

## بررسی خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی جدیدترین دگرشکل کربنی

سمیرا کاظمی\*، رستم مرادیان

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه رازی، کرمانشاه

دریافت: 1395/11/24 ویرایش نهائی: 1396/06/14 پذیرش: 1396/08/01

### چکیده

در این مقاله، خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی یکی از جدیدترین دگرشکل‌های کربنی بر مبنای نظریه تابعی چگالی (DFT) و با اجرای کد محاسباتی Wien2k بررسی شده است. نتایج ما نشان می‌دهند که این ساختار از نظر الکترونی و مغناطیسی، با داشتن گاف انرژی‌ای در حدود 2/2 الکترون-ولت و گشتاور مغناطیسی کل 0/0013 مگتون بوهر به‌ازای هر سلول یک، تقریباً یک نیم‌رسانای غیر مغناطیسی است. همچنین، از نظر خواص اپتیکی نیز، تغییرات تعدادی از پارامترهای اپتیکی مانند ثابت دی الکتریک، تابع اتلاف انرژی و بازتاب پذیری برحسب تغییرات انرژی مورد مطالعه قرار گرفته است. خواص اپتیکی نشان می‌دهند که اگر این دگرشکل در فناوری پیل خورشیدی مورد استفاده قرار گیرد، بازدهی آن در انرژی‌های پایین، بهتر خواهد بود، چون تابع اتلاف انرژی و بازتاب پذیری آن کمینه خواهد شد.

**کلیدواژگان:** نظریه تابعی چگالی، پنج ضلعی تک لایه، چگالی حالات، ساختار نوار الکترونی، خواص اپتیکی

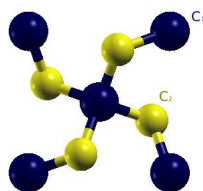
### مقدمه

دانشمندی به نام ایجیما کشف شد [3]، خواص منحصر به فرد این نانوساختارها توجه دانشمندان را به سمت کشف نانوساختارهای بیشتری از کربن معطوف ساخت. در سال‌های اخیر، بحث نانومواد دوبعدی، در تحقیقات نظری و آزمایشگاهی جایگاه ویژه‌ای پیدا کرده است [4-10]، زیرا این گروه از نانوساختارها، دریچه‌ای به سمت کشف مواد نیمه رسانای دو بعدی جهت استفاده در وسایل اپتوالکترونیکی گشوده‌اند. از این رو، مواد دو بعدی مختلفی که دربردارنده طیف گسترده‌ای از خواص غیر عادی هستند، کشف و یا ساخته شدند [11-16]. به‌تازگی نانوساختار جدیدی از کربن معرفی شده است که ساختاری لایه‌ای شبیه به گرافین دارد با این تفاوت که اتم‌های کربن در این نانوساختار جدید، به شکل پنج

کربن عنصری شیمیایی در جدول تناوبی با نشان C و عدد اتمی 6 است [1]. این عنصر غیر فلزی، فراوان، چهارظرفیتی و دارای چندین دگرشکل می‌باشد. تاکنون چهار شکل گوناگون از کربن شناخته شده است: غیر متبلور (آمورف)، گرافیت [2]، الماس و فولرن. کربن میل زیادی به پیوند با اتم‌های کوچک دیگر از جمله اتم‌های دیگر کربن، داشته و اندازه بسیار کوچک آن امکان پیوندهای متعدد را به وجود می‌آورد. این ویژگی باعث شکل‌گیری ده میلیون ترکیبات کربنی شده است. کربن در حوزه فناوری نانو نیز از اهمیت خاصی برخوردار است. از زمانی که نانولوله‌های کربنی در سال 1991 توسط

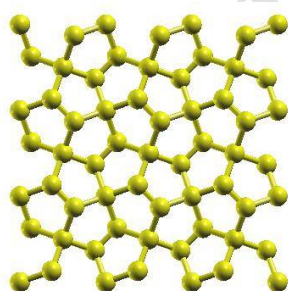
\* نویسنده مسئول: Samirakazemi1234@gmail.com

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.



شکل 1. موقعیت اتم‌های کربن در سلول واحد پنج ضلعی تک لایه.

