

First-principles investigation of electronic and mechanical properties of AlN monolayer under hydrogen adsorption

Raziyeh Nemati¹, Mojtaba Ashhadi¹, Davoud Vahedi Fakhrabad^{*2}

¹Department of Physics, Faculty of Science, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, Iran

²Department of Physics, Faculty of Science, University of Neyshabur, Neyshabur, Iran

Received: 06.06.2020 Final revised: 22.11.2020 Accepted: 19.01.2021

Doi link: [10.22055/jrmb.2021.16753](https://doi.org/10.22055/jrmb.2021.16753)

Abstract

In this study, we investigate the electronic and mechanical properties of pristine and fully hydrogenated AlN monolayer by first principles calculations. Two different states of hydrogen adsorption on AlN monolayer are considered: (I) adsorption of hydrogen atoms on Aluminum and Nitrogen atoms at the same side of AlN sheet (AlN-2H) and (II) adsorption of hydrogen atoms on Aluminum and Nitrogen atoms at the two opposite sides of AlN sheet (H-AlN-H). At the first, we calculated the electronic band structure and density of states based on density functional theory (DFT) and using the QUANTUM ESPRESSO computational package. Remarkable changes are observed in the electronic structure of fully hydrogenated AlN. The hydrogenated AlN nanosheet is semiconductor and its energy band gap changes relative to the pristine AlN sheet, so that, the band gap values (indirect band) were obtained as 3 eV and 4.3 eV for H-AlN-H and AlN-2H, respectively. Then, based on the calculated electronic properties, density functional calculations in the harmonic elastic deformation range are performed to obtain the mechanical elastic constants of pristine and fully hydrogenated AlN monolayer. It is shown that the hydrogenation has significant influences on the mechanical properties of AlN sheet. Energetically, Compared with the pristine AlN, hydrogenation AlN is more stable. Also, by calculating the formation energy of the structures AlN-2H and H-AlN-H, the results indicate that the structure of H-AlN-H is more stable than the structure of AlN-2H. In particular, it is found that the in-plane stiffness of hydrogenated AlN is significantly smaller than that of pristine AlN, so that, the in-plane stiffness was obtained as 82 N/m for H-AlN-H.

Keywords: Density functional theory, Mechanical elastic constants, Pristine and fully hydrogenated AlN monolayer

Corresponding Author: davoud.vahedi@neyshabur.ac.ir



بررسی خواص الکترونی و مکانیکی تک لایه AIN تحت جذب هیدروژن

با استفاده از اصول اولیه

راضیه نعمتی¹، مجتبی اشهدی¹، داود واحدی فخرآباد^{2*}

¹گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران

²گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه نیشابور، نیشابور، ایران

دریافت: 1399/03/17 ویرایش نهایی: 1399/09/02 پذیرش: 1399/10/30

Doi link: [10.22055/jrmbs.2021.16753](https://doi.org/10.22055/jrmbs.2021.16753)

چکیده

در این مطالعه، خواص الکترونی و مکانیکی تک لایه AIN خالص و کاملاً هیدروژن‌دار شده، با استفاده از محاسبات اصول اولیه، مورد مطالعه قرار گرفته است. دو حالت مختلف برای جذب هیدروژن در نظر گرفته شده است: (الف) جذب اتم‌های هیدروژن روی اتم‌های آلومینیوم و نیتروژن در یک سمت مشابه صفحه AIN (AIN-2H) و (ب) جذب اتم‌های هیدروژن روی اتم‌های آلومینیوم و نیتروژن در دو سمت مخالف صفحه AIN (H-AIN-H). ابتدا، محاسبه ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT) با استفاده از بسته محاسباتی کوآنتوم-اسپرسو (QE)، انجام شده است. تغییرات قابل توجهی در ساختار الکترونی AIN کاملاً هیدروژن‌دار شده مشاهده می‌شود. نانو صفحه AIN هیدروژن‌دار شده نیم‌رسانا است و گاف نواری انرژی آن نسبت به صفحه AIN خالص، تغییر پیدا می‌کند، به طوری که، مقدار گاف نواری برای H-AIN-H و AIN-2H به ترتیب 3 و 4/3 الکترون‌ولت به دست آمدند. سپس، با استفاده از خواص الکترونی محاسبه شده، محاسبات DFT در محدوده تغییر شکل الاستیک هارمونیک برای به دست آوردن ثابت‌های الاستیک مکانیکی تک لایه AIN خالص و کاملاً هیدروژن‌دار شده، انجام شده است. نتایج نشان می‌دهند که هیدروژن کردن تأثیر قابل توجهی در خواص مکانیکی صفحه AIN دارد. از لحاظ انرژی، ساختار AIN هیدروژن‌دار شده در مقایسه با ساختار AIN خالص، پایدارتر است. همچنین، با محاسبه انرژی تشکیل ساختارهای AIN-2H و H-AIN-H، ساختار H-AIN-H نسبت به ساختار AIN-2H پایدارتر است. به طور خاص، مشخص شده است که سختی در صفحه AIN هیدروژن‌دار شده به طور قابل توجهی کوچک‌تر از AIN خالص است، به طوری که سختی در صفحه برای H-AIN-H، 82 N/m است.

