

Elektronska i transportna svojstva dvoslojnih fosforenskih nanotraka sa cik-cak ivicama

Vladimir V. Arsoski, Nemanja A. Čukarić, Dušan B. Topalović i Milan Ž. Tadić

Apstrakt—U ovom radu smo razmatrali elektronska i transportna svojstva dvoslojnih nanotraka od fosforena sa običnim cik-cak ivicama. Elektronska struktura je računata pomoću modela jake veze. Transportne osobine su razmatrane u smislu promene konduktanse, koja je računata za režim balističkog transporta prema modelu neravnotežne Grinove funkcije u okviru formalizma metoda jake veze. Ustanovljeno je da male promene eksternog električnog polja dovode do željene promene transportnih svojstava traka, što nije bio slučaj kod jednoslojnih struktura.

Gljučne reči—2D materijali, nanotrake, fosforen, dvoslojni, cik-cak ivice, elektronska struktura, transport, ivična stanja.

I. UVOD

Postoji veliki broj materijala čiju strukturu karakterišu jake kovalentne veze u ravni i slaba Van der Valsova interakcija koja međusobno povezuje ove monoslojeve. Zbog ovakve slojevite građe moguće je mehanički razdvojiti slojeve materijala sve do debljine od jednog ili nekoliko monoslojeva kristala. Fabrikacija tankih slojeva grafena metodom mehaničke eksfolijacije [1] pokrenula je veliko interesovanje za dvodimenzione (2D) materijale. Ubrzo nakon otkrića grafena mehanički su izolovani i monoslojevi drugih kristala kao što su bor nitrid, dihalogenidi prelaznih metala i pojedini kompleksni oksidi [2]. Prethodno korišćene hemijske metode za dobijanje tankih slojeva pokazale su velike nedostatke kao što je nemogućnost izdvajanja pojedinačnih slojeva i umotavanje slojeva u tubu kako bi se dobila struktura koja ima minimum površinske energije [3].

Većina 2D materijala dobijenih u stabilnoj formi tehnikama mehaničke eksfolijacije sastojali su se iz dva ili više elementa [2]. Izuzetak je dugi niz godina bio grafen, sve do otkrića silicena [4]. Ipak, silicijum nema strukturu kao grafit, te se silicen ne može dobiti metodom mehaničkog raslojavanja, kao što je to bio slučaj sa grafenom. Radi dobijanja silicena razvijene su sofisticirane tehnike sinteze koje se zasnivaju na

Vladimir V. Arsoski – Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Bulevar Kralja Aleksandra 73, 11020 Beograd, Srbija (e-mail: vladimir.arsoski@etf.bg.ac.rs).

Nemanja A. Čukarić – Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Bulevar Kralja Aleksandra 73, 11020 Beograd, Srbija (e-mail: cukaric@etf.bg.ac.rs).

Dušan B. Topalović – Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Bulevar Kralja Aleksandra 73, 11020 Beograd, Srbija i Vinča Institut za nuklearne nauke, Univerzitet u Beogradu, Mike Petrovića Alasa 12–14, 11001 Beograd, Srbija (e-mail: dusan.topalovic@vin.bg.ac.rs).

Milan Ž. Tadić – Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Bulevar Kralja Aleksandra 73, 11020 Beograd, Srbija (e-mail: tadic@etf.bg.ac.rs).

depoziciji tankih slojeva atoma silicijuma na supstrat sa kojim silicijum slabo interaguje [4]. Pored relativno velike složenosti tehnološkog procesa, glavni nedostatak ove metode leži u činjenici da se silicen fabrikuje na visoko-provodnim supstratima poput srebra, kao i to da je sklon izuzetno intenzivnoj i brznoj oksidaciji, čak i pri veoma malim koncentracijama kiseonika u okolnoj sredini [5], što značajno umanjuje mogućnosti za njegovu praktičnu primenu.

Skorašnji eksperimentalni radovi su pokazali da je pomoću mehaničkih metoda moguće dobiti stabilan 2D sloj koji se sastoji od jednog elementa, fosfora [6-8]. Materijal sličan grafenu je dobijen od alotropa crnog fosfora i, po nomenklaturi ustaljenoj za 2D materijale, nazvan je *fosforen*. Glavna prednost fosforena u odnosu na poznatiji grafen je postojanje relativno velikog direktnog energetskog procepa, što je, u kombinaciji sa izuzetno visokom vrednošću za pokretljivost nosilaca, otvorilo mogućnost njegove primene u optici i u nanoelektronici za izradu kanala tranzistora sa efektom polja (FET) [6-9]. Skorija istraživanja su pokazala da u dužem vremenskom periodu ipak dolazi do degradacije osobina fosforena, najčešće usled neželjenog dopiranja i oksidacije [10]. Zbog toga se u praktičnim primenama slojevi fosforena inkapsuliraju između slojeva heksagonalnog bor nitrida, što dovodi do određene promene elektronskih, optičkih i transportnih karakteristika [10].

