Research Paper

Investigation of Tunneling Between the Edge States of Phosphorene Nanoribbon with Zigzag Edge [1]

Mahdieh Hosseinnakhaei [2], Mohsen Daeimohammad [3*], Morteza Soltani [4], Mina Neqabi [5] and Gholamreza Rashedi [6]

Received: 2023.11.12
Revised: 2024.02.27
Accepted: 2024.03.31

Abstract

In this paper, the transport properties of a phosphorene nanoribbon with zigzag edges are investigated. Although phosphorene is a two-dimensional structure with gaps, each zigzag edge of phosphorene nanoribbon acts like a one-dimensional quantum wire, so a nanoribbon with two edges is similar to two parallel quantum wires. We also show that by adding an impurity line between the upper and lower edges, we can create an impurity strip that can connect the upper edge to the lower edge. In other words, different inputs can be coupled to different outputs. To calculate coupling coefficients between inputs and outputs, we use the Lippmann-Schwinger formulation. The final results show that depending on the energy of the input state and the corresponding standing wave in the impurity band, the phenomenon of resonance or anti-resonance can be created in the dispersion between inputs and outputs. Besides the theoretical aspect of the proposed scheme presented in this article, it can be applied to make nanoswitches in practice.

Keywords: *Phosphorene, the Edge- State, Impurity Band, Lippmann-Schwinger Formulation.*

---

[1] https://doi.org/10.22051/ijap.2024.45541.1365

[2] PhD Student, Department of Physics, Faculty of Computer Engineering, Najafabad Branch, Islamic Azad University, Najafabad, Iran. Email: mahdieh.hosseinnakhaei1355@gmail.com

[3] Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Computer Engineering, Najafabad Branch, Islamic Azad University, Najafabad, Iran (Corresponding Autor) Email: m.daeimohammad@pco.iaun.ac.ir

[4]Associate Professor, Department of Physics, University of Isfahan, Isfahan, Iran. Email: mo.soltani@sci.ui.ac.ir

[5] Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Computer Engineering, Najafabad Branch, Islamic Azad University, Najafabad, Iran. Email: mphdneghabi@gmail.com

[6]Associate Professor, Department of Physics, University of Isfahan, Isfahan, Iran. Email: rashedi@sci.ui.ac.ir

مقالهٔ پژوهشی

بررسی اثر تونل‌زنی بین حالت‌های لبه‌ای نانو نوار فسفرین با لبه‌های زیگزاگ [1]

مهدیه حسین نخعی [۲]، محسن دایی محمد[۳]*، مرتضی سلطانی [۴]، مینا نقابی [۵] و غلامرضا راشدی [۶]

فصلنامهٔ علمی فیزیک کاربردی ایران
دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه الزهرا
سال چهاردهم، پیاپی ۳۸، پاییز ۱۴۰۳
صص۵۳ - ۶۴

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۸/۲۱
تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۱۲/۰۸
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۰۱/۱۲

چکیده:

در این مقاله به بررسی ویژگی‌های ترابردی یک نانونوار فسفرین با لبه‌های زیگزاگ پرداخته شده است. اگر چه فسفرین یک ساختار دو بعدی شکاف‌دار است ولی هر لبه‌ی زیگزاگ از نانونوار فسفرین مانند یک سیم کوانتومی یک بعدی عمل می‌کند. بنابراین یک نانونوار با دو لبه مانند دو سیم کوانتومی موازی یکدیگر هستند. در این مقاله نشان می‌شود که با اضافه کردن یک خط ناخالصی بین لبه‌ی بالا و پایین می‌توان یک نوار ناخالصی ایجاد کرد که می‌تواند لبه‌ی بالا را به لبه‌ی پایین متصل کند. به عبارتی می‌تواند ورودی‌های مختلف به خروجی‌هایی مختلف جفت شوند. برای محاسبه‌ی ضرایب جفت‌شدگی بین ورودی‌ها و خروجی‌ها از فرمول‌بندی لیپمن- شوئینگر استفاده شده است. نتایج نهایی نشان می‌دهد که بسته به انرژی حالت ورودی و موج ایستاده متناظر با آن در نوار ناخالصی می‌تواند پدیده‌ی تشدید یا پاد تشدید در پراکندگی بین ورودی‌ها و خروجی‌ها ایجاد شود. طرح پیشنهادی در این مقاله می‌تواند افزون بر جنبه‌ی نظری از لحاظ کاربردی برای ساخت نانوسوئیچ‌ها نیز کاربرد داشته باشد.

