

جدیدترین نانوساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه: اصول اولیه محاسباتی

سمیرا کاظمی، رستم مرادیان*

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه رازی، کرمانشاه

دریافت: 1397/04/25 ویرایش نهایی: 1397/11/21 پذیرش: 1397/12/25

چکیده

در این مقاله، خواص الکترونی و اپتیکی سه نمونه از جدیدترین ساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه شامل C_2N_4 و C_2B_4 ، C_4B_2 بر مبنای نظریه تابعی چگالی (DFT) و با اجرای کد محاسباتی Wien2k مورد مطالعه قرار گرفته است. در بخش خواص الکترونی، با رسم ساختار نواری و منحنی‌های چگالی حالت‌های کلی و جزئی، این نتایج حاصل شد که این نانوساختارها از نظر الکترونی، به ترتیب با داشتن گاف انرژی‌ای در حدود 0.2، 1/2 و 3/1 الکترون-ولت در گروه نیم‌رساناها دسته‌بندی می‌شوند. همچنین، در بخش خواص اپتیکی نیز، تعدادی از پارامترهای اپتیکی مانند ثابت دی‌الکتریک، تابع اتلاف انرژی و بازتاب پذیری برای این ترکیبات مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج محاسبات اپتیکی نشان می‌دهند که در قطبش میدان الکترونیکی در راستای x گاف اپتیکی با گاف نواری هم‌خوانی داشته و نیز انرژی پلاسmoni مطابقت بیشتری با مدل الکترون آزاد دارد. همچنین، تعداد مؤثر الکترون‌ها در انرژی حدود 15 الکترون-ولت برای این ترکیبات به ترتیب معادل با 21، 20 و 20 الکترون به دست آمد که در مقایسه با تعداد الکترون‌های آزاد به علت جای‌گزینی تعدادی از آنها کمتر است.

کلیدواژگان: خواص الکترونی، خواص اپتیکی، تابع دی‌الکتریک، بازتاب پذیری، تابع اتلاف انرژی

مقدمه

جدول تناوبی مورد ارزیابی قرار گرفته است [3]. جدیدترین طیف از نانوساختارهای دوبعدی، نانوساختارهای لایه‌ای با سلول واحدهای پنج ضلعی شکل می‌باشند. می‌توان گفت که هندسه خاص این نانوساختارها، آنها را به صدر جدول تحقیقات دهه اخیر منتقل کرده است. تاکنون در چندین کار تحقیقاتی مختلف با روش‌های محاسباتی گوناگون، خواص گرافین پنج ضلعی مورد بررسی قرار گرفته است و در تمامی آنها این نانوساختار در گروه نیم‌رساناها دسته‌بندی شده است [8-4]. همچنین در یک مطالعه دیگر، خواص نانوساختار

پس از ظهور فناوری نانو [1]، واژه نانو مواد وارد ادبیات علمی در جهان شد. بعد از اختراع میکروسکوپ تونل‌زنی روبشی (STM) در سال 1983 [2] مفهوم نانو مواد در دنیای علم و فناوری شکل گرفت. در سال‌های اخیر، در بین انواع مختلف نانو مواد، مبحث نانو مواد دو بعدی زمینه‌ساز تحقیقات متعددی شده است. به عنوان مثال در یک کار پژوهشی که در سال 2017 انجام شده است، پارامترهای تأثیرگذار بر روی سنسورهای گازی ساخته شده از نانوساختارهای دوبعدی گرافین، اکسید گرافین و نیم‌رساناهای لایه‌ای مربوط به گروه‌های سوم و ششم

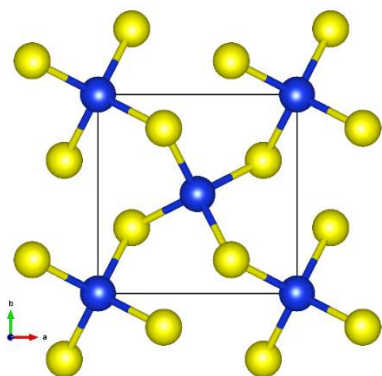
* نویسنده مسئول: r.moradian@razi.ac.ir

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

شده است [15]. اربیتال‌های ظرفیت برای اتم‌های نیتروژن، بورن و کربن ($2s, 2p$) در نظر گرفته شده است. به دلیل یکسان بودن لایه‌های اتمی این ترکیبات، برای جداسازی حالت‌های ظرفیت از حالت‌های مغزه، از مقدار انرژی بهینه شده (-6) ریدبرگ استفاده شده است. علاوه بر این، به علت ساختار اعوجاج یافته و وجود اتم‌ها در صفحات اتمی مختلف در ساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه C_2N_4, C_2B_4, C_4B_2 لازم است که موقعیت این اتم‌ها نسبت به یکدیگر با دقت بسیار بالایی بهینه شود. بهینه‌سازی انجام شده در این تحقیق، در دو بخش پارامترهای شبکه و همچنین کمینه کردن نیروهای بین اتمی توسط نرم افزار Wien2k انجام شده است. برای انجام محاسبات اپتیکی، تعداد نقاط موجود در ناحیه اول بریلوئن معادل با 3000 انتخاب شده است.