Opšte je poznato da širina energetskog procepa bitno određuje elektronske i optičke osobine materijala [9-13]. Detaljne *ab initio* kalkulacije su pokazale da se skromna vrednost energetskog procepa, koja na niskoj temperturi iznosi oko 0,35eV za masivni material, može povećati na skoro 2 eV što je maksimalna vrednost procepa koja se dobija kod monosloja crnog fosfora [11-13]. Pored mogućnosti da se veličina procepa “skokovito” menja sa promenom broja slojeva fosforena [11-17], pokazano je da se procep može relativno fino podešavati primenom naprezanja [18], dopiranjem [19], kao posledica prisutnih defekata tipa vakancija i intersticijalnih stanja [20, 21], i primenom eksternog električnog polja [22]. Ova teorijska razmatranja ukazuju na mogućnost zatvaranja procepa koje je praćeno specifičnom inverzijom zona, što može dovesti do potencijalnih topoloških prelaza.

Elektronska struktura, transportne i optičke osobine su pretežno razmatrane sa stanovišta slojeva nominalno beskonačno velikih dimenzija uz primenu *ab initio* proračuna ili su rezultat eksperimentalnih merenja [9-22]. Noviji teorijski radovi vezani za elektronsku strukturu i transportna svojstva fosforena pretežno se bave analizom jednoslojnih struktura [24-27]. Cilj ovog rada je da podrobnije razmotri

dvoslojne trake sa cik-cak ivicama na granici strukture, koje su prilično interesantne sa aspekta primene za kanal FET tranzistora [7-9, 11, 26].

Pored prvog uvodnog poglavlja rad sadrži teorijski model prikazan u poglavlju II i diskusiju numeričkih rezultata u III poglavlju. Najvažniji zaključci rada dati su u okviru poglavlja IV.

II. TEORIJSKI MODEL

A. Elektronska struktura

U cilju analize elektronskih stanja primenjen je metod jake veze. On omogućava da se stekne jasan uvid u fiziku sistema bez obzira na složenost analizirane nanostrukture. Kompleksnost modela za razmatrani materijal određena je brojem nezavisnih parametara, koji su rezultat fitovanja podataka dobijenih iz fundamentalnih *ab initio* kalkulacija. Za opis relativno kompleksne "izlomljene" strukture u ravni fosforena koristi se čak 10 parametara za skokove unutar monosloja, dok 5 parametara definiše veze između slojeva. Model hamiltonijana je

$$H = \sum_{i \neq j} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_i e \mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}_i. \quad (1)$$

Ovde je t_{ij} transfer energija za skok između i -tog i j -tog atoma u strukturi, $c_i^\dagger (c_j)$ je operator kreacije (anihilacije) elektrona u $i(j)$ -tom atomskom stanju, \mathbf{K}_i je vektor spoljašnjeg električnog polja, a \mathbf{r}_i vektor položaja atoma u prostoru. Centar trake je postavljen u koordinatni početak, koji je usvojen za referentnu tačku za izračunavanje promene potencijala u prisustvu električnog polja. Svih 15 parametara za transfer energije su preuzeti iz relevantne literature [23]. Iako se u većini radova koristi jednostavniji model koji računa manji broj skokova između stanja [12], može se pokazati da preuzeti parametri daju verodostojnije rezultate za višeslojne strukture [23]. Rastojanje između atoma, koje eksplicitno figuriše u proračunu disperzione relacije, izračunato je na osnovu podataka za parametre kristalne rešetke crnog fosfora na ambijentalnoj temperaturi od 25 °C [28]. Za konkretnu jediničnu ćeliju, čijim se periodičnim ponavljanjem reprodukuje nanotrake, postavlja se hamiltonijan (1) u inverznom prostoru. Nakon dijagonalizacije matrice hamiltonijana dobijaju se svojstvene vrednosti koje karakterišu elektronsku strukturu nanotrake.

