



Research Paper;



Band Structure Calculation of Monolayer Silicene Using the Tight-Binding Method for Applications in Aerospace Electronic Systems

Davood Korzebor^{1*}, Nader Ghobadi², Ali Soltani Vala³

¹. Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Sciences, University of Malayer, Malayer City, Iran. E-mail: davood.korzebor@stu.malayeru.ac.ir.

². Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Sciences, University of Malayer, Malayer City, Iran. E-mail: n.ghobadi@malayeru.ac.ir.

³. Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Physics, University of Tabriz, Tabriz, Iran. E-mail: asoltani@tabrizu.ac.ir.

Article Information

Abstract

Accepted:
2026/05/27

Received:
2024/06/26

Keywords:

tight-binding method, tight-binding parameters, silicene crystal, non buckling, Aerospace Electronic Systems.

Corresponding Author:
Davood Korzebor

Email:
dkorzebor@gmail.com

Silicene is a two-dimensional form of silicon with a hexagonal honeycomb structure similar to graphene (a two-dimensional form of carbon). The widespread applications of graphene in the manufacture of lightweight and durable composites, protective coatings, and advanced electronic systems, due to its outstanding electronic and structural behavior in the aerospace industry, have paved the way for scientific research to investigate the behavior of materials with a two-dimensional structure similar to graphene, such as silicene. With the increasing importance of two-dimensional structured materials in advanced technologies, understanding their electronic behavior through quantum calculations such as the Tight-Binding (TB) method is essential. This research focuses on refining the TB method parameters and calculating the band structure of single-layer silicene along the high-symmetry paths K- Γ -M-K. A TB-based Hamiltonian for single-layer silicene was developed using MATLAB coding. Our refined calculations reveal a key finding: at the Γ point, the fifth band energy 1.70 eV lies below the fourth band energy 1.13 eV. This band ordering presents a significant deviation from ab-initio method results, which report an inverse trend, highlighting the sensitivity of TB method predictions to parameterization. After resolving this mismatch, the π and π^* bands linearly intersect at the Fermi level, a characteristic crucial for Dirac cone formation and high-frequency electronic applications. These findings provide a more accurate computational model for silicene, essential for its effective integration into advanced military and aerospace electronic systems.

korzebor,D. , Ghobadi,N. and Soltani Vala,A. (2026). Band Structure Calculation of Monolayer Silicene Using the Tight-Binding Method for Applications in Aerospace Electronic Systems. (e³ 3). *Aerospace Defense*, Vol 4 (Issue 4), Page. 98.-115.



فصلنامه علمی دفاع هوافضایی

دوره ۴، شماره ۴
زمستان ۱۴۰۴
صفحات ۹۸-۱۱۵



مقاله پژوهش

محاسبه ساختار نواری تک لایه سیلیسین با روش بستگی قوی برای کاربرد در

سامانه‌های الکترونیکی هوافضا

داوود کرزبر^{۱*}، نادر قبادی^۲، علی سلطانی والا^۳

۱. گروه فیزیک ماده چگال، دانشگاه ملایر، ملایر، ایران. رایانامه: daavod.korzorbor@stu.malaveru.ac.ir

۲. گروه فیزیک ماده چگال، دانشگاه ملایر، ملایر، ایران. رایانامه: n.ghobadi@malaveru.ac.ir

۳. گروه فیزیک ماده چگال، دانشگاه تبریز، تبریز، ایران. رایانامه: asoltani@tabrizu.ac.ir

چکیده

اطلاعات مقاله

سیلیسین یک دگرشکل دوبعدی سیلیسیم با ساختار شش ضلعی لانه زنبوری مانند گرافن (دگرشکل دوبعدی کربن) است. کاربردهای گسترده گرافن در ساخت کامپوزیت‌های سبک و مقاوم، پوشش‌های محافظ، سامانه‌های الکترونیکی پیشرفته، به دلیل رفتار برجسته الکترونیکی و ساختاری آن در صنایع هوافضا، مسیر پژوهش‌های علمی را به سمت بررسی رفتار موادی با ساختار دوبعدی مشابه گرافن نظیر سیلیسین را هموار نموده است. با توجه به اهمیت روزافزون مواد با ساختار دوبعدی در فناوری‌های پیشرفته، درک رفتار الکترونیکی این مواد از طریق محاسبات کوانتومی مانند روش بستگی قوی، ضروری است. این پژوهش بر اصلاح پارامترهای روش TB و محاسبه ساختار نواری سیلیسین تک لایه در مسیرهای با تقارن بالا $K - \Gamma - M - K$ تمرکز دارد. یک هامیلتونی مبتنی بر روش TB برای سیلیسین تک لایه با استفاده از کدنویسی در متلب توسعه داده شد. محاسبات اصلاح شده ما یک یافته کلیدی را نشان می‌دهد: در نقطه Γ انرژی نواری پنجم $1.705(eV)$ پایین تر از انرژی نواری چهارم $2.013(eV)$ است. این ترتیب نواری، اختلافی قابل توجه با نتایج روش $ab-initio$ نشان می‌دهد که روند معکوسی را گزارش می‌کنند و حساسیت پیش بینی‌های روش TB به پارامترسازی را برجسته می‌سازد. پس از برطرف کردن این عدم تطابق، نوارهای π و π^* به صورت خطی در سطح فرمی متقاطع می‌شوند، ویژگی‌ای که برای تشکیل مخروط دیراک و کاربردهای الکترونیکی فرکانس بالا حیاتی است. این یافته‌ها یک مدل محاسباتی دقیق تر برای سیلیسین ارائه می‌دهند که برای ادغام مؤثر آن در سامانه‌های الکترونیکی پیشرفته نظامی و هوافضا ضروری است.

تاریخ دریافت:

۱۴۰۳/۰۴/۰۶

تاریخ پذیرش:

۱۴۰۵/۰۳/۰۶

کلیدواژه‌ها:

روش بستگی قوی،
پارامترهای بستگی قوی،
بلور سیلیسین، بدون جین
خوردگی، سامانه‌های
الکترونیکی هوافضا.

نویسنده مسئول:

داوود کرزبر

ایمیل:

dkorzorbor@gmail.com

کرزبر، داوود، قبادی، نادر و سلطانی والا، علی. (۱۴۰۴). محاسبه ساختار نواری تک لایه سیلیسین با روش بستگی قوی برای کاربرد در سامانه‌های الکترونیکی هوافضا. *مجله دفاع هوافضایی*، دوره ۴ (شماره ۴)، صفحه ۹۸-۱۱۵.

۱- مقدمه

پس از کشف گرافن (یک دگرشکل دوعبدي کربن)، در سال ۲۰۰۴ [۱]، سیلیسیم (سیلیکون)، عنصر دیگری از گروه IV و از جمله سیلیسین (یک دگرشکل دوعبدي لانه زنبوری سیلیسیم) مورد توجه قرار گرفت. در سال‌های اخیر کاربردهای گسترده گرافن در صنایع هوافضا، در ساخت کامپوزیت‌های سبک و مقاوم، پوشش‌های محافظ، سامانه‌های الکترونیکی پیشرفته و تجهیزات فضایی، به دلیل ویژگی‌های رفتاری برجسته‌ای نظیر: استحکام مکانیکی بی‌نظیر، رسانایی الکتریکی فوق‌العاده و وزن بسیار کم، مسیر پژوهش‌های علمی را به سمت بررسی رفتار فیزیکی موادی با ساختار دوعبدي مشابه گرافن، نظیر سیلیسین هموار نموده است.

