

# Screening effects of coulomb interactions of $C_3N$ compounds

Masoud Amiri\*, Hanif Hadipour

Department of Physics, University of Guilan, Rasht, Iran

Received: 18.08.2019 Final revised: 01.05.2020 Accepted: 21.09.2020

Doi link: [10.22055/JRMBS.2020.15924](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2020.15924)

## Abstract

In this paper we investigate the screening effects of coulomb interaction in monolayer and bilayer  $C_3N$  and  $C_3NH_3$  samples based on the random-phase approximation and compared with graphene and hydrogenated graphene. We calculate partially (U) and fully (W) screened, and also bare (V) interaction parameters for these compounds. In the system with more electrical conductivity the effects of the screening are greater and the parameters U and W are further reduced. In monolayer  $C_3N$ , interaction parameters are similar to those of graphene. The fully hydrogenated  $C_3N$  is also a relatively large gap in the chair-type and boat-type, and the values of interaction parameters are greater than the monolayer  $C_3N$  and hydrogenated graphene values. In the bilayer  $C_3N$  with metallic behavior, there's a large screening that makes it a correlated system.

**Keywords:** Energy gap, Screening effects, Coulomb Interaction, Random phase approximation



## اثرات استتاری اندرکنش‌های کولنی ترکیبات $C_3N$

مسعود امیری\*، حنیف هادی‌پور

گروه فیزیک، دانشکده فیزیک دانشگاه گیلان، گیلان، ایران

دریافت: 1398/05/27 ویرایش نهایی: 1399/02/12 پذیرش: 1399/06/31

Doi link: [10.22055/JRMBS.2020.15924](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2020.15924)

### چکیده

در این مقاله اثرات استتاری نیروی کولنی در نمونه‌های تک‌لایه و دولایه  $C_3N$  و  $C_3NH_3$  را بر اساس تقریب فاز تصادفی بررسی و با گرافن و گرافن هیدروژنه مقایسه می‌کنیم. ما پارامتر اندرکنش کولنی جزئی استتار شده ( $U$ )، کامل استتار شده ( $W$ ) و پارامتر اندرکنش کولنی بدون استتار ( $V$ ) را برای این ترکیبات محاسبه می‌کنیم. در سیستم با هدایت الکتریکی بیشتر، اثرات پوششی بیشتر بوده و پارامترهای  $U$  و  $W$  بیشتر کاهش می‌یابد. در  $C_3N$  تک‌لایه پارامترهای اندرکنشی مشابه گرافن شاهد هستیم. برای  $C_3N$  هیدروژنه شده که در دو ساختار صندلی و قایق یک نیم‌رسانا با گاف نسبتاً بزرگ است، مقادیر پارامترهای اندرکنشی به دست آمده بیشتر از مقادیر  $C_3N$  و گرافن هیدروژنه بود. اما در  $C_3N$  دولایه با توجه به رفتار فلزی آن، استتار اندرکنش‌های کولنی را شاهد هستیم که آن را تبدیل به یک سیستم همبسته می‌کند.

**کلیدواژگان:** گاف انرژی، اثرات استتاری، تقریب فاز تصادفی، اندرکنش کولنی

### مقدمه

زیادی برای گسترش خانواده گرافن ساخته شده از عناصر دیگر انجام گیرد. یک روش تغییر در ساختار گرافن، جایگزینی اتم‌های کربن با اتم‌های نیتروژن است. در سال 2015 یک ماده جدید به نام  $C_3N$  به صورت 2 و 3 بعدی ساخته شد [4]. اگرچه شباهت زیادی بین صفحات  $C_3N$  و گرافن وجود دارد، اما وجود اتم‌های نیتروژن باعث بروز تفاوت‌های برجسته در خواص الکترونیکی آن می‌شود [5].  $C_3N$  پایدارترین ساختار در بین ترکیبات  $C_xN$  است [6].  $C_3N$  به دلیل ویژگی‌های حرارتی، مکانیکی، اپتیکی و

در سال‌های اخیر پس از ساخت گرافن مطالعات زیادی روی ترکیبات کربنی انجام شده است [1,2]. این ساختار به دلیل ویژگی‌های خاص خود کاربرد زیادی در صنایع مختلف پیدا کرده است. گرافن با وجود نازک بودن، به علت نیروی بسیار زیاد پیوندهای کووالانسی، بسیار مقاوم و مستحکم بوده و رسانایی آن بسیار زیاد است. اما این مطالعات برای برنامه‌های کاربردی خاص با چالش‌ها و مسائلی (عمدتاً ناشی از طبیعت بدون گاف انرژی) روبرو شد [3]. این محدودیت‌های گرافن در کاربردهای عملی، سبب شد تلاش‌های

\* نویسنده مسئول: Mt.amiri90@gmail.com



محاسبه  $U$  در سال‌های اخیر پیشنهاد شد [13]. پارامتر  $U$  به اثرات استتاری الکترون‌های درونی مربوط است. بزرگی اندرکنش‌های کولنی بلند برد  $U(r)$  نیز نقشی بسیار مهم در تعیین شدت همبستگی الکترونی و طبقه‌بندی مواد دارد [14-15].