B. Model transporta

Transportne karakteristike nanotrake određene su konduktansom. Ona se može izračunati metodom neravnotežne Grinove funkcije u okviru formalizma jake veze [29]. Ovaj model se može primeniti u slučaju kada je dužina koherencije dovoljno velika, što je približno ispunjeno kod fosforena. Do ovog zaključka se može doći na osnovu velike vrednosti za provodnost, koja je ustanovljena eksperimentalno [6-10]. U aproksimaciji jednočestične Grinove funkcije može se izvesti izraz za konduktansu pri maloj polarizaciji [24]

$$\sigma(E) = \frac{e^2}{h} \text{Tr} \left[\Gamma_L(E) G_D^+(E) \Gamma_R(E) G_D(E) \right], \quad (2)$$

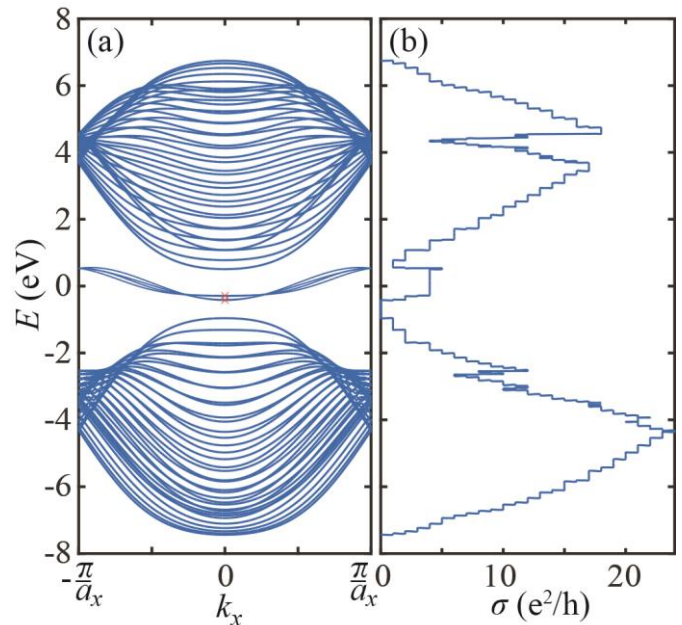
gde je hamiltonijan nanotrake

$$G_D(E) = [E - H_D - \Sigma_L(E) - \Sigma_D(E)]^{-1}, \quad (3)$$

matrice širenja linije $\Gamma_{R(L)}(E) = i[\Sigma_{R(L)}(E) - \Sigma_{R(L)}^+(E)]$, a $\Sigma_{R(L)}(E)$ su efektivne svojstvene energije za desni(levi) polubeskonačni kontakt koje računavaju njihov uticaj na elektronsku strukturu analizirane nanotrake.

III. NUMERIČKI REZULTATI I DISKUSIJA

U radu su razmotrene dvoslojne trake sa običnim cik-cak ivicama širine definisane sa $N_d = 20$ dimera. Cilj je da se utvrdi priroda trake (provodne, poluprovodne ili izolatorske) i da se razmotri uticaj spoljašnjeg električnog polja na promenu konduktanse. Za referentnu tačku usvojena je sredina trake i tačka na sredini rastojanja između slojeva u razmatranoj dvoslojnoj strukturi.



Sl. 1. (a) Zonska struktura dvoslojne nanotrake širine $N_d = 20$ dimera sa cik-cak ivicama i (b) njoj odgovarajuća konduktansa.

