

پیش‌یابی و بررسی خواص الکتریکی نانوساختار دوبعدی سیلیسیم ژرمانیم فسفید (SiGeP₄) با استفاده از روش ابتدا به ساکن

مصیب ناصری*^۱، جعفر جلیلیان^۲، خالد صالحی^۱

۱. گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد کرمانشاه، صندوق پستی: ۶۷۱۸۹۹۷۵۱، کرمانشاه - ایران

۲. گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه یاسوج، صندوق پستی: ۷۵۹۱۸۷۴۹۳۴، کرمانشاه - ایران

مقاله‌ی پژوهشی

تاریخ دریافت مقاله: ۹۷/۱۱/۲۴ تاریخ پذیرش مقاله: ۹۸/۴/۲۷

چکیده: این مقاله نانوساختار دوبعدی سیلیسیم ژرمانیم فسفید (SiGeP₄) را در فاز پنج‌گوشی با استفاده از محاسبه‌های ابتدا به ساکن مبتنی بر نظریه‌ی تابعی چگالی و با بهره‌گیری از نرم‌افزارهای وین و کوانتوم اسپرسو و متریاژ استودیو پیش‌یابی نموده و خواص الکتریکی آن را مورد بررسی قرار می‌دهد. پایداری ترمودینامیکی، دینامیکی و گرمایی این نانوساختار به ترتیب با محاسبه‌ی انرژی همبستگی ساختار، نمودار پاشندگی فونونی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ارزیابی و تأیید شده است. نتیجه‌های محاسبه‌ها نشان می‌دهد که تک لایه‌ی سیلیسیم ژرمانیم فسفید یک نیم‌رسانای غیرمستقیم با گاف انرژی حدود ۱٫۹۵ eV است که با اعمال کشش و کرنش دوبعدی قابل تنظیم است. ویژگی‌های منحصر به فرد این نانوساختار امکان استفاده از آن را در ابزارهای الکترونیکی در مقیاس نانو و به طور خاص در حسگرهای الکترومکانیکی فراهم می‌کند.

کلیدواژه‌ها: نانوساختار دوبعدی، سیلیسیم ژرمانیم فسفید، نیم‌رسانای غیرمستقیم، نمودار پاشندگی فونونی

First principles prediction of 2D SiGeP₄ monolayer: electronic properties investigation

M. Naseri*¹, J. Jalilian², Kh. Salehi¹

1. Department of Physics, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, P.O.Box: 671899751, Kermanshah-Iran

2. Department of Physics, Faculty of Sciences, Yasouj University, P.O.Box: 7591874934, Kermanshah-Iran

Abstract: Since the discovery of graphene in 2004, two-dimensional (2D) materials have attracted broad interest due to their outstanding electronic and optical properties. In 2014, a new carbon allotrope named penta-graphene was theoretically predicted. The advent of penta-graphene inspired various explorations for new pentagonal 2D nanostructures. In this paper, by using the first-principles calculations based on the density functional theory as implemented in Wien2K, Quantum Espresso, and Material Studio codes, a new two-dimensional pentagonal SiGeP₂ monolayer is predicted. The structural, kinetic, and thermal stabilities of the newly found monolayer are evaluated and confirmed by cohesive energy computation, phonon dispersion calculation, and first-principles molecular dynamics simulations, respectively. The electronic properties investigations reveal that the predicted monolayer has a strain tunable indirect bandgap of 2.95 eV calculated by the GGA-PBE level of theory. Through, the presence of a narrow phonon bandgap between acoustic and optical modes suggests its application in electro-mechanical resonators.

Keywords: 2D nano structure, SiGeP₄, Indirect semiconductor, Phonon dispersion

*Email: sepehr1976@yahoo.com

۱. مقدمه

بعد از فراوری تجربی گرافن در سال ۲۰۰۴ [۱]، خاصیت‌های الکتریکی و مکانیکی ویژه‌ی آن سبب شده است که مطالعه‌های مرتبط با گرافن در حوزه‌های نظری و آزمایشگاهی مورد اقبال بسیاری از پژوهش‌گران قرار گیرد. در سال‌های اخیر مطالعه‌های وسیعی برای پیدا کردن نانوساختارهای دوبعدی با ویژگی‌های مشابه گرافن انجام شده است که منجر به پیش‌یابی و فرآوری تجربی ساختارهای شبه‌گرافنی متعددی شده است [۲-۱۵].

در بین نانوساختارهای مورد مطالعه، خواص نیم‌رسانایی و کاربردهای گسترده‌ی عنصرهای گروه چهارم جدول تناوبی سبب شده است که این گروه از مواد مورد اقبال بیش‌تری قرار گیرند و نانوساختارهای تک‌عنصری متعددی متشکل از این عنصرها مانند پنتاگرافن [۲]، سیلیسین^۱ [۳]، ژرمانن^۲ [۳] و فسفرین^۳ [۴] پیش‌یابی و فراوری شود.

