

The Electronic and Optical Properties of 2D Boron Sheet with cmmm Space Group

Tayebeh Abasi¹, Arash Boochani^{2*}, Seyedeh Razieh Masharian¹

¹ Department of Physics, Hamedan Branch, Islamic Azad University, Hamedan, Iran.

² Department of Physics, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran.

Received: 16.04.2020 Final revised: 20.06.2021 Accepted: 03.08.2021

Doi link: [10.22055/JRMBS.2021.16982](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.16982)

Abstract

Recently a new type of two-dimensional material called borophene (boron Sheet) has been successfully synthesized on substrates under very high vacuum conditions and has received much attention. In this paper, using the density functional theory and FP-LAPW + lo method using the GGA approximation, we investigated the electronic and optical properties of borophene with the cmmm space group. The study shows the electronic properties of metallic behavior for this two-dimensional structure. The optical properties also indicate the optical anisotropy of this compound for both x and z directions. Borophene also has a good absorption coefficient in the visible region along the x-ray axis and that the refractive index in this region is less than one.

Keywords: Two-Dimensional Boron Sheet, DenSity Functional Theory, Electronic Properties, Optical Properties.

*Corresponding Author: arash_bch@yahoo.com

بررسی خواص الکترونی و اپتیکی صفحه دو بعدی بورون با گروه فضایی

cmmm

طیبه عباسی¹، آرش بوچانی^{2*}، سیده راضیه مشعریان¹¹گروه فیزیک، واحد همدان، دانشگاه آزاد اسلامی، همدان، ایران²گروه فیزیک، واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران

دریافت: 1399/01/28 ویرایش نهایی: 1400/03/30 پذیرش: 1400/05/12

Doi link: [10.22055/JRMBS.2021.16982](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.16982)

چکیده

اخیراً نوع جدیدی از مواد دوبعدی با عنوان بروفن (صفحه دو بعدی بورون) به صورت موفقیت آمیز بر روی زیرلایه‌هایی تحت شرایط خلأ بسیار بالا سنتز شده است و مورد توجه بسیاری قرار گرفته است. در این مقاله با استفاده از نظریه تابعی چگالی و روش FP-LAPW+lo و تقریب GGA به بررسی خصوصیات الکترونی و اپتیکی بروفن با گروه فضایی cmmm پرداخته شده است. مطالعه خواص الکترونی رفتار فلزی را برای این ساختار دوبعدی نشان می‌دهد. خواص اپتیکی نیز نشان دهنده ناهمسانگردی اپتیکی این ترکیب برای دو راستای X و Z است. همچنین بروفن دارای ضریب جذب مناسبی در ناحیه مرئی و در راستای محور تابشی X می‌باشد و در این ناحیه ضریب شکست کمتر از یک می‌باشد.

کلیدواژگان: صفحه دو بعدی بورون، نظریه تابعی چگالی، خواص الکترونی، خواص اپتیکی

مقدمه

سیلیسن، ژرمن، و... مورد توجه قرار گرفته و به صورت تئوری و تجربی به بررسی این مواد پرداخته شد [2-4]. امکان وجود صفحه دو بعدی از اتم‌های بورون که پس از کشف گرافن قوت گرفته بود، این عنصر را در کانون توجه قرار داد. بورون عنصری در گروه 3، یکی از جذاب‌ترین عناصر جدول تناوبی است. این عنصر توانایی قابل توجهی برای تشکیل تعداد زیادی از دگرشکل‌ها را دارد [5]. علاوه بر فاز انبوه سه بعدی، بورون می‌تواند خوشه‌های صفر بعدی، نانولوله‌های یک بعدی و نانوسیم‌ها و صفحات دو بعدی را تشکیل

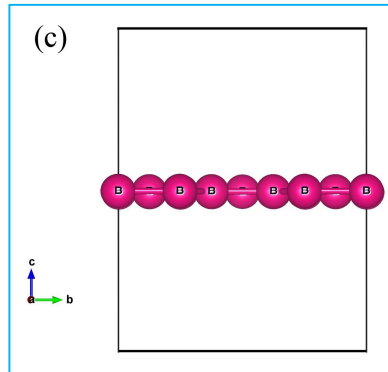
طی دو دهه اخیر تلاش‌های زیادی جهت ساخت مواد دوبعدی صورت گرفته است. در حال حاضر مواد دو بعدی یکی از موضوعات جالب در پژوهش‌ها به شمار می‌رود. علاقه به این طبقه جدید از مواد حاصل تولید موفقیت آمیز گرافن و شبکه لانه زنبوری اتم‌های کربن در شکل مسطح بوده است [1]. پس از سنتز گرافن به دلیل محدودیت‌های موجود از جمله گاف نواری صفر، مواد دوبعدی دیگر از جمله فسفرین،

* نویسنده مسئول: arash_bch@yahoo.com

دهد. تحقیقات تئوری گسترده‌ای در سال‌های اخیر بر روی صفحات دوبعدی بورون با عنوان بروفن متمرکز شده است [6-7]. بروفن ماده‌ای دوبعدی تک‌لایه متشکل از اتم‌های بورون است که در سال 2016 بر روی زیر لایه تحت شرایط خلأ بسیار بالا سنتز شد. چهار فاز متفاوت شامل 2-pmmn ، $\beta 12$ ، $\gamma 3$ و فاز آرایش شش ضلعی به صورت تجربی سنتز شدند که تمام این فازها فلز هستند. این صفحه‌ها شبکه‌های مثلثی با نظمی متفاوت از حفره‌های پرپودیک هگزاگونال می‌باشند که بر اساس نحوه قرارگیری اتم‌ها و شکل متفاوت حفره‌های هگزاگونال باعث به وجود آمدن فازهای متفاوت می‌شوند [8-10]. بروفن دارای خواص بسیار جالبی می‌باشد که همین خصوصیات، این ماده را در کانون توجه قرار داده است. از جمله اینکه بورون در حالت انبوه نیم‌رسانا است، در حالی که بروفن خاصیت فلزی از خود نشان می‌دهد. این ماده دارای مدول یانگ متفاوت در راستاهای مختلف صفحه می‌باشد و در راستای موازی با صفحه بروفن دارای مدول یانگ بیشتر از گرافن است [11]. همچنین خواص اپتیکی ناهمسانگرد برای این ماده گزارش شده است و دارای شفافیت و هدایت الکتریکی مناسب جهت کاربرد در ولتانوری می‌باشد [12]. این ماده در وسایل الکترونی به‌عنوان یک ماده شفاف و قابل انعطاف به‌کار گرفته شده است [13-14].