واژگان کلیدی: *فسفرین، حالت‌های لبه‌ای، نوار ناخالصی، فرمول‌بندی لیپمن- شوئینگر.*

---

[1] https://doi.org/10.22051/ijap.2024.45541.1365

[۲] دانشجوی دکترا، گروه فیزیک، دانشکده مهندسی کامپیوتر، واحد نجف‌آباد، دانشگاه آزاد اسلامی، نجف‌آباد، اصفهان، ایران. Email: mahdieh.hosseinnakhaei1355@gmail.com

[۳] استادیار، گروه فیزیک، دانشکده مهندسی کامپیوتر، واحد نجف‌آباد، دانشگاه آزاد اسلامی، نجف‌آباد، اصفهان، ایران (نویسندهٔ مسئول) Email: m.daeimohammad@pco.iaun.ac.ir

[۴] دانشیار، دانشکده فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان، ایران. Email: mo.soltani@sci.ui.ac.ir

[۵] استادیار، گروه فیزیک، دانشکده مهندسی کامپیوتر، واحد نجف‌آباد، دانشگاه آزاد اسلامی، نجف‌آباد، اصفهان، ایران. Email: mphdneghabi@gmail.com

[۶] دانشیار، دانشکده فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان، ایران. Email: rashedi@sci.ui.ac.ir

۱. مقدمه

پس از ساخت گرافین در سال ۲۰۰۵ توسط گایم و همکاران دریچه جدیدی در تولید ساختارهای دو بعدی گشوده شد. با توجه به کاربردهای گوناگون گرافین و ساخت آن به روش‌های مکانیکی و شیمیایی مختلف فیزیک‌دانان به سراغ ساخت آزمایشگاهی مواد دو بعدی مختلف مانند سیلیسین و بروفین پرداختند. فسفرین یکی از مواد دو بعدی هست که یک لایه از فسفر سیاه است [۱-۲].
فسفرین مانند گرافین دارای ساختار لانه زنبوری است ولی برخلاف گرافن متقارن نیست. نامتقارن بودن فسفرین سبب می‌شود که این ماده شکاف‌دار باشد. نکته جالب توجه دیگر در مورد فسفرین آن است که برای یک نانونوار فسفرین با لبه‌های زیگزاگ حالت‌های لبه‌ای ایجاد می‌شود که این حالت‌های لبه‌ای مانند یک سامانه یک بعدی رفتار می‌کند. این حالت لبه‌ای در شکاف سامانه قرار دارد و از این لحاظ می‌توان آن را به عنوان یک سامانه یک بعدی مجزا در نظر گرفت [۱-۴]. نکته جالب توجه دیگر در مورد فسفرین آن است که اگر یک خط ناخالصی در فسفرین ایجاد کنیم آنگاه یک نوار ناخالصی در آن ایجاد می‌شود [۵-۷]. این نوار ناخالصی نیز مانند حالت‌های لبه‌ای شکاف انرژی قرار دارند. در مقالات مختلف حالت‌های لبه‌ای فسفرین و ویژگی‌ها و کاربردهای آن و همچنین به بررسی نوارهای انرژی ناخالصی بررسی شده است [۷]. ساخت فسفرین به شکل نانونوار و بررسی ویژگی‌های ترابرد آن در مقالات [۹-۸] آمده است. افزون بر این، در مقالات [۱۰-۱۳] نیز در مورد ایجاد تهی‌جا در فسفرین به شکل عددی بحث شده است.
امروزه ساخت و بررسی سامانه‌های یک بعدی، که به آن‌ها سیم‌های کوانتومی گفته می‌شود، یکی از مباحث مورد توجه فیزیک دان‌ها می‌باشد. مباحثی چون ساخت ترانزیستورهای تک الکترونی و همچنین ساخت و بررسی بیت‌های کوانتومی و انجام محاسبات کوانتومی بر روی آن‌ها یکی از اهداف فیزیکدانان می‌باشد که برای پیاده‌سازی آن نیاز به سامانه‌های یک بعدی با امکانات برهم‌کنش بین آن‌ها می‌باشد [۱۴]. حالت‌های لبه‌ای در فسفرین ذاتا یک سامانه یک بعدی است و اگر بتوان به روشی بین انرژی سامانه‌های یک بعدی برهم‌کنش لازم را مهندسی کرد، می‌تواند کاربرد فراوانی در حوزه‌های یاد شده داشته باشد. به همین دلیل در این مقاله سعی شده است که با استفاده از نوارهای انرژی ناخالصی، امکان تونل‌زنی بین حالت‌های لبه‌ای یک نانو نوارفسفرین با لبه‌های زیگزاگ بررسی شود. همان‌گونه که در [۱۵] نشان داده شده است، در اثر عرض محدود می‌توان بین حالت‌های لبه‌ای بالایی و پایینی یک جفت‌شدگی به وجود آورد ولی این جفت‌شدگی