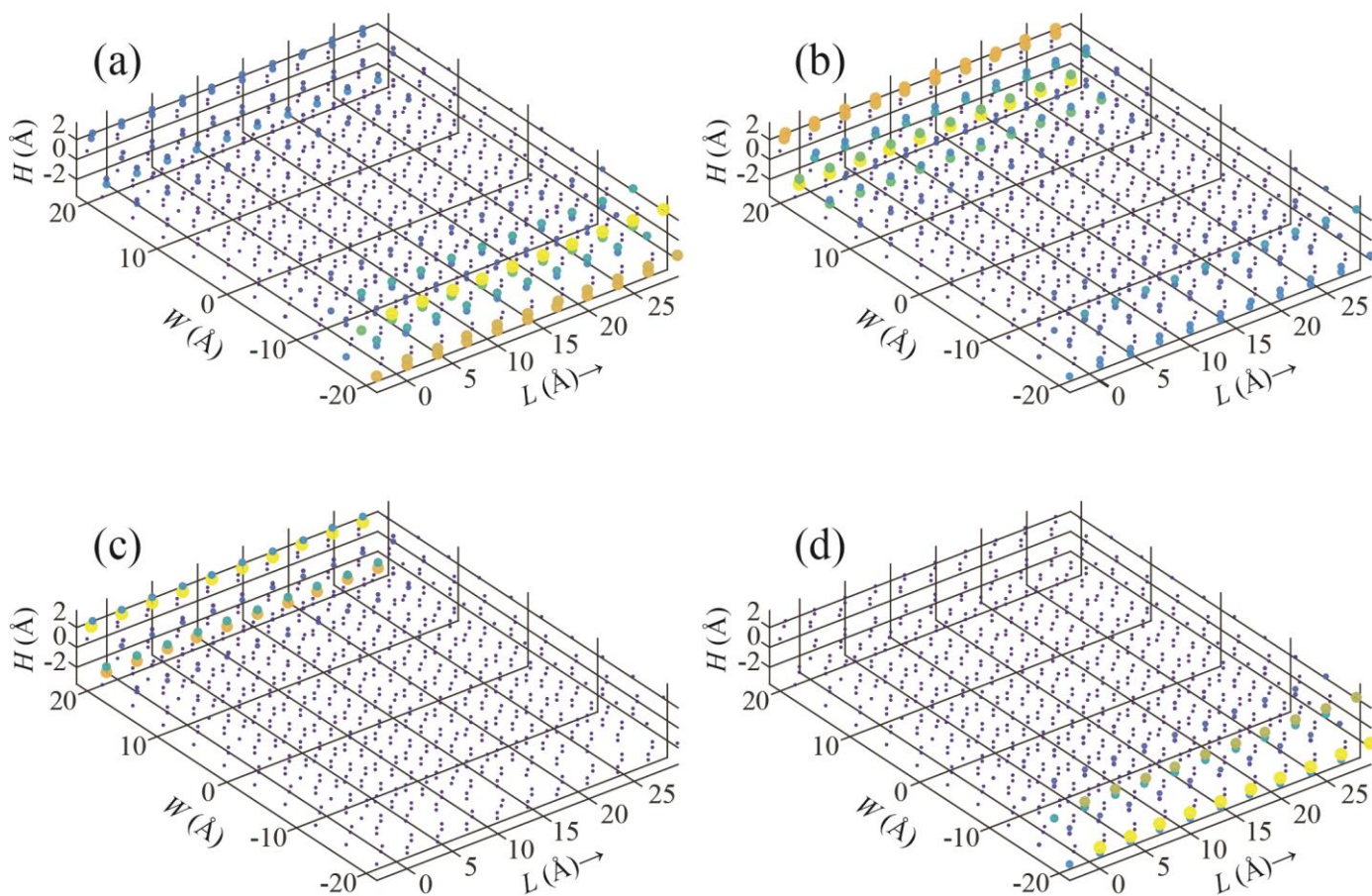
Teorijska analiza jednoslojnih traka sa običnim cik-cak ivicama je pokazala da su potrebne ekstremne vrednosti električnog polja da bi se značajnije modifikovala konduktansa nanotrake [26]. Ovako ekstremna polja dovela bi do pojave ne samo nelinearnih efekata već i do proboja materijala, što bi dovelo do uništenja naprave. Mi ovde analiziramo dvoslojne trake jer očekujemo da će kritične vrednosti polja biti bar dvostruko manje. Iako su razmotrene trake relativno male širine, primena električnog polja u ravni

može dovesti do značajne promene u provodnosti čak i kada je amplituda poprečnog polja relativno mala [26].

Disperziona relacija je prikazana na Sl. 1(a). Uočava se da su trake provodne, što je rezultat postojanja ivičnih stanja sa energijama u procepu u blizini Fermijeveg nivoa. Kako su kod višeslojnih traka susedni slojevi “smaknuti” duž cik-cak pravca za polovinu parametra rešetke gubi se simetrija [23], te razmatrana ivična stanja nisu degenerisana čak ni u odsustvu eksternog polja. Odgovarajuća konduktansa prikazana je na Sl. 1(b). Uočava se da, i pored prisutnih ivičnih stanja, postoji procep veličine približno 0,53 eV.