بحث و گفتگو

در سلول واحد ساختار پنج ضلعی تک‌لایه کربنی، اتم‌های کربن از نظر هندسی به دو دسته تقسیم می‌شوند که آنها را با نماد C_1 (اتم‌های آبی رنگ) و C_2 (اتم‌های زرد رنگ) نمایش می‌دهند (شکل 1) [4].



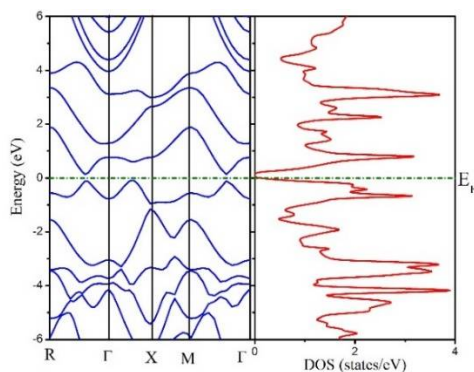
شکل 1. موقعیت اتم‌های کربن در سلول واحد پنج ضلعی تک‌لایه کربنی.

لایه‌ای با هندسه پنج ضلعی نیتريد بور مورد بررسی قرار گرفته و این نتیجه حاصل شده که این ترکیب بر خلاف رفتار نیم رسانایی در هندسه گرافین ماندش، در هندسه پنج ضلعی رفتاری فلزی از خود نشان می‌دهد [9]. اما تاکنون هیچ مطالعه‌ای بر روی نانوساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه C_2N_4 و C_2B_4, C_4B_2 انجام نشده است. در این مقاله، خواص الکترونی و اپتیکی جدیدترین نانوساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه شامل C_2B_4, C_4B_2 و C_2N_4 با استفاده از اصول اولیه محاسباتی و با به کارگیری نظریه تابعی چگالی [10-12] بررسی شده است.

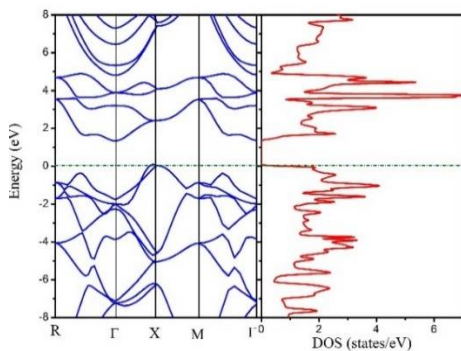
مواد و روش‌ها

محاسبات با اجرای کد محاسباتی Wien2k [13] و بر پایه روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل انجام شده است [14]. در این محاسبات شعاع کره‌های مافین-تین (R_{MT}) برای اتم‌های کربن معادل با $1/32$ au، برای اتم‌های بورن معادل با $1/26$ au و برای اتم‌های نیتروژن معادل با $1/38$ au در نظر گرفته شده است. انتخاب این مقادیر برای شعاع‌های کره‌های مافین-تین به گونه‌ای صورت گرفته است که نه تنها این کره‌ها هم‌پوشانی نداشته باشند، بلکه الکترون‌های مغزه نیز بیرون از این کره‌ها قرار نگیرند به عبارت دیگر نشت بار رخ ندهد. ثابت‌های شبکه‌ای مورد استفاده در این تحقیق برابر با $a=b=3/64$ و $c=15$ آنگستروم می‌باشند. در محاسبات انجام شده، همگرایی بر مبنای بار تنظیم شده است که برای هر سه ترکیب پس از طی 20 چرخه و با دقت 10^{-6} e همگرایی حاصل شده است. پارامتر $R_{MT} \times K_{MA}$ که همگرایی سری پایه را در محاسبات کنترل می‌کند، برابر 7 انتخاب شده است. از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) برای پتانسیل تبادلی-همبستگی استفاده

وجود و همچنین تعیین نوع گاف از لحاظ مستقیم یا غیر مستقیم بودن کسب کرد. از سوی دیگر با استفاده از منحنی چگالی حالت‌های کلی می‌توان توزیع الکترونی در طیف انرژی را مشاهده نمود. از این جهت، به منظور بررسی خواص الکترونی ساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه C_2B_2 ، C_4B_2 و C_2N_4 منحنی چگالی حالت‌های کل و ساختار نوار الکترونی، برای این نانوساختارها رسم شده است (شکل‌های 3، 4 و 5).

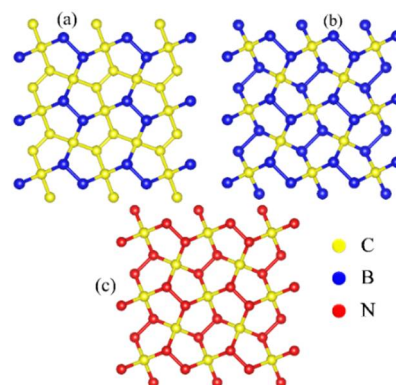


شکل 3. منحنی چگالی حالت‌های کل و ساختار نوار الکترونی برای نانوساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_4B_2 .