پژوهش‌های پیشین نشان داده‌اند که سیلیسین می‌تواند در طیف گسترده‌ای از کاربردها، از جمله ادوات فرکانس بالا، سامانه‌های تراهرتز، حسگرها، ترانزیستورهای اثر میدانی و پدیده‌های کوانتومی نوین، نقش مؤثری داشته باشد [۲۰، ۲۱، ۲۲]. همچنین مطالعات نظری و محاسباتی متعددی بر روی ساختار الکترونی و نواری این ماده با استفاده از روش‌هایی مانند نظریه تابعی چگالی و روش بستگی قوی انجام شده است [۱۱، ۱۸]. این مطالعات نشان می‌دهند که رفتار الکترونی سیلیسین به شدت به ساختار هندسی و پارامترهای مدل وابسته است و حتی تغییرات جزئی در پارامترها می‌تواند نتایج نواری را به‌طور معناداری تغییر دهد.

با وجود این پیشرفت‌ها، هنوز درک کاملی از تأثیر پارامترهای روش بستگی قوی بر ساختار نواری سیلیسین وجود ندارد و در برخی موارد، نتایج این روش با محاسبات *ab-initio* هم‌خوانی کامل ندارد. این خلأ علمی، به‌ویژه در توصیف دقیق ترتیب نوارها در نقاط با تقارن بالا، اهمیت بررسی و اصلاح پارامترهای مدل را نشان می‌دهد. از این‌رو، نیاز به مطالعه‌ای دقیق‌تر برای ارزیابی حساسیت ساختار نواری سیلیسین نسبت به پارامترهای بستگی قوی وجود دارد [۲۳].

چشم‌انداز مواد با ساختار دوعبدي مبتنی بر سیلیکون، به ویژه سیلیسین را برای الکترونیک آینده روشن می‌سازد. پتانسیل این مواد در ارائه عملکرد بالا و مصرف انرژی پایین، آن‌ها را برای کاربردهای حساس در صنایع دفاعی و هوافضا ایده‌آل می‌سازد. گسترش تحقیقات در زمینه ویژگی‌های رفتاری این مواد می‌تواند منجر به نسل جدیدی از ادوات شود. این امر نیازمند درک عمیق‌تر از خواص و قابلیت‌های ساخت آن‌هاست [۱۴، ۱۵]. کاربرد نانو ساختارهای سیلیسین در طیف تراهرتز برای جنگ الکترونیک بررسی شده است. دستگاه‌های مبتنی بر سیلیسین در این باند فرکانسی می‌توانند برای سیستم‌های پیشرفته تصویربرداری، ارتباطات امن و شناسایی اهداف به کار روند. این فناوری پتانسیل ارتقاء قابل توجهی در قابلیت‌های دفاعی دارد. با استفاده از روش‌های محاسباتی، پتانسیل نقاط کوانتومی سیلیسین را برای کاربردهای حسگری مورد ارزیابی قرار می‌دهد [۱۷، ۱۸]. این نقاط کوانتومی می‌توانند در توسعه حسگرهای نوین برای تشخیص مواد یا نظارت محیطی در شرایط سخت دفاعی و هوافضایی مؤثر باشند. توسعه ادوات الکترونیکی پایدار مبتنی بر سیلیسین برای اطمینان از عملکرد در شرایط سخت محیطی در صنایع هوافضا و دفاعی امری ضروری است. این تحقیق بر دوام و قابلیت اطمینان ادوات سیلیسین تمرکز دارد. پیشرفت قابل توجهی در ساخت ترانزیستورهای اثر

میدانی مبتنی بر سیلیسین را نشان می‌دهد. نتایج حاکی از عملکرد این ادوات در فرکانس‌های بسیار بالا است [۱۳, ۱۹]. این قابلیت، سیلیسین را به گزینه‌ای جذاب برای سیستم‌های ارتباطی پیشرفته و جنگ الکترونیک تبدیل می‌کند. توسعه چنین ادواتی گامی مهم در جهت ارتقاء فناوری‌های دفاعی است. پدیده‌های کوانتومی پیشرفته مانند اثر هال کوانتومی غیرعادی را در نانورویان‌های سیلیسی کشف می‌کند. این اثر می‌تواند مبنایی برای توسعه ادوات محاسباتی نوین با بهره‌وری انرژی فوق‌العاده باشد. چنین پیشرفت‌هایی برای کاربردهای خاص در سیستم‌های پیچیده هوافضا و دفاعی بسیار مهم تلقی می‌شوند [۱۲, ۱۵]. این احتمال که سیلیسین می‌تواند جایگزینی برای گرافن باشد یکی از دلایل اصلی مورد توجه آن است. برخلاف گرافن، سیلیسین دارای هیبریداسیون SP^2 و SP^3 اتم‌های سیلیکون است، به همین دلیل است که ساختار چین خورده دارد [۲, ۱۱, ۱۶, ۱۸]. ساختار نواری هنگام مطالعه رفتار الکترونیکی مواد بسیار مهم است. ساختارهای نواری فلزی یا نیم‌هادی می‌توانند ترکیب مواد را آشکار کنند. خواص فیزیکی جامدات را می‌توان به راحتی با ساختار نوار الکترونیکی توصیف کرد. این ویژگی‌ها شامل رفتار نوری و مقاومت الکتریکی است و به عنوان پایه‌ای برای دستگاه‌هایی مانند ترانزیستور، سلول‌های خورشیدی، عمل می‌کند. بنابراین، ما ساختارهای نواری را برای درک رفتار الکترونیکی سیلیسین، محاسبه کردیم. مواد با ساختار دوبعدی یکی از مهم‌ترین دسته‌های موادی می‌باشند که در طول تاریخ مورد مطالعه‌ی گسترده قرار گرفته‌اند [۳, ۴]. اخیراً پژوهشگران کارهای زیادی را به صورت نظری و تئوری در نیم‌هادی‌ها و نانو ساختارهای گرافینی و سیلیسینی بررسی کرده‌اند [۶]. ما در این تحقیق با استفاده از روش بستگی قوی، ساختار نواری شبکه‌ی سیلیسینی و پارامترهای روش بستگی قوی اصلاح شده بر روی ساختار نواری سیلیسین، را مورد بررسی قرار دادیم. سیلیسین یکی از نیم‌هادی‌های دو بعدی می‌باشد که دارای شکاف نواری کوچکی است [۴]. نتایج نهایی نشان می‌دهد که با توجه به شرایط لحاظ شده، ماده با ساختار دوبعدی مورد نظر می‌تواند در دستگاه‌های کوانتومی کاربردی داشته باشد.