Kako bi se stekao bolji uvid u lokalizaciju ivičnih stanja, na Sl. 2 je prikazana verovatnoća nalaženja elektrona na

atomskim pozicijama u rešetki. Prikazana su stanja čiji je položaj na disperzionoj relaciji na Sl. 1(a) naznačen crvenim krstićima. Ivična stanja koja imaju sličnu lokalizaciju duž visine trake (uporedi Sl. 2(a) i (b), takođe (c) i (d)), ali se nalaze na različitim krajevima (bližoj i daljoj ivici) imaju približno iste energije. Uočavamo da su stanja slične energije razlikuju po lokalizaciji u smislu da je jedno stanje lokalizovano više na donjem nego na gornjem sloju, i obratno. Ipak, postoji nešto veća razlika u energijama između stanja koja su lokalizovana na dužini od jedne heksagonalne primitivne ćelije (stanja više energije prikazana na Sl. 2(a) i (b)) i stanja koja su predominantno na ivičnim atomima (stanja niže energije prikazana na Sl. 2(c) i (d)).



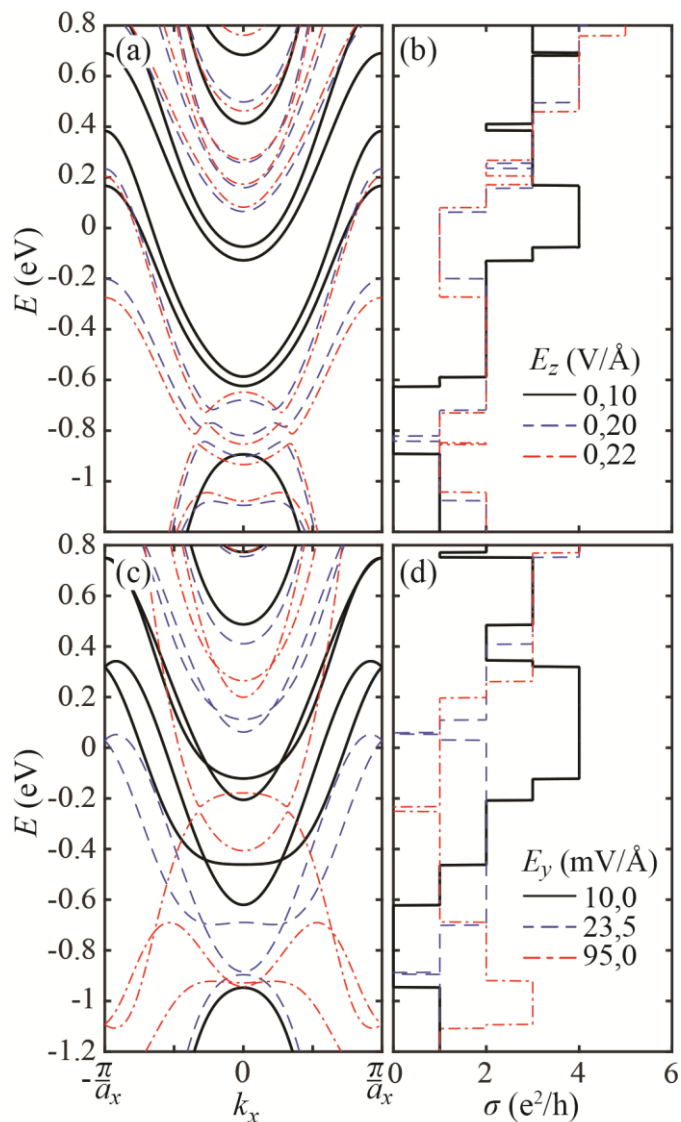
Sl. 2. Talasne funkcije ivičnih stanja u dvoslojnoj nanotraci širine $N_d = 20$ sa cik-cak ivicama, bez primenjenog eksternog polja. Položaj stanja na disperziji sa Sl. 1(a) naznačen je crvenim krstićima. Stanja su sortirana prema opadajućim vrednostima energije: (a), (b), (c) i (d), redom. Atomska stanja su prikazana malim kuglicama ljubičaste boje. U cilju bolje preglednosti nacrtano je 10 elementarnih ćelija beskonačno duge trake. Veličina kuglica na grafiku odgovara verovatnoći nalaženja elektrona na razmatranom atomskom stanju. Zbog bolje prostorne percepcije korišćena je gama boja kod prikaza lokalizacije koja odgovara amplitudi verovatnoće.