پنتاگرافن یک آلوتروپ دوبعدی جدید و پایدار از کربن در حالت پنج‌گوشی است که در سال ۲۰۱۴ پیش‌بینی شد [۵]. مطالعه‌ی خواص الکتریکی این ماده نشان‌دهنده است که این ماده یک نیم‌رسانای مستقیم با گاف انرژی حدود ۳/۵ eV است. در سلول واحد پنتاگرافن ۶ اتم کربن وجود دارد، دو اتم کربن با هیبریداسیون sp^3 و چهار اتم کربن با هیبریداسیون sp^2 که در سه صفحه‌ی مجزا با فاصله‌ی مشخصی از هم قرار گرفته‌اند. اتم‌های کربن دارای هیبرید sp^2 که هر کدام به سه اتم کربن مجاور خود متصل هستند در صفحه‌ی میانی و کربن‌های با هیبرید sp^3 که هر کدام به چهار اتم کربن مجاور متصل هستند در صفحه‌های بالایی و پایینی قرار دارند [۲].

پس از آرایه‌ی تک‌لایه‌ی پنتاگرافن ساختارهای دوبعدی مشابهی مانند تک‌لایه‌ی C_2Si ، تک‌لایه‌ی CN_2 ، تک‌لایه‌ی SiN_2 و تک‌لایه‌ی B_2C ، تک‌لایه‌ی As_2C و تک‌لایه‌ی CdS_2 [۹-۱۵] در فاز پنج‌گوشی پیش‌بینی شده است. در مقاله‌ی حاضر با استفاده از محاسبه‌های ابتدا به ساکن نانوساختار دوبعدی سیلیسیم ژرمانیم فسفید در حالت پنج‌گوشی پیش‌بینی و خواص ساختاری و الکتریکی آن مورد بررسی قرار می‌گیرد.

۲. روش محاسبه

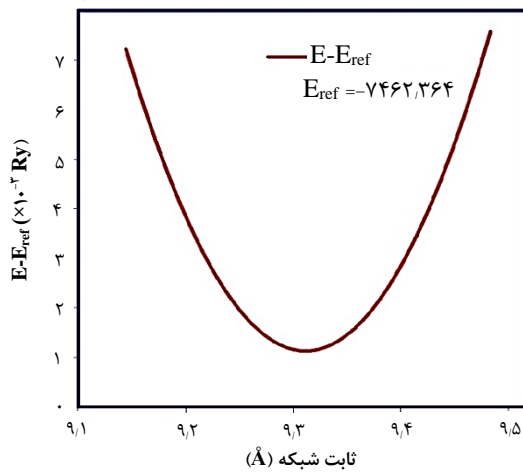
در شبیه‌سازی حاضر از روش موج‌های تخت بهبود یافته‌ی خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW)، در چار چوب نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) و توسط کد محاسباتی وین ۲k، استفاده شد [۱۶]. هم‌چنین برای بسط پتانسیل تبادل-همبستگی سیستم، تقریب شیب تعمیم یافته (GGA-PBE) به‌کار برده شد [۱۷]. پارامتر همگرایی $R_{Kmax}=R_{MT}K_{max}$ برابر ۷ و انرژی جداسازی Ry ۸ انتخاب شد. هم‌چنین با در نظر گرفتن روش مونخورست-پک [۱۸] در محاسبه‌های الکترونی و نوری به ترتیب مش‌بندی ساختار شبکه‌ای $1 \times 1 \times 1$ در منطقه‌ی اول بریلوئن در نظر گرفته شد. برای انجام دقیق محاسبه‌ها در اجرای برنامه، بازه‌ی همگرایی بار برابر با 1×10^{-6} در نظر گرفته شد.

برای بررسی پایداری دینامیکی ساختار و محاسبه‌ی نمودار پاشندگی فونونی از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو^۴ استفاده شد [۱۹]؛ در این محاسبه شبه پتانسیل مارتین ترولیر [۲۰] به‌کار گرفته شد. لازم به ذکر است که با عنایت به این موضوع که تنها در محاسبه‌ی نمودار پاشندگی فونونی از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو استفاده شده است و محاسبه‌ی خواص الکتریکی با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته‌ی خطی با پتانسیل کامل به وسیله‌ی نرم‌افزار وین انجام شده است، برای سازگاری نتیجه‌های دو نرم‌افزار، یعنی نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو که مبتنی بر استفاده از شبه پتانسیل است و نرم‌افزار وین که مبتنی بر استفاده از پتانسیل کامل است، از شبه پتانسیل مارتین ترولیر که پتانسیلی کارآمد در روش امواج تخت است استفاده شد.