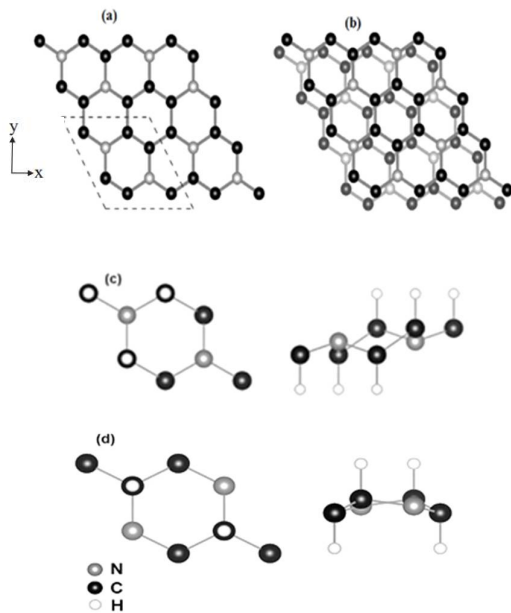
در مقالات گذشته اثرات استتاری اندرکنش‌های کولنی در نانونوارهای گرافنی و ارتباط آن با پهنای نانونوار [10]، پارامترهای اندرکنشی گرافن هیدروژنه و ارتباط آن با ویژگی‌های مغناطیسی [11]، همچنین اثرات استتاری در گرافن شامل تهی‌جای و ویژگی‌های مغناطیسی آن را بررسی کردیم [12]. در نانونوار گرافنی با لبه دسته‌صندلی اثرات محدودیت کوانتومی منجر به رفتار نوسانی پارامترهای اندرکنش کولنی موضعی با پهنای نوار شد. همچنین کاهش ابعاد و وجود گاف کوچک منجر به استتار اندرکنش‌ها در فواصل کوچک، و رفتار ضد استتاری در فواصل میانه و اندرکنش کولنی ساده در فواصل دورتر شد. در نانونوار گرافنی با لبه زیگزاگ حضور حالت‌های لبه به شدت بر اندرکنش‌ها تأثیر گذاشت که موجب کاهش شدید پارامتر  $U$  هابارد شد و بخش غیرموضعی اندرکنش‌ها توسط حالت‌های لبه‌ای استتار شد و این موضوع نانونوار گرافن با لبه زیگزاگ را تبدیل به ماده همبسته می‌کند. در گرافن هیدروژنه پارامترهای اندرکنشی را کمتر از گرافن محاسبه کردیم. این پارامترها به شدت به تعداد اتم‌های هیدروژن و جایگاه اتم‌های هیدروژن جذب‌شده در شبکه گرافن بستگی دارد. همچنین جایگاه متفاوت هیدروژن به رفتار متفاوت مغناطیسی در این ماده منتج می‌شود.

الکترونیکی نه تنها نقش مهمی در ساخت نانواپزارها دارد بلکه می‌تواند در کاربردهای جدید دیگری هم استفاده شود [7]. رسانندگی گرمایی صفحات  $C_3N$  نسبت به گرافن کمتر است که آن را گزینه خوبی برای کاربردهای ترموالکتریکی می‌سازد [8]. گافی به اندازه  $0.39\text{eV}$  در نمودار چگالی حالات  $C_3N$  تک‌لایه مشاهده شد که هرگز در مواد 2 بعدی بر پایه کربن وجود نداشته‌است و این خبر خوبی برای رفع مشکل طبیعت بدون گاف گرافن بود که نشانگر نقش مهم نیتروژن می‌باشد.

روش دیگر، جذب هیدروژن روی  $C_3N$  تک‌لایه می‌باشد که در آن هر اتم کربن به یک اتم هیدروژن با فرمول  $C_3NH_3$  متصل می‌شود. تک‌لایه‌های  $C_3NH_3$  دارای پایداری حرارتی خوبی بوده و نقطه ذوب آن‌ها بالاتر از  $1500\text{K}$  است [9]. گاف به دست آمده در نمودار چگالی حالات این ترکیب به اندازه  $3.9\text{eV}$  در  $C_3NH_3$  حالت صندلی و  $2.8\text{eV}$  در  $C_3NH_3$  حالت قایق نشان‌دهنده رفتار نیم‌رسانایی آن‌ها می‌باشد.