همین‌طور اتم بورون می‌تواند ساختارهایی مانند فولرن B_{40}^- ، خوشه شبه‌صفحه B_{36} با حفره هگزاگونال در مرکز ساختار و بیست وجهی‌های B_{12}^- که پایه بسیاری از ساختارهای انبوه می‌باشد را تشکیل دهد [15-16].

یکی از خواص جالب مواد دو بعدی این است که با اعمال تغییراتی از جمله افزایش یا کاهش تعداد لایه‌ها، اعمال میدان الکتریکی، جذب و وارد کردن ناخالصی یا جای خالی می‌توان خصوصیات آنها را تغییر داد. در این زمینه گزارش‌هایی ارائه شده است که نشان می‌دهد این تغییرات می‌تواند شامل تغییر در میزان گاف انرژی، تغییر در خواص اپتیکی و پدید آمدن خواص مغناطیستی در ماده باشد. این تغییرات در بروفن هم گزارش شده است [17-22]. گروه‌های مختلفی از پژوهشگران به بررسی خصوصیات الکترونیکی و اپتیکی ساختارهای متفاوت بروفن پرداخته‌اند که به صورت تئوری و تجربی پیش‌بینی شده است. ساختارهای متفاوت از نظر الکترونی دارای خاصیت فلزی هستند. در این مقاله به بررسی خصوصیات اپتیکی و الکترونی ساختار بروفن با گروه فضایی cmmm پرداخته می‌شود که یکی از ساختارهای بروفن می‌باشد و به صورت تئوری پیش‌بینی شده است [23]. از جمله نمودار چگالی حالت‌های کلی و جزئی، تابع دی‌الکتریک، اتلاف انرژی، ضریب شکست، بازتاب، جذب و هدایت اپتیکی مورد بررسی قرار گرفته می‌شود که تاکنون برای این ساختار گزارش نشده است. نتایج شبیه‌سازی‌های به‌دست آمده نشان می‌دهد ساختار از نظر الکترونی خاصیت فلزی دارد و از نظر اپتیکی در راستاهای متفاوت تابش نور، خواص ناهمسانگرد دارد که این امر با نتایج گزارش شده مطابقت دارد [24-27].



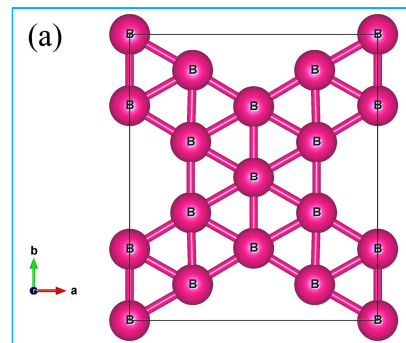
شکل 1. ساختار صفحه دو بعدی بورون با گروه فضایی $cmmm$ در دو نما.

پایداری دینامیکی

در هر ساختار جدیدی که کشف می‌شود، یکی از ابزارهای مهم برای نشان دادن پایداری آنها محاسبه پراکندگی فونونی در منطقه اول بریلوئن است. در شکل 2، نمودار ساختار نواری فونونی بورون نشان می‌دهد که تمام ترازها در ناحیه فرکانسی مثبت قرار دارند، بنابراین این ترکیب به لحاظ دینامیکی کاملاً پایدار است. با توجه به سبک بودن جرم اتمی بور در این ساختار هیچ‌گونه گاف فرکانسی به وجود نیامده است و لذا از ناحیه آکوستیکی تا اپتیکی انتقال انرژی به راحتی اتفاق می‌افتد. در ادامه از دیدگاه ترمودینامیکی نیز پایداری این ترکیب با محاسبه انرژی همبستگی بررسی شد و برای این پارامتر -0.393 الکترون ولت به دست آمد که نشان دهنده پایداری این ترکیب از منظر انرژی نیز می‌باشد.

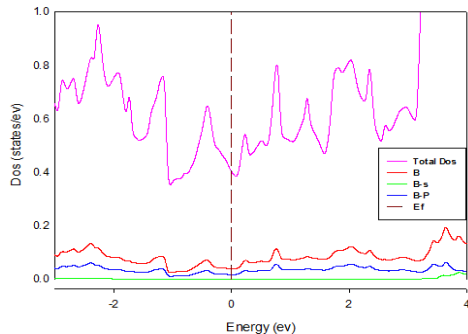
روش و جزئیات محاسبه

محاسبات اصول اولیه بر اساس نظریه تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسباتی Wien2K انجام گرفت و از تقریب شیب تعمیم یافته GGA^1 برای انرژی تبادل-همبستگی استفاده شده است. ثابت‌های شبکه بهینه شده عبارتند از $a=5.83 \text{ \AA}$ و $b=6.73 \text{ \AA}$ و $c=98.29 \text{ \AA}$ شعاع کره موفین تین برای بورون $1/57$ آنگستروم به دست آمد. مقدار RKmax برابر 8 و Gmax برابر 14 و پارامتر Kpoint نیز برابر 400 انتخاب شده است. در شکل 1 ساختار صفحه دو بعدی بورون با گروه فضایی $cmmm$ مشاهده می‌شود. ساختار مسطح شامل ردیف‌هایی از اتم بورون که حفره‌های هگزاگونال به صورت یک در میان در بین آنها قرار گرفته است. سلول واحد این ترکیب شامل 14 اتم و خلاء بهینه شده برای آن نیز 30 بوهر انتخاب شده است. برای محاسبات فونونی از کد محاسباتی Quantum Espresso استفاده شده است که ساختار کریستال تا دقت 10^{-6} (dyn/a.u.) بهینه شده است. تعداد نقاط در فضای وارون $15 \times 15 \times 1$ محاسبه شد و انرژی جداسازی نیز 120 اختیار گردید.