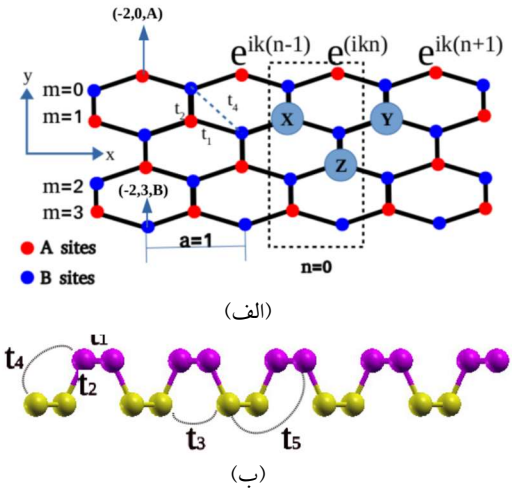
تنها برای عرض‌های بسیار کوچک است. در این مقاله ما نشان می‌دهیم که با استفاده از امکان نوار ناخالصی می‌توان برای عرض‌های بزرگ نیز یک تونل‌زنی بین لبه‌های بالا و پایین ایجاد کرد.

بررسی این مساله افزون بر جنبه نظری از دیدگاه کاربردی نیز می‌تواند مورد توجه باشد. به عنوان مثال در ساخت سوئیچ‌ها و یا ساخت گیت‌های کلاسیکی و کوانتومی می‌تواند کاربرد داشته باشد. برای محاسبه احتمال تونل‌زنی الکترون از یک لبه به لبه دیگر از روش لیپمن- شوئینگر که مبنای آن ماتریس $\hat{T}$ تابع گرین می‌باشد، استفاده شده است [۱۶]. در پایان نتایج عددی ارائه شد. در این بررسی نشان داده می‌شود که تونل زنی بین حالت‌های بالا و پایین می‌تواند رفتار تشدیدی و یا پاد تشدیدی ازخود نشان بدهد.

در بخش دوم مقاله مرور مختصری بر ساختار فسفرین و حالت‌های لبه‌ای نوار ناخالصی انجام می‌شود. در بخش سوم از روش لیپمن- شوئینگر برای محاسبه تونل‌زنی بین حالت‌های لبه‌ای استفاده و نتایج بررسی می‌شود . در پایان (بخش چهارم) نتایج جمع‌بندی می‌گردد.

۲. مروری بر ساختار فسفرین

در این بخش برای مشخص شدن فرمول‌بندی و نمادگذاری، مرور کوتاهی بر ساختار فسفرین و حالت‌های لبه‌ای و نوار ناخالصی انجام شده است.



شکل ۱ (الف) ساختار لانه زنبوری فسفرین با نوع شماره گذارهای اتم‌ها نشان داده شده است. (ب) ساختار فسفرین از کنار که نشان می‌دهد فسفرین دارای یک ساختار چین‌خورده است [۷].

ساختار فسفرین در شکل (۱) نشان داده شده است. همان‌گونه که در این شکل دیده می‌شود ساختار آن مانند گرافن یک ساختار لانه زنبوری است. بنابراین برای بیان این سامانه باید اتم‌ها را به دو دسته اتم‌های نوع A و نوع B تقسیم کرد. البته ساختار فسفرین بر خلاف ساختار گرافن مسطح نیست و دارای اعوجاج است. t_1 تا t_5 در شکل (۱) مشخص شده است و مقادیر آن عبارتند از [۴]:

$$\begin{aligned} t_1 &= -1.22eV \\ t_2 &= 3.66eV \\ t_3 &= -0.20eV \\ t_4 &= -0.10eV \\ t_5 &= -0.05eV \end{aligned} \tag{۱}$$

همان‌گونه که از معادله (۱) دیده می‌شود، برهم‌کنش بین همسایه‌های اول قویترین برهم‌کنش است و در مقالات مختلف تنها t_1 و t_2 و t_4 لحاظ می‌شود و از بقیه جملات صرفنظر می‌شود.