هدف اصلی این مقاله، بررسی ساختار نواری سیلیسین تک‌لایه و تحلیل تأثیر پارامترهای اصلاح‌شده روش بستگی قوی بر ویژگی‌های الکترونی آن است. در این راستا، هامیلتونی مناسب برای سیلیسین در چارچوب روش بستگی قوی تدوین و محاسبات لازم با استفاده از محیط متلب انجام شده است تا رفتار نوارها در مسیرهای با تقارن بالا به‌دقت بررسی شود.

نوآوری این پژوهش در آن است که علاوه بر محاسبه ساختار نواری سیلیسین، یک عدم تطابق مشخص در ترتیب نوارهای چهارم و پنجم در نقطه Γ شناسایی و تحلیل شده است؛ به‌طوری‌که انرژی نوار پنجم برابر 1.705 eV و انرژی نوار چهارم برابر 2.013 eV به‌دست آمده است. این اختلاف با نتایج گزارش‌شده در برخی محاسبات *ab-initio* نشان می‌دهد که پارامترهای مدل بستگی قوی نقش تعیین‌کننده‌ای در بازتولید دقیق ساختار نواری دارند. بنابراین، نتایج این مطالعه می‌تواند در بهبود مدل‌سازی الکترونی سیلیسین و توسعه ادوات مبتنی بر آن در کاربردهای پیشرفته هوافضا و دفاعی مؤثر باشد.

با توجه به اهمیت پیش‌بینی دقیق خواص الکترونی سیلیسین، مسئله اصلی این پژوهش بررسی ساختار نواری این ماده در چارچوب روش بستگی قوی و تحلیل حساسیت نتایج نسبت به پارامترهای

مدل است. اگرچه سیلیسین در مطالعات پیشین به عنوان یک نیمه رسانای دوبعدی با شکاف نواری کوچک معرفی شده است [۴]، اما انطباق کامل نتایج روش بستگی قوی با محاسبات *ab-initio* هنوز به طور کامل برقرار نشده و وابستگی نتایج به انتخاب پارامترها به خوبی روشن نشده است. از این رو، در این مقاله پارامترهای کلیدی مدل بستگی قوی برای سیلیسین بررسی و اصلاح شده‌اند تا ساختار نواری با دقت بیشتری بازتولید شود. نوآوری اصلی این مطالعه، شناسایی و تحلیل عدم تطابق در ترتیب نوارهای انرژی در نقطه Γ و نشان دادن نقش تعیین کننده پارامترهای مدل در ایجاد این اختلاف است. نتایج این پژوهش می‌تواند به بهبود مدل سازی الکترونی سیلیسین و استفاده دقیق تر از آن در ادوات کوانتومی کمک کند.

در ادامه، روش محاسباتی استفاده شده در این مطالعه ارائه می‌شود. سپس خصوصیات ساختاری تک لایه سیلیسین بررسی شده و پس از آن، محاسبات کوانتومی، ساختار نواری، و نقش پارامترهای روش بستگی قوی مورد بحث قرار می‌گیرد. در بخش پایانی نیز نتایج و جمع بندی پژوهش ارائه می‌شود.

۲- روش محاسباتی

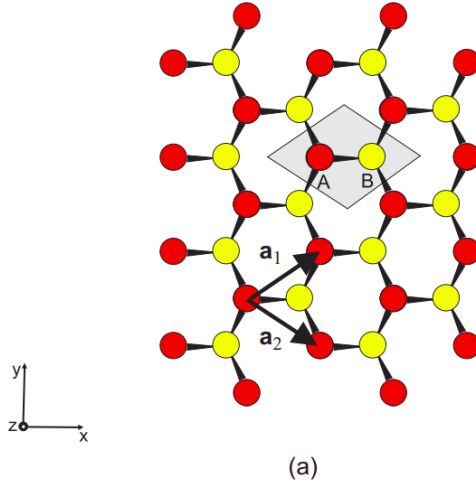
یکی از روش‌های محاسبه ساختار نواری روش بستگی قوی می‌باشد که در این مطالعه به کار گرفته شده است و تمامی محاسبات و کدنویسی‌ها در نرم افزار متلب صورت گرفته است. در فیزیک حالت جامد، روش بستگی قوی رویکردی برای محاسبه ساختار نوار الکترونیکی با استفاده از تعداد معینی از توابع موج اتمی بر اساس برهم نهی توابع موج اتمی در هر مکان اتمی است. در این تحقیق می‌خواهیم ساختار نواری تک لایه سیلیسین را با روش بستگی قوی محاسبه کنیم. روش بستگی قوی با نام LCAO (روش ترکیب خطی اوربیتال‌های اتمی)^۱ شناخته شده است. روش بستگی قوی، برای طیف گسترده‌ای از جامدات اعمال می‌شود. این روش در بسیاری از موارد نتایج کیفی خوبی به دست می‌دهد. اساس کلی در این روش بر پایه ترکیب خطی از توابع موج اتمی S_i است [۵،۹].

۳- مطالعات ساختاری

ساختار نواری تک لایه سیلیسین در چارچوب روش بستگی قوی که در این روش یک سری پارامترها هستند که به عنوان پارامترهای TB معروف هستند، در حالت دوبعدی بر پایه‌های اتمی اوربیتال‌های S,P محاسبه خواهد شد. شناخته شده است هر چقدر پایه‌های یک بسط بیشتر باشد آنگاه دقت محاسبات بالاتر می‌رود، تابع موج را با توجه به روش بستگی قوی ترکیب خطی از توابع موج اتمی بر پایه اوربیتال‌های S,P در نظر گرفته شده است که در اصل هدف تحقیق به دنبال نمایش ماتریسی هامیلتونی است، از تعاریف اندرکنش بین اتم A با نزدیک ترین اتم‌های زیر شبکه اتمی B به عنوان نزدیک ترین همسایه اول و اندرکنش بین اتم A با نزدیک ترین اتم‌های زیر شبکه اتمی A به عنوان نزدیک ترین همسایه دوم معرفی شده است (شکل ۱). عناصر ماتریس هامیلتونی را طبق برهم کنش

^۱ linear combination of atomic orbitals method

اتم‌های همسایه‌ی اول و دوم ($1NN, 2NN$) محاسبه می‌شوند. اعمال این روش بر پایه اتمی اوربیتال SP^3 منجر به حل معادله ویژه مقداری ماتریس هامیلتونی با اندازه 8×8 می‌شود.



شکل ۱. نمایش دو بعدی یک لایه سیلیسین.

آرایش الکترونی اتم سیلیکون:

$$Si = [Ne]3S^2 3P^2$$

ساختار نواری در حالت دوبعدی با فرض بدون چین خوردگی برای پارامترهای بستگی قوی مختلفی که در مقالات گزارش شده است را بر پایه‌های اتمی اوربیتال‌های S, P محاسبه خواهد شد.