شکل 4. منحنی چگالی حالت‌های کل و ساختار نوار الکترونی برای نانوساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_2B_4 .

در نانوساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه C_4B_2 ، C_2B_4 و C_2N_4 تقارن هندسی دقیقاً مشابه با ساختار پنج ضلعی تک‌لایه کربنی است تنها با این تفاوت که در هریک از نانوساختارهای مورد بحث، دو و یا چهار اتم کربنی از نوع C_2 با اتمی از جنس بورن و یا نیتروژن جایگزین شده است. در این تحقیق، جهت بررسی خواص ترکیبات مورد بحث، از سلول واحد شش اتمی استفاده شده است و نیازی به در نظر گرفتن ابر سلول نیست زیرا ساختارهای مورد نظر با در نظر گرفتن سلول واحدهایی با این تعداد اتم‌ها، در راستای X - Y تناوبی خواهند بود. مقدار خلأ مورد نیاز در محاسبات معادل با 15 آنگستروم در نظر گرفته شده است و در انتخاب این مقدار به این نکته توجه شده است که تصویر ساختار مورد نظر در سلول واحدهای مجاور در راستای غیر تناوبی (راستای Z) با سلول واحد اصلی، برهم‌کنش نداشته باشد و بتوان ساختار را تک‌لایه در نظر گرفت. در حقیقت با این مقدار خلأ برهم‌کنش بین لایه‌ای رخ نمی‌دهد. طرح‌واره‌ای از نانوساختارهای نامبرده در شکل 2 نشان داده شده است.



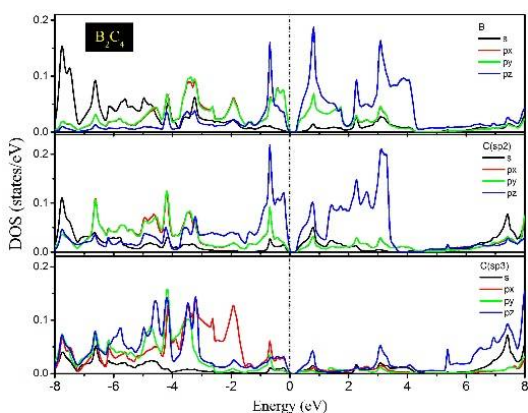
شکل 2. نانوساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه (الف) C_4B_2 (ب) C_2B_4 و (ج) C_2N_4 .

از یک سو با استفاده از ساختار نوار الکترونی می‌توان اطلاعات مفیدی در مورد ماهیت ساختار مورد بررسی از لحاظ فلزی یا غیر فلز بودن، مقدار گاف انرژی در صورت

الکترونی متفاوتی هستند در نتیجه زمانی که با اتم کربن پیوند می‌دهند، ترازهای انرژی متفاوتی ایجاد خواهند کرد که سطح انرژی آنها با یکدیگر متفاوت خواهد بود. این تفاوت منجر به تغییرات گاف انرژی در ترکیبات مورد بحث نسبت به یکدیگر خواهد شد.

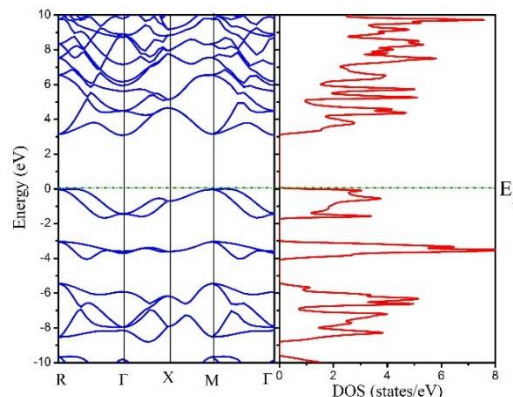
از آنجا که تاکنون هیچ مطالعه‌ای اعم از محاسبات نظری و یا کارهای آزمایشگاهی بر روی ترکیبات مورد بحث، انجام نشده است نمی‌توان مقایسه‌ای بین داده‌های این تحقیق و کارهای دیگران انجام داد اما مطابقت ساختارهای نوار الکترونی این ترکیبات با منحنی‌های چگالی حالت‌های کلی آنها می‌تواند دلیلی بر صحت محاسبات انجام شده باشد.

به‌منظور تحلیل بهتر نحوه توزیع مشارکت اربیتال‌های مختلف در خواص الکترونی نانو ساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه C_2N_4 و C_2B_4 ، C_4B_2 می‌توان منحنی‌های چگالی حالت‌های جزئی را برای این ترکیبات رسم نمود (شکل‌های 6، 7 و 8).



شکل 6. منحنی چگالی حالت‌های جزئی برای نانو ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_4B_2 .