با توجه به شماره‌گذاری به صورت شماره زنجیر زیگزاگ در راستای Y و شماره زنجیر دسته صندلی در راستای X به زبان کوانتش دوم می‌توان هامیلتونی را به صورت زیر نوشت [۴]:

$$\begin{aligned} H_0 &= H' + H'' \\ H' &= \sum_{m,n} t_1 (a^{\dagger}_{n,m} + a^{\dagger}_{n+1,m}) b_{n,m} \\ &\quad + t_2 a^{\dagger}_{n,m} b_{n,m+1} + H.C \\ H'' &= \sum_{m,n} t_4 (a^{\dagger}_{n,m+1} + a^{\dagger}_{n+1,m+1}) a_{n,m} \\ &\quad + \sum_{m,n} t_4 (b^{\dagger}_{n,m+1} + b^{\dagger}_{n+1,m+1}) b_{n,m} \\ &\quad + H.C \end{aligned} \tag{۲}$$

که در این معادله H' مربوط به برهمکنش مرتبه اول می‌باشد و H'' مربوط برهمکنش مرتبه دوم است.

برای بدست آوردن حالت‌های لبه‌ای یک نانونوار فسفرین با لبه زیگزاگ از معادله زیر استفاده می‌شود.

$$H' \left| \psi^A \right\rangle = 0 \tag{۳}$$

در این معادله فرض شده است که حالت لبه‌ای تنها بر روی اتم نوع A که در لبه قرار دارد غیرصفر است. با توجه به رابطه (۳) می‌توان نشان داد که تابع موج حالت لبه ای عبارت است از [۴]:

$$\left|\psi^{A}(k)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sum_{n,m}\alpha^{m}(k)\gamma(k)e^{ikx_A}\left|n,m,A\right\rangle$$
$$\alpha(k) = -2\frac{t_1}{t_2}\cos(\frac{k}{2})$$
$$\gamma(k) = 1-\alpha^{2}(k)$$

(۴)

و همچنین پاشندگی حالت‌های لبه‌ای با استفاده از نظریه اختلال به صورت زیر است.

$$E(k) = \left\langle\psi^{A}\middle|H''\middle|\psi^{A}\right\rangle = -4\frac{t_4 t_1}{t_2}(1+\cos(k))$$
$$= \varepsilon_0 - 2t'\cos(k)$$

(۵)

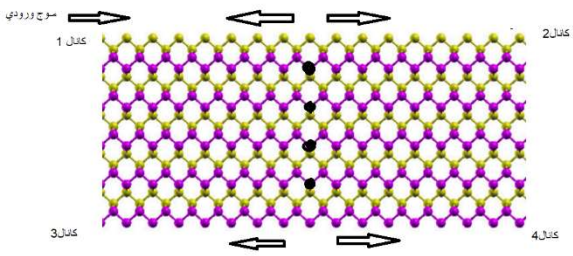
همان‌گونه که دیده می‌شود پاشندگی حالت‌های لبه‌ای بدست آمده دقیقاً مشابه یک سامانه بستگی قوی با جمله پرش موثر $t' = -2\frac{t_4 t_1}{t_2}$ است.

همان‌گونه که در [۷] نشان داده شده است، حضور تهی‌جا در فسفرین سبب ایجاد یک حالت جایگزیده در اطراف تهی‌جا می‌شود. در مقاله [۴] نیز نشان داده شده است، یک خط ناخالصی به شکل دوره‌ای منجر به یک نوار انرژی ناخالصی می‌شود. بررسی دقیق تحلیلی نوار ناخالصی در منبع [۷] آمده است و در این مقاله، از تکرار محاسبات صرف‌نظر شده است.

البته بیان نوار انرژی ناخالصی از لحاظ فیزیکی جالب است. وجود تهی‌جا منجر به ایجاد حالت‌های جایگزیده در اطراف تهی‌جا می‌شود و اگر آن‌ها به صورت دوره‌ای قرار بگیرند، آنگاه مانند آن است که اتم‌های یک‌ترازه به صورت دوره‌ای درکنار یکدیگر قرارگرفته‌اند که به دلیل همپوشانی تابع موج آن‌ها یک نوار انرژی ناخالصی مشابه یک زنجیر یک بعدی بستگی قوی به وجود می‌آید. نکته جالب توجه در این محاسبات آن است که چون در ناحیه نوار مرکزی ناشی از تهی‌جا موج ایستاده ایجاد می‌شود، به همین دلیل می‌تواند رفتار تشدیدی و یا پاد تشدیدی در رسانندگی بوجود آورد که این مساله می‌تواند به عنوان یک فیلتر برای انرژی عمل کند.