Najpre ćemo analizirati uticaj električnog polja usmerenog duž z -ose upravno na ravan slojeva (takozvani efekat vertikalnog gejta). Na Sl. 3(a) i (b) prikazana je promena disperzione relacije i provodnosti sa promenom vertikalnog polja. Razmatrana su polja amplitude 0,1, 0,2 i 0,22 V/Å, obeležena punom crnom, isprekidanom plavom i crta-tačka-crta crvenom linijom, redom. Uočava se da primena vertikalnog električnog polja dovodi do razdvajanja ivičnih stanja, tako da se stanja koja su lokalizovana pretežno na

gornjem sloju približavaju dnu provodne zone, dok se stanja koja su dominantno na donjem sloju pomeraju ka vrhu valentne zone. Istovremeno, vrh valentne zone i dno provodne zone se približavaju. Ovakvo ponašanje je očekivano i objašnjava se pojavom linearne promene potencijala duž z -ose, te su stanja na različitim slojevima u oblasti suprotne vrednosti potencijala.

Prethodno analizirani pomaci svojstvenih vrednosti energije sa porastom polja za posledicu imaju postepeno zatvaranje

energetskog procepa. Najpre se procep smanjuje na oko 0,2 eV pri normalnom polju od 0,1 V/Å, što se može uočiti posmatranjem pune crne linije na Sl. 3 (a) i (b). Kada je vrednost polja 0,2 V/Å došlo je do neukrštanja (engl. *anticrossing*) ivičnih stanja sa stanjem na vrhu valentne zone. Kada dodje do neukrštanja procep postaje indirektan i ima zanemarljivu vrednost (vidi plavu isprekidanu liniju na Sl. 3(a) i (b), redom). Konačno, pri vrednosti polja od 0,22 V/Å procep ne postoji. Dalje povećanje vertikalnog polja praćeno je odgovarajućim pomeranjima energije stanja, ali neće dovesti do željenog otvaranja procepa u okolini Fermijevog nivoa.



Sl. 3. (a) Elektronska struktura u prisustvu vertikalnog eksternog električnog polja E_z i (b) izračunata konduktansa. (c) Elektronska struktura u prisustvu poprečnog električnog polja E_y i (d) odgovarajuća konduktansa.

Takođe ćemo razmotriti i uticaj poprečnog električnog polja. Električno polje je u smeru y-ose (od bliže ka daljoj ivici strukture prikazane na Sl.2). Za uočavanje promene električnih i transportnih karakteristika potrebne su relativno

male vrednosti poprečnog polja. Na Sl. 3(c) i (d) prikazane su disperzija i konduktansa za amplitude poprečnog polja od 10, 23,5 i 95 mV/Å, obeleženih na slikama punom crnom, isprekidanom plavom i crta-tačka-crta crvenom linijom, redom. Ovde se potencijal smanjuje na bližoj ivici, a linearno raste na daljoj. Stoga dolazi do smanjenja energije stanja lokalizovanih na bližoj ivici, te se ona pomeraju ka vrhu valentne zone. Slično se stanja na daljoj ivici pomeraju ka dnu provodne zone. Interesantno, pri vrednosti $E_y = 23,5$ mV/Å dolazi do zatvaranja procepa usled približavanja vrha valentne zone i odgovarajućih ivičnih stanja i istovremenog otvaranja procepa oko dna provodne zone. Procep ima najveću vrednost od oko 0,7 eV za približnu vrednost polja 50 mV/Å, dok za vrednosti iznad 82 mV/Å procep prelazi u indirektan usled neukrštanja stanja u provodnoj i valentnoj zoni. Očigledno je da se primenom poprečnog električnog polja traka može prevesti iz provodnog režima u neprovodni, što je osnova za primenu ovih traka za kanal tranzistora sa efektom polja.

IV. ZAKLJUČAK

Naša analiza je pokazala da se transportna i električna svojstva dvoslojnih nanotraka od fosforena mogu efikasno kontrolisati primenom kako vertikalnog, tako i lateralnog električnog polja. Primena vertikalnog električnog polja dovodi do očekivanog pomeranja ivičnih stanja, ali do otvaranja procepa izađu ivičnih stanja lokalizovanih na različitim monoslojevima neće doći. Sa druge strane, primena poprečnog polja može prevesti nanotraku iz provodnog u neprovodni režim, što ovu strukturu čini povoljnom za primene u FET tranzistorima. Razmatranje traka različite širine, napravljenih od većeg broja slojeva, kao i traka sa foteljastim ivicama, može dovesti do interesantnih rezultata i biće predmet našeg budućeg rada.