با توجه به شکل 6، هم در بین اربیتال‌های اتم بورن و هم در بین اربیتال‌های اتم‌های کربنی ساختار پنج ضلعی

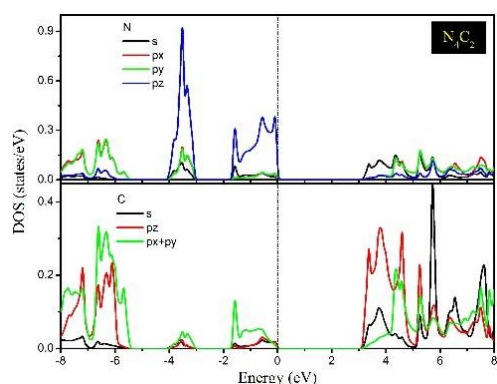


شکل 5. منحنی چگالی حالت‌های کل و ساختار نوار الکترونی برای نانو ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_2N_4 .

در ساختارهای نوار الکترونی رسم شده، انرژی فرمی به‌عنوان مبدأ انتخاب شده و مقیاس انرژی برحسب الکترون-ولت می‌باشد. در منحنی‌های چگالی حالت‌های کل رسم شده، انرژی صفر الکترون-ولت نشان دهنده تراز فرمی است که با خط عمود نشان داده شده است.

با دقت در شکل‌های 3، 4 و 5 مشخص می‌شود که هر سه نانو ساختار مورد بحث در گروه نیم‌رساناها دسته بندی می‌شوند اما مقادیر گاف انرژی آنها با هم متفاوت می‌باشند. ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_4B_2 نیم‌رسانایی با گاف انرژی مستقیمی در نقطه Σ معادل با $0/2$ الکترون-ولت می‌باشد. به‌همین ترتیب، ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_2B_4 نیم‌رسانایی با گاف انرژی غیر مستقیمی معادل با $1/2$ الکترون-ولت در راستای مسیر $X \rightarrow \Gamma$ می‌باشد. سرانجام، ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_2N_4 نیم‌رسانایی با گاف انرژی مستقیمی معادل با $3/1$ الکترون-ولت در نقطه M می‌باشد. تغییرات گاف انرژی در ترکیبات مذکور، به‌تغییر در موقعیت اتم‌ها و جابه‌جایی ترازهای انرژی یا به‌بیان دیگر به‌تغییر در نوع هیبریداسیون این ترکیبات برمی‌گردد. اتم‌های بورن و نیتروژن دارای آرایش

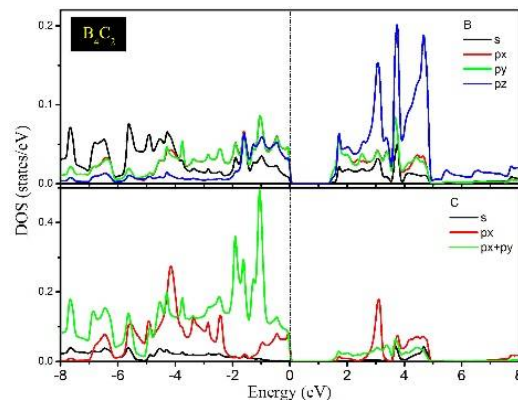
اربیتال $P_x + P_y$ است و بیشترین میزان مشارکت این اربیتال در نزدیکی سطح فرمی و در نوار ظرفیت رخ می‌دهد و بلندترین قله آن دارای انرژی 1/1 الکترون-ولت می‌باشد. از این رو می‌توان استنباط کرد که در پیوند کربن-بورن این نانوساختار، اتم‌های کربنی دارای الکترون‌های جای‌گزیده هستند که امکان جهش به همسایه بعدی را ندارند و گاف انرژی را به وجود می‌آورند.



شکل 8. منحنی چگالی حالت‌های جزئی برای نانوساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_2N_4 .

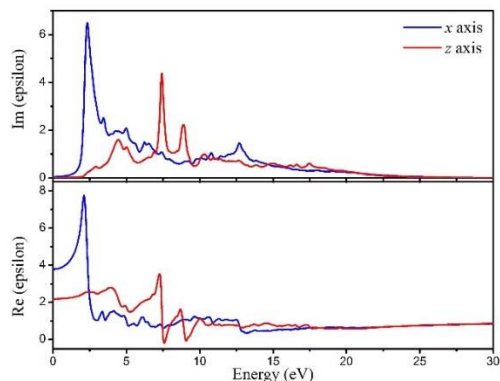
با توجه به شکل 8 برای ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_2N_4 در اتم نیتروژن، مشارکت عمده از آن اربیتال Pz است به طوری که بیشترین میزان مشارکت این اربیتال در نوار ظرفیت می‌باشد و بلندترین قله این اربیتال به طور تقریبی در اطراف انرژی 3/5 الکترون-ولت رخ می‌دهد. در اتم کربن نیز سهم عمده مشارکت از آن اربیتال s است و بیشترین میزان مشارکت این اربیتال در نزدیکی گاف انرژی و در نوار رسانش رخ می‌دهد و بلندترین قله آن دارای انرژی 6 الکترون-ولت می‌باشد. بنابراین در پیوند کربن-نیتروژن این نانوساختار، اتم‌های نیتروژن دارای الکترون‌های جای‌گزیده بوده و گاف انرژی را ایجاد می‌نمایند.