در سیستم‌های با ابعاد کم همبستگی الکترونی اهمیت زیادی دارد. اثرات همبستگی الکترونی در موادی مثل گرافن [10] و گرافن هیدروژنه مشاهده شده‌است [11-12]. همچنین برای افرادی که از هامیلتونی مدل استفاده می‌کنند اطلاع از مقدار پارامتر  $U$  دارای اهمیت زیادی است. پس بررسی اثرات استتاری ترکیبات  $C_3N$  و تعیین شدت موثر اندرکنش کولنی عمل‌کننده بر روی الکترون‌ها از اهمیت زیادی برخوردار است. به منظور حل هامیلتونی مدل هابارد، محاسبه مقدار  $U$  ضروری است. روشی بر پایه تقریب فاز تصادفی برای

که نیرو و استرس وارد بر هر اتم کمتر از  $0.02 \text{ eV}/\text{\AA}^0$  شود. برای همه اتم‌ها از شبه‌پتانسیل فوق‌نرم استفاده شد. شبکه نقاط K در جهت دوره‌ای در محاسبات نظریه تابعی چگالی با کد FLEURE برای  $\text{C}_3\text{N}$  تک‌لایه،  $\text{C}_3\text{N}$  دو لایه و  $\text{C}_3\text{NH}_3$  به ترتیب  $1 \times 24 \times 24$ ،  $1 \times 12 \times 12$ ،  $1 \times 30 \times 30$  و در محاسبات SPEX برای همه ساختارها  $1 \times 10 \times 10$  در نظر گرفته شد.



شکل 1. a.  $\text{C}_3\text{N}$  تک‌لایه. b.  $\text{C}_3\text{N}$  دو لایه. c.  $\text{C}_3\text{NH}_3$  صندلی. d.  $\text{C}_3\text{NH}_3$  قایق.

تکنیک تقریب فاز تصادفی روشی برای محاسبه پارامترهای اندرکنش کولنی مؤثر است که به ما امکان می‌دهد تا عناصر ماتریس کولنی را مشخص کنیم [15]. در این روش تابع قطبش را به دو بخش  $P_z$  و  $P_r$  تقسیم می‌کنیم.  $P_z$  فقط شامل گذار بین حالت‌های  $p_z$  است و  $P_r$  هم مربوط به بقیه گذارها می‌باشد.

$$P = P_z + P_r \quad 1$$

در این مقاله با استفاده از تقریب فاز تصادفی مقادیر پارامترهای اندرکنشی برای  $\text{C}_3\text{N}$  تک‌لایه،  $\text{C}_3\text{N}$  دو لایه و  $\text{C}_3\text{NH}_3$  به دست آمد. با مقایسه پارامتر اندرکنشی  $U$  گرافن و  $\text{C}_3\text{N}$  تک‌لایه دریافتیم که پارامتر  $U$  این دو ماده تقریباً هم‌اندازه و بزرگ است. طبق انتظار در گرافن که دارای ساختار نواری مخروطی شکل است مانند  $\text{C}_3\text{N}$  تک‌لایه، استتار اندرکنش‌های کولنی ضعیف است. با محاسبه پارامترهای اندرکنشی  $\text{C}_3\text{NH}_3$  و مقایسه آن‌ها با پارامترهای اندرکنشی  $\text{C}_3\text{N}$  و گرافن هیدروژنه متوجه شدیم مقدار پارامتر  $U$  در ترکیبات  $\text{C}_3\text{NH}_3$  از آن‌ها بیشتر است. در  $\text{C}_3\text{N}$  دو لایه و با توجه به رسانایی الکتریکی آن، مقدار خیلی کم پارامتر  $U$  نشان‌دهنده استتار اندرکنش کولنی بود که می‌توان آن را به‌عنوان یک سیستم همبسته در نظر گرفت.

## روش محاسبات

$\text{C}_3\text{N}$  شامل یک شبکه لانه زنبوری دوبعدی با توزیع همگن و مرتب اتم‌های نیتروژن است. اتم‌های نیتروژن خودشان یک شبکه لانه زنبوری دو بعدی با ثابت شبکه دو برابر تشکیل می‌دهند. ساختارهای شبیه‌سازی شده  $\text{C}_3\text{N}$  تک‌لایه،  $\text{C}_3\text{N}$  دو لایه و  $\text{C}_3\text{NH}_3$  حالت صندلی و قایق در شکل 1 نشان داده شده است. برای شبیه‌سازی ساختارها از سلول واحد هگزگونال استفاده کردیم و ثابت‌های شبکه همه آن‌ها  $4/86$  آنگستروم لحاظ شده است. برای جلوگیری از اندرکنش لایه‌ها، بین آن‌ها یک گاف خلاً به اندازه  $20$  آنگستروم در نظر گرفته شد. برای بهینه‌سازی ساختارها یک مرحله محاسبات بهینه‌سازی انجام شد به طوری

بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل استفاده می‌شود. برای اجرای این کد به ویژه مقادیر و ویژه‌حالت‌های همگرا شده نیاز داریم، پس محاسبات نظریه تابعی چگالی را بر اساس تقریب شیب تعمیم‌یافته PBE [16] برای محاسبه ویژه‌مقادیر و ویژه‌توابع همگرا شده در بسته SPEX توسط کد FLEUR انجام می‌دهیم. از قطع ممتوم خطی  $G_{\max} = 4/5 \text{ Bohr}^{-1}$  برای امواج تخت و قطع ممتوم زاویه‌ای  $L_{\max} = 6$  برای کره‌های مافین‌تین استفاده می‌کنیم. محاسبات نظریه تابعی چگالی به‌عنوان ورودی برای کد SPEX استفاده می‌شود [17] تا محاسبات تقریب فاز تصادفی برای محاسبه پارامتر  $U$  هابارد انجام شود [18,19]. توابع وانیر نقش اساسی در محاسبه ماتریس‌های کولنی دارد. در واقع کد اسپکس به‌کمک کد Wannier90 از ویژه‌توابع بلاخ، توابع وانیر را می‌سازد و در انتگرال‌های کولنی استفاده می‌کند [20]. پس از این مرحله برای اجرای بخش اصلی کد SPEX مواردی نظیر تقسیم‌بندی نقاط  $K$ ، نوع محاسبه، مقدار آستانه به‌منظور حذف ضرایب تابع موج و نوع اربیتال همبسته را تعیین می‌کنیم.

### بحث و نتایج

در هامیلتونین مدل و برای پیش‌بینی ویژگی‌های اپتیکی، الکترونیکی و مغناطیسی ترکیبات  $C_3N$  اطلاع از مقدار پارامتر اندرکنشی  $U$  هابارد برای افراد از اهمیت زیادی برخوردار است. پس ما با محاسبه اندرکنش‌های موضعی سیستم‌های  $C_3N$  تک‌لایه، دولایه و  $C_3NH_3$  شروع می‌کنیم.

اندرکنش کولنی مؤثر موضعی ( $U$ ) با رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$U = [1 - VP_r]^{-1} V \quad 2$$

که در آن  $V$  اندرکنش کولنی ساده است. پارامتر اندرکنش کولنی موضعی پوششی کامل ( $W$ ) با رابطه زیر بیان می‌شود:

$$W = [1 - UP_z]^{-1} U \quad 3$$

با استفاده از توابع وانیر جایگزیده بیشینه در مکان  $R$  با اربیتال  $n$ ،  $W_{nR}(r)$  عناصر ماتریس پتانسیل کولنی مؤثر  $U$  به‌صورت زیر مطرح می‌شود:

$$U_{Rn_1n_2n_3n_4}(\omega) = \langle n_1n_2 | U(\omega) | n_3n_4 \rangle = \iint W_{n_1R}^*(r) W_{n_2R}^*(r') U(r, r'; \omega) W_{n_3R}(r) W_{n_4R}(r') d^3r d^3r' \quad 4$$

عناصر ماتریس کولنی مؤثر میانگین توسط رابطه زیر بیان می‌شود:

$$U = \frac{1}{L} \sum_{n=m} U_{nm;nm} \quad 5$$

که در آن  $L$  تعداد اربیتال‌های موضعی است. برای بررسی میزان همبستگی موجود در  $C_3N$  و تعیین شدت مؤثر برهم‌کنش کولنی عمل‌کننده بر روی الکترون‌ها، مقادیر پارامترهای اندرکنشی موضعی جزئی ( $U$ ) و کامل ( $W$ ) و برهم‌کنش کولنی بدون استتار ( $V$ ) را با استفاده از بسته محاسباتی SPEX و بر اساس تقریب فاز تصادفی محاسبه می‌کنیم. بسته SPEX یک کد محاسباتی بر پایه نظریه اختلال بس‌ذره‌ای بوده که در آن از روش امواج تخت

جدول 1. پارامترهای اندرکنشی موضعی بدون استتار (bare)، جزئی و کامل استار شده (CRPA) اتم کربن.

