

## بررسی اثر پیچشی روی خواص الکترونی نانو ساختارهای دو لایه‌ای گرافین و بورن نیتريد

آزاده اشکش<sup>1\*</sup>، علی اصغر شکری<sup>2</sup>

1. کارشناسی ارشد، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور

2. استاد، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور

تاریخ دریافت: 1397/09/07 تاریخ پذیرش: 1398/12/13

## Investigating the Twisted Effect on Electronic Properties of Graphene and Boron- Nitride Bilayers Nanostructures

A. Ashkesh<sup>\*1</sup>, A.A. Shokri<sup>2</sup>

1. M.A., Department of Physics, Payame Noor University

2. Professor, Department of Physics, Payame Noor University

Received: 2018/11/28 Accepted: 2020/03/03

### Original Article

### مقاله پژوهشی

#### Abstract

In this paper, the electrical properties of graphene and boron nitride are studied. The effect of the layers on each other and also the twisting of the layers on each other were studied. The presence of an additional layer creates additional levels, which, in the case of graphene, maintains the conductivity of the material, but reduces its mobility dramatically. The curvature of graphene and boron nitride increases the number of energy strips to eight. Increasing the bending angle leads to the movement of the point of attachment of the conduction edges and also to the movement of the capacity of the graphene to the center of the region of the brillouin. . In the case of boron nitride, the curvature transfers the band gap to the center of the brillouin region. This transmission increases with increasing the angles of twisting.

#### Keywords

Dispersion Relation, Graphene, Boron Nitride, Electronic Properties, Twisting Effect.

#### چکیده

در این مقاله، خواص الکترونی گرافین و بورن نیتريد دو بعدی مورد مطالعه قرار گرفته است. تاثیر وجود لایه‌ها روی همدیگر و همچنین پیچش لایه‌ها روی همدیگر مطالعه می‌شود. وجود لایه اضافه موجب ایجاد تراز‌هایی اضافه می‌شود که در مورد گرافین همچنان رسانندگی این ماده را حفظ می‌کند ولی تحرک‌پذیری آن را به شدت کم می‌کند. اثر پیچش در گرافین و بورن نیتريد موجب افزایش تعداد نوارهای انرژی به هشت عدد می‌شود که افزایش زاویه پیچش منجر به حرکت نقطه اتصال لبه‌های رسانش و ظرفیت در گرافین به سمت مرکز منطقه بریلوئن شده است. در مورد بورن نیتريد اثر پیچش موجب انتقال محل گاف نوری به سمت مرکز منطقه بریلوئن می‌شود. این انتقال با افزایش زاویه پیچش بیشتر و بیشتر می‌شود.

#### واژگان کلیدی

رابطه پاشندگی، گرافین، بورن نیتريد، خواص الکترونی، اثر پیچش.

## مقدمه

گرافین یک تک لایه نازک متشکل از اتم‌های کربن است که در یک ساختار دو بعدی لانه زنبوری قرار گرفته‌اند و از لحاظ ترمودینامیکی پایدار می‌باشد [1]. این شبکه دو بعدی موضوع بسیار مورد علاقه‌ای در چند سال گذشته بوده است. این علاقه نه تنها به دلیل کاربردهای صنعتی و فناوری ممکن آن در آینده است، بلکه به دلیل این است که گرافین امکان بررسی پدیده‌های جالب که توسط نظریه میدان کوانتومی پیش‌بینی شده است را فراهم می‌کند. هم چنین تحقیقات گسترده‌ای را به صورت نظری و تجربی به علت ویژگی‌های تراپردی مغناطیسی و الکتریکی به خود اختصاص داده است. از طرفی دیگر، ساختارهای نیتريد بور هشت وجهی یا گرافین سفید مشابه ساختارهای گرافینی است که در آن اتم‌های بور و نیتروژن به صورت یک در میان جایگزین اتم‌های کربن شده‌اند. این ترکیب به عنوان یک ماده عایق الکتریکی با هدایت حرارتی بالا، و همچنین به عنوان یک نانو افزودنی دو بعدی به سیالات انتقال دهنده حرارت در بین سایر افزودنی‌ها محسوب می‌شود.