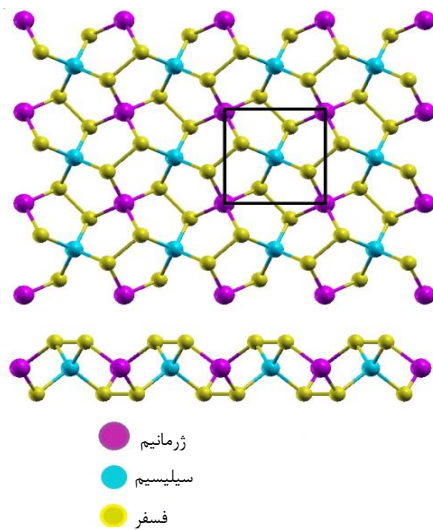
هم‌چنین برای ارزیابی پایداری گرمایی ساختار از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از بسته نرم‌افزار Dmol³ [۲۱] در قالب نرم‌افزار متریاژ استودیو^۵، استفاده شد. در این شبیه‌سازی پایداری ساختار در برابر اعمال دمای ۵۰۰ K و ۱۰۰۰ K تا مدت زمان ۱۰ ps، با گام‌های زمانی ۲ fs شبیه‌سازی و مورد ارزیابی قرار گرفت. این محاسبه‌ها با در نظر گرفتن هنگرد هم‌دما-هم‌فشار (NVT) صورت گرفت که در آن از روش نوز-هوفر^۶ در کنترل دمای اعمال‌شده استفاده شده است [۲۲].

4. Quantum espresso
5. Materials studio
6. Nose-Hoover

1. Silicene
2. Germanene
3. Phosphorene



(الف)



(ب)

شکل ۱. (الف) نمودار تغییرات انرژی سلول واحد با ثابت شبکه و (ب) ساختار شبکه‌ی بلوری نانو ساختار دوبعدی ژرمانیم سیلیکون دی فسفید از دو نمای روبه‌رو و مجاور.

اینک پیش از محاسبه‌ی خواص الکتریکی و نوری این نانو ساختار برای اطمینان از پایداری ساختاری آن انرژی همبستگی آن را محاسبه می‌کنیم. مطابق تعریف، انرژی همبستگی یک ساختار از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید [۲۴]:

$$E_{coh} = (\sum_i E_i) - E_t / n \quad (2)$$

در این‌جا E_t انرژی کل سلول واحد نانو ساختار، E_i انرژی اتم نام در حالت منفرد، و n تعداد اتم‌های موجود در سلول واحد است. با در نظر گرفتن مقادیر محاسبه شده برای انرژی سلول واحد و نیز انرژی اتم‌های منفرد و استفاده از این رابطه

۳. نتیجه‌ها

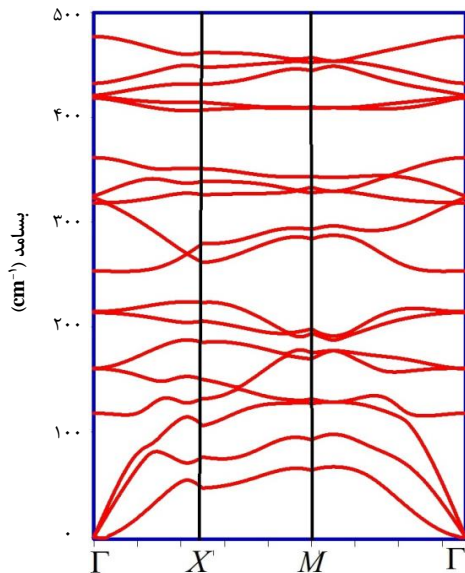
۱.۳ خاصیت‌های ساختاری و پایداری

برای دستیابی به شکل ابتدایی نانو ساختار دوبعدی سیلیسیم ژرمانیم فسفید، در یک سلول واحد پنتاگرافن، دو اتم کربن دارای هیبرید sp^2 در صفحه‌ی میانی با اتم‌های سیلیکون و ژرمانیم، و اتم‌های کربن‌های با هیبرید sp^3 در صفحه‌های بالایی و پایینی با اتم‌های فسفر جای‌گزین شدند. پیکربندی اولیه‌ی شبکه‌ی بلوری این نانو ساختار دوبعدی از نمای روبه‌رو و نمای کناری در شکل ۱ نشان داده شده است.