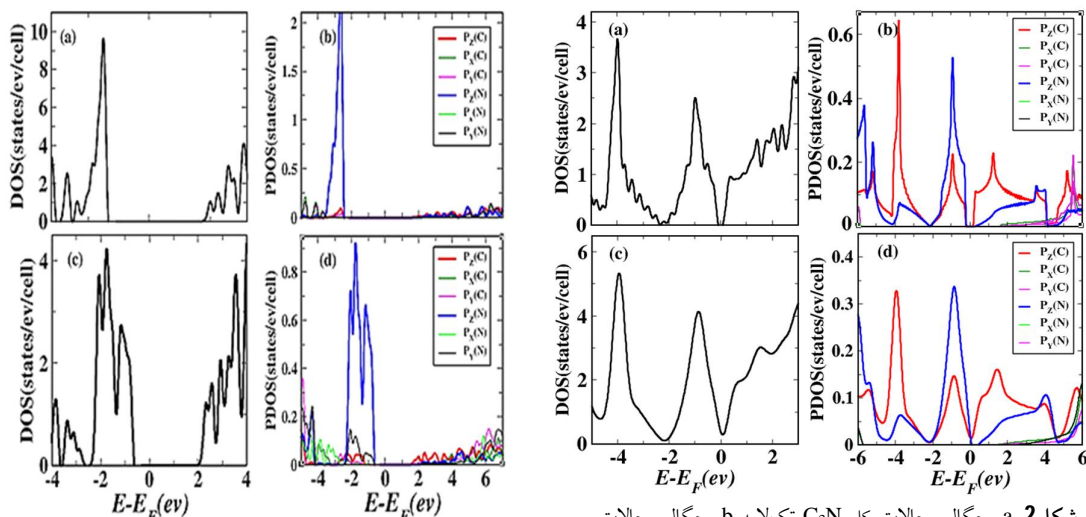
	$V(\text{bare})(\text{eV})$	$U_{00}(\text{eV})$	$W_{00}(\text{eV})$
گرافن	16,7	8,7	5,7
تکلایه $\text{C}_3\text{N}$	17,9	8,6	4,9
صندلی $\text{C}_3\text{NH}_3$	18,9	9,9	8,0
قایق $\text{C}_3\text{NH}_3$	21,7	10,9	9,0
دولایه $\text{C}_3\text{N}$	17,9	4,3	3,9

نسبت به  $\text{C}_3\text{N}$  تکلایه بیشتر باشد که مقایسه پارامترهای  $U$  و  $W$  به دست آمده در جدول 1 برای  $\text{C}_3\text{N}$  دولایه نشان‌دهنده این موضوع است.

اما در مورد  $\text{C}_3\text{NH}_3$  حالت صندلی و حالت قایق جذب اتم‌های هیدروژن توسط اتم‌های کربن منجر به ایجاد گاف در نمودار چگالی حالات شده و سیستم را به عایق تبدیل می‌کند (شکل‌های 3-a و 3-b). در شکل (4-a) نمودار ساختار نواری  $\text{C}_3\text{N}$  تکلایه نشان داده شده است که دارای گاف انرژی کوچکی اطراف سطح فرمی است و توافق خوبی با چگالی حالات انرژی دارد. نوارها نسبتاً پهن بوده و این سبب می‌شود که نسبت  $U/W$  که معیاری از همبسته بودن الکترون‌هاست کوچک باشد و سیستم را در ناحیه همبستگی متوسط قرار می‌دهد. در مورد ساختار نواری  $\text{C}_3\text{N}$  دولایه شکل (4b)، کمی نوارها تخت‌تر هستند و این می‌تواند سیستم را در ناحیه همبسته قوی قرار دهد. با توجه به ساختار نوار انرژی در شکل‌های (4c) و (4d)، نوارهای انرژی در اطراف انرژی فرمی از هم فاصله گرفته و در  $\text{C}_3\text{NH}_3$  حالت صندلی دارای گاف غیرمستقیم  $3,9\text{eV}$  می‌باشد که بیشینه نوار ظرفیت در نقطه  $\text{K}$  و کمینه نوار رسانش در نقطه  $\Gamma$  واقع است.  $\text{C}_3\text{NH}_3$  حالت قایق هم دارای گاف مستقیم  $2,8\text{eV}$  است. این گاف نواری مستقیم برای کاربردهای فوتوکاتالیستی و جذب نوری ضروری است.

همان‌طور که در جدول 1 نشان داده شده در  $\text{C}_3\text{N}$  تکلایه نیز همانند گرافن [11]، استتار ضعیف است و مقدار بزرگی برای  $U$  به دست آمده است. پارامترهای اندرکنشی موضعی گرافن ( $U = 8,7\text{eV}$ ) و  $\text{C}_3\text{N}$  تکلایه تفاوت کمی با هم دارند که با گاف کوچک  $0,39\text{eV}$  در  $\text{C}_3\text{N}$  تکلایه و رفتار شبه‌فلزی گرافن در توافق است. نمودار چگالی حالات کل در شکل (2a) و ساختار نوار انرژی در شکل (4a) نشان می‌دهد که  $\text{C}_3\text{N}$  تکلایه یک نیمه‌رسانا با گاف  $0,39\text{eV}$  است که با نتایج تجربه و کار دیگران توافق خوبی دارد [21]. نمودار چگالی حالات تصویر شده در شکل (2b) و نیز نوارهای انرژی در اطراف انرژی فرمی در شکل (4a) برای  $\text{C}_3\text{N}$  تکلایه نشانگر نقش زیاد الکترون‌های  $p_z$  در سطح فرمی می‌باشد.