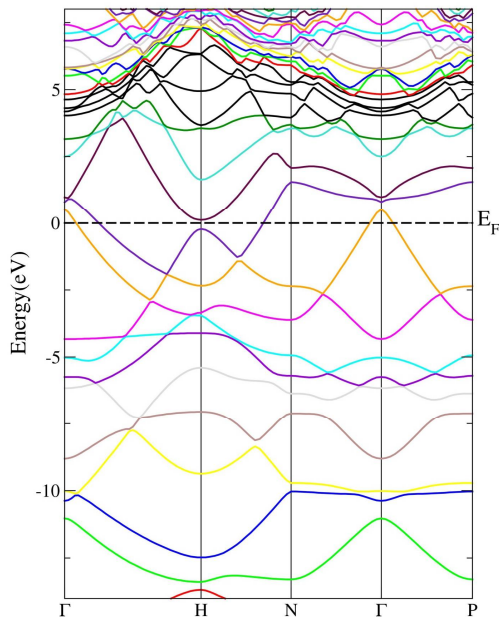


¹ Generalized Gradient Approximation

جزئی رفتار فلزی ساختار را تأیید می‌کند. با توجه به اینکه هر دو اوربیتال S و p در بازه انرژی در نظر گرفته شده سهم می‌باشند، بنابراین نوع پیوندهای الکتریکی بین اتم‌ها از هیبریداسیون بین اوربیتال‌های s و p شکل می‌گیرد.

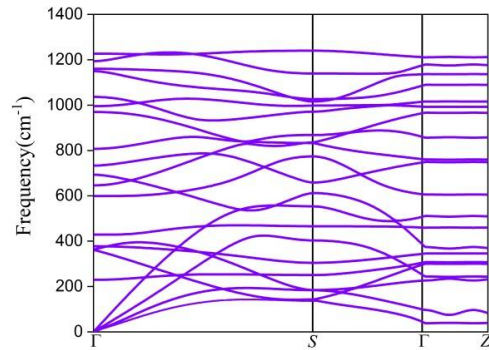


شکل 3. چگالی حالات کلی و جزئی.



شکل 4. نمودار ساختار نواری در راستاهای تقارنی منطقه اول بریلوئن.

در شکل 4، نمودار ساختار نواری بروفن $cmmm$ در منطقه اول بریلوئن رسم شده است. مشاهده می‌شود که ترازهای الکترونی به دفعات تراز فرمی را در اطراف نقطه گاما و مسیر تقارنی H-N، با شیب تندی قطع کرده‌اند. این موضوع بیانگر رفتار فلزی قوی این



شکل 2. نمودار ساختار نواری فونونی در منطقه اول بریلوئن.

خصوصیات الکترونی

چگالی حالات کلی و جزئی ساختار در شکل 3 نشان داده شده است. با توجه به نمودار، چگالی حالت‌های الکترونی روی سطح فرمی غیر صفر است و حالات الکترونی نوارهای رسانش و ظرفیت در تراز فرمی با هم همپوشانی دارند و گاف انرژی صفر می‌باشد. با توجه به اینکه در انرژی‌های بالا تعداد حالات و احتمال حضور الکترون نسبت به ناحیه فرمی و والانس افزایش یافته، ماده خاصیت فلزی قوی پیدا می‌کند.

حالات الکترونی از ناحیه ترازهای ظرفیت در محدوده 3- الکترون‌ولت تا ناحیه رسانش و انرژی‌های بالا کاملاً پیوسته است و هیچ گونه گافی را مشاهده نمی‌کنیم. بنابراین اگر الکترونی به هر دلیل به ناحیه مذکور منتقل شود رسانندگی بسیار خوبی برای آن انتظار می‌رود. از روی نمودار چگالی حالت‌های جزئی مشاهده می‌شود که اوربیتال‌های p تراز فرمی را قطع کرده و سهم اوربیتال‌های S در تراز فرمی بسیار ناچیز است. بنابراین این تراز سهم قابل توجهی در خاصیت فلزی ندارد و سهم اصلی مربوط به تراز p می‌باشد. مشارکت عمده تراز S در بالای نوار رسانش می‌باشد. در حالت کلی سهم اوربیتال‌های p بیشتر از سهم اوربیتال‌های S می‌باشد و در رسانش الکتریکی هم این تراز سهم بیشتری دارد. بنابراین نمودار چگالی حالت کلی و

$$\operatorname{Re} \varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) = \varepsilon_0 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon''(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}$$

$$\operatorname{Im} \varepsilon(\omega) = \varepsilon''(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{[\varepsilon''(\omega') - \varepsilon_0] d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}$$

P بر مقدار انتگرال کوشی دلالت می‌کند.

در شکل 5 الف مقدار استاتیکی قسمت حقیقی نشان داده شده است که در راستای محور Z مقدار آن 1/20 و در راستای محور X مقدار آن به سمت منفی بی‌نهایت میل می‌کند. بنابراین با تغییر جهت زاویه نور تابیده شده به این ساختار، در راستای Z (عمود بر صفحه) رفتار تقریباً نیم‌رسانا و در راستای X (در صفحه) رفتاری به شدت فلزی را از ماده انتظار داریم. با افزایش انرژی فوتون تابیده شده در راستای محور Z تغییر چندانی مشاهده نمی‌شود تا در انرژی 9/14 الکترون‌ولت بیشینه‌ای با مقدار 2/12 به وجود می‌آید. بعد از این مقدار با افزایش انرژی شاهد نوسانات بسیار اندک هستیم تا در انرژی 11/36 الکترون‌ولت و مقادیر بالاتر مقدار کمتر از 1 مشاهده می‌شود. در راستای محور X به دلیل رفتار بسیار شدید فلزی تا محدوده 4/3 الکترون‌ولت، قسمت حقیقی منفی است و پس از نوساناتی اندک، در انرژی‌های بالاتر همانند راستای Z مقادیری بین 0 تا 1 را اختیار می‌کند. از انرژی 11/5 الکترون‌ولت به بالا هر دو راستا همانند هم عمل کرده و مقادیری بین 0 تا 1 را به دست می‌آورند و رفتار ساختار شبیه محیط خلأ می‌باشد. با توجه به تغییر جهت تابش نور و در نتیجه به دست آوردن خواص فلزی و نیم‌رسانایی، از این خاصیت می‌توان استفاده کرد.