گرافین تک لایه‌ای گاف نواری ندارد و در نزدیکی نقاطی که نوار رسانش و نوار ظرفیت به هم می‌رسند شکل نوار انرژی همانند مخروط‌های دیراک برای ذرات بدون جرم می‌شود [2، 3]. این موضوع هم می‌تواند از جنبه‌هایی بسیار مهم و خوب باشد و هم در بعضی زمینه‌ها نامناسب است. بالاخص در جاهایی که نیاز داریم گرافین با اعمال ولتاژ گیت خاصیت رسانایی یا نارسانایی را ایفا کند عدم وجود گاف نواری در دسر ساز می‌شود [12]. حال آن که ساختار تک لایه‌ای بورن نیتريد دارای گاف نواری بزرگی در حدود 6 الکترون ولت است. گرافین دو لایه‌ای هم در شرایطی دارای یک گاف نواری می‌شود. اما در استفاده از این دو لایه‌ای‌ها عملاً ممکن است لایه‌ها دقیقاً روی هم قرار نگیرند و کمی روی هم بچرخند. مطالعه چرخش لایه‌ها و تاثیر آن روی نمودار پاشندگی الکتریکی نانو ساختارهای گرافین و بورن نیتريد دو لایه‌ای می‌تواند در کاربردهای نانو الکترونیکی مفید باشد

## فرمولبندی نظری مسئله

در گونه‌های مختلف کربن به جز الماس الکترون‌های  $p$  هستند که در امر رسانش دخالت می‌کنند [4، 5]. جهت بررسی ساختار نواری صفحه گرافین از روش تنگ بست<sup>1</sup> و نظریه بلاخ<sup>2</sup> استفاده می‌کنیم. چون در این محاسبات احتیاج به تقارن‌ها و همسایه‌های نزدیک هر اتم داریم، بنابراین قبل از پرداختن به محاسبه ساختار نواری گرافین بهتر است ابتدا با ساختار هندسی گرافین آشنا شویم.

گرافین دارای یک ساختار دو بعدی است که در آن اتم‌های کربن در گوشه‌های شش ضلعی‌های منتظمی قرار گرفته‌اند. فاصله پیوندی کربن - کربن برابر  $0/142$  نانومتر می‌باشد و زاویه پیوندی برابر  $120$  است [6]. هر اتم کربن در صفحه گرافین با سه اتم مجاور خود پیوندهای قوی  $S$  برقرار می‌کند. اربیتال  $P$  هر اتم کربن بر این صفحه عمود است. در شکل (1) ساختار هندسی صفحه گرافین نشان داده شده است. همان گونه که مشاهده می‌کنید گرافین یک ساختار شبکه‌ای براوه نیست. در یک شبکه براوه دو بعدی می‌توان از هر اتم در شبکه به وسیله بردار انتقالی که بر اساس دو بردار پایه شبکه تعریف می‌شود به هر اتم دیگری در شبکه دست یافت. ولی در مورد گرافین هر چند تمام اتم‌ها کربن هستند اما یک سری از اتم‌ها دارای بازوهای پیوندی متفاوت با سری دیگر هستند. در شکل (1) این تفاوت را به صورت واضحی نشان داده ایم. ما به سری اول اتم‌ها برچسب 'a' و به سری دوم برچسب 'b' را می‌زنیم. حال می‌توان با تعریف بردارهای پایه از هر اتم 'a' به اتم دیگر 'a' به وسیله بردار انتقال  $\vec{R}$  رفت. به عبارت دیگر اتم‌های نوع 'a' و یا اتم‌های نوع 'b' با هم دیگر در یک صفحه گرافین تولید شبکه براوه‌ای با ثابت شبکه  $0/246$  نانومتر می‌کنند [6، 7]. بردارهای پایه همان طور که در شکل (1) نشان داده شده‌اند به صورت زیر تعریف می‌شوند.