۴- محاسبات کوانتومی

ابتدا هامیلتونی بلور $H(r)$ و سپس اوربیتال‌های اتمی $\phi_m(r)$ را معرفی می‌کنیم که ویژه تابع‌های هامیلتونی H_{at} یک اتم منفرد هستند. هنگامی که اتم در یک بلور قرار می‌گیرد، هامیلتونی کل سیستم به صورت زیر تعریف خواهد شد:

$$H(r) = H_{at} + \sum_{R_m \neq 0} V(r - R_m) \quad (1)$$

که در آن $V(r - R_m)$ پتانسیل اتمی یک اتم واقع در محل R_m در شبکه بلوری را نشان می‌دهد.

$$H(r)\psi_{nk}(r) = E(k)\psi_{nk}(r) \quad (2)$$

سپس یک جواب برای $\psi_{nk}(r)$ برای معادله شرودینگر تک الکترون به صورت ترکیب خطی از اوربیتال‌های اتمی $\phi_n(r - R_m)$ تقریب زده می‌شود:

$$\psi_{nk}(r) = \sum_{R_m} \sum_n C_n(k) e^{ik \cdot R_m} \phi_n(r - R_m) \quad (3)$$

در رابطه (۳) پارامترهای nk شماره نوار و بردار موج بلوخ می‌باشد که در محاسبات برای راحتی از نوشتن آن‌ها صرف نظر شده است. بلوخ این قضیه مهم را ثابت کرد که پاسخ‌های معادله شرودینگر برای پتانسیل دوره‌ای باید به این شکل خاص باشد:

$$\psi_{nk}(r) = e^{ik \cdot r} u_{nk}(r) \quad (4)$$

ویژه تابع‌های معادله موج برای پتانسیل دوره‌ای به صورت حاصل ضرب موج تحت $e^{ik \cdot r}$ در تابع u_{nk} (r) با دوره شبکه بلور است. در اصل الکترون‌های که پتانسیل دوره‌ای را ببینند، الکترون‌های بلوخ نامیده می‌شوند. قضیه بلوخ بیان می‌کند که تابع موج در یک بلور می‌تواند تحت انتقال تنها با یک عامل فاز تغییر کند:

$$\psi(r + R_m) = e^{ik \cdot R_m} \psi(r) \quad (5)$$

که در آن k بردار موج تابع موج است.

در نهایت تابع موج در روش بستگی قوی شرط بلوخ را ارضا خواهد کرد [۵] که به صورت زیر محاسبه شده است:

$$\psi(r) = \sum_m \sum_n C_n(k) e^{ik \cdot R_m} \varphi_n(r - R_m) \quad (6)$$

در این تحقیق، تابع موج را با توجه به روش بستگی قوی ترکیب خطی از توابع موج اتمی بر پایه اوربیتال‌های S, P در نظر گرفته شده است، در اصل تابع موج ترکیب خطی از یک اوربیتال S و سه تا اوربیتال P می‌باشد چون در هر سلول واحد شبکه مثلثی دو تا اتم پایه A و B وجود دارد پس تابع موج بدست آمده ترکیب خطی از هشت تابع موج اتمی می‌باشد [۵]. همچنین بردارهای پایه برای شبکه سیلیسین به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$a_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right)a, a_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)a$$

پارامتر a ثابت شبکه می‌باشد.

$$\begin{aligned} \psi(r) = & \sum_m e^{ik \cdot R_m} [C_{SA}(k) \varphi_{SA}(r - R_m) \\ & + C_{XA}(k) \varphi_{XA}(r - R_m) \\ & + C_{YA}(k) \varphi_{YA}(r - R_m) \\ & + C_{ZA}(k) \varphi_{ZA}(r - R_m) \\ & + e^{ik \cdot d} [C_{SB}(k) \varphi_{SB}(r - R_m - d) \\ & + C_{XB}(k) \varphi_{XB}(r - R_m - d) \\ & + C_{YB}(k) \varphi_{YB}(r - R_m - d) \\ & + C_{ZB}(k) \varphi_{ZB}(r - R_m - d)] \quad (7) \end{aligned}$$

در تابع موج تعریف شده R_m بردار انتقال اساسی در شبکه مستقیم می‌باشد [۷، ۱۱]. با تشکیل شدن تابع موج از معادله ویژه مقداری هامیلتونی استفاده می‌شود:

$$\hat{H} \psi(r) = E(k) \psi(r) \quad (8)$$

معادله شرودینگر درویژه تابع موج اتمی $\langle \varphi_{sA}(r) |$ ضرب شده است

$$\langle \varphi_{sA}(r) | H | \psi(r) \rangle = E(k) \langle \varphi_{sA}(r) | \psi(r) \rangle \quad (9)$$

که با جایگزینی تابع موج $\Psi(r)$ ساختار انتگرالی

ساخته شده است.

$$\begin{aligned}
 & \langle \varphi_{SA}(r) | H | \psi(r) \rangle = \\
 & \sum_m e^{ik \cdot R_m} [C_{SA}(k) \int \varphi_{SA}^*(r) H \varphi_{SA}(r - R_m) dr \\
 & + C_{XA}(k) \int \varphi_{SA}^*(r) H \varphi_{XA}(r - R_m) dr \\
 & + C_{YA}(k) \int \varphi_{SA}^*(r) H \varphi_{YA}(r - R_m) dr \\
 & + C_{ZA}(k) \int \varphi_{SA}^*(r) H \varphi_{ZA}(r - R_m) dr \\
 & + e^{ik \cdot d} [C_{SB}(k) \int \varphi_{SA}^*(r) H \varphi_{SB}(r - R_m - d) dr \\
 & + C_{XB}(k) \int \varphi_{SA}^*(r) H \varphi_{XB}(r - R_m - d) dr \\
 & + C_{YB}(k) \int \varphi_{SA}^*(r) H \varphi_{YB}(r - R_m - d) dr \\
 & + C_{ZB}(k) \int \varphi_{SA}^*(r) H \varphi_{ZB}(r - R_m - d) dr] = E(k) \langle \varphi_{SA}(r) | \psi(r) \rangle \quad (10)
 \end{aligned}$$

برای $R_m = 0$

$$\begin{aligned}
 & \sum_{m=0} e^{ik \cdot R_m} C_{SA}(k) \int \varphi_{SA}^*(r) \hat{H} \varphi_{SA'}(r - R_m) dr \\
 & = C_{SA}(k) \int \varphi_{SA}^*(r) \hat{H} \varphi_{SA'}(r) dr \\
 & = C_{SA}(k) E_S \quad (11)
 \end{aligned}$$

و برای $R_m \neq 0$

$$\begin{aligned}
 & \sum_{m \neq 0} e^{ik \cdot R_m} C_{SA}(k) \int \varphi_{SA}^*(r) \hat{H} \varphi_{SA'}(r - R_m) dr \\
 & = C_{SA}(k) \sum_{m \neq 0} e^{ik \cdot R_m} \int \varphi_{SA}^*(r) \hat{H} \varphi_{SA'}(r - R_m) dr \\
 & = C_{SA}(k) \sum_{m \neq 0} e^{ik \cdot R_m} (SS\sigma)_2^{AA'} \quad (12)
 \end{aligned}$$

هر کدام از انتگرال‌های رابطه (۱۰) محاسبه می‌شود. با توجه به اینکه از انتگرال هم پوشانی بین اتمی صرف نظر می‌شود، پس فقط برای $R_m = 0$:

$$\begin{aligned}
 & E(k) \langle \varphi_{SA}(r) | \psi(r) \rangle \\
 & = E(k) \sum_{m=0} e^{ik \cdot R_m} C_{SA}(k) \int \varphi_{SA}^*(r) \varphi_{SA'}(r - R_m) dr \\
 & = E(k) C_{SA}(k) \int \varphi_{SA}^*(r) \varphi_{SA'}(r) dr \\
 & = E(k) C_{SA}(k) \quad (13)
 \end{aligned}$$