۳. محاسبه تونل‌زنی با استفاده از رهیافت لیپمن- شوئینگر

مساله‌ی مورد بررسی این مقاله در شکل (۲) نشان داده شده است.



شکل ۲ طرح‌واره مساله مورد بررسی. تهی جاها به صورت نقاط مشکی نشان داده شده است.

فرض می‌شود که یک نانونوار فسفرین با لبه‌های زیگزاگ داریم و در داخل آن یک خط ناخالصی در راستای دسته صندلی قرار داده شده است. انتظار می‌رود در ناحیه‌ای که نوار انرژی ناخالصی و نوار انرژی حالت‌های لبه‌ای هم‌پوشانی دارند، امکان تونل‌زنی از لبه بالا به لبه پایین وجود داشته باشد. به عبارتی انتظار می‌رود که اگر الکترون مطابق شکل (۲) از کانال ۱ وارد شود آنگاه با احتمال‌های مختلف می‌تواند از کانال‌های ۱ تا ۴ خارج شود. هدف اصلی این مقاله محاسبه احتمال‌های مختلف است. به منظور روشن‌تر شدن موضوع، هامیلتونی کل به صورت زیر بازنویسی می‌شود.

$$
\begin{aligned}
&H = H^{u} + H^{d} + H^{imp} + H^{int} \\
&H^{u(d)} = \int_{-\pi}^{\pi} -۲t' cos(k^{u(d)}) \left| k^{u(d)} \right\rangle \left\langle k^{u(d)} \right| dk^{u(d)} \\
&H^{ch} = \sum_{i} t'' \left| i \right\rangle \left\langle i+۱ \right| + H.C \\
&H^{int} = \int_{-\pi}^{\pi} V(k^{u}) \left| k^{u} \right\rangle \left\langle ۱ \right| dk^{u} \\
&\qquad + \int_{-\pi}^{\pi} V(k^{d}) \left| k^{d} \right\rangle \left\langle N \right| dk^{d} + H.C
\end{aligned}
\tag{۶}
$$

در رابطه بالا H^{u} و H^{d} هامیلتونی حالت‌های لبه‌ای مربوط به لبه بالا و پایین در فضای k می‌باشد و H^{ch} مربوط به حالت‌های خط ناخالصی می‌باشد. در این معادله از نتایج مقاله‌های [۵-۷] استفاده شده است. دراین مقاله‌ها نشان داده شده است که یک شبکه منظم از تهی‌جاها را می‌توان با یک

زنجیر یک بعدی شبیه‌سازی کرد. در آخر H^{int} مربوط به جفت‌شدگی حالت‌های لبه‌ای و حالت‌های ناخالصی است که فرض شده است لبه بالا با حالت جایگزیده تهی‌جا درلبه بالا، که شماره آن با ۱ نشان داده شده، جفت شده است و لبه پایین با اولین تهی‌جا، که آن را با N نشان داده شده، جفت شده است. قدرت جفت‌شدگی برای هر k^i با $V(k^i)$ نشان داده شده است.

همان‌گونه که در شکل (۲) آمده است، فرض می‌شود که الکترونی در کانال ۱ از سمت چپ وارد می‌شود. سوالی که مطرح است آن است که این الکترون با چه احتمالی پس از پراکندگی از خط ناخالصی از کانال‌های متفاوت پراکنده می‌گردد. برای محاسبه این احتمالات از فرمول‌بندی لیپمن- شوئینگر استفاده می‌شود. در فرمول‌بندی لیپمن- شوئینگر ارتباط تابع موج خروجی و تابع موج ورودی به صورت رابطه زیر می‌باشد.

$$|\psi_{out}\rangle = |\psi_{in}\rangle + G_0 T |\psi_{in}\rangle \tag{۷}$$

که در این رابطه، G_0 تابع گرین سامانه بدون برهمکنش است و T ماتریس پراکندگی است که از رابطه زیر بدست می‌آید [۱۶].

$$T = H^{int}(1 + G_0 H^{int} + G_0 H^{int} G_0 H^{int} + ...) \tag{۸}$$

توابع گرین مختلف به صورت زیر بدست می‌آید.

$$G_0(E) = \int dE' \frac{|E'\rangle\langle E'|}{E - E' + i0^+} \tag{۹}$$

که در این رابطه، $|E'\rangle$ ویژه حالت انرژی با ویژه مقدار E' است.