کلیدواژه‌گان: نظریه تابعی چگالی، ثابت‌های الاستیک مکانیکی، تک لایه AIN خالص و کاملاً هیدروژن‌دار شده

مقدمه

کرده‌اند [1-3]. بعضی از گروه مواد دو بعدی که بر روی پایداری ساختاری آنها، مطالعاتی انجام شده است، ترکیب‌های دو تایی عناصر گروه III-V جدول تناوبی می‌باشند [4]. در میان ترکیبات دو تایی III-V،

مواد نیم‌رسانا و عایق با ساختارهای دو بعدی و شبکه شش گوشه، در سال‌های اخیر به علت خواص ویژه‌ای که دارند، توجه زیادی از دانشمندان را به خود جلب

* نویسنده مسئول: davoud.vahedi@neyshabur.ac.ir



نیم‌رساناهای بر پایه AIN مورد توجه بیشتری قرار گرفته‌اند [5-7]. اگر به جای اتم‌های کربن در گرافین اتم‌های دیگری از ترکیب گروه -III و گروه -V جدول تناوبی قرار بگیرند، این گروه از مواد دو بعدی تشکیل می‌شوند، که هر کدام از این گروه مواد، خاصیت‌های جالبی دارند و شبکه همه آنها مانند گرافین می‌باشند. البته بیشتر این گروه مواد دو بعدی، نیم‌رسانا و عایق بوده و این مواد کاندیدای خوبی برای کاربرد در صنعت نیم‌رساناها می‌باشند. تک لایه AIN خصوصیات ویژه‌ای از خود نشان می‌دهد، که با فاز انبوهه آن متفاوت هستند. به‌طور مثال، گاف انرژی تک لایه AIN می‌تواند با انواع تنش‌های متفاوت از مستقیم به غیر مستقیم تغییر کند [5]، که این رابطه تفاوت خصوصیت ساختاری تک لایه AIN نسبت به فاز حجمی آن را نشان می‌دهد. دانشمندان به‌صورت تجربی اثبات کردند که ساخت نانوساختارهای AIN امکان پذیر است [8]. در سال 2013 دانشمندان توانستند نانو صفحه AIN را بر روی نقره (در جهت (111)) رشد دهند [9]. همچنین در مطالعه‌ای دیگر، اثرات نقص ذاتی بر ساختار الکترونی و خصوصیات مغناطیسی تک لایه AIN مورد بررسی قرار گرفت و مشاهده شد که سیستم با نقص- نیتروژنی در مقایسه با نقص-آلومنیومی، خاصیت فرومغناطیسی با دمای کوری بالاتر از دمای اتاق را نشان می‌دهد [6]، و در این راستا در پژوهشی دیگر، انواع نقص‌های بیشتری در تک لایه AIN مورد بررسی قرار گرفته است [7]. این نتایج نشان می‌دهند که اصلاح شیمیایی، راهی مؤثر برای کنترل خواص مکانیکی، مغناطیسی و الکترونی است.

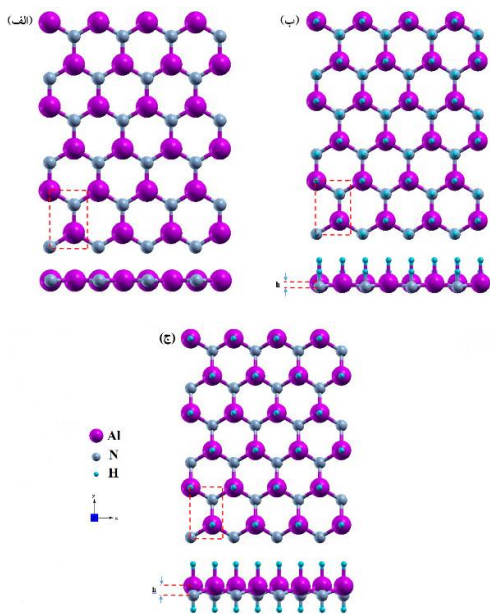
همچنین، هیدروژن‌دار کردن نانو صفحات، روشی کارا برای کنترل اینچنین خواص است. تحقیقات زیادی بر روی این گروه از مواد انجام شده است که نشان دهنده اهمیت آنها می‌باشد [10-13]. جذب اتم‌های هیدروژن

توسط مواد نانوساختار، باعث تغییر پهنای گاف انرژی می‌شود، به‌علاوه پیوند شیمیایی ساختار خالص را تضعیف می‌نماید که در نهایت بر خواص مکانیکی و الکترونی آنها اثر گذار است [14-18]. بنابراین اثر هیدروژن می‌تواند تأثیر به‌سزایی در خواص ماده داشته باشد. از این رو در این مقاله، با استفاده از نظریه تابعی چگالی، خواص الکترونی و مکانیکی نانوساختارهای تک لایه AIN خالص و کاملاً هیدروژن‌دار شده را بررسی و مقایسه می‌کنیم. ثابت‌های کشسانی، سختی در صفحه و نسبت پواسون، تک لایه AIN خالص و کاملاً هیدروژن‌دار شده با استفاده از محاسبات انرژی تنشی در محدوده تغییر شکل کشسانی هارمونیک محاسبه شدند. انرژی تشکیل AIN کاملاً هیدروژن‌دار شده، منفی به‌دست آمد که نشان دهنده پایداری آن از لحاظ انرژی می‌باشد. نکته مهم این است که، با محاسبه انرژی تشکیل ساختارهای AIN-2H و H-AIN-H، ساختار H-AIN-H نسبت به ساختار AIN-2H پایدارتر است.