با توجه به حل رابطه‌ی انتگرالی (۱۰)

$$\begin{aligned} & (s \setminus s)_{AA'} C_{SA}(k) + (s \setminus x)_{AA'} C_{xA} + (s \setminus y)_{AA'} C_{yA} \\ & + (s \setminus z)_{AA'} C_{zA} + (s \setminus s)_{AB} C_{SB}(k) \\ & + (s \setminus x)_{AB} C_{xB} + (s \setminus y)_{AB} C_{yB} \\ & + (s \setminus z)_{AB} C_{zB} = E(k) C_{SA} \quad (14) \end{aligned}$$

معادله‌ی (۱۴) بدست آمده یک معادله خطی است. حال اگر معادله ویژه مقدراری هامیلتونی را در هفت تابع موج اتمی

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_{xA}(r) |, \langle \varphi_{yA}(r) |, \langle \varphi_{zA}(r) |, \langle \varphi_{SB}(r-d) | \\ & , \langle \varphi_{xB}(r-d) |, \langle \varphi_{yB}(r-d) |, \langle \varphi_{zB}(r-d) | \end{aligned}$$

آنگاه در مجموع هشت معادله خطی بدست می‌آید که به زبان معادله ویژه مقدار استاندارد هامیلتونی به صورت یک ماتریس 8×8 تشکیل می‌شود [۸].

$$\begin{aligned} h_{AA'} &= \begin{bmatrix} (s/s)_{AA'} & (s/x)_{AA'} & (s/y)_{AA'} & (s/z)_{AA'} \\ (x/s)_{AA'} & (x/x)_{AA'} & (x/y)_{AA'} & (x/z)_{AA'} \\ (y/s)_{AA'} & (y/x)_{AA'} & (y/y)_{AA'} & (y/z)_{AA'} \\ (z/s)_{AA'} & (z/x)_{AA'} & (z/y)_{AA'} & (z/z)_{AA'} \end{bmatrix} \\ h_{AB} &= \begin{bmatrix} (s/s)_{AB} & (s/x)_{AB} & (s/y)_{AB} & (s/z)_{AB} \\ (x/s)_{AB} & (x/x)_{AB} & (x/y)_{AB} & (x/z)_{AB} \\ (y/s)_{AB} & (y/x)_{AB} & (y/y)_{AB} & (y/z)_{AB} \\ (z/s)_{AB} & (z/x)_{AB} & (z/y)_{AB} & (z/z)_{AB} \end{bmatrix} \quad (15) \end{aligned}$$

اعمال این روش منجر به حل معادله ویژه مقدراری ماتریس هامیلتونی 8×8 می‌شود [۶]. در نهایت برای ما ماتریس هامیلتونی $H(k)$ را نمایش خواهند داد:

$$H(k) = \begin{bmatrix} h_{AA'} & h_{AB} \\ h_{BA} & h_{BB'} \end{bmatrix} \quad (16)$$

هر کدام از عناصر با یک جمله اختصاری مشخص شده است و از توابع معرفی شده در روابط (۲۱) استفاده می‌شود. با توجه به تعریف هر کدام از عناصر ماتریس:

$$(s/s)_{AA'} = E_s + (ss\sigma)_{2}^{AA'} \sum_{A'} e^{ik.(R_{Si}^{A'} - R_{Si}^A)} \quad (17)$$

که در رابطه (۱۷) E_s انرژی اوربیتال s و $(ss\sigma)_{2}^{AA'}$ پارامتر بستگی قوی خواهد بود. با توجه به انتخاب مبدا و همچنین با فرض اینکه مقدار چین خوردگی را A^* ، پس $\Delta Z = *$ و $(R_{Si}^B - R_{Si}^A) = \sum_{i=1}^r \delta_i^{(1)}$ بردارهای همسایه اول و $(R_{Si}^A - R_{Si}^A) = \sum_{i=1}^r \delta_i^{(r)}$ بردارهای همسایه‌ی دوم را تشکیل می‌دهند که برای همسایه اول $1NN$ به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\delta_1^{(1)} = \left(\frac{a}{\sqrt{3}}, 0, 0 \right)$$

$$\delta_2^{(1)} = \left(-\frac{a}{2\sqrt{3}}, \frac{a}{2}, 0 \right)$$

$$\delta_3^{(1)} = \left(-\frac{a}{2\sqrt{3}}, -\frac{a}{2}, 0 \right)$$

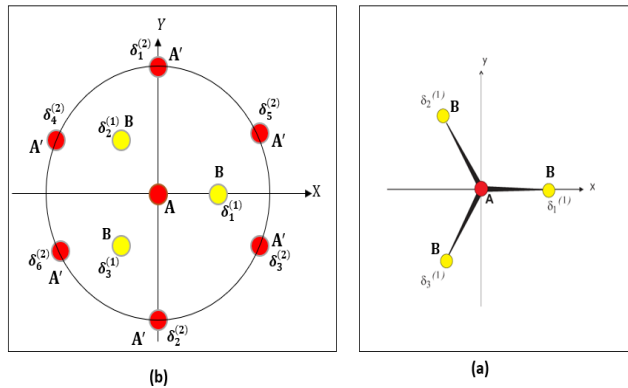
و برای همسایه‌های دوم ۲NN :

$$\delta_1^{(2)} = (0, a, 0), \delta_2^{(2)} = (0, -a, 0)$$

$$\delta_3^{(2)} = \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}, -\frac{a}{2}, 0 \right), \delta_4^{(2)} = \left(-\frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{a}{2}, 0 \right)$$

$$\delta_5^{(2)} = \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{a}{2}, 0 \right), \delta_6^{(2)} = \left(-\frac{a\sqrt{3}}{2}, -\frac{a}{2}, 0 \right)$$

که برای همسایه‌های دوم چون با اتم A در یک زیرشبکه وجود دارند پس تغییری نمی‌کنند.



شکل ۲. بردارهای همسایه‌های اول و دوم برای بلور سیلیسین.

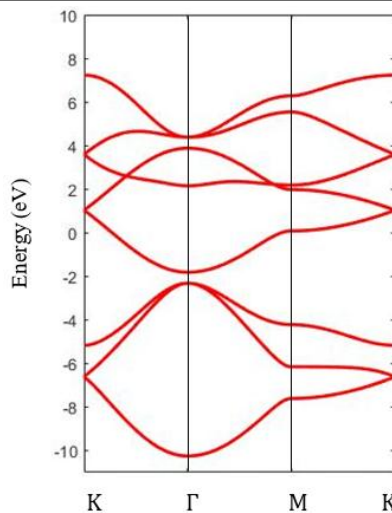
۵- مطالعات الکترونیکی

اوربیتال‌های اتمی بر پایه یک اوربیتال اتمی S و سه تا اوربیتال اتمی P خواهد بود که به صورت SP^3 نمایش داده می‌شود که ماتریس هامیلتونی تشکیل خواهد شد و ویژه مقدار انرژی بدست می‌آوریم که ۸ تا نوار خواهیم داشت چون ابعاد ماتریس هامیلتونی 8×8 می‌باشد [۱۰]. که هر کدام از انرژی‌ها بر حسب بردار موج رسم می‌شود و برای همسایه‌های اول و دوم سیلیسین و پارامترهای روش بستگی قوی طبق جدول ۳ و ۲ ساختار نواری محاسبه خواهد شد. سپس طبق نتایج به دست آمده در شکل ۴ مشاهده می‌شود که ساختار نواری سیلیسین برای همسایه دوم دارای تناقض است که با بررسی و تاثیر پارامترهای بستگی قوی اصلاح شده طبق جدول ۴ در ساختار نواری این تناقض برطرف خواهد شد.