پس از واهلش این سلول واحد، طول پیوند کربنی  $C_1-C_2$  برابر با  $1/55$  آنگستروم، طول پیوند کربنی  $C_2-C_2$  برابر با  $1/34$  آنگستروم و زاویه  $C_2-C_1-C_2$  معادل با  $134/2$  درجه به دست آمدند که طول پیوندها و زوایای به دست آمده توسط ما با نتایج به دست آمده از محققان دیگر مطابقت دارند [4]. در واقع در ساختار پنج ضلعی تک لایه، یک ردیف از اتم‌های کربنی از نوع  $C_1$  بین دو ردیف از اتم‌های کربنی از نوع  $C_2$  قرار گرفته است و ضخامت جانبی این تک لایه برابر  $1/2$  آنگستروم می‌باشد. طرح‌واره‌ای از ساختار مورد بحث در شکل 2 نشان داده شده است.



شکل 2. ساختار پنج ضلعی تک لایه.

پس از واهلش دستگاه، اتم‌های کربن در یک ردیف قرار ندارند و این خصوصیت می‌تواند مشابه با ساختار سیلیکون [18] باشد (شکل 3).

ضلعی‌هایی کنار هم چیده شده‌اند که لزوماً منتظم نیستند. به این دگرشکل نوین کربنی، پنج ضلعی تک لایه گفته می‌شود [4].

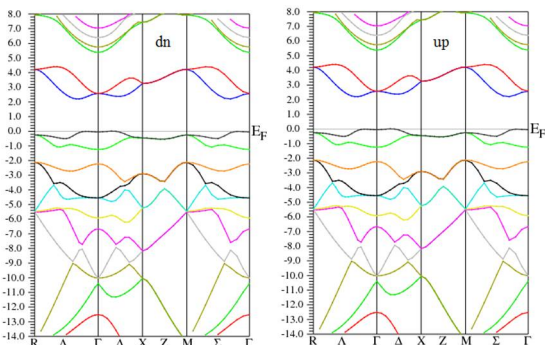
در این مقاله، خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی جدیدترین دگرشکل کربنی با استفاده از اصول اولیه محاسباتی و با به‌کارگیری نظریه تابعی چگالی بررسی شده است.

## مواد و روش‌ها

محاسبات با استفاده از کد محاسباتی Wien2k و بر پایه روش امواج تخت بهبود یافته (پتانسیل کامل) انجام شده است [17]. در این محاسبات شعاع کره‌های مافین-تین ( $R_{MT}$ ) برای اتم‌های کربن در پنج ضلعی تک لایه را معادل  $1/26au$  اختیار کرده‌ایم. پارامتر  $R_{MTK_{MAX}}$  که همگرایی سری پایه را در محاسبات کنترل می‌کند، برابر 7 انتخاب شده است. از تقریب شیب تعمیم یافته ( $GGA$ ) برای پتانسیل تبدلی-همبستگی استفاده شده است. شرط همگرایی برای خاتمه فرایند چرخه حل خود سازگار برای حالتی که بار کل در بین گام‌ها به کمتر از  $e \cdot 10^{-6}$  برسد تنظیم شده است. به منظور بالا بردن دقت محاسبات، طول پیوندها و اندازه زاویا و نیز سلول واحد بهینه شده است. برای انجام محاسبات اپتیکی، تعداد نقاط موجود در ناحیه اول بریلوئن طوری انتخاب شده است که پارامتر  $k$ -point mesh معادل با  $30 \times 30 \times 7$  شود.

## بحث و گفتگو

در پنج ضلعی تک لایه، اتم‌های کربن از نظر هندسی به دو دسته تقسیم می‌شوند که آنها را با  $C_1$  و  $C_2$  نمایش می‌دهند (شکل 1).



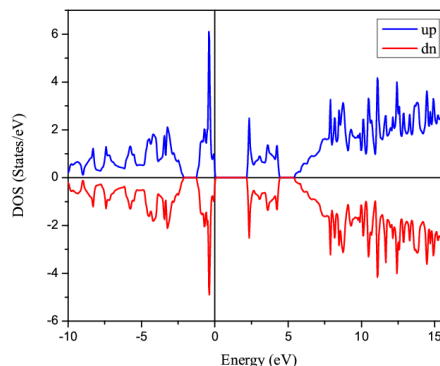
شکل 5. ساختار نوار الکترونی به‌ازای اسپین‌های بالا و پایین پنج ضلعی تک‌لایه.