در نمودار قسمت موهومی در بیشینه‌های نمودار گذار بین نواری داریم. در شکل 5 ب قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک مشاهده می‌شود که برای حالت $E \parallel Z$ در انرژی صفر، مقدار 0 را دارد. در حالی که برای حالت $E \parallel X$ ، قسمت موهومی به سمت مقادیر مثبت بینهایت میل کرده است و معرف رفتار بسیار شدید

ساختار است، همچنین شاهد درهم‌تنیدگی ترازها در ناحیه رسانش هستیم، بنابراین حرکت پذیری الکترون‌های برانگیخته موجب افزایش هرچه بیشتر رفتار فلزی آن گردیده است.

خصوصیات اپتیکی

در این قسمت به بررسی خواص اپتیکی طی نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی در مورد ساختار دوبعدی صفحه بورون با گروه فضایی cmmm می‌پردازیم. با توجه به تقارن کریستالی این ترکیب، پاسخ دهی اپتیکی آن در دو راستای X و Y (در صفحه بروفن) کاملاً متقارن است و در ادامه تنها نمودارهای اپتیکی راستای X را نمایش داده‌ایم. اما رفتار اپتیکی در راستای Z متفاوت از آن دو راستای دیگر است.

تابع دی‌الکتریک

نمودار بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک برای دو جهت تابش عمود بر صفحه (راستای Z) و موازی صفحه (راستای X) نشان داده شده است که برای توصیف پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی به کار برده می‌شود و به ساختار نواری الکترونی بلور بستگی دارد. تابع دی‌الکتریک تحت تأثیر ساختار بلوری و تقارن‌های موجود در آن تغییر می‌کند. این کمیت یک تانسور است. اگر اثرات جذب در ماده را نیز در نظر بگیریم، تابع دی‌الکتریک یک کمیت مختلط خواهد بود که قسمت موهومی و حقیقی آن توسط روابط موسوم به کرامرز-کرونیک (روابط زیر) به هم مربوط می‌شوند. تبدیلات کرامرز-کرونیک به ما اجازه می‌دهد که قسمت حقیقی تابع پاسخ نور را با علم به قسمت موهومی در تمام بسامدها و بالعکس تعیین کنیم.

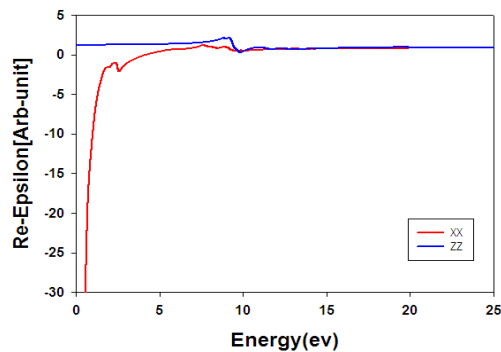
$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega)$$

قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک در مقابل نور در راستای X و Z به صورت ناهمسانگرد رفتار می‌کنند. در راستای محور Z تا حدود $8/5$ الکترون ولت هیچ گونه گذاری رخ نمی‌دهد. این در حالی است که در راستای محور X نیز با یک شیب تند مواجه هستیم. اما در هر دو راستا از محدوده $7/5$ تا 12 الکترون ولت شاهد چندین پیک هستیم که معرف گذارهای بین‌نواری هستند و از 13 الکترون ولت به بعد عملاً مقدار گذار به حداقل خود رسیده است که رفتار قسمت حقیقی کاملاً در تطابق با قسمت موهومی است. در انرژی‌های بالا جذب اتفاق نمی‌افتد و محیط کاملاً شفاف است. البته این محدوده دیگر شامل نور مرئی نمی‌باشد.

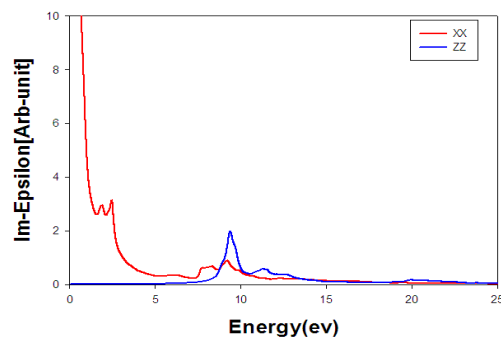
تابع اتلاف انرژی

یکی از پارامترهای مهم در اپتیک، تابع اتلاف انرژی است. چندین راه برای تحریک الکترون‌ها در یک ماده وجود دارد. یک راه که وابسته به طیف اپتیکی است، تحریک الکترون‌ها توسط دیگر الکترون‌ها است و به وسیله تاباندن یک اشعه از الکترون‌های تک انرژی به نمونه و تجزیه انرژی منعکس شده انجام می‌شود. طیف اتلاف انرژی می‌تواند ناشی از تحریک الکترون‌های تک انرژی در جامد که با جذب فوتون اتفاق می‌افتد و یا از تحریک دسته‌جمعی الکترون‌های والانس که پلاسمون (نوسانات الکترون‌های آزاد یک محیط پلاسمایی) نامیده می‌شود و یا از هر برانگیختگی دیگری باشد. طیف اتلاف انرژی ساختار در شکل 6 نشان داده شده است. پیک‌ها در نمودار اتلاف انرژی با گذارهای بین باند و درون‌باندی مرتبط هستند. شاخص‌ترین پیک‌ها در نمودار برای حالت $E \parallel Z$ در انرژی $9/86$ الکترون‌ولت و برای حالت $E \parallel X$ در انرژی $4/75$ الکترون‌ولت رخ می‌دهد. با توجه به اینکه این انرژی‌ها ریشه $\epsilon_1(\omega)$ می‌باشند، قله پلاسمونی و تحریک

