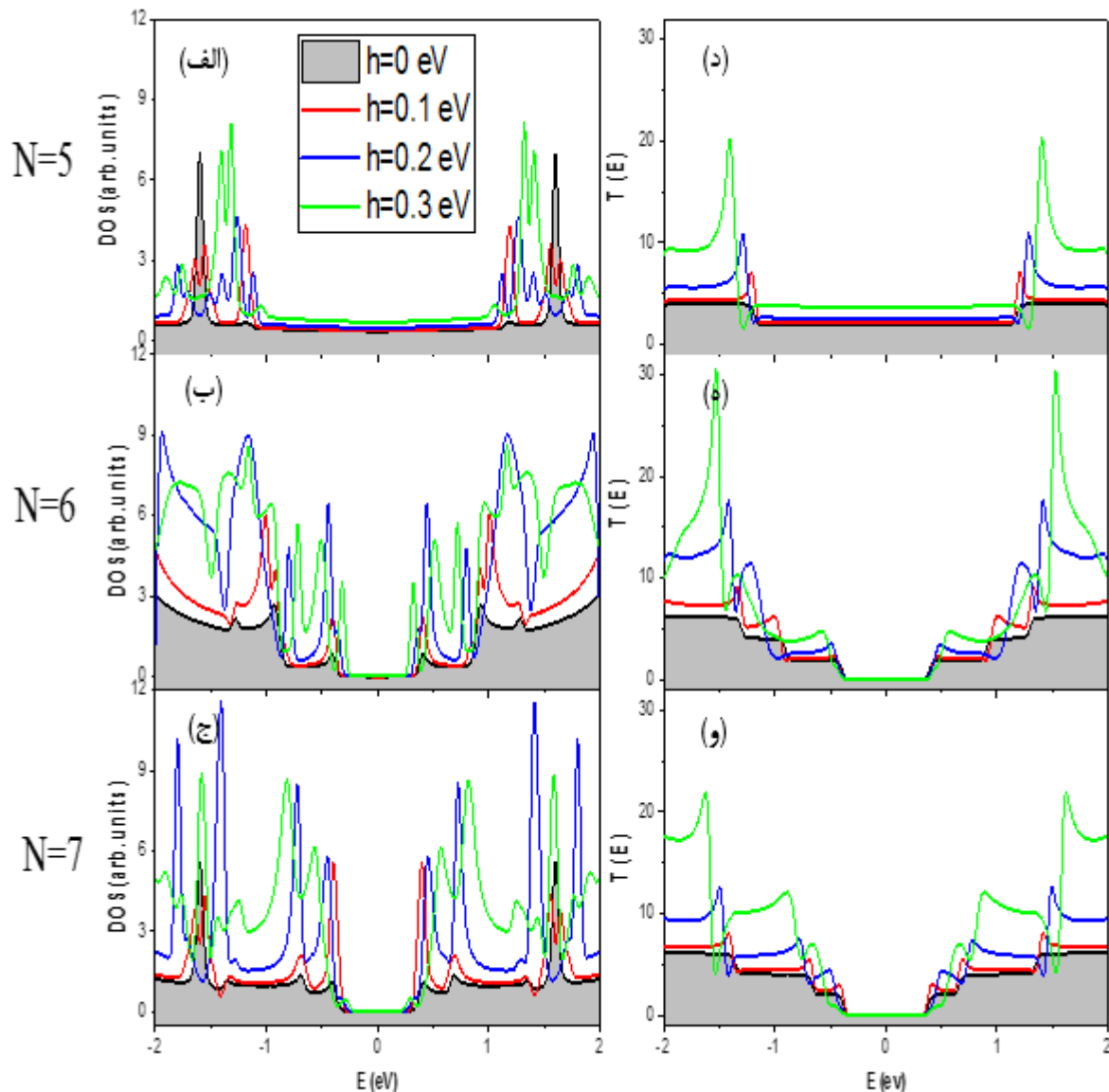


شکل ۳- مقادیر گاف نواری نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبلی با عرض های ۷ و ۶ و ۵ N در غیاب و در حضور میدان مغناطیسی.