1. Tight bonding  
2. Bloch

با مقداری عملیات جبری به رابطه زیر می‌رسیم:

$$\sum_{i=1}^h \mathbf{a}_i^h c_i H_{ij} = E \sum_{i=1}^h \mathbf{a}_i^h c_i S_{ij} \quad (j=1, \dots, h) \quad (5)$$

در این رابطه  $H_{ij}$  المان ماتریس تبدیلی و  $S_{ij}$  انتگرال همپوشانی است و  $h$  تعداد کل اربیتال‌ها است. رابطه (5) را به صورت جبری می‌توان به شکل زیر نوشت.

$$\hat{H} \times \hat{C} = E \hat{S} \times \hat{C} \quad (6)$$

در این رابطه  $C$  یک بردار ستونی از ضرایب  $c_i$  ها است. برای به دست آوردن انرژی باید دترمینان ماتریس ضرایب را برابر صفر قرار داد.

$$\det(\hat{H} - E\hat{S}) = 0 \quad (7)$$

ابعاد ماتریس  $H$  و  $S$  را تعداد و نوع اتم‌هایی که در مولکول وجود دارد معین می‌کند. اگر دو اتم کربن یک مولکول تشکیل دهند چون هر اتم کربن دارای چهار الکترون ظرفیت است، بنا به رابطه (5) می‌توان دید که ابعاد این ماتریس  $8 \times 8$  است.

صفحه گرافین شامل دو نوع اتم کربن است. هر اتم 'a' با سه اتم 'b' پیوند برقرار می‌کند و بالعکس. بنابراین با توجه به شکل (1) و در نظر گرفتن نزدیک‌ترین همسایه، ماتریس هامیلتونی که یک ماتریس هرمیتی است به صورت زیر به دست می‌آید:

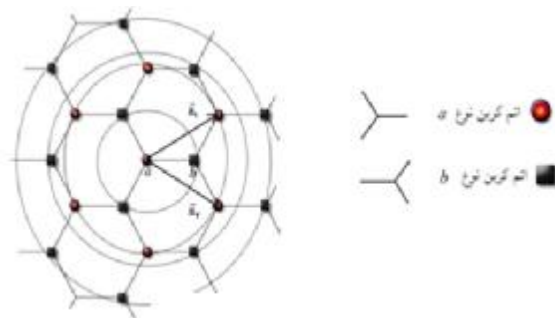
$$H = \begin{pmatrix} \sum_{\mathbf{r}} a & \sum_{\mathbf{r}} b f(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \\ \sum_{\mathbf{r}} b f^*(\mathbf{k}) & \sum_{\mathbf{r}} a \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \end{pmatrix} \quad (8)$$

$$S = \begin{pmatrix} \sum_{\mathbf{r}} 1 & \sum_{\mathbf{r}} s f(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \\ \sum_{\mathbf{r}} s f^*(\mathbf{k}) & \sum_{\mathbf{r}} 1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$\bar{a}_1 = a \left( \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right) \quad (1)$$

$$\bar{a}_2 = a \left( \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right) \quad (2)$$

در این روابط  $a$  ثابت شبکه می‌باشد. فضای وارون صفحه گرافین به وسیله بردارهای پایه‌ای که نسبت به بردارهای پایه شبکه مستقیم آن تعریف شده مشخص می‌شود.



شکل 1. در این شکل بردارهای پایه صفحه گرافین و پایه‌های آن نشان داده شده است

### روش بستگی قوی برای گرافین تک لایه‌ای

یک مولکول با تعدادی معین از اتم‌ها را در نظر بگیرید. هر اتم شامل الکترون‌های نوار ظرفیت است که اربیتال‌های اتمی را تشکیل می‌دهند. تابع موج مولکول را می‌توان بر اساس یک ترکیب خطی از تابع موج اتم‌ها به صورت زیر نوشت.

$$Y_M(\mathbf{r}) = \sum_i \mathbf{a}_i c_{ij} \psi_i(\mathbf{r}) \quad (3)$$

اگر این تابع موج را در رابطه ویژه مقداری انرژی با هامیلتونی کل مولکول قرار دهیم داریم:

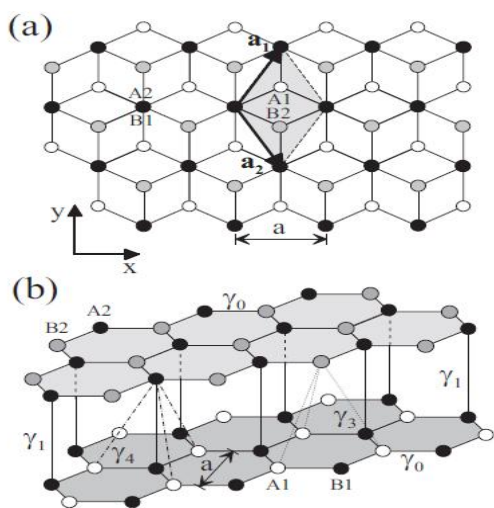
$$\hat{H}_M Y_M(\mathbf{r}) = E Y_M(\mathbf{r}) \quad (4)$$