فلزی ترکیب است. در راستای Z تا انرژی $5/46$ الکترون‌ولت مقدار موهومی تابع دی‌الکتریک تقریباً 0 است که نشان‌دهنده گاف انرژی در این محدوده می‌باشد. با افزایش مقدار انرژی مقدار تابع دی‌الکتریک هم افزایش می‌یابد تا در انرژی $9/36$ الکترون‌ولت به میزان بیشینه خود یعنی $1/98$ و در انرژی $11/33$ الکترون‌ولت به مقدار $0/60$ می‌رسد. بعد از این نقطه با افزایش مقدار انرژی شاهد روند کاهشی در میزان تابع دی‌الکتریک هستیم. در این راستا باز هم تأکید بر رفتار نیم‌رسانایی از دید اپتیکی است. برای حالت $E \parallel X$ در انرژی‌های $1/91$ و $2/43$ و $9/22$ الکترون‌ولت نمودار دارای پیک می‌باشد که در این حالت نیز نشان‌دهنده گذار بین‌نواری است. در انرژی در حدود بالاتر از 13 الکترون‌ولت رفتار تابع دی‌الکتریک برای هر دو حالت $E \parallel X$ و $E \parallel Z$ یکسان است.



شکل 5-الف. قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک.

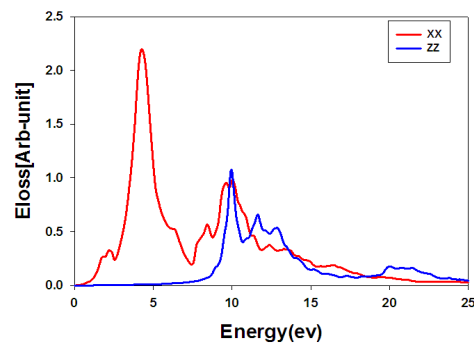


شکل 5-ب. قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک.

ماده مربوط می‌شود. در واقع اگر ماده دارای ضریب خاموشی پایینی باشد، موج الکترومغناطیسی به‌آسانی از آن عبور می‌کند. با توجه به نمودار شکل 7 الف ضریب شکست استاتیک برای حالت $E \parallel Z$ برابر 1/14 و بیشینه آن نیز در انرژی 8/7 الکترون‌ولت برابر 1/53 و کمینه آن در انرژی 9/94 الکترون‌ولت برابر 0/76 می‌باشد. برای حالت $E \parallel X$ ضریب شکست از مقدار بیشینه کاهش پیدا می‌کند تا در انرژی 1/18 الکترون‌ولت به مقدار کمینه می‌رسد و سپس روند افزایشی و کاهشی را طی می‌کند. در این راستا در انرژی‌های پائین رفتار ثابتی مشاهده نمی‌شود. مقدار استاتیکی ضریب شکست در راستای X و Z به ترتیب باز هم فلزی و نیم‌رسانایی بودن رفتار اپتیکی ماده را تأیید می‌کند. اما برای راستای X از محدوده انرژی لبه مرئی به بعد مقدار ضریب شکست کمتر از 1 شده است. مقدار بسیار کم ضریب شکست (از خلا هم کمتر شده است) گواهی بر شفافیت این ترکیب در راستای مذکور می‌باشد. اما در راستای Z در ناحیه IR و ناحیه کمتر از 9/5 الکترون‌ولت شاهد ضریب شکست بزرگتر از مقدار 1 هستیم.

با توجه به شکل 7 ب که قسمت موهومی ضریب شکست را نشان می‌دهد، در حالت $E \parallel Z$ بیشینه‌ای در انرژی 9/46 الکترون‌ولت وجود دارد که در این انرژی کمترین عبور و بیشترین جذب وجود دارد. از انرژی حدود 0 الکترون‌ولت تا انرژی 7 الکترون‌ولت ضریب خاموشی تقریباً صفر است و در این محدوده موج می‌تواند کاملاً عبور نماید. نمودارهای قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک و تابع اتلاف در محدوده نور مرئی که مقدار تقریباً 0 را دارند نیز عبور کامل نور در این محدوده را تأیید می‌کند. برای حالت $E \parallel X$ ضریب خاموشی روند کاهشی دارد. در محدوده کوچک‌تر از مقدار 2/21 الکترون‌ولت نور به‌سختی از ماده عبور

جمعی الکترون‌ها را نشان می‌دهند. رفتار تابع اتلاف در راستای X و Z ناهمسانگردی ماده را نشان می‌دهد. در راستای Z عملاً در ناحیه IR (مرئی) و انرژی‌های پایین UV اتلافی وجود ندارد و یا خیلی کم است که نشان دهنده وجود گاف انرژی در این ناحیه می‌باشد. در نمودار قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک نیز مشاهده شد در محدوده نور مرئی گاف وجود دارد که این امر رفتار نمودار اتلاف در راستای Z را تأیید می‌کند. اما در راستای X در محدوده نور مرئی یک پیک کوچک داریم و بعد از ناحیه مرئی پیک‌های دیگری را نیز مشاهده می‌کنیم. بنابراین بهترین پاسخ اپتیکی در هر دو راستا در این ترکیب مربوط به ناحیه IR و پایین UV می‌باشد، به‌طوری‌که در انرژی‌های بالاتر شاهد افزایش پیک‌های اتلاف هستیم. همان‌طور که اشاره شد در راستای X قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در محدوده نور مرئی مقدار منفی دارد و نشان دهنده وجود اتلاف در این ناحیه می‌باشد. وجود پیک در نمودار تابع اتلاف در محدوده نور مرئی، با نمودار قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک مطابقت کامل دارد.



شکل 6. تابع اتلاف انرژی.