تک‌لایه C_4B_2 ، اربیتال Pz سهم مشارکت بالاتری نسبت به سایر اربیتال‌ها داراست. اربیتال Pz اتم بورن مشارکت چشم‌گیری در حوالی سطح فرمی داشته و بلندترین قله آن دارای انرژی تقریبی 0/7 الکترون-ولت می‌باشد. اربیتال Pz اتم کربن در موقعیت هندسی C_2 نیز دارای مشارکت عمده‌ای در نزدیکی تراز فرمی است و بلندترین قله آن در بالای نوار ظرفیت بوده و دارای انرژی 1 الکترون-ولت می‌باشد در حالی که اربیتال Pz اتم کربن در موقعیت هندسی C_1 بیشترین مشارکت را در سطوح پایینی نوار ظرفیت و نیز سطوح بالایی نوار رسانش دارد. با این توضیحات می‌توان این چنین نتیجه گرفت که در پیوند بین بورن و اتم‌های کربنی از نوع C_2 ، برای اتم‌های کربن الکترون‌های جای‌گزیده ایجاد می‌گردد که منشأ ایجاد گاف انرژی نیز همین امر می‌باشد.

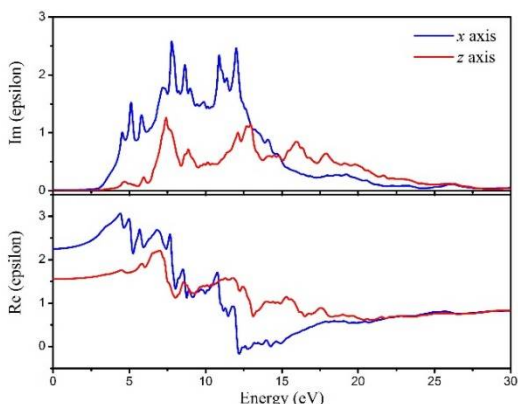


شکل 7. منحنی چگالی حالت‌های جزئی برای نانوساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_2B_4 .

با توجه به شکل 7 برای ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_2B_4 در اتم بورن، مشارکت عمده از آن اربیتال Pz است به طوری که بیشترین میزان مشارکت این اربیتال نزدیک به گاف انرژی و در نوار رسانش می‌باشد و بلندترین قله این اربیتال به طور تقریبی در اطراف انرژی 3/5 الکترون-ولت رخ می‌دهد. در اتم کربن نیز سهم عمده مشارکت از آن



شکل 10. سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک برای ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_2B_4 .



شکل 11. سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک برای ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_2N_4 .

در شکل‌های بالا، خطوط آبی و قرمز رنگ به ترتیب معرف راستای قطبش‌پذیری موازی با محور Zها و Xها می‌باشند. به‌وضوح پیداست که با تغییر جهت قطبش‌پذیری، محل قله‌های سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک تغییر پیدا می‌کند. به‌عبارت دیگر، جهت میدان الکتریکی اعمال شده روی این نانوساختارها، روی تغییرات تابع دی‌الکتریک اثر گذار است.

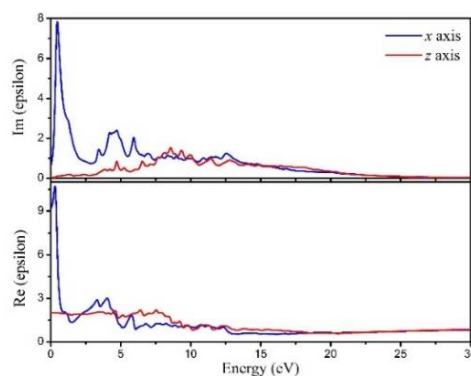
مقادیر تابع دی‌الکتریک استاتیکی یعنی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر الکترون-ولت برای نانوساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه C_2N_4 و C_2B_4 ، C_4B_2 با در نظر داشتن

جدول 1. طول پیوندهای پس از واهلش برحسب آنگستروم برای نانوساختارهای شبه‌گرافین پنج ضلعی C_2N_4 و C_2B_4 ، C_4B_2 .

پیوند	کربن-کربن	کربن-بورن	بورن-بورن	کربن-نیتروژن	نیتروژن-نیتروژن
C_4B_2	1,531	1,532	1,578	-	-
C_2B_4	-	1,516	1,685	-	-
C_2N_4	-	-	-	1,499	1,557

علاوه بر خواص الکتریکی نانوساختارهای مورد بررسی، چندی از خواص اپتیکی آنها همچون سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، بازتاب‌پذیری اپتیکی و تابع اتلاف انرژی نیز مورد مطالعه قرار گرفته است.

نمودار تغییرات سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک برحسب انرژی برای نانوساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه C_2N_4 و C_2B_4 ، C_4B_2 در شکل‌های 9، 10 و 11 رسم شده است. جهت میدان الکتریکی اعمالی در دو راستای موازی و عمود بر صفحه نانوساختارها در نظر گرفته شده است.