با دقت در شکل فوق، پیداست که پنج ضلعی تک‌لایه با داشتن گاف انرژی مستقیمی معادل با  $2/2$  الکترون-ولت در امتداد مسیر گاما، در رده نیم‌رساناها دسته‌بندی می‌شود. با توجه به چینش اتم‌های کربن در هر سلول واحد، این نکته دریافت می‌شود که اتم‌های کربنی از نوع  $C_1$  با برقراری چهار پیوند، تمامی الکترون‌های ظرفیت خود را به‌اشتراک گذاشته‌اند اما اتم‌های کربنی از نوع  $C_2$  با به اشتراک گذاشتن سه الکترون ظرفیت خود، هر یک دارای یک الکترون جایگزیده می‌باشند. به‌عبارت دیگر، در هر سلول واحد، چهار الکترون جایگزیده وجود دارد که این الکترون‌ها امکان جهش و برقراری پیوند را ندارند. عامل ایجاد گاف انرژی همین الکترون‌های جایگزیده می‌باشند. همچنین لازم است این نکته متذکر شود که برای به‌دست آوردن مقدار گاف انرژی این ماده، از تقریب شیب تعمیم‌یافته استفاده شده است که در آن فرض می‌شود که الکترون‌ها در داخل گاز الکترونی همگنی قرار دارند و سهم انرژی تبدلی-همبستگی، علاوه بر چگالی الکترونی به‌گرایان آن نیز وابسته است. از آنجا که مقدار گاف انرژی پنج ضلعی تک‌لایه بزرگتر از 2 الکترون-ولت به‌دست آمده است می‌توان این چنین استدلال کرد که حضور گاز الکترونی همگن در فضای بین الکترون‌ها



شکل 3. نگاه جانبی به ساختار پنج ضلعی تک‌لایه.

به‌منظور بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی پنج ضلعی تک‌لایه، با اجرای کد محاسباتی Wien2k منحنی چگالی حالات کل به‌ازای اسپین‌های بالا و پایین، برای این ساختار رسم شده است (شکل 4).



شکل 4. منحنی چگالی حالات کل به‌ازای اسپین‌های بالا و پایین پنج ضلعی تک‌لایه.

با توجه به شکل فوق به‌وضوح پیداست پنج ضلعی تک‌لایه یک نیمه‌رسانا با گافی معادل با  $2/2$  الکترون-ولت می‌باشد. تحلیل بهتر خواص الکترونی این ساختار با رسم منحنی ساختار نوار الکترونی به‌ازای اسپین‌های بالا و پایین امکان پذیر می‌گردد (شکل 5).

موهومی تشکیل شده است. از دیدگاه نظری، قسمت موهومی تابع دی الکترونیک بر طبق فرمول زیر محاسبه می شود [20]:

1

$$\text{Im}[\varepsilon_{\alpha\alpha}(\omega)] = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{i,f} \int \frac{2dk^3}{(2\pi)^3} |\langle ik | p_\alpha | fk \rangle|^2 \times f_i^k (1-f_f^k) \delta(E_f^k - E_i^k - \omega)$$

معادله فوق، سهم گذار بین بانندی را نشان می دهد به گونه ای که  $|ik\rangle$  بردار حالت موقعیت اولیه،  $|fk\rangle$  بردار حالت موقعیت نهایی،  $f_i^k$  تابع توزیع فرمی برای حالات اشغال شده و  $f_f^k$  تابع توزیع فرمی برای حالات اشغال نشده می باشند.

قسمت حقیقی تابع دی الکترونیک نیز، برحسب قسمت موهومی آن و از طریق رابطه کرامرز-کرونینگ محاسبه می شود:

2

$$\text{Re}[\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega)] = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} \text{Pr} \int_0^\infty \frac{\omega' \text{Im}[\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega')]}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

نمودارهای قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکترونیک برحسب انرژی برای ساختار پنج ضلعی تک لایه و با در نظر داشتن جهت میدان الکترونیک عمود بر دستگاه رسم شده اند (شکل 6).

باعث ایجاد یک پتانسیل استتاری شده است که این پتانسیل استتاری شدت برهم کنش های میان الکترون ها (برهم کنش هایی نظیر دافعه کولنی) را کاهش می دهد، زیرا الکترون ها به وضوح اثرات یکدیگر را دریافت نمی کنند. در حقیقت با بیان چنین استدلالی، از تقریب فاز تصادفی (RPA) [19] برای توجیه گاف انرژی نسبتاً بزرگ این ماده بهره گرفته ایم.

عمده ترین تفاوت ساختار پنج ضلعی تک لایه و گرافین در گاف انرژی آنها نهفته است. گرافین با داشتن گاف انرژی صفر الکترون-ولت، شبه فلز بوده اما پنج ضلعی تک لایه با داشتن گاف انرژی 2/2 الکترون-ولت، نیم رسانا محسوب می شود.

نیم رسانا بودن این ماده، مستقیم بودن گاف انرژی آن و نیز مسیر قرارگیری گاف آن با مطالعات انجام شده توسط سایر پژوهشگران تطابق دارد [4].