برای به دست آوردن سلول واحد بهینه‌ی این نانو ساختار، بهینه‌سازی هم‌زمان مختصات اتمی و ابعاد یاخته انجام شد. برای این منظور پس از بهینه‌سازی مختصات اتمی، برای رسیدن به ساختار بهینه‌شده‌ی سلول واحد، با استفاده از رابطه‌ی حالت ترمودینامیکی بریج- مورانقان [۲۳] تغییرات انرژی سلول واحد برحسب حجم سلول واحد و با استفاده از آن تغییرات انرژی سلول واحد برحسب ابعاد سلول واحد (ثابت شبکه) محاسبه شد (شکل ۱ الف):

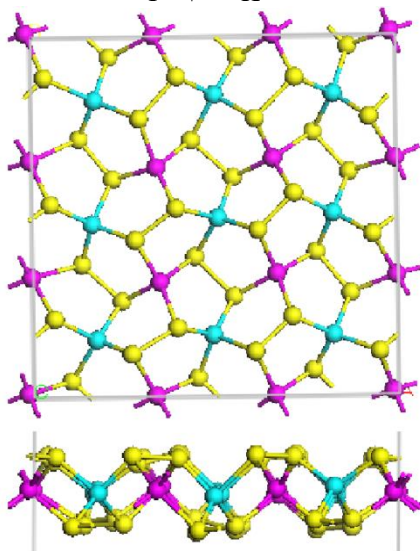
$$E(V) = E_0 + \frac{9B_0 V_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^2 B'_0 \right\} + \frac{9B_0 V_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^2 \left[6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} \right] \right\}. \quad (1)$$

با استفاده از این روش، مقدار 4.92 \AA برای ثابت شبکه‌ی سلول واحد بهینه‌شده‌ی این نانو ساختار محاسبه شد. شکل شبکه‌ی بلوری این نانو ساختار و سلول بسیط بهینه‌شده‌ی نانو ساختار دوبعدی سیلیسیم ژرمانیم فسفید از نماهای روبه‌رو و کنار در شکل ۱ ب نشان داده شده است. همان‌گونه که در این شکل دیده می‌شود، سلول بسیط بهینه‌شده‌ی نانو ساختار دوبعدی سیلیسیم ژرمانیم فسفید از چهار اتم فسفر، یک اتم سیلیکون و یک اتم ژرمانیم تشکیل شده است. اتم‌های سیلیکون و ژرمانیم در یک صفحه‌ی واحد (صفحه میانی) و اتم‌های فسفر در دو صفحه‌ی مجزا (صفحه‌های بالایی و پایینی) قرار گرفته‌اند؛ فاصله‌ی این دو صفحه از یک‌دیگر 2.82 \AA محاسبه شد.



(الف)

T = 1000 K



(ب)

شکل ۲. (الف) نمودار پاشندگی طیف فونونی ساختار دوبعدی سیلیسیم ژرمانیم فسفید؛ (ب) نمای روبه‌رو و مجاور نانوساختار دوبعدی سیلیسیم ژرمانیم فسفید در دمای ۱۰۰۰ K، ۱۰ ps.

۲.۳ خاصیت‌های الکتریکی

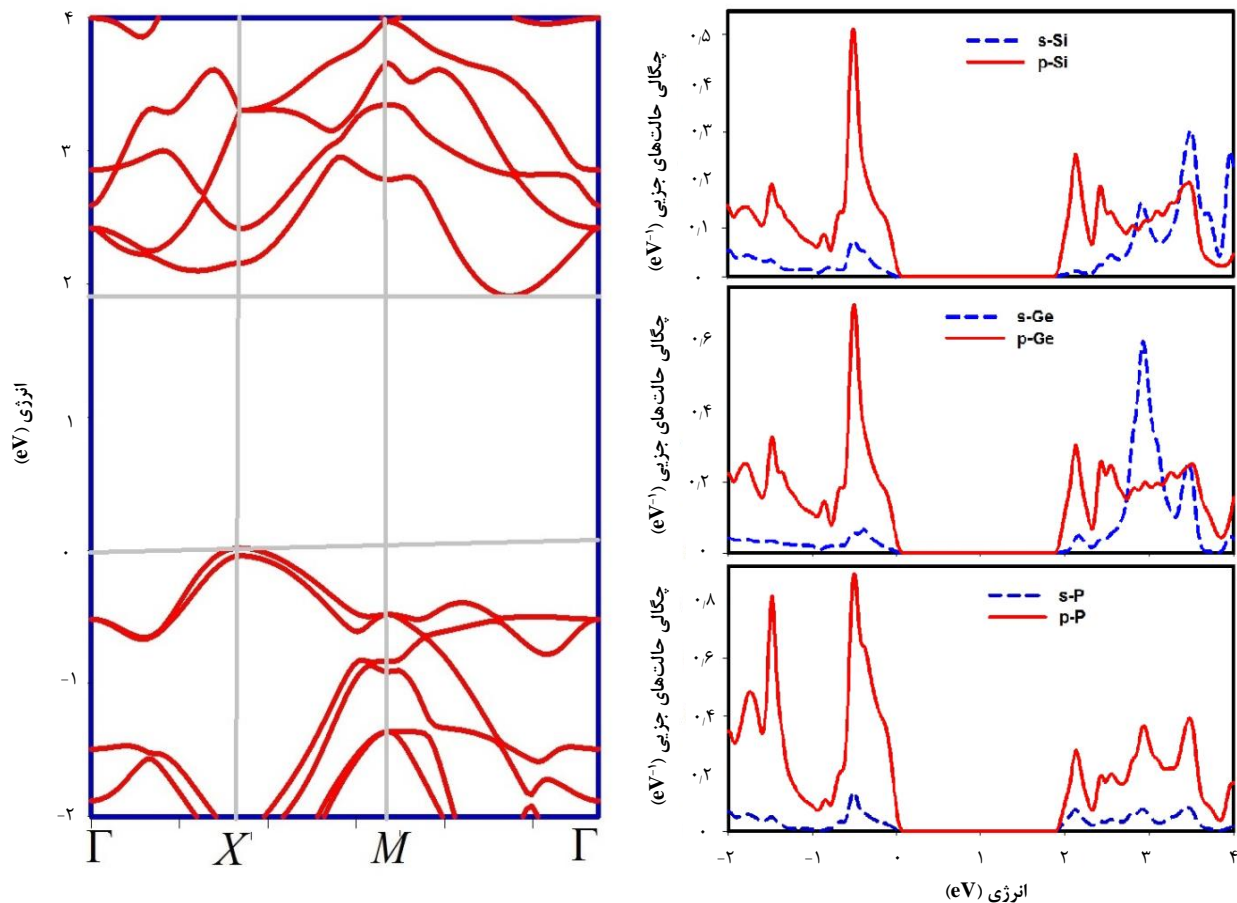
نمودار ساختار نواری تک لایه‌ی سیلیسیم ژرمانیم فسفید در شکل ۳ (چپ) نشان داده شده است. همان‌گونه که دیده می‌شود، محاسبه‌ها نشان می‌دهد که این ماده یک نیم‌رسانای غیرمستقیم با گاف نواری حدود ۱/۹۰ eV بوده و حالت بیشینه‌ی نوار ظرفیت آن در نقطه‌ی X و حالت کمینه‌ی نوار رسانش آن در نقطه‌ای بین نقطه‌های M و Γ در منطقه‌ی اول بریلوئن قرار گرفته‌اند.