شکل 9. سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک برای ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_4B_2 .

$$E_p = \hbar \sqrt{\frac{n_e e^2}{m \epsilon_0}} \quad 2$$

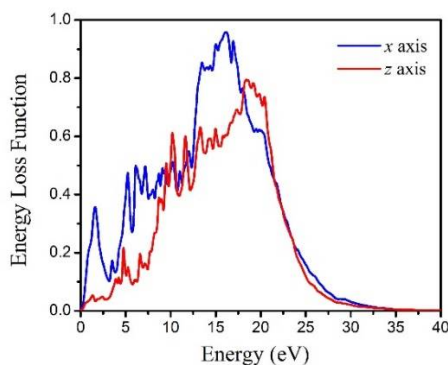
که n_e تعداد الکترون‌های ظرفیت در واحد حجم، e بار الکترون، m جرم الکترون، ϵ_0 ثابت گذردهی خلأ و \hbar ثابت دیراک است.

تابع دی‌الکتریک در اتلاف انرژی یک ذره باردار که به‌داخل یک جسم جامد نفوذ می‌کند به‌صورت $\text{Im}\left\{\frac{1}{\epsilon(\omega)}\right\}$ وارد می‌شود و از رابطه 4 به‌دست می‌آید [17]:

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_1 + i \epsilon_2 \quad 3$$

$$L_{ij} = \text{Im} \left[-\frac{1}{\epsilon_{ij}(\omega)} \right] = \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \quad 4$$

طیف اتلاف انرژی برای نانوساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه C_4B_2 ، C_2B_4 و C_2N_4 در شکل‌های 12، 13 و 14 رسم شده است. جهت میدان الکتریکی اعمالی در دو راستای موازی و عمود بر صفحه نانوساختارها در نظر گرفته شده است.



شکل 12. نمودار تغییرات تابع اتلاف انرژی برحسب انرژی برای ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_4B_2 .

قطبش‌های موازی و عمود بر صفحه این نانوساختارها در جدول 2 گزارش شده است.

اگر سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک به‌ترتیب با ϵ_1 و ϵ_2 نام‌گذاری شوند، می‌توان ضریب شکست اپتیکی را برحسب این سهم‌ها با استفاده از رابطه زیر به‌دست آورد [16]:

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

با توجه به‌مقادیر ثابت دی‌الکتریک ذکر شده در جدول 2 و با در نظر داشتن رابطه 1، ضریب شکست استاتیک (ضریب شکست در انرژی صفر الکترون-ولت) برای ترکیبات مورد بحث با در نظر داشتن قطبش‌های موازی و عمود بر صفحه این نانوساختارها محاسبه و در جدول 2 گزارش شده است.

جدول 2. مقادیر ثابت دی‌الکتریک و ضریب شکست استاتیک برای نانوساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه C_4B_2 ، C_2B_4 و C_2N_4 .

	C_4B_2	C_2B_4	C_2N_4
ϵ_{0z}	1,80	2,20	1,60
ϵ_{0x}	9,10	4,10	2,40
n_{0z}	1,34	1,44	1,26
n_{0x}	3,01	1,97	1,48

از آنجا که تابع اتلاف انرژی الکترون، در بردارنده تحریک دسته جمعی الکترون‌های ظرفیت (پلاسمون) به‌داخل حالات اشغال شده در نوار رسانش می‌باشد می‌توان با تجزیه و تحلیل نمودار این تابع به‌انرژی پلاسمون‌ها دست یافت. به‌گونه‌ای که بلندترین قله در تابع اتلاف، پیک پلاسمونی نام دارد. در مدل الکترون آزاد می‌توان انرژی پلاسمون را به‌صورت زیر فرمول بندی کرد:

جدول 3. مقادیر انرژی پلاسمون (برحسب الکترون-ولت) برای نانوساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه C_2N_4 ، C_2B_4 ، C_4B_2 .

	مدل الکترون آزاد	محاسبات در راستای x	محاسبات در راستای z
C_4B_2	15,92	16	18
C_2B_4	8,70	9	14
C_2N_4	14,96	15	13

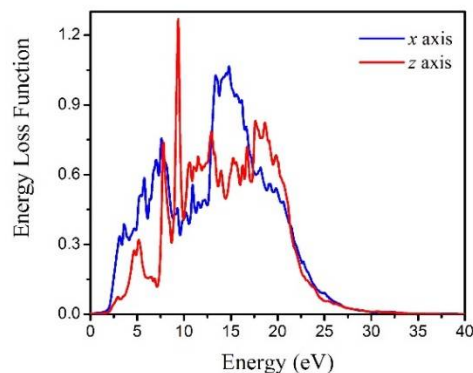
با توجه به جدول فوق، محاسبات در راستای قطبشی موازی همخوانی بیشتری با مدل الکترون آزاد دارد.