روش محاسبات

محاسبات اصول اولیه بر اساس نظریه تابعی چگالی با استفاده از بسته نرم افزاری کوآنتوم-اسپرسو [19] برای بررسی ساختارهای مختلف تک لایه AIN خالص و کاملاً هیدروژن‌دار شده مورد استفاده قرار گرفته است. برای تعیین پتانسیل همبستگی-تبادلی از تقریب چگالی موضعی (LDA) که توسط پردیو و زانگر پارامتریزه شده [20]، استفاده شده است. انرژی کل و سایر کمیت‌های مربوط به آن با استفاده از روش شبه‌پتانسیل و روش موج تخت محاسبه شده است. از آنجا که محاسبات به‌روش خود سازگار و برای مجموعه معینی از نقاط درون منطقه اول بریلوئن انجام می‌شود، لذا دقت و سرعت محاسبات بستگی شدیدی به انتخاب صحیح پارامترهایی نظیر تعداد نقاط k و

جذب اتم‌های هیدروژن روی صفحه AlN ، لازم است که انرژی هیدروژنه کردن را از رابطه $E_B = E(\text{AlN}+\text{H}) - E(\text{AlN}) - 1/2E(\text{H}_2)$ به دست آوریم. در این رابطه $E(\text{AlN}+\text{H})$ ، $E(\text{AlN})$ و $E(\text{H}_2)$ به ترتیب، انرژی‌های کل ساختار AlN هیدروژن‌دار شده، AlN خالص و انرژی مولکول هیدروژن است.



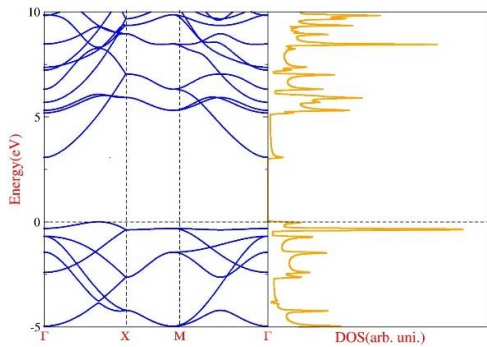
شکل 1. نمای بالا و جانبی تک لایه (الف) AlN ، (ب) AlN-2H و (ج) H-AIN-H .

انرژی‌های تشکیل مربوط به ساختارهای H-AIN-H و AlN-2H منفی بوده و به ترتیب، برابر $-1/15\text{eV}$ و $-0/48\text{eV}$ می‌باشند. بنابراین، از لحاظ شیمیایی، امکان جذب اتم‌های هیدروژن روی صفحه AlN وجود خواهد داشت. علاوه بر این، با مقایسه انرژی‌های تشکیل هر دو ساختار AlN-2H و H-AIN-H ، مشاهده می‌شود که ساختار H-AIN-H نسبت به ساختار AlN-2H پایدارتر است. بنابراین، در ادامه، خواص مکانیکی ساختار H-AIN-H مورد بررسی قرار

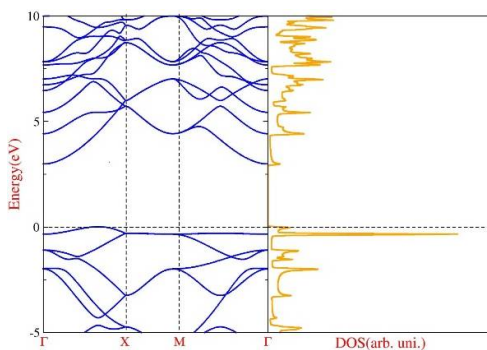
انرژی قطع دارد. برای دستیابی به دقت مناسب در محاسبات از روش مونخورست-پک و انرژی قطع eV 680 و تحت نمونه برداری از منطقه اول بریلوئن $16 \times 16 \times 1$ ، استفاده کرده‌ایم. ثابت شبکه و مکان‌های اتمی را به طور کامل و اهلش کرده تا همگرایی انرژی حدود 10^{-5}eV و نیروی وارد بر هر اتم کمتر از $\text{eV}/\text{\AA}$ 0,02 شود و برای کمینه کردن انرژی نسبت به موقعیت اتم‌ها قضیه هلمن-فاینمن را به کار برده‌ایم. همچنین برای بهینه‌سازی حجم، 15\AA خلأ، برای جلوگیری از اندرکنش بین لایه‌ها در یاخته‌های مجاور استفاده شده است.