مقدار $4,82 \text{ eV atom}^{-1}$ برای انرژی همبستگی به دست می‌آید که بیان‌گر پایداری ساختاری نسبتاً خوب این تک لایه است.

در ادامه برای بررسی پایداری موضعی دینامیکی نانوساختار در سطح پتانسیل، نمودار پاشندگی فونونی آن با استفاده از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو محاسبه شد (شکل ۲ الف). همان‌گونه که در شکل ۲ مشاهده می‌شود در این نمودار هیچ‌گونه مد منفی یا موهومی دیده نمی‌شود؛ عدم وجود مدهای منفی در نمودار پاشندگی فونونی نشان‌گر پایداری دینامیکی این نانو-ساختار است.

در ادامه برای ارزیابی پایداری گرمایی پیش‌بینی شده‌ی نانوساختار رفتار این ماده در گستره‌ی دمایی ۵۰۰ تا ۱۰۰۰ K با استفاده از بسته‌ی محاسباتی دینامیک مولکولی Dmol³ در قالب نرم‌افزار متریالز استودیو شبیه‌سازی شد. در این شبیه‌سازی، تک لایه به مدت ۱۰ ps تحت دماهای ۵۰۰ و ۱۰۰۰ K قرار گرفت. این محاسبه‌ها با در نظر گرفتن هنگرد هم‌دما-هم‌فشار (NVT) صورت گرفت که در آن از روش نوز-هوفر در کنترل دمای اعمال شده استفاده شد [۲۲]. در این روش با اعمال دماهای اولیه‌ی ۵۰۰ و ۱۰۰۰ K به ساختار مورد بررسی انرژی‌های کاتوره‌ای متناسب با این دماها توسط نرم‌افزار برای سیستم در نظر گرفته می‌شود و حالت سیستم پس از زمان ۱۰ ps و با در نظر گرفتن ۵۰۰۰ گام زمانی (با گام‌های زمانی ۲ fs) بررسی می‌شود. نتیجه‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای ساختار پیش‌یابی شده نشان می‌دهد که کمیت‌های فیزیکی این نانوساختار پس از گذشت زمان شبیه‌سازی پیش‌گفته حول مقدارهای ثابتی نوسان می‌کنند و این نانوساختار به خوبی پیکربندی فیزیکی خود را حفظ می‌کند. بنابراین، این نانوساختار در دماهای ۵۰۰ و ۱۰۰۰ K پایداری بسیار خوبی دارد.

به طور خلاصه می‌توان نتیجه گرفت که نانوساختار دوبعدی سیلیسیم ژرمانیم فسفید نه تنها دارای پایداری ساختاری خوبی است بلکه از نظر دینامیکی و گرمایی نیز بسیار پایدار است که این امر قابلیت فراوری تجربی آن را تأیید می‌کند.