نانو نوارها را نشان می دهند. اعمال میدان مغناطیسی عمودی باعث افزایش مقدار طیف گسیل در نواحی دورتر از تراز فرمی خواهد شد. افزایش قدرت میدان مغناطیسی ارتباط مستقیمی با افزایش مقدار طیف گسیل خواهد داشت. پس به نظر می رسد اعمال میدان مغناطیسی به هر سه گروه از نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبلی، باعث افزایش چگالی حالت های الکترونی و افزایش احتمال گذار الکترون ها در سامانه به خصوص در نواحی دورتر از تراز فرمی خواهند شد. هر چه به مناطق دورتر از تراز فرمی برویم این اختلاف بیشتر قابل مشاهده خواهد بود. حال اگر دو الکتروند نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبلی تحت اختلاف ولتاژ قرار گیرند، می توان جریان گذرنده را از نانو نوار را مطابق رابطه (۴) به دست آورد. شکل (۵ و ۶) منحنی مشخصه جریان-ولتاژ نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبلی در غیاب میدان مغناطیسی (نموار مشکی) و نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبلی در حضور میدان مغناطیسی با قدرت  $0.1\text{ eV}$  (نموار قرمز)، با قدرت  $0.2\text{ eV}$  (نموار آبی) و با قدرت  $0.3\text{ eV}$  (نموار سبز) را نشان می دهد. همان طور که در شکل ها پیداست اعمال میدان مغناطیسی باعث افزایش قابل توجه جریان در نانو نوار خواهد شد. علت افزایش جریان در نانو نوار با عرض  $N=5$  افزایش

ملاحظه می شود در نمودارهای (ب) و (ج) گاف های نواری طبق پیش بینی ساختار نواری شکل (۲) وجود داشته و در نمودار (الف) گاف نواری وجود ندارد و حالت های الکترونی فعال و قابل ملاحظه ای در تراز فرمی سیستم وجود دارد. همان طور که در شکل مشاهده می شود، اعمال میدان مغناطیسی عمودی باعث ایجاد حالت های الکترونی فعال بیشتری در نواحی دور از تراز فرمی خواهد شد و هرچه قدرت میدان مغناطیسی بیشتر گردد، حالت های الکترونی فعال بیشتری را شاهد خواهیم بود. ایجاد نوارهای مسطح جدید که به واسطه اعمال میدان مغناطیسی در ساختار نواری نانو نوارهای با عرض  $N=5$  و  $7$  شکل گرفته است، باعث افزایش تعداد قله های نمودار چگالی حالت های الکترونی شده است. در این نوارها چگالی حالت های الکترونی مقدار بیشینه ای به خود می گیرد.

نمودارهای (د) تا (و) در شکل (۴) گسیل الکترونی از طریق سامانه را به ترتیب در سه گروه از نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبلی در غیاب و حضور میدان مغناطیسی با قدرت های مختلف را نشان می دهد. چنانکه ملاحظه می شود طیف ها حول انرژی فرمی ( $E=0$ ) متقارن بوده و در هماهنگی با ساختارهای نواری مربوطه در شکل (۲) چگونگی تراپرد الکترون از طریق