بحث و نتیجه‌گیری

همان‌طور که می‌دانیم عملکرد شیمیایی، یک روش مؤثر برای کنترل ویژگی‌های الکترونی و مکانیکی نانو ساختارها است، به طوری که برهم‌کنش هیدروژن با AlN از دیدگاه تکنولوژی، مورد توجه زیادی قرار گرفته است. بنابراین انتظار می‌رود که هیدروژن‌دار کردن AlN ، خواص مختلف قابل توجهی را در پی داشته باشد. یاخته اولیه هر سه نانو ساختار مورد بررسی در این پژوهش به صورت یاخته اولیه با چهار و هشت اتم با تقارن راست‌گوشه، به ترتیب برای نانو ساختارهای تک لایه AlN خالص و کاملاً هیدروژن‌دار شده، در نظر گرفته شده است. طرح‌واره‌ای از ساختار AlN و حالت‌های مختلف جذب شیمیایی هیدروژن روی صفحه AlN در شکل 1 نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در این مطالعه، دو حالت مختلف برای جذب شیمیایی هیدروژن در نظر گرفته شده است: (1) جذب اتم‌های هیدروژن روی اتم‌های آلومنیوم و نیتروژن در یک سمت مشابه صفحه AlN و (2) جذب اتم‌های هیدروژن روی اتم‌های آلومنیوم و نیتروژن در دو سمت مخالف صفحه AlN . برای بررسی امکان



شکل 2. ساختار نواری (سمت چپ) و چگالی حالت‌های الکترونی (سمت راست) تک لایه AlN خالص، با گاف نواری غیر مستقیم 3,1 eV در طول راستاهای تقارنی، $\Gamma(0,0,0)$ ، $X(0,5,0,0)$ ، $\Gamma(0,0,0)$ و $M(0,0,0)$ ، رسم شده است. مقیاس انرژی بر حسب eV و مبدأ انرژی به طور دلخواه به عنوان بیشینه نوار ظرفیت انتخاب شده است.



شکل 3. مانند شکل 2 ولی برای تک لایه H-AlN-H با گاف نواری غیر مستقیم 3 eV.

به همین ترتیب، با توجه به شکل‌های 3 و 4، همانند شکل 2، هر دو نانوساختار H-AlN-H و AlN-2H گاف نواری غیرمستقیم (ماکزیمم نوار ظرفیت در مسیر Γ -X، در حوالی نقطه X، و مینیمم نوار رسانش در نقطه Γ)، به ترتیب، با مقادیر 3 eV و 4/3 eV را نشان می‌دهند. تغییر موقعیت اتم‌های AlN در اثر هیدروژنه کردن آن، تعداد و ترازهای انرژی متفاوت اتم‌های هیدروژن در نانو ساختارهای H-AlN-H و AlN-2H، باعث تغییرات گاف نواری در اینچنین ترکیبات خواهد شد. کاهش گاف نواری در اثر هیدروژنه کردن ساختار H-AlN-H، در مراجع [12]، [14] و [15] نشان داده شده است.

خواهد گرفت. ثابت‌های شبکه بهینه‌سازی شده و همچنین طول خمیدگی برای AlN، $a=3,08\text{\AA}$ و $b=5,33\text{\AA}$ ، برای H-AlN-H، $a=3,08\text{\AA}$ و $b=5,33\text{\AA}$ ، برای AlN-2H، $a=3,24\text{\AA}$ و $b=5,61\text{\AA}$ و $h=0,68\text{\AA}$ می‌باشند. نتایج در جدول 1 ارائه شده است. مقادیر ثابت شبکه و طول خمیدگی، با مقدار صفر، برای ساختار AlN با آنچه که در مرجع [4] آمده است، توافق خوبی دارد.

جدول 1. ثابت‌های شبکه بهینه‌سازی شده، طول خمیدگی، h مقادیر گاف نواری و طول پیوند d، برای ساختارهای تک لایه AlN، H-AlN-H و AlN-2H

| ساختار | a(Å) | b(Å) | h(Å) | gap(eV) | d(Å) |
|---------|------|------|------|---------|------|
| AlN | 3,08 | 5,33 | 0,00 | 3,1 | 1,78 |
| H-AlN-H | 3,08 | 5,33 | 0,68 | 3 | 1,90 |
| AlN-2H | 3,24 | 5,61 | 0,27 | 4,3 | 1,89 |

در شکل 2، 3 و 4 ساختار نواری الکترونی و طیف چگالی حالت‌ها در طول راستاهای تقارنی Γ -X-M- Γ برای نانوساختارهای AlN، H-AlN-H و AlN-2H نشان داده شده است. همان‌طور که از شکل‌های 2، 3 و 4 مشاهده می‌شود، هر سه نانوساختار رفتار نیم‌رسانا از خود نشان می‌دهند، به طوری که ساختار تک لایه AlN خالص، گاف نواری غیرمستقیم (ماکزیمم نوار ظرفیت در مسیر Γ -X، در حوالی نقطه X، و مینیمم نوار رسانش در نقطه Γ) به میزان 3,1 eV را از خود نشان می‌دهد. نوع و مقدار گاف نواری این ساختار با مقالات منتشر شده در مراجع [4]، [21] و [22] همخوانی دارد.