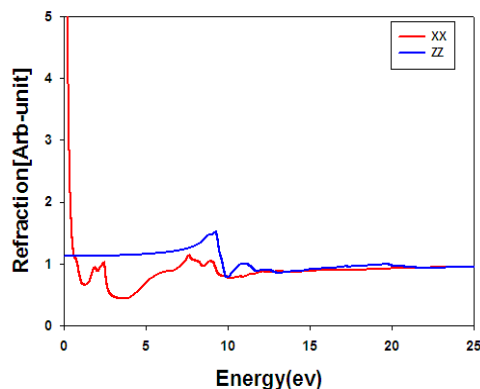
تابع ضریب شکست

ضریب شکست یک کمیت مختلط می‌باشد که بخش حقیقی آن همان ضریب شکست متعارف ماده و بخش موهومی آن ضریب خاموشی است و مستقیماً به جذب

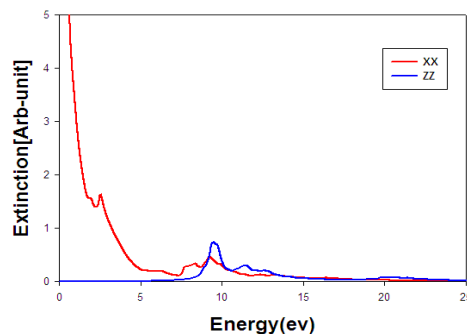
بازتاب

با توجه به نمودار شکل 8 برای حالت $E \parallel Z$ در انرژی 9,76 الکترونولت بیشینه بازتاب را مشاهده می‌کنیم. در محدوده انرژی 0 تا حدود 5,5 الکترونولت و بالای 13,8 الکترونولت بازتاب بسیار به مقدار 0 نزدیک است. در محدوده 5,5 تا 13,8 الکترونولت به غیر از بیشینه ذکر شده بازتاب اندک می‌باشد. در حالت $E \parallel X$ بازتاب روند کاهشی دارد تا در انرژی 2,71 به یک بیشینه رسیده و مجدداً روند کاهشی را طی می‌کند تا در انرژی‌های بالاتر از 5,8 الکترونولت تقریباً به سمت 0 میل می‌کند. مشاهده می‌شود که در انرژی‌های پایین خصوصیات اپتیکی در جهت‌های مختلف متفاوت می‌باشد. برای حالت $E \parallel X$ در انرژی‌های پایین بازتاب تقریباً نزدیک به 100 درصد می‌باشد. در حالی که برای حالت $E \parallel Z$ بازتاب در همان انرژی‌ها نزدیک به 0 است و امواج الکترومغناطیسی از ماده عبور می‌کنند. این امر نشان دهنده آن است که خصوصیات اپتیکی ساختار وابسته به جهت می‌باشد. بازتاب تقریباً 100 درصدی در انرژی‌های پایین برای راستای X گواهی دیگر بر رفتار فلزی بسیار قوی این ترکیب است. در حالی که مقدار استاتیکی بازتاب در راستای محور Z در حدود 0 درصد است که نشان دهنده رفتار عایق‌گونه این ترکیب در این راستا است. با توجه به اینکه در راستای Z حداقل انعکاس و حداقل ضریب شکست مشاهده شد، بنابراین ساختار در این راستا یک عبور دهنده شفاف برای نور است. نمودارهای قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک و اتلاف نیز شفافیت ساختار در راستای Z را تأیید کردند. اما در انرژی‌های بالای 10 الکترونولت رفتار متقارن می‌شود و ضریب بازتاب باز هم به سمت صفر میل می‌کند و در هر دو راستا ماده عبور دهنده خوبی برای

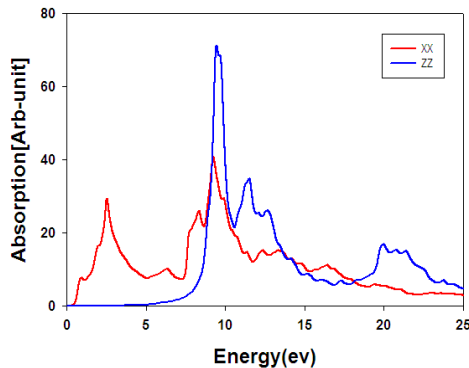
می‌کند و بیشترین اتلاف در ناحیه مرئی وجود دارد. پیک‌های نمودارهای قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک و تابع اتلاف نیز عبور سخت نور در محدوده نور مرئی را تأکید می‌کند. همان‌طور که در نمودار مشاهده می‌شود، در انرژی‌های پایین یک ناهمسانگردی در ضریب خاموشی وجود دارد به طوری که مقدار کاهش دامنه موج الکترومغناطیس در راستای X و در انرژی‌های پایین، بسیار زیاد است و با یک شیب تند تا محدوده 4,91 الکترونولت رو به کاهش داشته است. در مقابل در راستای Z از بازه انرژی 0 تا 7 الکترونولت مقدار کاهش دامنه تقریباً 0 و در نتیجه جذب رخ نمی‌دهد که البته نمودار جذب در شکل 7 نیز آن را تأیید می‌کند.



شکل 7-الف. قسمت حقیقی تابع ضریب شکست.