$$E_c = \frac{(E_a + E_b) + \sqrt{(E_a - E_b)^2 + 4|f(\mathbf{k})|^2}}{2} \quad (13)$$

$$E_v = \frac{(E_a + E_b) - \sqrt{(E_a - E_b)^2 + 4|f(\mathbf{k})|^2}}{2} \quad (14)$$

### محاسبه نوار انرژی ساختارهای دو لایه‌ای به روش بستگی قوی

ساختارهای لانه زنبوری تک لایه‌ای با پایه‌های دو اتمی توصیف می‌شوند. بنا بر این ماتریس هامیلتونی در این پایه‌ها در تقریب بستگی قوی نوشته می‌شود و یک ماتریس از مرتبه 2 است. حال وقتی دو لایه داریم هر لایه برای خودش دو پایه دارد. پس قاعدتا باید ماتریس هامیلتونی از مرتبه 4 باشد. سیستم‌های دو لایه‌ای لانه زنبوری به صورتی که در شکل (2) نشان داده‌ایم بلوری می‌شوند.



شکل 2. ساختارهای دو لایه‌ای لانه زنبوری و تعریف ضرایب پرش

می‌توان ماتریس هامیلتونی را در روش بستگی قوی به

صورت زیر نوشت:

$$H = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 & A_2 & B_2 \\ \varepsilon_A & -\gamma_0 f(k) & \gamma_4 f(k) & -\gamma_3 f^*(k) \\ -\gamma_0 f^*(k) & \varepsilon_B & \gamma_1 & \gamma_4 f(k) \\ \gamma_4 f^*(k) & \gamma_1 & \varepsilon_A & -\gamma_0 f(k) \\ -\gamma_3 f(k) & \gamma_4 f^*(k) & -\gamma_0 f^*(k) & \varepsilon_B \end{pmatrix} \quad (15)$$

تابع  $f(\mathbf{k})$  با توجه هندسه مربوط به صفحه گرافین به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$f(\mathbf{k}) = e^{-ik_x \frac{a}{\sqrt{3}}} + 2e^{-i\frac{k_x a}{2\sqrt{3}}} \cos \frac{\sqrt{3} k_y a}{2} \quad (10)$$

همچنین  $b$  انرژی پیوندی دو اربیتال  $p$  اتم‌های 'a' و 'b' است.  $a$  ثابت شبکه و  $s$  مقدار انتگرال همپوشانی این دو اربیتال است. انرژی پیوندی الکترون‌های  $p$  در منابع به صورت  $3/033 \text{ eV}$  و انتگرال همپوشانی آن‌ها به صورت  $0/129$  آورده شده است [4]. با صفر قرار دادن دترمینان (7) ترازهای انرژی برای صفحه گرافین به دست می‌آید.

$$E_{\pm} = \frac{\pm b |f(\mathbf{k})|}{1 \pm s |f(\mathbf{k})|} \quad (11)$$

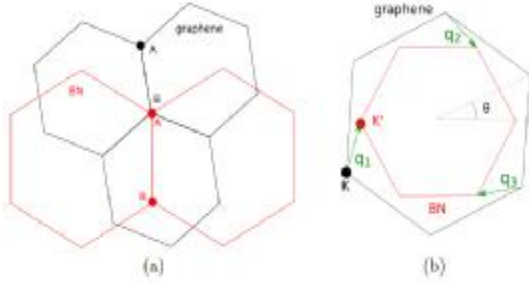
### محاسبه ساختار نواری بورن نیتريد تک لایه‌ای

بورن نیتريد تک لایه‌ای همانند گرافین در شبکه لانه زنبوری بلورین می‌شود [9]. بنابراین در نگاه اول باید نوار انرژی آن بسیار شبیه گرافین باشد، اما با دقت بیشتر متوجه می‌شویم چون در مورد گرافین پایه‌های شبکه همه اتم‌های کربن بوده‌اند، بنابراین انرژی جایگاهی همه آنها با هم برابر بود. اما در این جا ما با دو اتم متفاوت سر و کار داریم، لذا انرژی جایگاهی هرکدام با دیگری بسیار متفاوت است. همین تفاوت است که باعث ایجاد گاف نواری بزرگی در بورن نیتريد می‌شود [8]. بنا بر این باید معادله زیر را حل کنیم تا انرژی این ساختارها به دست آید.

$$\begin{vmatrix} E_a - E & tf(\mathbf{k}) \\ tf^*(\mathbf{k}) & E_b - E \end{vmatrix} = 0 \quad (12)$$

جواب‌ها به صورت زیر هستند.