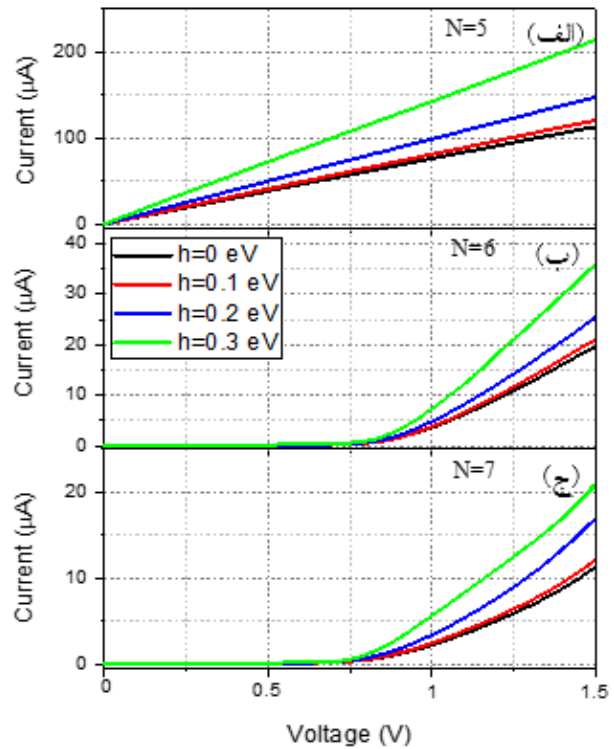
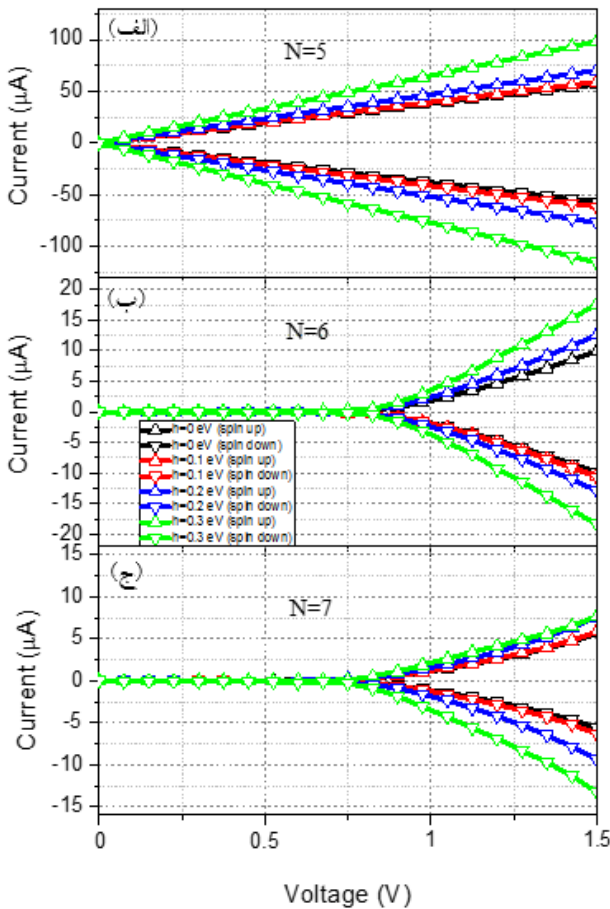


شکل ۴- چگالی حالت‌ها و طیف‌های گسیل الکترونی نانو نوار سیلیسین لبه دسته میلی در غیاب و در حضور میدان مغناطیسی عمودی با عرض (الف) و (د)  $N=5$ ، (ب) و (ه)  $N=6$ ، (ج) و (و)  $N=7$ .

همچنین افزایش جریان در نانو نوار با عرض‌های ۷ و  $N=6$  به علت کاهش گاف نواری و نزدیک شدن نوارهای ظرفیت و رسانش به هم می‌باشد. در شکل (۵- ب و ج) به وضوح نشان داده است که ولتاژ باید تا حدی (به اندازه گاف نواری ایجاد شده) زیاد شده تا جریان در نانو نوار برقرار گردد. ضمناً در شکل (۶) مشخص است که با اعمال میدان مغناطیسی جریان الکترون‌های با اسپین بالا و پایین در خلاف جهت هم شکل

تعداد نقاط دیراک در ساختار نواری می‌باشد. زیرا الکترون‌ها با کانال‌های رسانشی بیشتری مواجه خواهند بود و همین امر باعث افزایش قابل توجه جریان در نانو نوار می‌گردد. به عنوان نمونه جریان در نانو نوار سیلیسین لبه دسته میلی با عرض  $N=5$  وقتی تحت اختلاف ولتاژ  $V=1$  v قرار گیرد، حدود  $I=75 \mu A$  می‌باشد ولی اگر میدان مغناطیسی عمودی با قدرت  $0.3$  eV به نانو نوار اعمال شود، جریان به حدود  $I=140 \mu A$  خواهد رسید.





شکل ۵- تغییرات جریان بر حسب اختلاف پتانسیل الکتروود چپ و راست در نوار سیلیسین لبه دسته مبلی در غیاب و در حضور میدان مغناطیسی عمودی با عرض (الف)  $N=5$ ، (ب)  $N=6$ ، (ج)  $N=7$ .