در این بخش از تحقیق مناسب است به منظور دیدن تاثیر اضافه شدن همسایه‌های دوم ابتدا ساختار نواری سیلیسین برای همسایه‌های اول با استفاده از پارامترهای بستگی قوی (جدول ۲) بر پایه اوربیتال‌های اتمی SP^3 محاسبه می‌شود که نتایج آن به صورت نمودار شکل ۳ نشان داده شده است [۶].

جدول ۲. پارامترهای بستگی قوی همسایه اول سیلیسین برای اوربیتال SP^3 .

Parameter	value(eV)
E_s	-4.0497
E_p	1.0297
$(ss\sigma)_1^{AB}$	-2.0662
$(sp\sigma)_1^{AB}$	2.0850
$(pp\sigma)_1^{AB}$	3.1837
$(pp\pi)_1^{AB}$	-0.9488

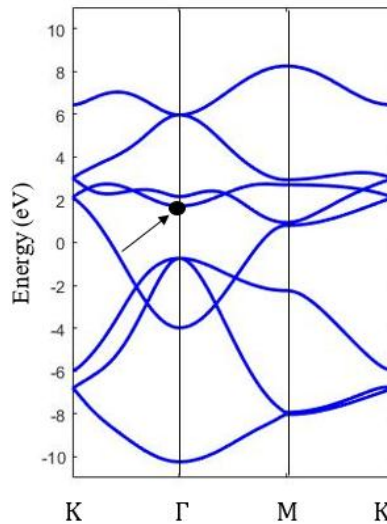


شکل ۳. ساختار نواری سیلیسین برای همسایه اول با اوربیتال SP^3 .

در ادامه کار تاثیر در نظر گرفتن همسایه‌های دوم مشاهده می‌شود که در ساختار نواری چه تغییراتی صورت خواهد گرفت، ابتدا از پارامترهای روش بستگی قوی جدول ۳ استفاده شده است [۶] با استفاده از محاسبه رابطه ویژه مقداری ماتریس 8×8 ، انرژی‌ها بر حسب بردار موج رسم می‌شود سرانجام ساختار نواری با توجه به در نظر گرفتن همسایه‌های دوم بدست آمده است که در شکل ۴ نتیجه به صورت نمودار نشان داده شده است.

جدول ۳. پارامترهای روش بستگی قوی برای همسایه‌های دوم برای اوربیتال SP^3 .

Parameter	value(eV)
E_s	-4.0497
E_p	1.0297
$(ss\sigma)_1^{AB}$	-2.0662
$(sp\sigma)_1^{AB}$	2.0850
$(pp\sigma)_1^{AB}$	3.1837
$(pp\pi)_1^{AB}$	-0.9488
$(ss\sigma)_2^{AA'}$	0.0000
$(sp\sigma)_2^{AA'}$	0.0000
$(pp\sigma)_2^{AA'}$	0.8900
$(pp\pi)_2^{AA'}$	-0.3612

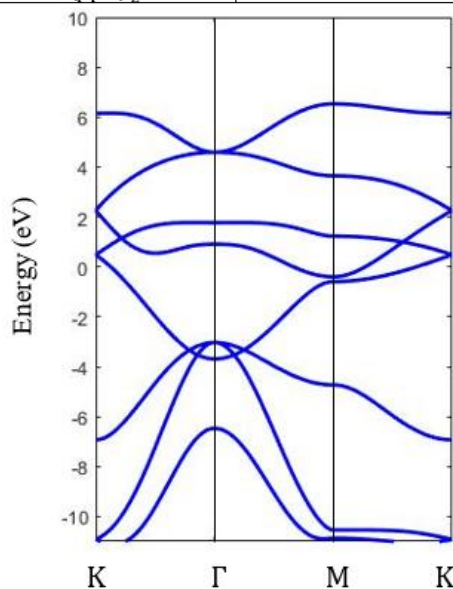


شکل ۴. ساختار نواری سیلیسین بدون چین خوردگی برای همسایه دوم با اوربیتال SP^3 .

با توجه به ساختار نواری این موضوع که، انرژی نواری پنجم در نقطه Γ مقدارش 1.705 (eV) است که از انرژی نواری چهارم در نقطه K که مقدارش 2.013 (eV) می‌باشد، پایین‌تر است که با ساختار نواری بدست آمده در روش ab-initio در تناقض می‌باشد. با توجه به اینکه نوعا پارامترهای روش بستگی قوی با بهره‌گیری از نتایج محاسبات اصول اولیه نظیر DFT بدست می‌آید نیازمند است که از پارامترهای بستگی قوی برازش شده باید استفاده کرد. برای رفع مشکل پیش آمده در ساختار نواری همسایه دوم، پارامترهای بستگی قوی اراعه شده در مقاله گزارش شده [۸] که با روش دقیق‌تری پارامترهای بستگی قوی را برای سیلیسین بدست آورده است را در محاسبات به کار برده خواهد شد (جدول ۴). محاسبات با پارامترهای اصلاح شده تکرار شده است و مشاهده می‌شود کمترین انرژی حول نقطه K بود و سرانجام تناقض بر طرف خواهد شد (شکل ۵).

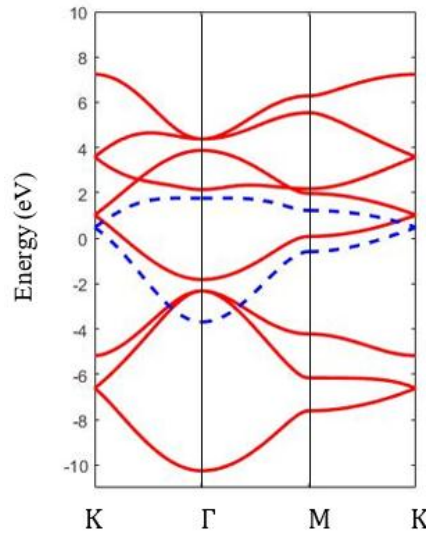
جدول ۴. پارامترهای اصلاح شده روش بستگی قوی برای همسایه‌های دوم برای اوربیتال SP^3 .

Parameter	Value (eV)
E_s	-6.44
E_p	0
$(ss\sigma)_1^{AB}$	-1.23
$(sp\sigma)_1^{AB}$	2.49
$(pp\sigma)_1^{AB}$	3.45
$(pp\pi)_1^{AB}$	-0.91
$(ss\sigma)_2^{AA'}$	0.61
$(sp\sigma)_2^{AA'}$	0.01
$(pp\sigma)_2^{AA'}$	0.42
$(pp\pi)_2^{AA'}$	-0.16



شکل ۵. ساختار نوارهای اصلاح شده سیلیسین برای همسایه دوم.