می‌توان تعداد الکترون‌های مؤثر شرکت کننده در فرآیند انتقال بین نواری را برحسب قسمت موهومی تابع (اتلاف) دی الکترونیک محاسبه نمود [16]:

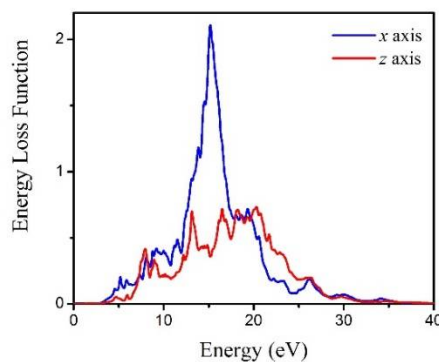
$$n_{eff}(\omega) = \int_0^{\infty} \text{Im} \left[-\frac{1}{\epsilon_{ij}(\omega')} \right] \omega' d\omega' \quad 5$$

بر طبق رابطه فوق، به‌ازای انرژی‌های پایین‌تر از گاف، تعداد الکترون‌های مؤثر برای هر سه ترکیب صفر است و با افزایش انرژی فوتون‌ها، الکترون‌ها قادر به عبور از گاف انرژی خواهند بود و در انرژی حدود 15 eV به‌حالت اشباع خود می‌رسند. همچنین تعداد الکترون‌های مؤثر که در فرآیند انتقال بین نواری شرکت می‌کنند به‌ترتیب برای نانوساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه C_4B_2 ، C_2B_4 و C_2N_4 برابر با 21، 20 و 20 به‌دست آمد که در مقایسه با تعداد الکترون‌های آزاد کمتر است و این امر حاکی از جایگزیدگی برخی از الکترون‌هاست.

در ادامه، نمودار تغییرات بازتاب پذیری اپتیکی برحسب انرژی برای نانوساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه C_4B_2 ، C_2B_4 و C_2N_4 در شکل‌های 15، 16 و 17 رسم شده است. جهت میدان الکترونیکی اعمالی در دو راستای موازی و عمود بر صفحه نانوساختارها در نظر گرفته شده است.



شکل 13. نمودار تغییرات تابع اتلاف انرژی برحسب انرژی برای ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_2B_4 .



شکل 14. نمودار تغییرات تابع اتلاف انرژی برحسب انرژی برای ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_2N_4 .

بر طبق شکل‌های 12، 13 و 14، اتلاف انرژی برای این ترکیبات از انتهای گاف انرژی آغاز می‌شود و در انرژی‌های بالاتر از 30 الکترون-ولت میزان اتلاف انرژی به‌سمت صفر میل می‌کند. پیک‌های پلاسمونی برای هر سه ترکیب در دو راستای قطبشی x و z در جدول 3 گزارش شده است و با مقادیر انرژی پلاسمون در مدل الکترون آزاد مقایسه شده است.

دهنده‌های خوبی هستند. همچنین، در حوالی انرژی 12 الکترون-ولت، ساختار C_2N_4 پنج ضلعی، یک بازتاب دهنده عالی محسوب می‌شود.

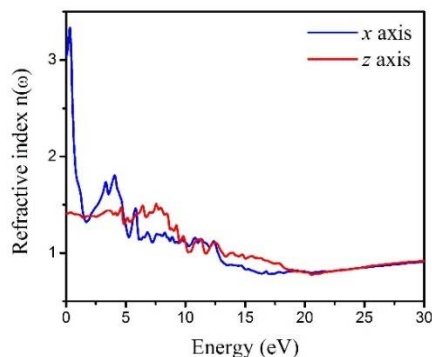
نتیجه‌گیری

محاسبه خواص الکترونی و اپتیکی جدیدترین نانو ساختارهای پنج ضلعی تک‌لایه شامل C_4B_2 ، C_2B_4 و C_2N_4 با به‌کارگیری اصول اولیه محاسباتی انجام شد. نتایج نشان دادند که ساختارهای مورد بحث، به ترتیب نیم‌رساناهایی با گاف نواری 0/2، 1/2 و 3/1 الکترون-ولت می‌باشند و چگالی حالت‌های کلی نیز تأیید کننده این ساختار نواری بود اما از آنجا که هیچ کار نظری و تجربی دیگری روی این ترکیبات انجام نشده است امکان مقایسه داده‌ها وجود نداشت ولی می‌توان گفت که سازگاری با مفاهیم پایه وجود دارد. در محاسبات اپتیکی نیز با رسم نمودارهای مربوط به تغییرات تابع دی‌الکتریک، تابع اتلاف انرژی و بازتاب پذیری اپتیکی نسبت به انرژی، مشخص شد که در قطبش میدان الکتریکی در راستای x گاف اپتیکی با گاف نواری مطابقت داشته و نیز انرژی پلاسمونی در این راستا سازگاری بیشتری با مدل الکترون آزاد دارد. همچنین تعداد الکترون‌های مؤثر برای این ترکیبات در انرژی 15 eV به ترتیب معادل با 21، 20 و 20 الکترون به دست آمد که به نسبت تعداد الکترون‌های آزاد به علت جایگزیدگی برخی از الکترون‌ها کمتر است.