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & T_1^\dagger & T_2^\dagger & T_3^\dagger & \delta \\ \frac{\hbar^2 q^2}{2m} & h_{BN}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) & 0 & 0 & \delta \\ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & 0 & h_{BN}(\mathbf{k} + \mathbf{q}_b) & 0 & \delta \\ \frac{\hbar^2 q^2}{2m} & -v_F p^\dagger & v_F p & h_{BN}(\mathbf{k} + \mathbf{q}_b) & \delta \end{pmatrix} \quad (19)$$

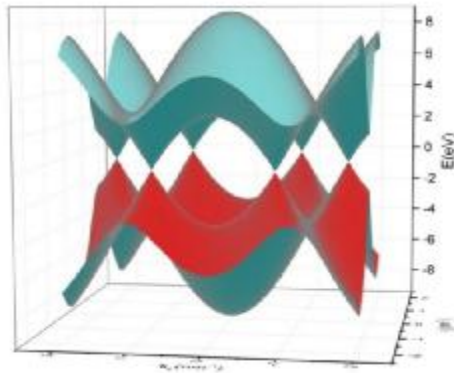


شکل 3. اثر پیچش روی شبکه مستقیم (a) و شبکه وارون (b)

### نتایج عددی و بحث بر روی آنها

#### نوار انرژی گرافین تک لایه‌ای

در استخراج رابطه پاشندگی به روش بستگی قوی دو فرض جداگانه را مطرح می‌نماییم. یکی این که اربیتال‌های  $p_z$  اتم‌های مجاور هیچ گونه همپوشانی نداشته باشند و فرض دیگر این که این اربیتال‌ها همپوشانی اندکی داشته باشند. ضریب پرش الکترون برای گرافین از منابع 3 الکترون ولت در نظر گرفته می‌شود [4]. در حالتی که همپوشانی اربیتال‌های  $p_z$  صفر نباشد مقدار این همپوشانی را نیز برابر



شکل 4. نوار انرژی گرافین تک لایه‌ای

همچنین می‌توان انتگرال همپوشانی اربیتال‌ها را به صورت زیر تعریف کرد.

$$S_{ij} = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 & A_2 & B_2 \\ 1 & s_1 f(k) & 0 & 0 \\ s_1 f^*(k) & 1 & s_1 & 0 \\ 0 & s_1 & 1 & s_1 f(k) \\ 0 & 0 & s_1 f^*(k) & 1 \end{pmatrix} \quad (16)$$

#### محاسبه تاثیر پیچش<sup>1</sup> لایه‌ها روی همدیگر

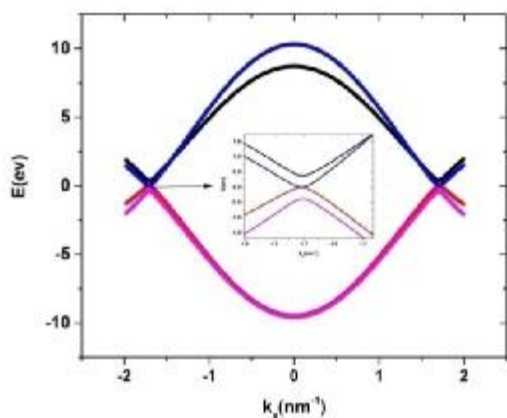
وقتی لایه بالایی روی لایه پایینی می‌پیچد دیگر سیستم دوره‌ای نیست و نظریه بلوخ برای دو لایه صادق نیست. اما همچنان لایه پایین و بالا به صورت جداگانه دوره‌ای هستند و توابع موج بلوخ برای آنها صادق است. ما ضریب پرش بین دو لایه را به صورت زیر برای دو لایه‌ای که به اندازه زاویه  $Q$  نسبت به همدیگر پیچیده باشند تعریف می‌کنیم [11]:

$$T_{p^*k}^{ba} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{(\mathbf{k} + M(\mathbf{q})G_1)_x}{W} e^{-iG_1(t_a - t_b)} e^{iG_2 t_b} d \quad (17)$$