شکل 7-ب. قسمت موهومی تابع ضریب شکست

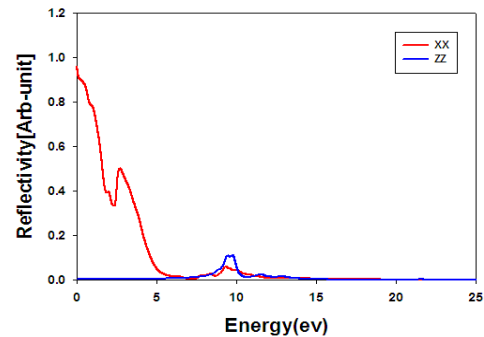


شکل 9. نمودار جذب اپتیکی

هدایت اپتیکی

هدایت اپتیکی به قسمت موهومی تانسور دی‌الکتریک وابسته است. در راستای Z شکل 10 مشاهده می‌شود که هدایت اپتیکی بعد از گافی در حدود 6 الکترون‌ولت شروع می‌شود، بعد از این مقدار هدایت اپتیکی رو به افزایش است تا در انرژی 9/35 الکترون‌ولت به بیشینه خود می‌رسد که بنا بر نتایج بخش‌های گذشته مجدداً رفتار عایق‌گونه در این راستا تأیید می‌شود. در راستای X در انرژی‌های پایین هدایت الکتریکی از مقدار بینهایت کاهش پیدا می‌کند و در انرژی 1/36 الکترون‌ولت به مقدار کمینه می‌رسد و سپس با افزایش مجدد در انرژی 2/47 الکترون‌ولت به میزان بیشینه خود می‌رسد و سپس روند کاهشی را طی نموده و بعد از نوسان‌هایی مجدداً روند کاهشی را پیش می‌گیرد. رفتار فلزی ماده در این راستا مشهود است. کلیه نمودارها در راستای X رفتار فلزی و در راستای Z رفتار نیم‌رسانایی ساختار را تأیید و تکمیل می‌کنند.

نور می‌شود. به علاوه رفتار پایداری را در دو راستا بعد از این مقدار مشاهده می‌کنیم.



شکل 8. نمودار بازتاب

جذب اپتیکی

جذب اپتیکی نتیجه گذار بین نوار و درون نواری می‌باشد که از حالت‌های اشغال شده به حالت‌های اشغال نشده اتفاق می‌افتد. در مورد ضریب جذب برای حالت $E \parallel Z$ با توجه به شکل 9، در انرژی‌های کمتر از 5/5 الکترون‌ولت میزان جذب نور بسیار اندک می‌باشد. جذب اندک در این محدوده از نمودارهای قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک، اتلاف و ضریب خاموشی نیز قابل استخراج است. بیشینه جذب در انرژی 9/45 و 11/52 الکترون‌ولت می‌باشد. بعد از این مقدار انرژی، میزان جذب با نوسان‌هایی رو به کاهش می‌گذارد. برای حالت $E \parallel X$ در محدوده انرژی نور مرئی در انرژی 2/53 الکترون‌ولت میزان جذب بیشینه است. پیک نمودارهای قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک و اتلاف، جذب بالا در این محدوده را تأیید می‌کنند. علاوه بر این نمودار دارای بیشینه دیگری در انرژی 9/28 الکترون‌ولت می‌باشد. در انرژی‌های بالاتر میزان جذب در این راستا کاهش می‌یابد. ناهمسانگردی ماده به دلیل تفاوت میزان جذب در انرژی‌های پایین مشهود است و تأیید مجدد بر خاصیت فلزی در راستای X و رفتار عایق‌گونه در راستای Z می‌باشد.

669.

<https://doi.org/10.1126/Science.1102896>

[2] F. Zhu, W. Chen, Y. Xu, C. Gao, D. Guan, C. Liu, Epitaxial Growth of Two-Dimensional Stanene, *Nature Materials* **14** 10 (2015) 1020.

<https://doi.org/10.1038/nmat4384>

[3] A.K. Geim, I.V. Grigorieva, Van der Waals heterostructure, *Nature* **499** (2013) 419–425.

<https://doi.org/10.1038/nature12385>

[4] Q.H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J.N. Coleman, M.S. Strano, Electronic and optoelectronic properties of two-dimensional transition metal dichalcogenides, *Nature Nanotechnology* **7** (2012) 699–712.

<https://doi.org/10.1038/nnano.2012.193>

[5] A.P. Sergeeva, I.A. Popov, Z.A. Piazza, W.L. Li, C. Romanescu, L.S. Wang, A.I. Boldyrev, Understanding boron through size-selected clusters: Structure, chemical bonding, and fluxionality, *Accounts of Chemical Research* **47** (2014) 1349–1358.

<https://doi.org/10.1021/ar400310g>

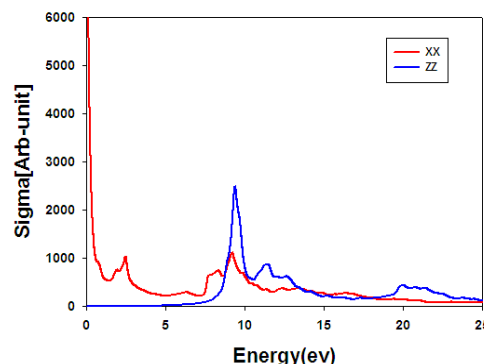
[6] X.J. Wu, J. Dai, Y. Zhao, Z.W. Zhuo, J.L. Yang, X.C. Zeng, Two-dimensional boron monolayer sheets, *ACS Nano* **6** (2012) 7443–7453.

<https://doi.org/10.1021/nl302696v>

[7] Y.Y. Liu, E.S. Penev, B.I. Yakobson, Probing the synthesis of two-dimensional boron by first-principles computations, *Angew. Angewandte Chemie International Edition* **52** (2013) 3156–3159.

<https://doi.org/10.1002/anie.201207972>

[8] A.J. Mannix, X.F. Zhou, B. Kiraly, J.D. Wood, D. Alducin, B.D. Myers, X. Liu, B. L. Fisher, U. Santiago, J.R. Guest, M.J. Yacaman, A. Ponce, A.R. Oganov, M.C. Hersam, N. Guisinger, Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs, *Science* **350** (2016) 1513. DOI: 10.1126/science.aad1080