شده به دست می‌آیند. برای هر نقطه شبکه، موقعیت‌های اتمی متناظر با این سلول‌ها کاملاً بهینه‌سازی می‌شوند و انرژی کل آن‌ها محاسبه می‌گردد، نتایج در شکل 5 (ب) نشان داده شده است. با استفاده از روش کمترین مربعات، داده‌ها به رابطه

$$E - E_0 = a_1 \varepsilon_x^2 + a_2 \varepsilon_y^2 + a_3 \varepsilon_x \varepsilon_y$$

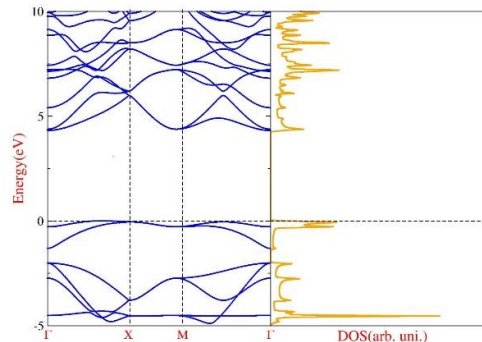
در آن انرژی ساختار در حالت تعادل، ε_x و ε_y به ترتیب، تنش در امتداد جهت‌های x و y می‌باشند. نمودار انرژی-تنش سه بعدی برای ساختار تک لایه H-AIN در شکل 5 ب نشان داده شده است. نمودار مشابه برای ساختار تک لایه AIN خالص به دست آمد. با به‌کارگیری این رابطه و بعضی محاسبات، مرجع [23] نشان می‌دهد که می‌توان سختی در صفحه را به صورت

$$C = \frac{1}{A_0} (2a_1 - \frac{a_3^2}{2a_1})$$

و نسبت پواسون بدون بعد را نیز $\nu = \frac{a_3}{2a_1}$ نشان داد. نتایج در جدول 2 ارائه شده است. مقادیر محاسبه شده C و ν برای AIN با آنچه که در مراجع [4] و [25] گزارش شده است، توافق قابل قبولی دارند که مؤید صحت محاسبات انجام شده است. لازم به ذکر است که خطای مطلق برازش $1/46 \times 10^{-6} \text{ eV}$ می‌باشد که توسط رابطه زیر محاسبه شده است:

$$\Delta(a_1, a_2, a_3) = \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i=1}^n [E_i - E(a_1, a_2, a_3)]^2} \quad 1$$

که در آن E_i انرژی کل مشاهده شده i ام در داده شبکه‌ای $(\varepsilon_x; \varepsilon_y)$ ، $E(a_1, a_2, a_3)$ انرژی محاسبه شده حاصل از برازش و $n=289$ تعداد نقاط داده شبکه‌ای است. به‌منظور مقایسه بیشتر، می‌توان آنها را با مقادیر N/m 335 و 0/16 برای تک لایه شش ضلعی گرافن و همچنین با مقادیر 243 N/m و 0/07 به دست آمده برای تک لایه گرافان، مقایسه کرد [23].

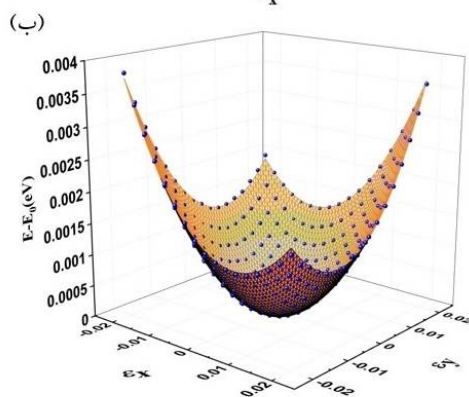
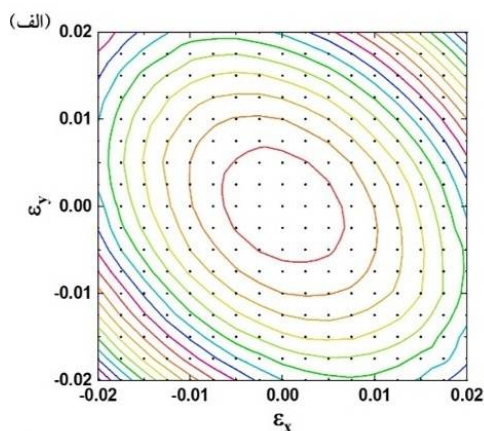


شکل 4. مانند شکل 2 ولی برای تک لایه AIN-2H، با گاف نواری غیر مستقیم 4/3 eV

در ساختارهای دو بعدی، ثابت‌های الاستیک مکانیکی توسط دو ثابت مستقل، سختی در صفحه C و نسبت پواسون ν ، توصیف می‌شوند. سختی در صفحه به صورت مشتق دوم انرژی کل نسبت به تنش در مساحت تعادلی توسط رابطه $Y = (1/A_0)(\partial^2 E / \partial^2 \varepsilon)$ تعریف می‌شود که در آن A_0 ، E و ε به ترتیب مساحت تعادلی، انرژی کل و تنش تک محوره $\varepsilon = (a - a_0) / a_0$ و a و a_0 به ترتیب، ثابت‌های شبکه تعادلی و تنش داده شده است) می‌باشند. نسبت پواسون نیز به صورت نسبت تنش عرضی به تنش محوری توسط رابطه محوری $\varepsilon / \nu = -\varepsilon$ بیان می‌شود. یاخته اولیه مورد بررسی در محاسبات به صورت خط چین برای نانو ساختارهای تک لایه AIN خالص و کاملاً هیدروژن دار شده، در شکل 1 رسم شده است.