اما در مورد  $\text{C}_3\text{N}$  دولایه، شکل (2-d) نشان می‌دهد که اربیتال‌های  $p_z$  روی سطح فرمی نقش عمده دارند، و با توجه به رفتار فلزی که در شکل (2-c) و ساختار نوار انرژی در شکل (4-b) شاهد هستیم انتظار می‌رود که استتار کولنی دو الکترون قرار گرفته در یک مکان



شکل 3. a. چگالی حالات کل  $C_3NH_3$  صندلی. b. چگالی حالات تصویر شده  $C_3NH_3$  صندلی. c. چگالی حالات کل  $C_3NH_3$  قایق. d. چگالی حالات تصویر شده  $C_3NH_3$  قایق.

شکل 2. a. چگالی حالات کل  $C_3N$  تک‌لایه. b. چگالی حالات تصویر شده  $C_3N$  تک‌لایه. c. چگالی حالات کل  $C_3N$  دولایه. d. چگالی حالات تصویر شده  $C_3N$  دولایه.

اکنون در مورد برهم‌کنش‌های بلندبرد صحبت خواهیم کرد. با توجه به پارامترهای اندرکنشی بلندبرد به‌دست‌آمده در جدول 2 پارامتر اندرکنش کولنی نزدیکترین همسایگی برای  $C_3N$  تک‌لایه برابر  $4/3 \text{ eV}$  و برای  $C_3N$  دولایه، برابر  $1/5 \text{ eV}$  است که این مقدار نشانگر استتار اندرکنش کولنی در  $C_3N$  دولایه می‌باشد که رفتار فلزی ماده (شکل 2c) این مطلب را تأیید می‌کند.

در  $C_3N$  دولایه پارامتر اندرکنشی بلند برد تا همسایگی سوم به مقدار خیلی کوچک  $0/1 \text{ eV}$  می‌رسد. این گونه سیستم‌ها که در آنها افت ناگهانی پارامتر اندرکنشی بلندبرد وجود دارد، همبسته نامیده می‌شوند. برخلاف  $C_3N$  تک‌لایه، برای بررسی ویژگی‌های  $C_3N$  دولایه که سیستمی همبسته می‌باشد تقریب‌های چگالی موضعی و شیب تعمیم‌یافته ناکافی است و تقریب‌های فراتر از این‌ها نیاز خواهد شد.

در  $C_3NH_3$  مقادیر پارامترهای اندرکنشی موضعی  $U$  و  $W$  به‌دست‌آمده از مقادیر مربوط به  $C_3N$  تک‌لایه بزرگ‌تر است، که در توافق با گاف بزرگ و رفتار عایق‌گونه  $C_3NH_3$  است. همچنین مقدار این پارامترها از مقادیر مربوط به گرافن هیدروژنه در کار قبلی ما بیشتر است که در گرافن نیمه‌هیدروژنه پارامتر  $U$  برابر  $4/3 \text{ eV}$  و در گرافن تمام‌هیدروژنه برابر  $9/8 \text{ eV}$  بود [11].

شکل 4. ساختار نوار انرژی a.  $C_3N$  تک‌لایه، b.  $C_3N$  دو لایه، c.  $C_3NH_3$  صندلی d.  $C_3NH_3$  قایق.

اما در مورد  $C_3NH_3$  با توجه به جدول 3 کاهش پارامتر اندرکنش کولنی با افزایش فاصله، از  $C_3N$  تک‌لایه، دو لایه و گرافن نامحسوس‌تر است، به طوری که تا همسایگی سوم مقدار قابل توجه  $2.8 \text{ eV}$  برای حالت صندلی و  $2.9 \text{ eV}$  برای حالت قایق نشان می‌دهد. بدیهی است گاف بزرگ‌تر  $C_3NH_3$  و نیز رفتار عایق‌گونه آن در این موضوع اثرگذار بوده است، هرچند حضور اتم‌های هیدروژن در بالای اتم‌های کربن سبب دخالت همه اربیتال‌ها ( $sp^3$ ) در سطح فرمی شکل‌های (3d و 3b) شده است.