در رابطه (17)،  $M$  ماتریس دوران است و مطابق رابطه زیر داده می‌شود.

$$M(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} \cos(q) & -\sin(q) \\ \sin(q) & \cos(q) \end{pmatrix} \quad (18)$$

در نهایت، هامیلتونی یک صفحه بورن نیتريد که روی یک صفحه گرافین قرار گرفته باشد و پیچیده باشد را به صورت زیر خواهیم داشت.



شکل 6. نوار انرژی گرافین دو لایه‌ای بر اساس داده‌های مرجع [10]

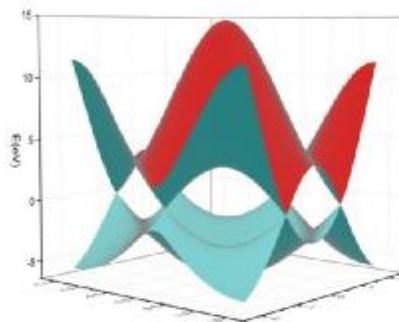
در این وضعیت چهار نوار انرژی داریم که دو نوار از آن‌ها همدیگر را لمس کرده‌اند. این موضوع باعث رسانا بودن این ساختار می‌شود. اما وقتی به محل اتصال نوار رسانش به نوار ظرفیت نگاه می‌کنیم دیگر شکل مخروطی ندارد و این یعنی فرم انرژی گرافین دو لایه‌ای در نزدیکی این نقاط رفتار خطی با تکانه ندارد [12].

نوار انرژی گرافین دو لایه‌ای که با زوایای مختلف پیچیده است به صورت شکل 7 است:

تفکیک نوار انرژی به هشت نوار مجزا کاملاً مشهود است. وقتی زاویه پیچش کوچک می‌شود برخی از ترازها روی همدیگر قرار می‌گیرند، اما برای زوایای بزرگ‌تر تفکیک شدن ترازهای انرژی کاملاً مشهود است.

0/129 در نظر می‌گیریم [4]. در شکل (4) نوار انرژی گرافین تک لایه‌ای را با فرض آن که همپوشانی الکترون‌های  $p_z$  اتم‌های مجاور صفر باشد نشان داده ایم. نوار رسانش نوار ظرفیت را در شش نقطه لمس کرده است. این نقاط همان نقاط  $K$  و  $K'$  هستند.

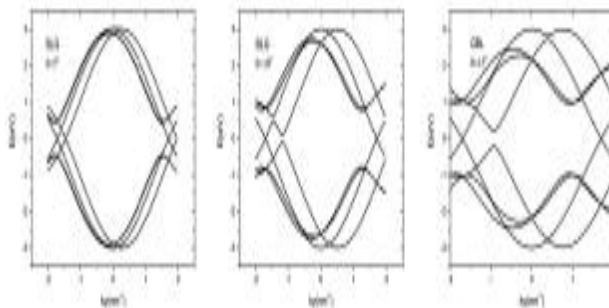
این موضوع باعث می‌شود گرافین از خود خاصیت رسانندگی داشته باشد. از طرف دیگر نوار رسانش و نوار ظرفیت کاملاً متقارن هستند. این موضوع دقیقاً به خاطر این است که همپوشانی اربیتال‌های  $p_z$  را برابر صفر در نظر گرفتیم. اگر انتگرال همپوشانی را غیر صفر قرار دهیم، دیگر نوار رسانش و نوار ظرفیت متقارن نیستند.