برای محاسبه خواص کشسانی ساختارهای فوق، از روش توصیف شده در مراجع [23] و [24] استفاده می‌کنیم. در این محاسبات هر دو تنش فشاری و کششی مورد بررسی قرار گرفته است. در محدوده تغییر شکل کشسانی هارمونیک [23,24]، تنش به سلول واحد بین -0/02 تا 0/02 برای هر راستای x و y با افزایش 0/0025 اعمال می‌شود. همان‌طور که از شکل 5 (الف) مشاهده می‌شود، داده شبکه‌ای $(\varepsilon_x; \varepsilon_y)$ که حاوی 289 نقطه است برای تک لایه AIN خالص و هیدروژن دار

همان‌طور که از نمودارها مشخص است در اثر اعمال تنش، ساختار نواری الکترون تغییر پیدا می‌کند به‌طوری‌که گاف نواری در تنش فشاری (کششی) به‌میزان تقریباً 0.2 eV (0.1 eV) نسبت به حالت بدون تنش، کاهش (افزایش) پیدا می‌کند که با آنچه در مرجع [24] آمده است، توافق خوبی دارد. همچنین در اثر اعمال تنش ایجاد شده، تبهگنی نوارهای ظرفیت انرژی (در مسیر X-M) نسبت به حالت بدون تنش، از بین می‌رود.



شکل 5. الف: داده شبکه‌ای $(E_x; E_y)$ استفاده شده در محاسبات انرژی کل و ب: منحنی سه بعدی انرژی کل برای هر یک از ساختارهای تنش داده شده. گلوله‌های آبی رنگ کوچک داده‌های اصلی هستند و سطح رنگی مقدار برازش شده را نشان می‌دهد.

جدول 2. ثابت‌های الاستیک مکانیکی برای نانو ساختارهای تک لایه AIN خالص و کاملاً هیدروژن‌دار شده

| ساختار | سختی در صفحه (N/m) | نسبت پواسون |
|---------|--------------------|-------------|
| AIN | 117 | 0/46 |
| H-AIN-H | 82 | 0/30 |

همان‌طور که از جدول 2 مشاهده می‌شود، هیدروژنه کردن صفحه AIN تأثیر قابل توجهی در خواص مکانیکی آن دارد. به‌طوری‌که سختی در صفحه و نسبت پواسون در ساختار H-AIN-H کوچک‌تر از AIN است. همان‌طور که در مرجع [23] نشان داده شده است، این امر به‌علت، تغییر نوع پیوند از sp^2 به sp^3 و خمیدگی صفحه در ساختار H-AIN-H نسبت به AIN است. با توجه به شکل 1، صفحه AIN بعد از هیدروژنه کردن تخت باقی نمی‌ماند. اتم‌های هیدروژن باعث جابجایی اتم‌های Al و N در صفحه AIN شده و موجب خمیدگی آن می‌شود. با توجه به جدول 1، طول پیوند Al-N در ساختار H-AIN-H حدود 6/74 درصد نسبت به ساختار AIN خالص، بلندتر است. طول پیوند بزرگ‌تر نشان دهنده ضعیف‌تر بودن پیوند است. بنابراین، این پیوند ضعیف Al-N، باعث نرم‌تر بودن ساختار H-AIN-H نسبت به ساختار AIN خالص می‌شود. به‌طوری‌که، ساختار H-AIN-H به‌میزان 30 درصد از AIN نرم‌تر است. این تفاوت را می‌توان برای تمایز بین AIN خالص و هیدروژن‌دار شده استفاده کرد. برای تجزیه و تحلیل بیشتر، در شکل 6 ساختار نواری الکترونی تحت تنش‌های متفاوت برای نانو ساختار H-AIN-H نشان داده شده است. در شکل 6، ساختار نواری H-AIN-H در حالت بدون تنش ($0; 0$) و تنش کششی $(0.02; 0.02)$ مقایسه شده است.

ساختار می‌شود (شکل 7ج). به طوری که در اثر جذب اتم‌های هیدروژن روی صفحه AlN توزیع بار بین صفحه و اتم‌های هیدروژن ظاهر می‌شود که منجر به تشکیل پیوند می‌شود.