### نتیجه‌گیری

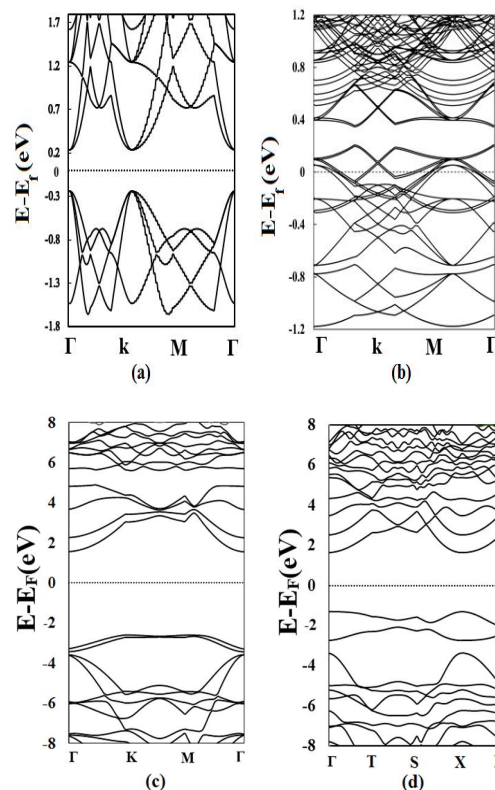
ما استتار اندرکنش‌های کولنی موضعی و بلندبرد الکترون‌های ترکیبات  $C_3N$  را با به‌کارگیری تقریب فاز تصادفی مطالعه کردیم. با مقایسه پارامتر اندرکنشی  $U$  دریافتیم این پارامتر در  $C_3N$  تک‌لایه نسبت به گرافن تفاوت چندانی ندارد و در واقع جایگزینی نیتروژن با کربن لااقل در این مورد تقریباً بی‌اثر بوده است. با محاسبه پارامترهای اندرکنشی  $C_3NH_3$  و مقایسه آن‌ها با پارامترهای اندرکنشی  $C_3N$  تک‌لایه و گرافن هیدروژنه متوجه شدیم که مقادیر پارامترها نسبت به  $C_3N$  و گرافن هیدروژنه بیشتر و قابل توجه است که این موضوع در ارتباط مستقیم با گاف بزرگ  $C_3NH_3$  و رفتار عایق‌گونه آن است. در مورد  $C_3N$  دو لایه، محاسبات نشان‌دهنده استتار اندرکنش‌های کولنی بود که در توافق با رفتار فلزی آن می‌باشد. در این

جدول 2. پارامترهای اندرکنشی موضعی و بلندبرد بدون استتار (bare) جزئی استتار شده (cRPA) اتم کربن.

	تک‌لایه $C_3N$		دو لایه $C_3N$	
	Bare	cRPA	Bare	cRPA
$U_{00}$ (eV)	17,9	8,6	17,9	3,9
$U_{01}$ (eV)	8,7	4,3	10,1	1,5
$U_{02}$ (eV)	5,4	2,9	5,4	0,2
$U_{03}$ (eV)	4,8	2,7	3,7	0,1

جدول 3. پارامترهای اندرکنشی موضعی و بلندبرد بدون استتار (bare) جزئی استتار شده (cRPA) اتم کربن

	صندلی $C_3NH_3$		قایق $C_3NH_3$	
	Bare	cRPA	Bare	cRPA
$U_{00}$ (eV)	18,9	9,9	21,7	10,9
$U_{01}$ (eV)	15,4	6,8	16,7	7,8
$U_{02}$ (eV)	14,2	6,4	15,1	7,3
$U_{03}$ (eV)	5,9	2,8	5,0	2,9





[4] M. Bagheri, Electrical and mechanical properties of a fully hydrogenated two-dimensional polyaniline sheet, *Computational Materials Science* **153** (2018) 126-133.

<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.06.027>

[5] M. Bagheri, S. Izadi, Polyaniline (C<sub>3</sub>N) nanoribbons: Magnetic metal, Semiconductor, and Half-Metal, *Applied Physics* **124** (2018) 84304.

<https://doi.org/10.1063/1.5042207>

[6] H.J. Xiang, B. Huang, Z.Y. Li, S.H. Wei, J.L. Yang, X.G. Gong, Ordered Semiconducting Nitrogen-Graphene Alloys, *Physical Review X* **2** (2012) 11003.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevX.2.011003>

[7] B. Mortazavi, Ultra high stiffness and thermal conductivity of graphene like C<sub>3</sub>N, *Carbon* **118** (2017) 25-34.

<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2017.03.029>

[8] S. Kumar, S. Sharma, V. Babar, U. Schwingenschlogl, Ultralow lattice thermal conductivity in monolayer C<sub>3</sub>N as compared to graphene, *Materials Chemistry A* **5** (2017) 407-411.

<https://doi.org/10.1039/C7TA05872A>

[9] D. Wang, Y. Bao, T. Wu, S. Gan, D. Han, L. Niu, First-principles study of the role of strain and hydrogenation on C<sub>3</sub>N, *Carbon* **134** (2018) 22-28.