مجموعه ای از اطلاعات فیزیکی این دستگاه در جدول 1 گزارش شده است.

جدول 1. اطلاعات فیزیکی ساختار پنج ضلعی تک لایه.

گشتاور مغناطیسی کل (مگنتون-بوهر)	انرژی فرمی (الکترون-ولت)	انرژی کل (الکترون-ولت)
0,0013	-0,018	-33,5769

به منظور بررسی خواص اپتیکی ساختار پنج ضلعی تک لایه، وابستگی برخی از کمیت های اپتیکی مانند تابع دی الکترونیک، تابع اتلاف انرژی و بازتاب پذیری به نسبت تغییرات انرژی مورد تحقیق قرار گرفته است.

الف) تابع دی الکترونیک

ثابت دی الکترونیک یک کمیت مختلط است که پاسخ خطی دستگاه نسبت به یک تابش الکترومغناطیس را نشان می دهد. این کمیت مختلط از دو قسمت حقیقی و

بازتاب پذیری در یک تابش معمولی به شکل زیر مطرح می‌شود:

4

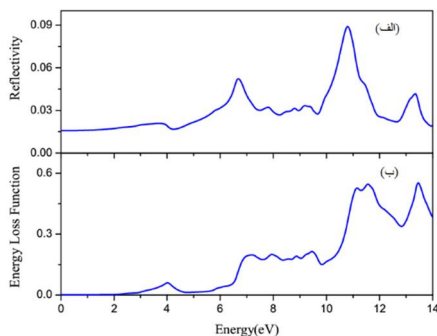
$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}$$

که در فرمول فوق،  $n$  و  $k$  قسمت‌های حقیقی و موهومی ضریب شکست می‌باشند. هر یک از این دو ضریب نیز به نوبه خود برحسب قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک به صورت زیر بیان می‌شوند:

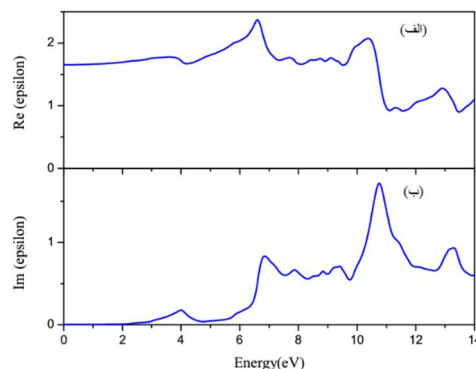
$$n(\omega) = \sqrt{\frac{(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{1/2} + \epsilon_1}{2}} \quad 5$$

$$k(\omega) = \sqrt{\frac{(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{1/2} - \epsilon_1}{2}} \quad 6$$

نمودارهای تابع اتلاف انرژی الکترونی و بازتاب‌پذیری برحسب انرژی برای ساختار پنج‌ضلعی تک‌لایه و با در نظر گرفتن راستای عمودی میدان الکتریکی، در شکل 7 رسم شده‌اند.



شکل 7. الف: نمودار بازتاب پذیری و ب: نمودار اتلاف انرژی برحسب انرژی برای ساختار پنج ضلعی تک لایه.



شکل 6. الف: قسمت حقیقی و ب: قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک برای ساختار پنج ضلعی تک لایه.

با توجه به شکل بالا، مشخص است که مقدار ثابت دی‌الکتریک استاتیکی، یعنی ثابت دی‌الکتریک در انرژی صفر الکترون-ولت، تقریباً معادل با 2/2 می‌باشد. قسمت موهومی این تابع در انرژی‌های اندک معادل با صفر است و تغییرات این کمیت با تغییرات انرژی، نسبت مستقیمی دارد.

ب) تابع اتلاف انرژی الکترونی  
تابع اتلاف انرژی الکترونی (ELF)، انرژی از دست رفته به علت برهم‌کنش الکترون و ماده را توصیف می‌کند. این برهم‌کنش می‌تواند از نوع تحریک فونونی، یونش سطحی و یا تابش چرنکوف باشد.  
از دیدگاه نظری، تابع اتلاف انرژی برحسب قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک به صورت زیر فرمول‌بندی می‌شوند:

3

$$L(\omega) = -\text{Im}\left(\frac{1}{\epsilon(\omega)}\right) = \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)}$$

ج) بازتاب پذیری

مغناطیسی با گاف مستقیم 2/2 الکترون-ولتی در راستای مسیر گاما می‌باشد. از نظر خواص اپتیکی نیز با رسم نمودارهای مربوط به تغییرات تابع دی الکترونیک، اتلاف انرژی و بازتاب پذیری نسبت به انرژی، مشخص شد که اگر این ماده در فناوری پیل خورشیدی مورد استفاده قرار گیرد در انرژی‌های پایین بازدهی خوبی خواهد داشت؛ چون در این طیف انرژی، میزان اتلاف انرژی و بازتاب پذیری دستگاه کمینه است.