شکل ۶- تغییرات جریان الکترون‌های با اسپین بالا و پایین بر حسب اختلاف پتانسیل الکتروود چپ و راست در نوار سیلیسین لبه دسته مبلی در غیاب و در حضور میدان مغناطیسی عمودی با عرض (الف)  $N=5$ ، (ب)  $N=6$ ، (ج)  $N=7$ .

نشان داده شد که ساختار نواری نانو نوارهای سیلسن با اعمال میدان مغناطیسی عمودی تغییر می‌کند. اعمال میدان مغناطیسی عمودی در نانو نوار با عرض  $N=5$  باعث افزایش تعداد نقاط دیراک روی تراز فرمی و افزایش تعداد نوارهای مسطح در نقاط دور از تراز فرمی خواهد شد. این افزایش در تعداد نقاط دیراک باعث افزایش احتمال گسیل الکترون و افزایش جریان در این نوع از نانو نوارها خواهد شد. همچنین با اعمال میدان، گاف نواری نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبلی با عرض‌های ۷ و  $N=6$  کوچک‌تر می‌شود که مقدار این گاف به قدرت میدان اعمال شده وابسته است. کاهش گاف نواری باعث افزایش

خواهند گرفت و هرچه قدرت میدان مغناطیسی بیشتر گردد، جریان گذرنده الکترون‌های با اسپین بالا و پایین افزایش خواهد یافت.

در حالت کلی به علت عدم وجود گاف نواری در ساختار نواری نانو نوار سیلیسین لبه دسته مبلی با عرض  $N=5$  در غیاب و حضور میدان مغناطیسی عمودی، جریان در این نوع از نانو نوارها به وضوح بیشتر از دو گروه دیگر نانو نوارها می‌باشد. اعمال میدان نیز کمک خواهد کرد تا جریان در این نوع نانو نوار بیش از پیش افزایش یابد.

#### ۴- نتیجه‌گیری

در این مقاله خواص الکترونی و تراپردی سه گروه نانو نوارهای سیلیسین لبه دسته مبلی در غیاب و در حضور میدان مغناطیسی عمودی مورد بررسی قرار گرفت.

## تشکر و سپاسگزاری

این تحقیق حمایت خاصی از مؤسسات عمومی، صنعتی و غیرانتفاعی دریافت نکرده است.

## تضاد منافع

نویسندگان مقاله اذعان دارند هیچ نوع تضاد منافی با شخص، شرکت یا سازمانی برای این پژوهش ندارند.

1. silicene
2. graphene
3. zigzag edge silicene
4. armchair edge silicene
5. band gap engineering
6. flat bands
7. Dirac bands

احتمال گسیل الکترون و افزایش جریان در نانونوارهای مذکور خواهد شد.

همچنین اعمال میدان مغناطیس باعث افزایش نوارهای مسطح در نانو نوارهای با عرض  $N=57$  خواهد شد که این امر باعث افزایش چگالی حالت‌های الکترونی خواهد شد. می‌توان نتیجه گرفت اعمال میدان مغناطیسی عمودی یکی از روش‌های افزایش تعداد نوارهای انرژی، افزایش تعداد نوارهای مسطح و افزایش قابل توجه جریان الکترونی می‌باشد.

## واژه‌نامه

8. tight-binding model
9. density functional theory
10. non-equilibrium Green's function formalism
11. band structure
12. density of states
13. electronic transmission spectra
14. current- voltage characterization