شکل ۳. نمودار ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی جزئی نانو ساختار دوبعدی سیلیسیم ژرمانیم فسفید.

می‌یابد. این در حالی است که این نانو ساختار در برابر تنش درون صفحه‌ای رفتار متفاوتی از خود نشان می‌دهد، به گونه‌ای که تا مقدار بیشینه‌ی ۴٪ تنش درون صفحه‌ای، گاف انرژی سیستم تغییرات بسیار اندکی دارد و با تقریب خوبی می‌توان آن را ثابت فرض کرد. با افزایش بیش‌تر مقدار تنش اعمال شده، گاف انرژی تک لایه‌ی مورد بررسی با آهنگ تندتری شروع به کاهش می‌کند.

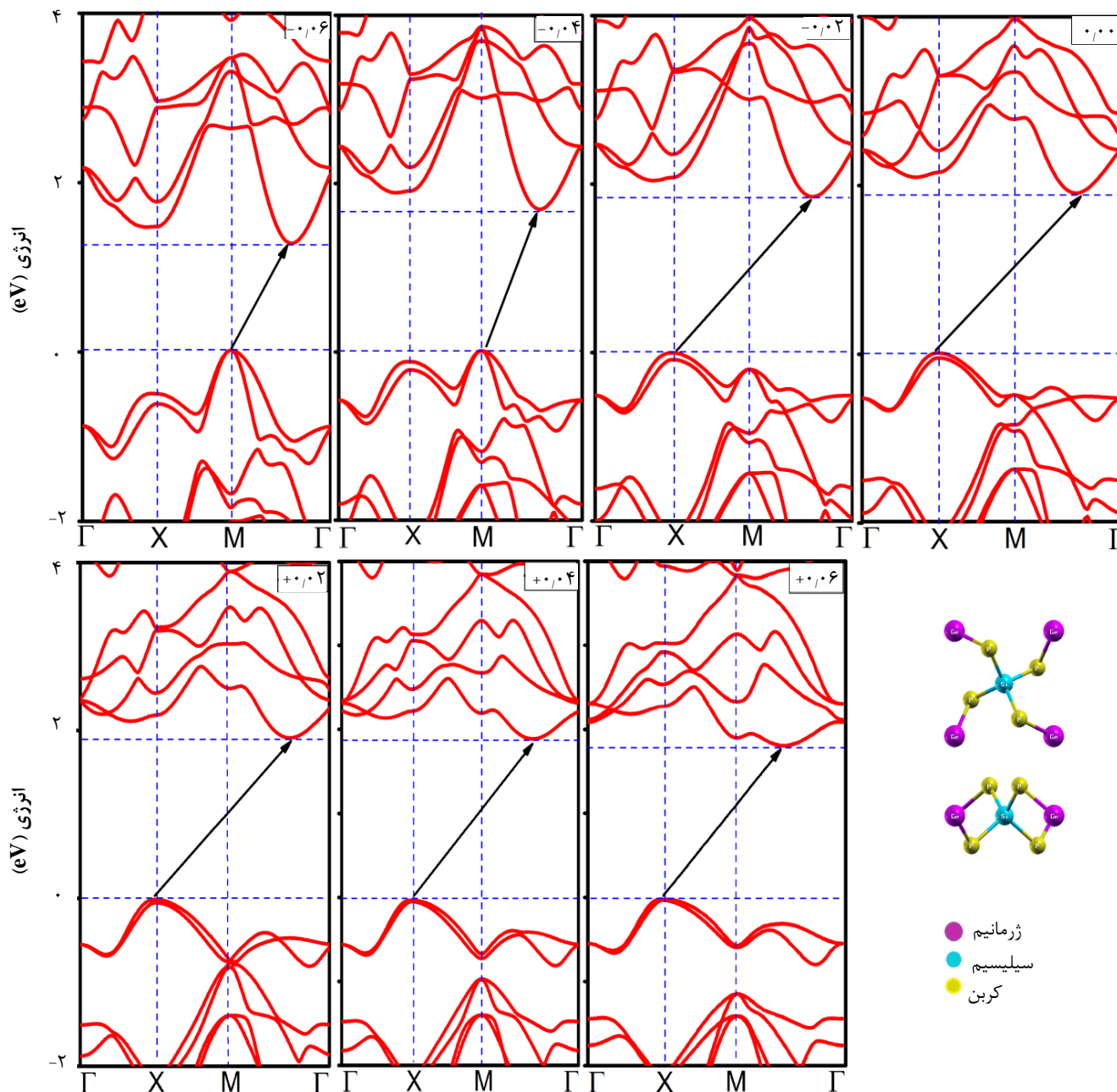
در شکل ۴ مشاهده می‌شود که اعمال تنش (وقتی ساختار متراکم می‌شود)، و کرنش (وقتی ساختار کشیده می‌شود)، درون یک صفحه همسانگرد، در هر دو حالت سبب کاهش مقدار گاف انرژی سیستم می‌شود. هر چند که گاف نواری این تک لایه در برابر اعمال تنش و کرنش درون صفحه‌ای همسانگرد از ۴- تا ۴٪+ تغییرات بسیار اندکی از خود نشان می‌دهد اما در برابر اعمال کرنش همسانگرد تا مقدار بیشینه‌ی ۶٪+ تغییرات هم‌چنان اندک است، ولی با اعمال تنش‌های با