شکل 5. نوار نامتقارن انرژی گرافین

### نوار انرژی گرافین دو لایه‌ای

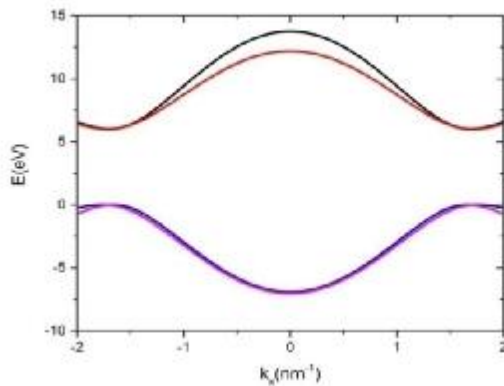
لایه‌های گرافین می‌توانند به دو صورت روی همدیگر باشند. اول اینکه بدون هیچ گونه پیچشی و به صورت کامل روی همدیگر قرار گیرند و دوم این که کمی لایه بالایی نسبت به پایینی پیچیده باشد.



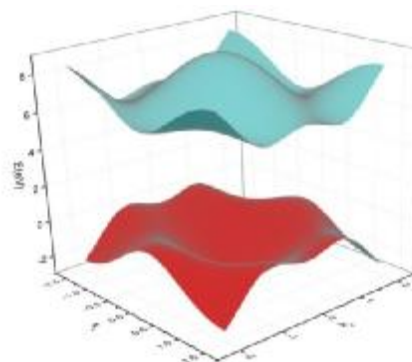
شکل 7. نوار انرژی گرافین دو لایه‌ای پیچیده شده تحت زوایای مختلف

### نوار انرژی بورن نیتريد تک لایه‌ای

در نظریه بستگی قوی تنها تفاوتی که بین شبکه بورن



شکل 9. نوار انرژی بورن نیتريد دو لایه‌ای مستقیم



شکل 8. نوار انرژی بورن نیتريد تک لایه‌ای

### بحث و نتیجه‌گیری

تغییرات گاف نواری و خواص الکترونی گرافین و بورن نیتريد دولایه در اثر چرخش لایه‌ها نسبت به هم می‌تواند در صنعت الکترونیک و اپتیکی مورد توجه قرار گیرد. گرافین تک لایه‌ای ماده‌ای است رسانا که در حوالی اتصال نوار رسانش به نوار ظرفیت خواص مخروط دیراک را دارد. گرافین دو لایه‌ای ماده‌ای است رسانا اما دیگر حوالی اتصال نوار رسانش و ظرفیت حالت مخروط دیراک را ندارد. این بدان معنا است که در این وضعیت تحرک پذیری الکترون‌ها کاهش چشم‌گیری پیدا کرده است. در گرافین دو لایه‌ای پیچش لایه‌ها روی همدیگر سبب به وجود آمدن نوارهای اضافی می‌شود. محل اتصال نوار ظرفیت و رسانش با افزایش زاویه پیچش به سمت مرکز منطقه بریلوئن در حرکت است. بورن نیتريد تک لایه‌ای دارای گاف نواری بزرگ 6 الکترون ولت است و حالت نوار رسانش و ظرفیت

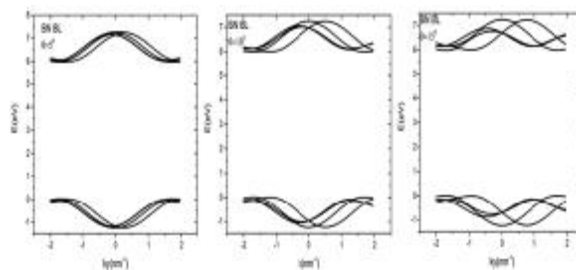
نیتريد و گرافین وجود دارد تفاوت در انرژی جایگاهی نیتروژن و بورن به مقدار 6 الکترون ولت است.

### نوار انرژی بورن نیتريد دو لایه‌ای

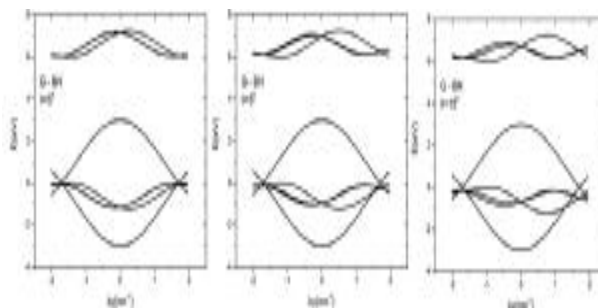
در این حالت، همچنان گاف نواری 6 الکترون ولت وجود دارد. اما محل کمینه و بیشینه نوار رسانش و ظرفیت با افزایش زاویه به سمت مرکز منطقه بریلوئن در حال پیشرفت است. همچنان با افزایش زاویه گاف نواری مستقیم باقی می‌ماند.