## مراجع

1. Leoni T, Hogan C, Zhang K, Daher Mansour M, Bernard R, Parret R, Resta A, Colonna S, Borensztein Y, Ronci F, Prévot G. Demonstration of the Existence of Dumbbell Silicene: A Stable Two-Dimensional Allotrope of Silicon. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2021; 125(32): 17906-17917.
2. Duan H, Guo H, Zhang R, Wang F, Liu Z, Ge M, Yu L, Lin H, Chen Y. Two-dimensional silicene composite nanosheets enable exogenous/endogenous-responsive and synergistic hyperthermia-augmented catalytic tumor theranostics. *Biomaterials*. 2020; 256: 120206.
3. Bechstedt F, Gori P, Pulci O. Beyond graphene: Clean, hydrogenated and halogenated silicene, germanene, stanene, and plumbene. *Progress in Surface Science*. 2021; 96(3): 100615.
4. Naumis GG. Electronic properties of two-dimensional materials. In: *Synthesis, Modeling, and Characterization of 2D Materials, and Their Heterostructures 2020* (pp. 77-109).
5. Howlader AH, Islam MS, Ferdous N. Phonon transmission of vacancy disordered armchair silicene nanoribbon. *Optoelectronics Letters*. 2021; 17: 454-458.
6. Song YL, Zhang Y, Zhang JM, Lu DB. Effects of the edge shape and the width on the structural and electronic properties of silicene nanoribbons. *Applied Surface Science*. 2010; 256(21): 6313-6317.
7. Zhang X, Zhang D, Xie F, Zheng X, Wang H, Long M. First-principles study on the magnetic and electronic properties of Al or P doped armchair silicene nanoribbons. *Physics Letters A*. 2017; 381(25-26): 2097-2102.
8. Guo X, Liu L, Xiao Y, Qi Y, Duan C, Zhang F. Band gap engineering of metal-organic frameworks for solar fuel productions. *Coordination Chemistry Reviews*. 2021; 435: 213785.
9. Singh N, Yadav D, Mulay SV, Kim JY, Park NJ, Baeg JO. Band gap engineering in solvchromic 2D covalent organic framework photocatalysts for visible light-driven enhanced solar fuel production from carbon dioxide. *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2021; 13(12): 14122-14131.
10. Bafekry A, Faraji M, Stampfl C, Sarsari IA, Ziabari AA, Hieu NN, Karbasizadeh S, Ghergherehchi M. Band-gap engineering, magnetic behavior and Dirac-semimetal character in the MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> nanoribbon with armchair and zigzag edges. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 18; 55(3): 035301.
11. Saraswat V, Jacobberger RM, Arnold MS. Materials science challenges to graphene nanoribbon electronics. *ACS nano*. 2021; 15(3): 3674-3708.
12. Kargar F, Krayev A, Wurch M, Ghafouri Y, Debnath T, Wickramaratne D, Salguero TT, Lake RK, Bartels L, Balandin AA. Metallic vs. semiconducting properties of quasi-one-dimensional tantalum selenide van der Waals nanoribbons. *Nanoscale*.