پس از برطرف کردن تناقض گفته شده، نوارهای π, π^* به صورت خطی در سطح فرمی متقاطع می‌شوند و مخروط دیراک معروف را در نقطه متقارن K تشکیل می‌دهند که در شکل ۶ اختلاف ساختار نوری رسم شده است. چون در این بخش از تحقیق حالت سیلیسین بدون چین خوردگی بررسی می‌شود پس فقط دو تا نوارهای مربوط به اوربیتال P که این دو نوار π, π^* نامیده می‌شوند که دارای اهمیت بیشتری است.



شکل ۶. اختلاف ساختار نواری شکل‌های ۴ و ۵.

به منظور وضوح بیشتر و به علت در نظر گرفتن فرض بدون چین خوردگی، نوارهای σ^* و σ نمایش داده نشده است.

۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، ساختار نواری سیلیسین تک‌لایه با استفاده از روش بستگی قوی (TB) و پارامترهای اصلاح‌شده مورد تحلیل قرار گرفت. نتایج نشان داد که در اطراف نقاط دیراک، رفتار الکترونی سیلیسین همچون گرافن، خطی است که نشان‌دهنده ماهیت شبه‌ذره‌ای آن و پتانسیل آن برای کاربردهای الکترونیکی فرکانس بالا است. محاسبات نشان داد که حالت مخروط دیراک به خوبی حفظ شده و این یافته با نتایج گزارش‌شده در مطالعات پیشین که از روش TB استفاده کرده‌اند، هم‌خوانی دارد [۱,۵,۹].

با این حال، مقایسه دقیق‌تر نتایج به‌دست‌آمده با محاسبات ab-initio [۲۳] نشان‌دهنده عدم تطابق قابل توجهی در ترتیب نوارها در نقطه Γ بود؛ به‌طوری‌که انرژی نوار پنجم 1.705 eV و نوار چهارم 2.013 eV محاسبه شد. این اختلاف، که در مقالات پیشین کمتر به آن پرداخته شده است، نشان‌دهنده محدودیت‌های مدل بستگی قوی در توصیف دقیق خواص الکترونی سیلیسین، به‌ویژه در نقاطی که اثرات پویا یا برجسته هستند، می‌باشد. این یافته نوآوری کلیدی این پژوهش را در برجسته کردن اهمیت پارامترسازی دقیق مدل TB و تأثیر آن بر بازتولید کیفی و کمی ساختار نواری سیلیسین شکل می‌دهد.

محدودیت اصلی این مطالعه، استفاده از پارامترهای بستگی قوی اصلاح‌شده با اتکا به نتایج کیفی است و مقایسه دقیق کمی با نتایج ab-initio نشان‌دهنده لزوم بازنگری عمیق‌تر در انتخاب اوربیتال‌های پایه‌ای اتمی و پارامترهای اندرکنش بین‌اتمی برای تطابق کامل با واقعیت فیزیکی است. بر اساس نتایج به‌دست‌آمده، استفاده از پارامترهای بستگی قوی اصلاح‌شده، منجر به بهبود دقت در

محاسبه ساختار نواری سیلیسین و درک عمیق تر خواص الکترونیکی آن شد. شناخت و به کارگیری گسترده تر علوم کوانتومی در حوزه مواد با ساختار دوبعدی، به ویژه سیلیسین و گرافن، فرصت های جدیدی را برای مطالعات در زمینه قطعات الکترونیکی و اپتیکی در صنایع نظامی، هوافضا و الکترونیک فراهم می آورد. این مطالعه با بررسی ویژگی های ساختاری و الکترونیکی سیلیسین، ساختار نواری آن را که مبنای خواص الکترونیکی و اپتیکی مواد است، محاسبه کرده و پتانسیل این ماده را برای ساخت قطعات و دستگاه های الکترونیکی، حسگرها و کاربردهای پیشرفته در علوم نظامی و صنایع هوافضا آشکار ساخت.

تمرکز این تحقیق بر محاسبه دقیق ساختار نواری سیلیسین، ارتباط آن را با شناخت و ساخت قطعات الکترونیکی از طریق خواص الکترونیکی و ساختاری مشخص نمود. نتایج حاکی از آن است که سیلیسین، با ویژگی های منحصر به فرد خود، پتانسیل بالایی برای تبدیل شدن به یک ماده کلیدی در نسل آینده ادوات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی، به ویژه در کاربردهای دفاعی و فضایی دارد. تحقیقات آتی می تواند بر بهینه سازی پارامترهای بستگی قوی برای کاربردهای خاص، بررسی اثرات محیطی بر خواص سیلیسین، و توسعه روش های نوین ساخت ادوات مبتنی بر این ماده تمرکز نماید.

۵- تشکر و قدردانی

از آقای دکتر نادر قبادی و دکتر علی سلطانی والا تشکر و قدردانی می شود.

۶- تعارض منافع

نویسنده (گان) اعلام می دارند که در مورد انتشار این مقاله تضاد منافع وجود ندارد. علاوه بر این، موضوعات اخلاقی شامل سرقت ادبی، رضایت آگاهانه، سوء رفتار، جعل داده ها، انتشار و ارسال مجدد و مکرر توسط نویسندگان رعایت شده است.

۷- دسترسی آزاد

این نشریه دارای دسترسی باز است و اجازه اشتراک (تکثیر و بازآرایی محتوا به هر شکل) و انطباق (بازترکیب، تغییر شکل و بازسازی بر اساس محتوا) را می دهد.

۸-منابع

- [۱] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D. E., Zhang, Y., Dubonos, S. V., ... & Firsov, A. A. (۲۰۰۴). Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, ۳۰۶(۵۶۹۶), ۶۶۶-۶۶۹.
- [۲] Jose, D., & Datta, A. (۲۰۱۴). Structures and chemical properties of silicene: unlike graphene. *Accounts of chemical research*, ۴۷(۲), ۵۹۳-۶۰۲.
- [۳] Khan, U., Saeed, M. U., Elansary, H. O., Moussa, I. M., Bacha, A. U. R., & Saeed, Y. (۲۰۲۴). A DFT study of bandgap tuning in chloro-fluoro silicene. *RSC advances*, ۱۴(۷), ۴۸۴۴-۴۸۵۲.
- [۴] Geim, A. K., & Novoselov, K. S. (۲۰۰۷). The rise of graphene. *Nature materials*, ۶(۳), ۱۸۳-۱۹۱.
- [۵] Yu, P. Y., & Cardona, M. (۲۰۰۵). Tight-binding or LCAO approach to the band structure of semiconductors. *Fundamentals of Semiconductors, ۳rd Edn.*, ۶۸-۷۱.
- [۶] Guzmán-Verri, G. G., & Lew Yan Voon, L. C. (۲۰۰۷). Electronic structure of silicon-based nanostructures. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, ۷۶(۷), ۰۷۵۱۳۱.
- [۷] CNT, C. (۲۰۰۹). Energy Bands in Graphene: Tight Binding and the Nearly Free Electron Approach.
- [۸] Zólyomi, V., Drummond, N. D., Wallbank, J. R., & Fal'ko, V. I. (۲۰۱۸). Density-functional and tight-binding theory of silicene and silicane. In *Silicene: Prediction, Synthesis, Application* (pp. ۲۳-۴۱). Cham: Springer International Publishing.
- [۹] Slater, J. C., & Koster, G. F. (۱۹۵۴). Simplified LCAO method for the periodic potential problem. *Physical Review*, ۹۴(۶), ۱۴۹۸.
- [۱۰] Cahangirov, S., Topsakal, M., Aktürk, E., Şahin, H., & Ciraci, S. "Two-and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium". *Physical review letters*, ۱۰۲(۲۳) (۲۰۰۹).
- [۱۱] Ni, Z., Liu, Q., Tang, K., Zheng, J., Zhou, J., Qin, R., & Lu, J. (۲۰۱۲). Tunable bandgap in silicene and germanene. *Nano letters*, ۱۲(۱), ۱۱۳-۱۱۸.
- [۱۲] Molle, A., Grazianetti, C., Tao, L., Taneja, D., Alam, M. H., & Akinwande,