برای درک بیش‌تر خواص الکتریکی این ساختار، چگالی حالت‌های جزئی اتم‌های سیلیسیم، ژرمانیم و فسفر محاسبه شد. نمودار چگالی حالت‌های جزئی این اتم‌ها در شکل ۳ (راست) نشان داده شده است. همان‌گونه که در این نمودار دیده می‌شود الکترون‌های تراز p هر سه اتم نه تنها در تشکیل نوار ظرفیت بلکه در شکل‌گیری تراز رسانش نیز نقش بیش‌تر و نسبتاً یکسانی دارند. هر چند سهم الکترون‌های تراز p اتم فسفر در این امر اندکی بیش‌تر از دو اتم دیگر است.

برای درک بیش‌تر میزان پایداری و ویژه‌گی‌های الکتریکی این نانو ساختار، رفتار مشخصه‌های الکتریکی و مکانیکی آن تحت اعمال کرنش همسانگرد درون- صفحه‌ای بررسی شد. شکل ۴ نمودار تغییرات گاف انرژی سیستم را در بازه‌ی کرنش اعمال شده‌ی همسانگرد ۶- تا ۶٪+ نشان می‌دهد. همان‌گونه که در شکل ۴ دیده می‌شود، با اعمال کرنش همسانگرد در صفحه‌ی تک لایه‌ی مورد بررسی، گاف انرژی سیستم کاهش

کردن ساختار تک لایه سبب می‌شود که شیب نمودار ساختار نواری در ترازهای نزدیک به انرژی فرمی افزایش یابد، به عبارتی اعمال تنش تراکمی به ساختار سبب کاهش جرم مؤثر حامل‌های بار و تحرک‌پذیری بیش‌تر آن‌ها می‌شود که این امر امکان استفاده از این نانوساختار را در ساخت حسگرهای الکترومکانیکی فراهم می‌کند.

بزرگی بیش‌تر از ۴٪ گاف نواری به شدت کاهش پیدا می‌کند. از طرف دیگر با اعمال تنش همسانگرد درون صفحه‌ای بیش‌تر از ۲٪ به این نیم‌رسانا بیشینه‌ی ترازهای ظرفیت از نقطه‌ی X به M جابه‌جا می‌شود. این در حالی است که تغییر خاصی در مکان بیشینه‌ی ترازهای ظرفیت آن در هنگام اعمال کرنش همسانگرد درون صفحه‌ای دیده نمی‌شود. هم‌چنین با دقت در شکل ساختار نواری مشاهده می‌شود که اعمال تنش و متراکم



شکل ۴. نمودار تغییرات اندازه‌ی گاف نواری برحسب کرنش اعمال‌شده‌ی همسانگرد ۶- تا ۶+٪.