- 2022; 14(16): 6133-6143.
13. Taheri N, Moradi M, Farzad MH. Structural, electronic and magnetic properties of some adatoms adsorbed at the edges and Mg-doped SiC nanoribbons. *Computational Condensed Matter*. 2022; 32: e00722.
  14. Kistanov AA, Khadiullin SK, Dmitriev SV, Korznikova EA. Effect of oxygen doping on the stability and band structure of borophene nanoribbons. *Chemical Physics Letters*. 2019; 728: 53-56.
  15. Ajeel FN, Mohammed MH, Khudhair AM. Energy bandgap engineering of graphene nanoribbon by doping phosphorous impurities to create nano-heterostructures: A DFT study. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2019; 105: 105-115.
  16. Xu J, Wan Q, Wang Z, Lin S. The band structure engineering of fluorine-passivated graphdiyne nanoribbons via doping with BN pairs for overall photocatalytic water splitting. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2020; 22(46): 26995-27001.
  17. Do TN, Shih PH, Gumbs G, Huang D. Influence of electric and magnetic fields and  $\sigma$ -edge bands on the electronic and optical spectra of graphene nanoribbons. *Physical Review B*. 2021; 103(11): 115408.
  18. Chegel R. Engineering the electronic structure and band gap of boron nitride nanoribbon via external electric field. *Applied Physics A*. 2016; 122: 1-8.
  19. Zhao T, Fan ZQ, Zhang ZH, Zhou RL. Electronic structure, strain effects and transport property of armchair graphene nanoribbon with variously possible edge oxidation. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2019; 52(47): 475301.
  20. Shayeganfar F. Strain engineering of electronic properties and anomalous valley hall conductivity of transition metal dichalcogenide nanoribbons. *Scientific Reports*. 2022; 12(1): 11285.
  21. Pantelides ST. The electronic structure of impurities and other point defects in semiconductors. *Reviews of Modern Physics*. 1978; 50(4): 797.
  22. Santos EJ, Ayuela A, Sánchez-Portal D. First-principles study of substitutional metal impurities in graphene: structural, electronic and magnetic properties. *New Journal of Physics*. 2010; 12(5): 053012.
  23. Yang X, Wu G. Itinerant flat-band magnetism in hydrogenated carbon nanotubes. *ACS nano*. 2009; 3(7): 1646-1650.
  24. Shima N, Aoki H. Electronic structure of super-honeycomb systems: A peculiar realization of semimetal/semiconductor classes and ferromagnetism. *Physical review letters*. 1993; 71(26): 4389.
  25. Tang E, Fu L. Strain-induced partially flat band, helical snake states and interface superconductivity in topological crystalline insulators. *Nature Physics*. 2014; 10(12): 964-969.
  26. Kopnin NB, Heikkilä TT, Volovik GE. High-temperature surface superconductivity in topological flat-band systems. *Physical Review B*. 2011; 83(22): 220503.
  27. Tamura, H., Shiraishi, K., Kimura, T. and Takayanagi, H., Flat-band ferromagnetism in quantum dot superlattices. *Physical Review B*, 2022; 65(8): 085324.
  28. Wang J, Deng S, Liu Z, Liu Z. The rare two-dimensional materials with Dirac cones. *National Science Review*. 2015; 2(1): 22-39.
  29. Li LL, Moldovan D, Xu W, Peeters FM. Electric-and magnetic-field dependence of the electronic and optical properties of phosphorene quantum dots. *Nanotechnology*. 2017; 28(8): 085702.
  30. Gholami M, Golsanamlou Z, Rahimpour Soleimani H. Effects of 3d transition metal impurities and vacancy defects on electronic and magnetic properties of pentagonal Pd<sub>2</sub>S<sub>4</sub>: competition between exchange splitting and crystal fields. *Scientific Reports*. 2022; 12(1): 10838.
  31. Khoeini F, Nazari M, Shekarforoush S, Mahdaviifar M. Electromechanical and magnetic response in zigzag phosphorene nanoribbons. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2020; 123: 114200.
  32. Cao L, Ang YS, Wu Q, Ang LK. Electronic properties and spintronic applications of carbon phosphide nanoribbons. *Physical Review B*. 2020; 101(3): 035422.
  33. Kalami R, Ketabi SA. Spin-dependent thermoelectric properties of a magnetized zigzag graphene nanoribbon. *Progress in Physics of Applied Materials*. 2021; 1(1): 1-6.
  34. An XT, Zhang YY, Liu JJ, Li SS. Spin-polarized current induced by a local exchange field in a silicene nanoribbon. *New Journal of Physics*. 2012; 14(8): 083039.
  35. Farokhnezhad M, Esmailzadeh M, Ahmadi S, Pournaghavi N. Controllable spin polarization and spin filtering in a zigzag silicene nanoribbon. *Journal of Applied Physics*. 2015; 117(17): 173913.
  36. Aghaiimanesh Z, Chegel R, Ghobadi N. Thermoelectric performance of biased silicene nanoribbon in the presence of magnetic field. *Micro and Nanostructures*. 2022; 163:107143.
  37. Smidstrup S, Markussen T, Vancaerfeld P, Wellendorff J, Schneider J, Gunst T, Verstichel B, Stradi D, Khomyakov PA, Vej-Hansen UG, Lee ME. QuantumATK: an integrated platform of electronic and atomic-scale modelling tools. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2019; 32(1): 015901.
  38. Ahn EC, 2D materials for spintronic devices. *2D Materials and Applications*. 2020; 4(1): 17.
  39. Zaminpayma E, Nayebi P. Band gap engineering in

- silicene: A theoretical study of density functional tight-binding theory. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2016; 84: 555-563.
40. Datta S. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge university press; 1997
41. Sancho ML, Sancho JL, Sancho JL, Rubio J. Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface Green functions. *Journal of Physics F: Metal Physics*. 1985; 15(4): 851.
42. Chuan MW, Wong KL, Hamzah A, Riyadi MA, Alias NE, Tan ML. Electronic properties of silicene nanoribbons using tight-binding approach. In 2019 International Symposium on Electronics and Smart Devices (ISESD) 2019; 1-4.