D. (۲۰۱۸). Silicene, silicene derivatives, and their device applications. *Chemical Society Reviews*, ۴۷(۱۶), ۶۳۷۰-۶۳۸۷.

[۱۳] Drissi, L. B., Ouarrad, H., Ramadan, F. Z., & Fritzsche, W. (۲۰۲۰). Graphene and silicene quantum dots for nanomedical diagnostics. *RSC advances*, ۱۰(۲), ۸۰۱-۸۱۱.

[۱۴] Ali, J., Ali, S., Ullah, K., ur Rashid, A., Hadi, F., & Uddin, S. (۲۰۲۵). Preparation of Silicene and Silicene Derivatives for Optoelectronic Devices Applications. In *Layered Nanomaterials for Solution-Processed Optoelectronics* (pp. ۱۶۰-۱۹۴). CRC Press.

[۱۵] Tene, T., Guevara, M., Borja, M., Mendoza Salazar, M. J., Palacios Robalino, M. D. L., Vacacela Gomez, C., & Bellucci, S. (۲۰۲۳). Modeling semiconducting silicene nanostrips: Electronics and THz plasmons. *Frontiers in Physics*, ۱۱, ۱۱۹۸۲۱۴.

[۱۶] Yu, S., Tang, J., Wang, Y., Xu, F., Li, X., & Wang, X. (۲۰۲۲). Recent advances in two-dimensional ferromagnetism: strain-, doping-, structural-and electric field-engineering toward spintronic applications. *Science and technology of advanced materials*, ۲۳(۱), ۱۴۰-۱۶۰.

[۱۷] Ghosal, S., Bandyopadhyay, A., Chowdhury, S., & Jana, D. (۲۰۲۳). A review on transport characteristics and bio-sensing applications of silicene. *Reports on Progress in Physics*, ۸۶(۹), ۰۹۶۵۰۲.

[۱۸] Tang, H., Cai, Z., Tang, M., Yu, N., Shi, W., Ma, L., ... & Zhang, G. (۲۰۲۶). Multiscale Modeling Techniques in the Study of ۲-Dimensional Materials under Ionizing Radiation. *Space: Science & Technology*, ۶, ۰۴۰۳.

[۱۹] Lü, X. L., Zhang, Y. C., Fu, P. H., & Liu, J. F. (۲۰۲۴). Phase diagrams and topological mixed edge states in silicene with intrinsic and extrinsic Rashba effects. *Physical Review Research*, ۶(۴), ۰۴۳۱۰۸.

[۲۰] Ramasamy, A., Mohanraj, H. R., Thiruvadigal, J. D., & Shah, K. A. (۲۰۲۵). Silicene and its derivatives: Structure, properties, modifications, and emerging applications. *Nanoelectronics*, ۱۲۲-۱۴۶.

[۲۱] Ponomarenko, V. P., Popov, V. S., & Popov, S. V. (۲۰۲۲). ۲D Structures Based Field-Effect Transistors. *Journal of Communications Technology and Electronics*, ۶۷(۹), ۱۱۳۴-۱۱۵۱.

[۲۲] Akinwande, D., Huyghebaert, C., Wang, C. H., Serna, M. I., Goossens, S., Li, L. J., ... & Koppens, F. H. (۲۰۱۹). Graphene and two-dimensional materials for silicon technology. *Nature*, ۵۷۳(۷۷۷۵), ۵۰۷-۵۱۸.

[۲۳] Moradi, S. A. H., & Ghobadi, N. (۲۰۲۴). Fabrication of composite GO/NiFe^۲O_۳-MnFe^۲O_۳-CoFe^۲O_۳ anode material: Toward high performance hybrid supercapacitors. *Microscopy Research and Technique*, ۸۱(۱۰), ۲۴۵۹-۲۴۷۴.

[۲۴] Nanakar, Hassan, Hosseini Moradi, Seyed ali, & Nazirzadeh, Mehdi. (۲۰۲۰). Application of quantum technology in radars. IRANIAN JOURNAL OF RADIATION SAFETY AND MEASUREMENT, ۸(۲ (supplement)), ۶۷-۷۷. SID. <https://sid.ir/paper/۳۸۱۳۵۶/en>

[۲۵] Alborzania, H. and Hosseini Moradi, S. A. (۲۰۲۵). Calculation of Reflection Coefficient of Radar Absorbing Composite Lattice Grids Using Silica and Carbon Nanofibers. *Aerospace Defense*, ۴(۱), ۱۲۱-۱۲۹.

[۲۶] Seyed Ali Hosseini Moradi, Nader Ghobadi, Sajad Esfandyari, Reza Daqiq, Enhanced spin-transfer torque in asymmetric superlattice magnetic tunnel junctions with engineered barrier profiles, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Volume ۶۲۹, ۲۰۲۵,

[۲۷] Seyed Ali Hosseini Moradi, Nader Ghobadi, Seyed Milad Tabatabaeinejad, Sonochemical assisted auto-combustion synthesis of NiCo^۲O_۳/NiO/rGO nanocomposite and examination of photocatalytic ability for antibiotics photo-degradation, *Materials Science in Semiconductor Processing*, Volume ۱۹۳,

[۲۸] GHOBADI, N., Hosseini Moradi, S.A., & AMIRZADE, M.. (۲۰۲۲). SYNTHESIS AND STRUCTURAL, MAGNETIC, AND ELECTROMAGNETIC CHARACTERIZATION OF COBALT FERRITE / REDUCED GRAPHENE OXIDE COMPOSITE. *ADVANCED MATERIALS IN ENGINEERING (ESTEGHLAL)*, ۴۰(۴), ۶۹-۸۳. SID. <https://sid.ir/paper/۱۰۴۲۸۱۷/en>

[۲۹] Chen, M. X., Zhong, Z., & Weinert, M. (۲۰۱۶). Designing substrates for silicene and germanene: First-principles calculations. *Physical Review B*, ۹۴(۷), ۰۷۵۴۰۹.