همان‌گونه که در شکل (۲) امده است، برای یک ورودی چهار خروجی مختلف وجود دارد، از این رو، بر خلاف محاسبات منبع [۴] که در آن با استفاده از یک عدد قابل نوشتن می‌باشد، در اینجا باید از فرمول‌بندی ماتریسی برای بدست‌آوردن یک شکل بسته استفاده کرد. به دلیل وجود دو کانال و همچنین ردگیری نوار ناخالصی بر روی درجات آزادی، باید از ماتریس‌های دو در دو برای یافتن شکل بسته استفاده کرد. با استفاده از نمادگذاری ماتریسی، از معادله (۸) نتیجه زیر بدست می‌آید:

$$
\begin{aligned}
T &= \iint \left[V^u \left| k^u \right\rangle, V^d \left| k^d \right\rangle \right] \frac{1}{1-\tilde{G}} \begin{bmatrix} \langle 1 | \\ \langle N | \end{bmatrix} dk^u dk^d \\
&+ \iint \left[V^u \left| k^u \right\rangle, V^d \left| k^d \right\rangle \right] \\
&\times \frac{1}{1-\tilde{G}} \begin{bmatrix} G_{11}^{imp} & G_{1N}^{imp} \\ G_{N1}^{imp} & G_{NN}^{imp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle k^u | V^u \\ \langle k^d | V^d \end{bmatrix} dk^u dk^d \\
&+ \left[|1\rangle, |N\rangle \right] \frac{1}{1-\tilde{G}} \begin{bmatrix} g^u & 0 \\ 0 & g^d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle 1 | \\ \langle N | \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{10}
$$

کمیت‌های معادله (۱۰) عبارتند از:

$$
G_{i,j}^{imp} = \langle i | G^{imp} | j \rangle = \frac{-ie^{ik_0 |i-j|}}{2t'' \sin(k_0)}
$$

$$
g^i = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\left| V^i \right|^2}{E - 2t' \cos(k) + i0^+}
$$

$$
\tilde{G} = \begin{bmatrix} g^u G_{1,1}^{imp} & g^d G_{1,N}^{imp} \\ g^u G_{N,1}^{imp} & g^d G_{N,N}^{imp} \end{bmatrix}
\tag{11}
$$

که در این عبارت $k_0 = \cos^{-1}\left(\frac{E}{2t''}\right)$ است.

با فرض آنکه حالت ورودی مطابق شکل به صورت زیر باشد.

$$
\left| \psi^{in} \right\rangle = \left| k_0^u \right\rangle
\tag{12}
$$

آنگاه به سادگی می‌توان نشان داد که دامنه خروج الکترون از کانال‌های مختلف عبارت است از :

$$
\begin{aligned}
t_{12} &= 1 + \frac{-i}{2t' \sin(k_0)} T_{11} \\
t_{11} &= \frac{-i}{2t' \sin(k_0)} T_{11} \\
t_{13} &= t_{14} = \frac{-i}{2t' \sin(k_0)} T_{21}
\end{aligned}
\tag{13}
$$

در محاسبه رابطه (۱۳) ماتریس پراکندگی که از معادله (۱۰) بدست آمده بود بین $\left|k^i\right\rangle$ های مختلف ساندویچ شده است. با توجه به شکل معادله (۱۰)، T_{ij} باید مولفه‌های ماتریس T' به صورت زیر باشد.

$$T' = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} = \frac{1}{1-\tilde{G}} \begin{bmatrix} G_{11}^{imp} & G_{1N}^{imp} \\ G_{N1}^{imp} & G_{NN}^{imp} \end{bmatrix} \tag{۱۴}$$