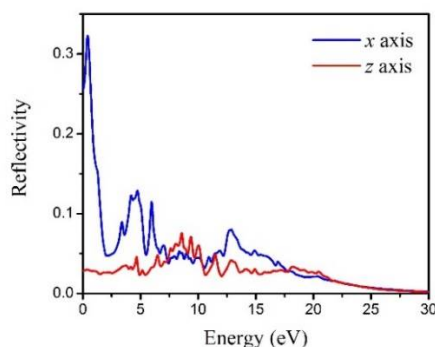
مرجع‌ها

[1] S. Iijima, Helical microtubules of graphitic carbon, Nature 354 (1991) 56-58.

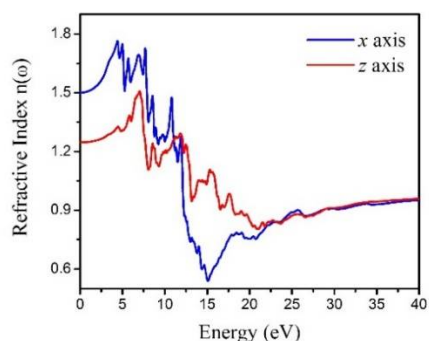
[2] Y. Kuk, P.J. Silverman, Scanning tunneling microscope instrumentation, Rev Sci Instrum 60 (1989) 165-180.



شکل 15. نمودار تغییرات بازتاب پذیری اپتیکی برحسب انرژی برای ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_4B_2 .



شکل 16. نمودار تغییرات بازتاب پذیری اپتیکی برحسب انرژی برای ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_2B_4 .



شکل 17. نمودار تغییرات بازتاب پذیری اپتیکی برحسب انرژی برای ساختار پنج ضلعی تک‌لایه C_2N_4 .

با دقت در شکل‌های فوق، به‌خوبی مشخص می‌شود که در انرژی‌های اندک، دو ساختار C_4B_2 و C_2B_4 بازتاب

- [12] K. Berland, V.R. Cooper, K. Lee, E. Schröder, T. Thonhauser, P. Hyldgaard, B. I. Lundqvist, van der Waals forces in density functional theory: a review of the vdW-DF method, *Reports on Progress in Physics* 78 (2015) 1-41.
- [13] N. Mehmood, R. Ahmad, Structural, Electronic, Magnetic, and Optical Properties of Half-Heusler Alloys RuMnZ (Z = P, As): a First-Principle Study, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* 31 1 (2018) 233-239.
- [14] S. Maintz, V.L. Deringer, A.L. Tchougréeff, R. Dronskowski, Analytic projection from plane-wave and PAW wavefunctions and application to chemical-bonding analysis in solids, *Journal of Computational Chemistry* 34 29 (2013) 2557-2567.
- [15] A. Djefal, S. Amari, K.O. Obodo, L. Beldi, H. Bendaoud, First-principles prediction of insulating antiferromagnet in ordered double-perovskite $\text{Ca}_2\text{MnMoO}_6$ compound, *International Journal of Computational Materials Science and Surface Engineering* 06 (2017) 1-14.
- [16] 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.
- [17] F. Wang, Y. Zhang, Ch. Tian, C. Girit, A. Zettl, Gate-Variable Optical Transitions in Graphene, *Science* 320 (5873) (2008) 206-209.
- [3] Sh. Yang, Ch. Jiang, S. Wei, Gas sensing in 2D materials, *Applied Physics Reviews* 4 (2017) 1-34.
- [4] S. Kazemi, R. Moradian, Investigation of the electronic, magnetic and optical properties of newest carbon allotrope, *Phys. C.* 548 (2018)126-128.
- [5] W. Xu, G. Zhang, B. Li, Thermal conductivity of penta-graphene from molecular dynamics study, *Journal of Chemical Physics* 143 (15) (2015) 1-6.
- [6] X. Li, Sh. Zhang, F.Q. Wang, Y. Guo, J. Liu, Q. Wang, Tuning the electronic and mechanical properties of penta-graphene via hydrogenation and fluorination, *Physical Chemistry Chemical Physics* 18 (2016)14191-14197.
- [7] H. Einollahzadeh, R.S. Dariani, S.M. Fazeli, Computing the band structure and energy gap of penta-graphene by using DFT and G0W0 approximation, *Solid State Communications* 229 (2016) 1-4.
- [8] B. Rajbanshi, S. Sarkar, B. Mandal, P. Sarkar, Energetic and electronic structure of penta-graphene nanoribbons, *Carbon* 100 (2016) 118-125.
- [9] 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 (10) (2015) 1-6.
- [10] M.G. Medvedev, I.S. Bushmarinov, J. Sun, J.P. Perdew, K.A. Lyssenko, Density functional theory is straying from the path toward the exact functional, *Science* 355 6320 (2017) 49-52.
- [11] R. O. Jones, Density functional theory: Its origins, rise to prominence, and future, *Reviews of Modern Physics* 87 (2015) 897-923.