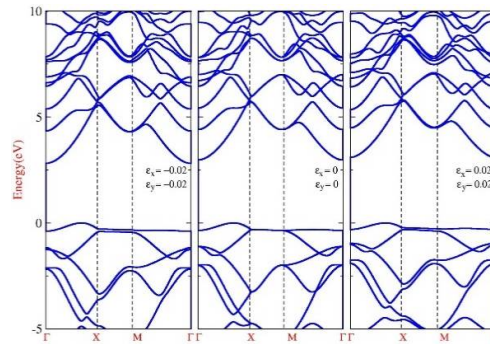
نتیجه‌گیری

در این مقاله، خاصیت‌های الکترونی و مکانیکی نانو ساختارهای تک لایه AlN خالص و کاملاً هیدروژن‌دار شده، با استفاده از محاسبات اصول اولیه مورد مطالعه قرار گرفتند. در این مطالعه، دو حالت مختلف برای بیشترین جذب شیمیایی اتم‌های هیدروژن روی صفحه AlN در نظر گرفته شده است. نتایج نشان می‌دهند که احتمال جذب اتم‌های هیدروژن روی اتم‌های آلومینیوم و نیتروژن در دو سمت مخالف صفحه AlN بیشتر است. ثابت‌های شبکه بهینه‌سازی شده، مقادیر گاف نواری و طول پیوند Al-N برای ساختار تک لایه AlN خالص و هیدروژن‌دار شده محاسبه شدند. نتایج نشان می‌دهند که هیدروژن‌دار کردن AlN باعث تغییر اینچنین پارامترها می‌شود. در ادامه، محاسبات انرژی تنش برای به دست آوردن سختی در صفحه و نسبت پواسون ساختار تک لایه AlN خالص و هیدروژن‌دار شده، انجام شد. به طوری که مقدار سختی در صفحه و نسبت پواسون برای ساختار H-AIN-H، به ترتیب، 82 N/m و 0/30 به دست آمد. نتیجه‌گیری شد که جذب شیمیایی هیدروژن به طور قابل توجهی می‌تواند خواص مکانیکی صفحه AlN را تضعیف کند.

مرجع‌ها

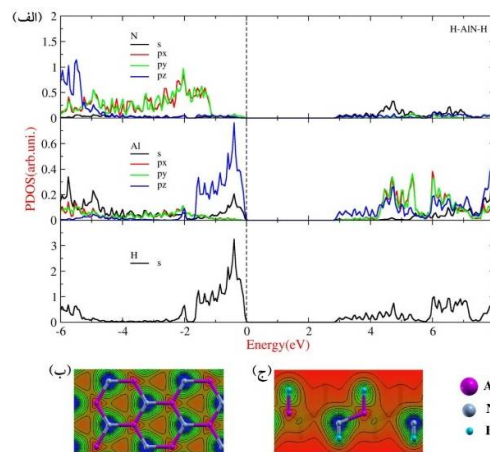
[1] K. Li, X.B. Du, Y. Yan, H.X. Wang, Q. Zhan, H.M. Jin, First-principles study on ferromagnetism in C-doped AlN, *Physics Letters A* **374** (2010) 3671-3675.

<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2010.07.011>



شکل 6. ساختار نواری تک لایه H-AIN-H تحت تنش‌های متفاوت.

در شکل 7الف نمودار چگالی حالت‌های جزئی تک لایه H-AIN-H رسم شده است. در بین تمام اربیتال‌های اتم‌های نیتروژن، آلومینیوم و هیدروژن ساختار H-AIN-H، اربیتال P_z آلومینیوم و اربیتال S هیدروژن، بیشترین مشارکت نسبت به سایر اربیتال‌ها در نزدیکی تراز فرمی و در نوار ظرفیت دارند. به طوری که بلندترین قله آنها به طور مشترک دارای انرژی 0,4 eV است.



شکل 7. الف: نمودار چگالی حالت‌های جزئی تک لایه H-AIN-H. (ب) و ج: به ترتیب، برشی از توزیع چگالی‌های بار الکترونی برای ساختارهای تک لایه AlN و H-AIN-H.

نمودار توزیع چگالی‌های بار الکترونی برای ساختارهای تک لایه AlN و H-AIN-H، به ترتیب، در شکل 7ب و ج رسم شده است. اضافه کردن هیدروژن به ساختار AlN باعث تغییر در نوع هیبریداسیون این