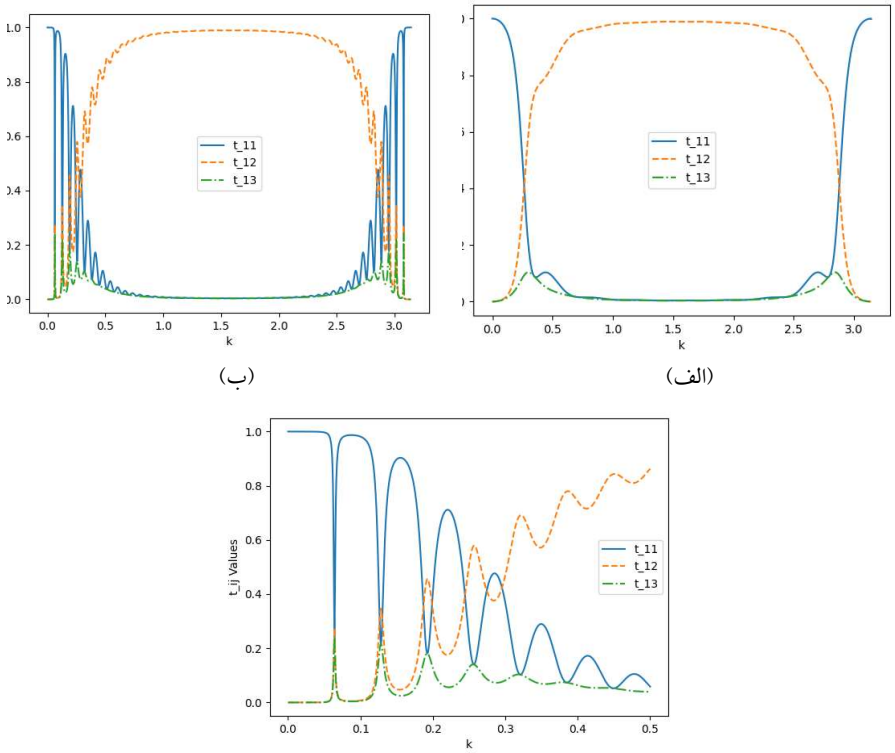
البته برای یک سامانه متقارن شکل (۲) انتظار می‌رود که $T_{12} = T_{21}, T_{11} = T_{22}$ باشد.

در عبارت (۱۳)، t_{12} دامنه احتمال آن است که الکترون از کانال ۱ وارد شود و ازکانال ۲ خارج شود. بقیه دامنه‌های احتمال نیز به همین صورت است. با استفاده از داده‌های مقالات مقادیر زیر برای انرژی برهم‌کنش بدست آمده است.

$$\begin{aligned} t' &= 0.15eV \\ t'' &= 0.13eV \end{aligned} \tag{۱۵}$$

با توجه به مقادیر بالا احتمال پراکندگی از کانال ۱ به کانال‌های مختلف برای Nهای مختلف بر حسب k_x رسم شده است. لازم به بیان است که در بدست آوردن نتایج از برنامه پایتون استفاده شده است.

نکته جالب توجه از این شکل‌ها آن است که چون خط ناخالصی توسط امواج ایستاده منجر به انتقال الکترون از لبه بالا به لبه پایین می‌شود، بنابراین در این حالت پدیده‌های تشدید و پاد تشدید به وجود می‌آید و همان‌گونه که در این شکل دیده می‌شود پراکندگی می‌تواند بر حسب k_x به شدت تغییرکند. همچنین پدیده‌های تشدید و پادتشدید با افزایش عرض نوار به شدت افزایش می‌یابند.



(الف) (ب)

(ج)

شکل ۳ نتایج عددی برای $t' = ۰/۱۵eV, t'' = ۰/۱۳eV$: (الف) N=5، (ب) N=20 و (ج) نتایج شکل "ب" برای بازه کوچکتر.

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله نشان داده شد که با اضافه کردن یک خط ناخالصی درراستای دسته صندلی از یک نانو نوار فسفرین با لبه‌های زیگزاگ یک کانال بین لبه بالا و لبه پایین ایجاد می‌شود. با استفاده از فرمول‌بندی لیپمن- شوئینگر ماتریس پراکندگی و همچنین احتمال پراکندگی بین کانال‌های مختلف محاسبه و نشان داده شدکه با توجه به ویژگی موجی بودن حالت خط ناخالصی، پدیده‌های تشدید و یا پادتشدید رخ می‌دهد. نکته دیگر آن است که تعداد پدیده‌های تشدید و پادتشدید بستگی به عرض نانو نوار دارد. به عبارتی با افزایش عرض نانونوار تعداد امواج ایستاده نیز افزایش می‌یابد و به

همین دلیل تعداد حالت‌هایی که پدیده تشدید در آن اتفاق می‌افتد افزایش می‌یابد. نتایج این مقاله می‌تواند برای ساخت فیلترهای انرژی مورد استفاده قرار بگیرد.