<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2018.03.068>

[10] H. Hadipour, E. Sasıoglu, F. Bagherpour, C.Friedrich, S. Blugel, I. Mertig, Screening of the long-range Coulomb interaction in graphene nanoribbons: Armchair versus zigzag edges *Physical Review B* **98** (2018) 205123.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.205123>

ترکیب تعویض اتم‌های کربن با نیتروژن با توجه به دولایه بودن آن سبب ایجاد رفتار فلزی و کاهش پارامترهای اندرکنشی شده‌است. همچنین در این ماده پارامتر اندرکنشی بلندبرد تا همسایگی سوم به‌طور ناگهانی به مقدار 0/1 eV می‌رسد. به سبب این رفتار می‌توان آن را به‌عنوان یک سیستم همبسته در نظر گرفت که برای بررسی آن تقریبات چگالی موضعی و شیب تعمیم‌یافته کامل نخواهد بود و نیاز به تصحیحات بیشتری می‌باشد. پارامترهای اندرکنشی محاسبه‌شده به‌طور قابل توجهی توانایی پیش‌بینی هامیلتونین مدل برای ویژگی‌های مغناطیسی، اپتیکی و الکترونیکی را افزایش می‌دهد. پارامترهای مدل هامیلتونی از محاسبات اولیه به‌دست می‌آید و با داده‌های تجربی موجود مقایسه می‌شود که سبب افزایش توان پیش‌گویی مدل می‌شود.

## مرجع‌ها

[1] A.K. Geim, K.S. Novoselov, The rise of graphene, *Nature Materials* **6** (2007) 183-191.

<https://doi.org/10.1038/nmat1849>

[2] M.I. Katsnelson, Graphene: carbon in two dimensions, *Materialstoday* **10** (2007) 20-27.

[https://doi.org/10.1016/S1369-7021\(06\)71788-6](https://doi.org/10.1016/S1369-7021(06)71788-6)

[3] Y. Wu, W. Xia, W. Gao, F. Jia, P. Zhang, W. Ren, Quasiparticle electronic structure of honeycomb C<sub>3</sub>N: from monolayer to bulk, *2D material* **6** (2018) 15-18.

<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2053-1583/aaeaa>

- electron FLAPW method, *Physical Review B* **81** (2010) 125102.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.125102>
- [18] D.K. Singh, A. Thamizhavel, J.W. Lynn, S.K. Dhar, T. Hermann, Multiple magnetic structures of correlated Ce ions in intermetallic CeAu<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>, *Physical Review B* **86** (2012) 60405.  
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.86.060405>
- [19] M. Makaremi, B. Mortazavi, C. Veer Singh. Adsorption of Metallic, Metalloidal, and Nonmetallic Adatoms on Two-Dimensional C<sub>3</sub>N, *Physical Chemistry* **121** (2017) 575-583.  
<http://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b04511>
- [20] F. Freimuth, Y. Mokrousov, D. Wortmann, S. Heinze, S. Blugel. Maximally localized Wannier functions within the FLAPW formalism, *Physical Review B* **78** (2008) 035120.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.035120>
- [21] Q. Wei, Q. Zhang, H. Yan, M. Zhang, Cubic C<sub>3</sub>N: A New Superhard Phase of Carbon-Rich Nitride, *Materials* **9** (2016) 840-846.  
<https://doi.org/10.3390/ma9100840>
- [11] E. Sasoglu, H. Hadipour, C. Friedrich, S. Blugel, I. Mertig, Strength of effective Coulomb interactions and origin of ferromagnetism in hydrogenated graphene, *Physical Review B* **95** (2017) 60408.  
<http://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.060408>
- [12] H. Hadipour, Screening of Coulomb interaction and  $\pi$  magnetism in defected graphene, *Physical Review B* **99** (2019) 75102.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.075102>
- [13] F. Aryasetiawan, M. Imada, A. Georges, G. Kotliar, S. Biermann, A.I. Lichtenstein, Frequency-dependent local interactions and low-energy effective models from electronic structure calculations, *Physical Review B* **70** (2004) 195104.  
<http://doi.org/10.1103/PhysRevB.70.195104>
- [14] S. Yang, W. Li, C. Ye, G. Wang, H. Tian, C. Zhu, P. He, G. Ding, X. Xie, Y. Liu, Y. Lifshitz, S. Lee, Z. Kang, M. Jiang, C<sub>3</sub>N—A2D Crystalline, Hole-Free, Tunable-Narrow-Bandgap Semiconductor with Ferromagnetic, *Advanced Material* **29** (2017) 1605625.  
<https://doi.org/10.1002/adma.201605625>
- [15] J. van den Brink, G.A. Sawatzky, Non-conventional screening of the Coulomb interaction in low-dimensional and finite-size system, *Europhysics Letters* **50** (2000) 447-453.  
<https://doi.org/10.1209/epl/i2000-00290-6>
- [16] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Physical Review Letters* **78** (1997) 3865.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.1396>
- [17] C. Friedrich, S. Blugel, A. Schindlmayr, Efficient implementation of the GW approximation within the all