مرجع‌ها

- [1] T.A. Saleh, V.K. Gupta, Processing methods, characteristics and adsorption behavior of tire derived carbons: A review, *Advances in Colloid and Interface Science* **211** (2014) 93-101.
- [2] M.A. Rafiee, Graphene-based Composite Materials, Rensselaer Polytechnic Institute, *ProQuest Dissertations Publishing* (2011) 3476260.
- [3] S. Iijima, Helical microtubules of graphitic carbon, *Nature* **354** (1991) 56.
- [4] S. Zhang, J. Zhou, Q. Wang, X. Chen, Y. Kawazoe, P. Jena, Penta-graphene: a new carbon allotrope, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United* **112** (2015) 2372-2377.
- [5] A. Gupta, T. Sakthivel, S. Seal, Recent development in 2D materials beyond graphene, *Progress in Materials Science* **73** (2015) 44-126.
- [6] S.Z. Butler, S.M. Hollen, L. Cao, Y. Cui, J.A. Gupta, H.R. Gutierrez, et al., Progress, challenges, and opportunities in two-dimensional materials beyond graphene, *ACS nano* **7** (2013) 2898-2926.
- [7] J.N. Coleman, M. Lotya, A. O'Neill, S.D. Bergin, P.J. King, U. Khan, Two-

با دقت در شکل‌های الف و ب، پیداست که در انرژی‌های اندک میزان بازتاب پذیری و اتلاف انرژی کم است و تغییرات این توابع با تغییرات انرژی، رابطه مستقیمی دارند.

### نتیجه‌گیری

خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی جدیدترین دگرشکل کربنی (پنج ضلعی تک‌لایه) با به‌کارگیری اصول اولیه محاسباتی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج، نشان دادند که ساختار مورد بحث، یک نیم‌رسانای غیر

dimensional nanosheets produced by liquid exfoliation of layered materials, *Science* **331** (2011) 568-571.

[8] M.J. Allen, V.C. Tung, R.B. Kaner, Honeycomb carbon: a review of graphene, *Chemical Reviews* **110** (2010) 132-145.

[9] R. Mas-Balleste, C. Gomez-Navarro, J. Gomez-Herrero, F. Zamora, 2D materials: to graphene and beyond, *Nanoscale* **3** (2011) 20-30.

[10] Y. Lin, J.W. Connell, Advances in 2D boron nitride nanostructures: nanosheets, nanoribbons, nanomeshes, and hybrids with graphene, *Nanoscale* **4** (2012) 6908-6939.

[11] E. Gibney, 2D or not 2D, *Nature* **522** (2015) 274-276.

[12] M.E. Davila, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, G. Le Lay, Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene, *New Journal of Physics* **16** (2014) 095002.

[13] H. Liu, A. T. Neal, Z. Zhu, Z. Luo, X. Xu, D. Tomanek, et al., Phosphorene: an unexplored 2D semiconductor with a high hole mobility, *ACS nano* **8** (2014) 4033-4041.

- [14] M. Osada, T. Sasaki, Two-dimensional dielectric nanosheets: novel nanoelectronics from nanocrystal building blocks, *Advanced Materials* **24** (2012) 210-228.
- [15] M. Xu, T. Liang, M. Shi, H. Chen, Graphene-like two-dimensional materials, *Chemical Reviews* **113** (2013) 3766-3798.
- [16] M. Yagmurcukardes, H. Sahin, J. Kang, E. Torun, F.M. Peeters, R.T. Senger, Pentagonal monolayer crystals of carbon, boron nitride, and silver azide, *Journal of Applied Physics* **118** (2015) 104303.
- [17] K. Schwarz, P. Blaha, Solid state calculations using WIEN2k, *Computational Materials Science* **28** (2003) 259-273.
- [18] X. Lin, J. Lu, H. Zhu, The stability and electronic properties of a new allotrope of silicene and silicon nanotube, *Superlattices and Microstructures* **101** (2017) 480-487.
- [19] J. Harl, G. Kresse, Cohesive energy curves for noble gas solids calculated by adiabatic connection fluctuation-dissipation theory, *Physical Review B* **77** (2008) 045136.
- [20] C. Ambrosch-Draxla, J.O. Sofo, Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented plane-wave method, *Computer Physics Communications* **175** (2006) 1-14.