۵. تقدیر و تشکر

نویسندگان از ریاست محترم دانشگاه آزاد اسلامی واحد نجف‌آباد به دلیل کمک‌های ارزشمندشان در راستای انجام این تحقیق صمیمانه تشکر می‌کنند.

منابع

[1] Ezawa M., Topological origin of quasi-flat edge band in phosphorene, *New Journal of Physics*, 16, 115004-115017, 2014. https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/11/115004/meta

[2] Liu H., Neal A.T., Zhu Z., Luo Z., Xu X., D. Tomanek, and Ye P.D., Phosphorene: An Unexplored 2D Semiconductor with a High Hole Mobility, *ACS Nano,* 8, 4033-4041, 2014. https://doi.org/10.1021/nn501226z

[3] Qingyun Wu, Lei Shen, Ming Yang, Yongqing Cai, Zhigao Huang, and Yuan Ping Feng, "Electronic and transport property of phosphorene nanoribbons", *Phys. Rev. B,* 92, 035436-035454, 2015. https://doi.org/10.1021/nn501226z

[4] Rudenko A.N., Katsnelson M.I., Quasiparticle band structure and tight-binding model for single and bilayer black phosphorus, *Phys. Rev. B,* 89, 201408-201413, 2014. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.201408

[5] Amini M and Soltani M, Quantum transport through the edge states of zigzag phosphorene nanoribbons in presence of a single point defect: analytic green's function method, *Journal of Physics: Condensed Matter,* 31, 215301-215311, 2019. https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab09b8

[6] Zare M.H., Fazileh F, and Shahbazi.F,Zero Temperature Phase Diagram of the Classical Kane-Mele-Heisenberg Model, *Phys. Rev. B,* 87, 224416-221428, 2013. https://doi.org/ 10.1103/PhysRevB.87.224416

[7] Rezaei M., Karbaschi H., Amini M., Soltani M., and Rashedi G., Thermoelectric properties of armchair phosphorene nanoribbon in the presence of vacancy-induced impurity band, *Nano technology,* 32, 375704-375711, 2021. https://doi.org/ 10.1088/1361-6528/ac08ba

[8] Li L., Yu Y., Ye G.J, Ge Q., Ou X., Wu H., Feng D., Chen X.H., and Zhang. Y., Black phosphorus field-effect transistors, *Nature Nanotechnology,* 9, 372-377, 2014. https://doi.org/ 10.1038/nnano.2014.35

[9] Chang P.-H., Bahramy M.S.,Nagaosa N., and Nikoli B.K., Giant Thermoelectric Effect in Graphene-Based Topological Insulators with Heavy Adatoms and Nanopores, *Nano Letters,* 14, 3779-3784, 2014. https://doi.org/ 10.1088/1674-1056/aba9bf

[10] V. Wang, Y. Kawazoe, and W. T. Geng, Native point defects in few-layer phosphorene, *Phys. Rev. B,* 91, 045433-045442, 2015. https://doi.org/ 10.1103/PhysRevB.91.045433

[11] B. Kiraly, N. Hauptmann, A. N. Rudenko, M. I. Kat-snelson, and A. A. Khajetoorians, "Probing Single Vacancies in Black Phosphorus at the Atomic level", *Nano Lett.* 17, 3607-3612, 2017. https://doi.org/ 10.1021/acs.nanolett.7b00766

[12] Cupo A., Masih Das P., Chien C.-C., Danda G, Kharche N., Tristant D., Drndi M., and Meunier V., Periodic Arrays of Phosphorene Nanopores as Antidot Lattices with Tunabel Properties, *ACS Nano,* 11, 7494-7507, 2017. https://doi.org/ 10.1021/acsnano.7b04031

[13] Li L.L., and Peeters F.M., Quantum transport in defective phosphorene nanoribbons: Effects of atomic vacancies, *Phys. Rev. B,* 97, 075414-075423, 2018. https://doi.org/ 10.1103/PhysRevB.97.075414

[14] Michael A. Nielsen and Isaac Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*, Cambridge University Press,Cambridge,1,50-100, 2010.

[15] Paez C.J., Bahamon D.A., Pereira A.L.C., Schulz A., Zigzag phosphorene nanoribbons: one-dimensional resonant channels in two-dimensional atomic crystals, *Beilstein J. Nanotechnol.* 7, 1983-1990, 2016. https://doi.org/ 10.3762/bjnano.7.189

[16] Economou E.N., *Greens Functions in Quantum Physics*, 3rd, Springer-Verlag, New York,3,10-15, 1979.

This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/).