۴. نتیجه‌گیری

مراجع

1. K.S. Novoselov, et al, *Electric field effect in atomically thin carbon films*, Science. **306**, 666 (2004).
2. S. Zhang, et al, *Penta-graphene: A new carbon allotrope*, Proc. Natl. Acad. Sci. **112**, 2372 (2015).
3. S. Cahangirov, et al, *Two- and One-Dimensional Honeycomb Structures of Silicon and Germanium*, Phys. Rev. Lett. **102**, 236804 (2009).
4. M. Wu, et al, *Nine new phosphorene polymorphs with non-honeycomb structures: A much extended family*, Nano lett. **15**, 3557 (2015).
5. S.L. Zhang, et al, *Atomically Thin Arsenene and Antimonene: Semimetal–Semiconductor and Indirect– Direct Band-Gap Transitions*, Angew. Chem. Int. Ed. **54**, 3112 (2015).
6. S.L. Zhang, et al, *Semiconducting Group 15 Monolayers: A Broad Range of Band Gaps and High Carrier Mobilities*, Angew. Chem. Int. Ed. **128**, 1698 (2016).
7. E. Aktürk, O.Ü. Aktürk, S. Ciraci, *Single and bilayer bismuthene: Stability at high temperature and mechanical and electronic properties*, Phys. Rev. B. **94**, 014115 (2016).
8. S. Zhang, et al, *Semiconductor-topological insulator transition of two-dimensional SbAs induced by biaxial tensile strain*, Phys. Rev. B. **93**, 245303 (2016).
9. J. Ji, et al, *Two-dimensional antimonene single crystals grown by van der Waals epitaxy*, Nat. Commun. **7**, 13352 (2016).
10. S. Zhang, et al, *Antimonene Oxides: Emerging Tunable Direct Bandgap Semiconductor and Novel Topological Insulator*, Nano Lett. **17**, 3434 (2017).
11. A. Lopez-Bezanilla, P.B. Littlewood, *σ - π -Band Inversion in a Novel Two-Dimensional Material*, J. Phys. Chem. C. **119**, 19469 (2015).
12. S. Zhang, et al, *Beyond Graphitic Carbon Nitride: Nitrogen-Rich Penta-CN₂ Sheet*, J. Phys. Chem. C. **120**, 3993 (2016).
13. F. Li, et al, *Flexible structural and electronic properties of a pentagonal B₂C monolayer via external strain: a computational investigation*, Phys. Chem. Chem. Phys. **17**, 24151 (2015).
14. M. Naseri, *Arsenic carbide monolayer: First principles prediction*, Appl. Surf. Sci. **423**, 566 (2017).
15. M. Naseri, *First-principles prediction of a novel cadmium disulfide monolayer (penta-CdS₂): Indirect to direct band gap transition by strain engineering*, Chem. Phys. Lett. **685**, 310 (2018).
16. P. Blaha, et al, *An augmented PlaneWave+ Local Orbitals Program for calculating crystal properties revised edition WIEN2k 13.1 (release 06/26/2013)*. Wien2K Users Guide, ISBN 3-95010 31-1-2.
17. J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Generalized Gradient Approximation Made Simple*, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).

با استفاده از محاسبه‌های ابتدا به ساکن و در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی یک ساختار پنج‌گوشی دوبعدی جدید از ترکیب SiGeP_۴ مورد محاسبه و بررسی قرار گرفت. پایداری ساختاری، دینامیکی و گرمایی این نانوساختار با محاسبه‌ی انرژی هبستگی، نمودار پاشندگی فونونی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد ارزیابی قرار گرفت. هم‌چنین در بررسی خاصیت‌های الکتریکی از روش موج‌های تخت تقویت‌شده‌ی خطی (FL-LAPW) در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) استفاده شد. نتیجه‌های محاسبه‌ها نشان داد که:

- ترکیب تک لایه‌ی SiGeP_۴ در فاز پنج‌گوشی از پایداری ساختاری، دینامیکی و گرمایی بسیار خوبی برخوردار است؛
- تک لایه‌ی SiGeP_۴ در فاز پنج‌گوشی یک نیم‌رسانای غیرمستقیم با گاف نواری حدود ۱٫۹۵ eV است؛
- گاف نواری این نانوساختار و متعاقب آن خواص الکتریکی آن با اعمال تنش و کرنش درون صفحه‌ای قابل تنظیم است؛
- اعمال کرنش همسانگرد درون- صفحه‌ای به این ترکیب سبب کاهش گاف انرژی آن با آهنگ‌های متفاوتی در بازه‌های در نظر گرفته شده‌ی تنش کششی و فشاری می‌شود؛
- اعمال تنش درون- صفحه‌ای همسانگرد و متراکم کردن ساختار تک لایه‌ی پیش‌بینی شده موجب جابه‌جایی بیشینه‌ی ترازهای ظرفیت در فضای تکانه و افزایش شیب نمودار ساختار نواری در ترازهای نزدیک به انرژی فرمی می‌شود که این امر سبب کاهش جرم مؤثر حامل‌های بار و تحرک‌پذیری بیش‌تر آن‌ها می‌شود. این امر، استفاده از این نانوساختار را در ساخت حسگرهای الکترومکانیکی فراهم می‌کند.

18. H.J. Monkhorst, J.D. Pack, *Special points for Brillouin-zone integrations*, Phys. Rev. B. **13**, 5188 (1976).
19. P. Giannozzi, et al, *Quantum espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials*, Journal of Physics Condensed Matter. **21**, 395502, (2009).
20. N. Troullier, J.L. Martins, *Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations*, Phys. Rev. B. **43**, 1993 (1991).
21. B. Delley, *From molecules to solids with the DMol3 approach*, The Journal of Chemical Physics. **113**, 7756 (2000).
22. G.J. Martyna, M.L. Klein, M.E. Tuckerman, *Nosé–Hoover chains: The canonical ensemble via continuous dynamics*, J. Chem. Phys. **97**, 2635 (1992).
23. F. Birch, *Equation of state and thermodynamic parameters of NaCl to 300 kbar in the high-temperature domain*, J. Geophys. Res. B. **83**, 1257 (1978).
24. M. Naseri, *Magnesium carbide monolayer: A novel quasi-planar semiconductor*, Superlattices Microstruct. **102**, 134 (2017).