ZAHVALNICA

Ovaj rad je podržan od strane Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije br. III 45003. Autori posebno žele da se zahvale dr Marku Grujiću naučnom saradniku na Elektrotehničkom fakultetu Univerziteta u Beogradu na korisnim raspravama na temu elektronske strukture i transporta u strukturama zasnovanim na dvodimenzionim materijalima.

LITERATURA

- [1] K.S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubons, I. G. Grigorieva, and A. A. Firsov, "Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films," *Science*, vol. 306., pp. 666-669, Oct., 2004.
- [2] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim, "Two-dimensional atomic crystals," *PNAS*, vol. 120, no. 30, pp. 10451-10453, Jul., 2005.
- [3] H. Shioyama, "Cleavage of graphite to graphene," *J. Mater. Sci Lett.* vol. 20, pp. 499-500, Mar., 2001.
- [4] P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M. C. Asensio, A. Resta, B. Ealet, and G. L. Lay, "Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, no. 15, pp. 155501/1-5, Apr., 2012.
- [5] A. Molle, C. Grazianetti, D. Chiappe, E. Cinquanta, E. Cianci, G. Tallarida, and M. Fanciulli, "Hindering the oxidation of silicene with

- non-reactive encapsulation,” *Adv. Funct. Mater.* vol. 23, no. 35, pp. 4340-4344, Sep., 2013.
- [6] A. Castellanos-Gomez, L. Vicarelli, E. Prada, J. O. Island, K. L. Narasimha-Acharya, S. I. Blanter, D. J. Groenendijk, M. Buscema, G. A. Steele, J. V. Alvarez, H. W. Zandbergen, J. J. Palacios, and H. S. J. van der Zant, “Isolation and characterization of few-layer black phosphorus,” *2D Mat.*, vol. 1, no. 2, pp. 025001/1-19, Jun, 2014.
- [7] L. Li, Y. Yu, G. J. Ye, Q. Ge, X. Ou, H. Wu, D. Feng, X. H. Chen, and Y. Zhang, “Black phosphorus field-effect transistors,” *Nat. Nanotechnol.*, vol. 9, pp. 372-377, May, 2014.
- [8] H. Liu, A. T. Neal, Z. Zhu, Z. Luo, X. Xu, D. Tománek, and P. D. Ye, “Phosphorene: An Unexplored 2D Semiconductor with a High Hole Mobility,” *ACS Nano*, vol. 8, no. 4, pp. 4033-4041, Mar., 2014.
- [9] F. Xia, H. Wang, and Y. Jia, “Rediscovering black phosphorus as an anisotropic layered material for optoelectronics and electronics,” *Nat. Commun.*, vol. 5, pp. 4458/1-6, Jul., 2014.
- [10] T. Hu and J. Hong, Anisotropic Effective Mass, “Optical Property, and Enhanced Band Gap in BN/Phosphorene/BN Heterostructures,” *ACS Appl. Mater. Interfaces*, vol. 7, no. 42, pp. 23489-23495, Oct., 2015.
- [11] J. Qiao, X. Kong, Z.-Xin Hu, F. Yang, and J. Wei, “High-mobility transport anisotropy and linear dichroism in few-layer black phosphorus,” *Nat. Commun.*, vol. 5, pp. 4475/1-7, Jul., 2014.
- [12] A. N. Rudenko and M. I. Katsnelson, “Quasiparticle band structure and tight-binding model for single- and bilayer black phosphorus,” *Phys. Rev. B*, vol. 89, no. 20, pp. 201408(R)/1-5, May, 2014.
- [13] Y. Cai, G. Zhang, and Y.-Wei Zhang, “Layer-dependent Band Alignment and Work Function of Few-Layer Phosphorene,” *Sci. Rep.*, vol. 4, pp. 06677/1-6, Oct., 2014.
- [14] V. Tran, R. Soklaski, Y. Liang, and L. Yang, “Layer-controlled band gap and anisotropic excitons in few-layer black phosphorus,” *Phys. Rev. B*, vol. 89, no. 23, pp. 235319/1-6, Jun, 2014.
- [15] J. Dai and X. C. Zeng, “Bilayer Phosphorene: Effect of Stacking Order on Bandgap and Its Potential Applications in Thin-Film Solar Cells,” *J. Phys. Chem. Lett.*, vol. 5, no. 7, pp. 1289-1293, Mar., 2014.
- [16] T. Low, A. S. Rodin, A. Carvalho, Y. Jiang, H. Wang, F. Xia, and A. H. C. Neto, “Tunable optical properties of multilayer black phosphorus thin films,” *Phys. Rev. B*, vol. 90, no. 7, pp. 075434/1-5, Aug., 2014.