### نوار انرژی گرافین روی بورن نیتريد

در این وضعیت، تعداد ترازهای نوار رسانش به 3 عدد تقلیل پیدا کرده است. این بدان معنا است که یک تراز رسانش به درون تراز ظرفیت کشیده شده است که موجب رسانا شدن این ساختار می‌شود. قطعاً رسانش این ساختار به دلیل حضور گرافین می‌باشد.



شکل 10. نوار انرژی بورن نیتريد دو لایه‌ای پیچیده شده



شکل 11. نوار انرژی بورن نیتريد و گرافين که نسبت به هم پیچیده شده باشند

نوار رسانش و چهار تراز دیگر در نوار ظرفیت هستند. وقتی زاویه دوران خیلی کوچک باشد نوارها روی هم می‌افتند و با افزایش زاویه پیچش جدایی ترازها از هم مشهود می‌شود. این امر باعث می‌شود که گاف نواری به سمت مرکز منطقه بریلوئن پیش روی کند.

آن بسیار شبیه به گرافین می‌باشد. بورن نیتريد دو لایه‌ای دارای چهار نوار می‌شود و این نوارها گاف نواری 6 الکترون ولت را هم چنان نشان می‌دهند. تاثیر پیچش بر روی ساختار نواری بورن نیتريد دقیقاً مانند گرافین است. هشت تراز انرژی به وجود می‌آیند که چهار تراز آن در

## References

- [1] M.S.A. Bhuyan, M.N. Uddin, M.M. Islam, F.A. Bipasha, S.S. Hossain, Synthesis of graphene, *International Nano Letters*, 6 (2016) 65-83.
- [2] S. Stankovich, D.A. Dikin, R.D. Piner, K.A. Kohlhaas, A. Kleinhammes, Y. Jia, Y. Wu, S.T. Nguyen, R.S. Ruoff, Synthesis of graphene-based nanosheets via chemical reduction of exfoliated graphite oxide, *carbon*, 45 (2007) 1558-1565.
- [3] H.-L. Guo, X.-F. Wang, Q.-Y. Qian, F.-B. Wang, X.-H. Xia, A green approach to the synthesis of graphene nanosheets, *ACS nano*, 3 (2009) 2653-2659.
- [4] R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, *Physical properties of carbon nanotubes*, World Scientific, 1998.
- [5] A. Bahari, M. Amiri, Simulation Study of the Electron and Hole Transport in a CNTFET, *Communications in Theoretical Physics*, 59 (2013) 121.
- [6] H. Rafii-Tabar, Computational modelling of thermo-mechanical and transport properties of carbon nanotubes, *Physics Reports*, 390 (2004) 235-452.
- [7] W. Landgraf, S. Shallcross, K. Türschmann, D. Weckbecker, O. Pankratov, Electronic structure of twisted graphene flakes, *Physical Review B*, 87 (2013) 075433.
- [8] X. Blase, A. Rubio, S. Louie, M. Cohen, Stability and band gap constancy of boron nitride nanotubes, *EPL (Europhysics Letters)*, 28 (1994) 335.
- [9] M. Bagheri, A. Bahari, M. Amiri, B. Dehbandi, Electronic and structural properties of Au-doped zigzag boron nitride nanotubes: A DFT study, *Solid State Communications*, 189 (2014) 1-4.



- [10] A. Kuzmenko, I. Crassee, D. Van Der Marel, P. Blake, K. Novoselov, Determination of the gate-tunable band gap and tight-binding parameters in bilayer graphene using infrared spectroscopy, *Physical Review B*, 80 (2009) 165406.
- [11] H. Kim, N. Leconte, B.L. Chittari, K. Watanabe, T. Taniguchi, A.H. MacDonald, J. Jung, S. Jung, Accurate Gap Determination in Monolayer and Bilayer Graphene / h-BN Moire Superlattices, *Nano Lett*, 2018, 18, 12, 7732-7741
- [12] K. Lee, E. Liu, K. Watanabe, T. Taniguchi, J. Nah, Interface State in Bilayer Graphene Encapsulated by Hexagonal Boron Nitride, *Mater Interfaces*, 2018, 10, 48, 40985-40989.