- [11] S. Ryu, M.Y. Han, J. Maultzsch, T.F. Heinz, P. Kim, M.L. Steigerwald, L.E. Brus, Reversible Basal Plane Hydrogenation of Graphene, *Nano Letters* **8** (2008) 4597-4602. <https://doi.org/10.1021/nl802940s>
- [12] C. Zhang, F. Zheng, First-principles prediction on electronic and magnetic properties of hydrogenated AlN nanosheets, *Journal of Computational Chemistry* **32** (2011) 3122-3128. <https://doi.org/10.1002/jcc.21902>
- [13] Y. Ding, Y. Wang, J. Ni, The stabilities of boron nitride nanoribbons with different hydrogen-terminated edges, *Applied Physics Letters* **94** (2009) 233107 (3). <https://doi.org/10.1063/1.3152767>
- [14] F.W. Averill, J.R. Morris, V.R. Cooper, Calculated properties of fully hydrogenated single layers of BN, BC₂N, and graphene: Graphane and its BN-containing analogues, *Physical Review B* **80** (2009) 195411 (8). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.195411>
- [15] Y. Wang, Electronic properties of two-dimensional hydrogenated and semihydrogenated hexagonal boron nitride sheets, *Physica Status Solidi-Rapid Research Letters* **4** (2010) 34-36. <https://doi.org/10.1002/pssr.200903374>
- [16] Z. Sohbatazadeh, H.A. Eivari, D. Vahedi Fakhrabad, Formation energy and some mechanical properties of hydrogenated hexagonal monolayer of GeC, *Physica B: Condensed Matter* **547** (2018) 88-91. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2018.08.009>
- [17] Ch. Feng, H. Qin, D. Yang, G. Zhang, First-Principles Investigation of the Adsorption Behaviors of CH₂O on BN, AlN, GaN, InN, BP, and P Monolayers, *Materials* **12** (2019) 676(8). <https://doi.org/10.3390/ma12040676>
- [18] G.R. Schleder, E.M. Jr, D.J.R. Baquiao, Y.M. Celaschi, F. Gollino, G.M. Dalpian, P.A.S. Autreto, Tuning hydrogen adsorption and electronic properties from graphene to fluorographane, *Physical Review Materials* **4** (2020) 074005. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.4.074005>
- [19] P. Giannozzi, et al., A modular and open-source software project for quantum simulations [2] X. Peng, R. Ahuja, Non-transition-metal doped diluted magnetic Semiconductors, *Applied Physics Letters* **94** (2009) 102504 (3). <https://doi.org/10.1063/1.3095601>
- [3] R. Han, W. Yuan, H. Yang, X. Du, Y. Yan and H. Jin, Possible ferromagnetism in Li, Na and K-doped AlN: A first-principle study, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **326** (2013) 45-49. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2012.08.026>
- [4] H. Şahin, S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Bekaroglu, E. Akturk, R.T. Senger, S. Ciraci, Monolayer honeycomb structures of group-IV elements and III-V binary compounds: First-principles calculations, *Physical Review B* **80** (2009) 155453(12). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.155453>
- [5] P. Liu, A.D. Sarkar, R. Ahuja, Shear Strain Induced Indirect to Direct Transition in Band Gap in AlN Monolayer Nanosheet. *Computational Materials Science* **86** (2014) 206-210. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.01.026>
- [6] C.W. Zhang, First-principles study on electronic structures and magnetic properties of AlN nanosheets and nanoribbons, *Journal of Applied Physics* **111** (2012) 043702(6). <https://doi.org/10.1063/1.3686144>
- [7] E.F. de Almeida Junior, F. de Brito Mota, C.M.C. de Castilho, A. Kakanakova-Georgieva, G.K. Gueorguiev, Defects in hexagonal-AlN sheets by first-principles calculations, *The European Physical Journal B* **85** (2012) 48 (9). <https://doi.org/10.1140/epjb/e2011-20538-6>
- [8] Q. Wu, Z. Hu, X.Z. Wang, Y.M. Hu, Y.J. Tian, Y. Chen, A simple route to aligned AlN nanowires, *Diamond and Related Materials* **13** (2004) 38-41. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2003.08.017>
- [9] P. Tsipas, et al., Evidence for graphite-like hexagonal AlN nanosheets epitaxially grown on single crystal Ag (111), *Applied Physics Letters* **103** (2013) 251605 (4). <https://doi.org/10.1063/1.4851239>
- [10] D.C. Elias, et al., Control of Graphene's Properties by Reversible Hydrogenation: Evidence for Graphane, *Science* **323** (2009) 610-613. <https://doi.org/10.1126/science.1167130>

of materials, *Journal of Physics: Condensed Matter* **21** (2009) 395502-395521.

<https://doi.org/doi:10.1088/0953-8984/21/39/395502>

[20] J.P. Perdew, A. Zunger, Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, *Physical Review B* **23** (1981) 5048-5079.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.23.5048>

[21] H.L. Zhuang, A.K. Singh, R.G. Hennig, Computational discovery of single-layer III-V materials, *Physical Review B* **87** (2013) 165415 (5).

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.165415>

[22] D. Vahedi Fakhrabad, N. Shahtahmasebi, M. Ashhadi, Optical excitations and quasiparticle energies in the AlN monolayer honeycomb structure, *Superlattices and Microstructures* **79** (2015) 38-44.

<http://dx.doi.org/10.1016/j.spmi.2014.12.012>

[23] M. Topsakal, S. Cahangirov, S. Ciraci, The response of mechanical and electronic properties of graphane to the elastic strain, *Applied Physics Letters* **96** (2010) 091912(3).

<https://doi.org/10.1063/1.3353968>

[24] J. Kang, J. Li, F. Wu, S.-S. Li, J.-B. Xia, Elastic, electronic, and optical properties of two-dimensional graphyne sheet, *The Journal of Physical Chemistry C* **115** (42) (2011) 20466–20470. <https://doi.org/10.1021/jp206751m>

[25] Q. Peng, X.J. Chen, S. Liu, S. De, Mechanical stabilities and properties of graphene-like aluminum nitride predicted from first-principles calculations, *RSC Advances* **3** (2013) 7083-7092.

<https://doi.org/10.1039/C3RA40841H>