- [17] T. Low, R. Roldán, H. Wang, F. Xia, P. Avouris, L. M. Moreno, and F. Guinea, “Plasmons and Screening in Monolayer and Multilayer Black Phosphorus,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, no. 10, pp. 116802/1-5, Sep., 2014.
- [18] T. Hu and J. Dong, “Structural phase transitions of phosphorene induced by applied strains,” *Phys. Rev. B*, vol. 92, no. 6, pp. 064114/1-7, Aug., 2015.
- [19] J. Kim, S. S. Baik, S. H. Ryu, Y. Sohn, S. Park, B.-Gyu Park, J. Denlinger, Y. Yi, H. J. Choi, and K. S. Kim, “Observation of tunable band gap and anisotropic Dirac semimetal state in black phosphorus,” *Science*, vol. 349, no. 6249, pp. 723-726, Aug., 2015.
- [20] V. Wang and Y. Kawazoe, “Determination of the trends of electronic and native defect properties in few-layer phosphorene,” arXiv: 1409.5171v3, pp. 1-10, Aug., 2015.
- [21] S. Yuan, A. N. Rudenko, and M. I. Katsnelson, “Transport and optical properties of single- and bilayer black phosphorus with defects,” *Phys. Rev. B*, vol. 91, no. 11, pp. 115436/1-10, Mar., 2015.
- [22] Q. Liu, X. Zhang, L. B. Abdalla, A. Fazzio, and A. Zunger, “Switching a Normal Insulator into a Topological Insulator via Electric Field with Application to Phosphorene,” *Nano Lett.*, vol. 15, no.2, pp. 1222-1228, Feb., 2015.
- [23] A. N. Rudenko, S. Yuan, and M. I. Katsnelson, “Toward a realistic description of multilayer black phosphorus: From GW approximation to large-scale tight-binding simulations,” *Phys. Rev. B*, vol. 92, no. 8, pp. 085419/1-9, July, 2015; See Erratum: A. N. Rudenko, S. Yuan, and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B*, vol. 93, no. 19, pp. 199906, May, 2016.
- [24] M. Ezawa, “Topological origin of quasi-flat edge band in phosphorene,” *New J. Phys.*, vol. 16, no. 11, pp. 115004/1-13, Oct., 2014.
- [25] E. T. Sisakht, M. H. Zare, and F. Fazileh, “Scaling laws of band gaps of phosphorene nanoribbons: A tight-binding calculation,” *Phys. Rev. B*, vol. 91, no. 8, pp. 085409/1-085409/8, Feb., 2015.
- [26] M. M. Grujić, M. Ezawa, M. Ž. Tadić, and F. M. Peeters, “Tunable skewed edges in puckered structures,” *Phys. Rev. B*, vol. 93, no. 24, pp. 245413/1-7, Jun., 2016.
- [27] R. Zhang, X. Y. Zhou, D. Zhang, W. K. Lou, F. Zhai, and K. Chang, “Electronic and magneto-optical properties of monolayer phosphorene quantum dots,” *2D Mat.*, vol. 2, no. 5, pp. 045012/1-7, Nov., 2015.
- [28] W. M. Haynes Eds., “Properties of Solids,” in *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 95th ed., Boca Raton, Florida, USA: CRC Book Taylor & Francis Group LCC, 2014, ch. 12, pp. 12-17.
- [29] S. Datta, “Transmission function, S-matrix and Green’s functions,” in *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, New Delhi, India: Cambridge U.P., 2011, ch. 3, sec. 5, pp. 144–153.

ABSTRACT

In this paper we investigate electronic and transport properties of bilayer phosphorene nanoribbons with normal zig-zag edges. Electronic structure is calculated by the tight binding model. Transport properties are considered in terms of conductance, which is calculated in a ballistic regime using nonequilibrium Green function formalism in the scope of the tight binding model. We found that modest amplitudes of an external electric field may result in favorable evolution of transport properties, which was not the case in monolayer nanostructures.

Electronic and transport properties of bilayer phosphorene nanoribbons with zig-zag edges

Vladimir V. Arsoški, Nemanja A. Čukarić, Dušan B. Topalović and Milan Ž. Tadić