شکل 10. نمودار هدایت اپتیکی

نتایج

در این مقاله با استفاده از نظریه تابعی چگالی و کد محاسباتی Wien2K به بررسی خصوصیات الکترونی و اپتیکی یکی از ساختارهای بروفن پرداخته شد که به صورت تئوری پیش‌بینی شده است. با توجه به نمودارها، چگالی حالت‌های الکترونی روی سطح فرمی غیر صفر می‌باشد. در این ساختار باندهای رسانش و ظرفیت در تراز فرمی با هم همپوشانی دارند و گاف انرژی صفر است. بنابراین این ساختار خاصیت فلزی دارد، در صورتی که در حالت انبوهه خاصیت نیم‌رسانایی از خود نشان می‌دهد. خواص اپتیکی از جمله قسمت موهومی و حقیقی ثابت دی الکتریک و ضریب شکست، اتلاف انرژی، بازتاب و جذب و هدایت اپتیکی در دو راستای تابش عمود و موازی بر صفحه مورد بررسی و تحلیل قرار گرفت. در راستای صفحه خواص فلزی و در راستای عمود بر صفحه خواص نیم‌رسانایی مشاهده شد. در حالت کلی می‌توان گفت با توجه به اینکه خصوصیات اپتیکی در راستاهای مختلف به صورت متفاوت از یکدیگر عمل می‌کنند، خصوصیات اپتیکی این ماده ناهمسانگرد است.

مرجع‌ها

[1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, Electric field effect in atomically thin carbon films, *Science* **306** (2004) 666–

- 6 8 (2014) 727-731.
<https://doi.org/10.1039/D1SC00534K>
- [16] A. Piazza, H.S. Hu, W.L. Li, Y.F. Zhao, J. Li, L. Wang, Planar hexagonal B36 as a potential basis for extended Single-atom layer boron SheetS, *Nature Communications* **5** (2014) 3113.
<https://doi.org/10.1038/ncomms4113>
- [17] H. Wang, Q. Li, Y. Gao, F. Miao, X.F. Zhou, X. Wan, Strain effects on borophene: ideal Strength, negative PoSSion'S ratioand phonon inStability, *New Journal of Physics* **18** (2016) 073016.
<https://doi.org/10.1088/1367-2630/18/7/073016>
- [18] J. Thakur, M. Singh, H. Saini, M.K. Kashyap, Electronic and magnetic propertieS of Mo doped graphene; Full potential approach, *AIPConference Proceedings* **1661** (2015) 030032.
<httpS://doi.org/10.1063/1.4915420>
- [19] V. Kulish, O. Malyi, C. Persson, P. Wu, Adsorption of metal adatoms on Single-layer PhoSphorene, *Physical Chemistry Chemical Physics* **17** (2014)992.
<https://doi.org/10.1039/C4CP03890H>
- [20] J.Y. Li, H.Y. Lv, W.J. Lu, D.F. Shao, R.C. Xiao, Y.P. Sun, Tuning the electronic and magnetic properties of borophene by 3dtransition-metal atom adsorption. *physics letters A* **189** (2016) 3928-3931.
<https://doi.org/10.1021/jp5058644>
- [21] R. Peköz, M. Konuk, M. Emin Kilic, E. Durgun, Two-DimenSional Fluorinated Boron Sheets: Mechanical, Electronic, and Thermal Properties, *ACS Omega* **3** (2018) 1815–1822.
<https://doi.org/10.1021/acsomega.7b01730>
- [9] W. Li, L. Kong, C. Chena, J. Goua, Sh. Sheng, W. Zhang, H. Lid, L. Chen, P. Cheng, K. Wu, Experimental realization of honeycomb borophene, *Science Bulletin* **63** (2018) 282-286.
<https://doi.org/10.1016/j.Scib.2018.02.006>
- [10] B. Feng, J. Zhang, Q. Zhong, W. Li, S. Li, H. Li, P. Cheng, S. Meng, L. Chen, K. Wu, Experimental realization of two-dimenSional boron Sheets, *Nature Chemistry* **8** (2016) 563-8.
<https://doi.org/10.1038/nchem.2491>
- [11] C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar, J. Hone, Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene. *Science* **321** (2008) 385–388
 DOI: [10.1126/science.1157996](https://doi.org/10.1126/science.1157996)
- [12] B. Peng, H. Zhang, H. Shao, Y. Xu, R. Zhang, H. Zhu, The Electronic, Optical, and Thermodynamic Properties of Borophene from First-principles Calculations. *Journal of Materials Chemistry C* **4** (2016) 3592–3598.
<https://doi.org/10.1039/C6TC00115G>
- [13] A.J. Mannix, Z. Zhang, N.P. GuiSinger, B.I. YakobSon, M.C. Hersam, Borophene as a prototype for Synthetic 2D materials development, *Nature Nanotechnology* **13** (2018) 444–450.
<https://doi.org/10.1038/S41565-018-0157-4>
- [14] Z. Zhang, Y. Yang, G. Gao, B.I. YakobSon, Two-dimenSional boron monolayers mediated by metal Substrates, *Angewandte Chemie International Edition* **54** (2015) 13022–13026.
<https://doi.org/10.1002/anie.201505425>
- [15] H.J. Zhai, Y.F. Zhao, W.L. Li, Q. Chen, H. Bai, H.S. Hu, Z.A. Piazza, W.J. Tian, H.G. Lu, Y.B. Wu, Y.W. Mu, G.F. Wei, Z.P. Liu, J. Li, S.D. Li, L.S. Wang, *Observation of an all-boron fullerene*, *Nature chemistry*

- Many-body Systems* **8** 19 (2019) 47-58.
[10.22055/JRMBS.2018.13959](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2018.13959)
- [26] R. Nemati, M. Ashhadi, D.V. Fakhrabad, First-principles investigation of electronic and mechanical properties of AlN monolayer under hydrogen adsorption, *Journal of Research on Many-body Systems* **10** 4 (2021) 83-93.
[10.22055/JRMBS.2021.16753](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2021.16753)
- [27] E. Mohebbi, N. Ansari, Design of structures including MoS2 monolayer with low absorption at THz range for application in transparent electrodes, *Journal of Research on Many-body Systems* **8** 16 (2018) 13-21.
[10.22055/JRMBS.2018.13632](https://doi.org/10.22055/JRMBS.2018.13632)
- [22] L. Adamska, S. Sharifzadeh, Fine-Tuning the Optoelectronic Properties of Freestanding Borophene by Strain, *ACS Omega* **2** (2017) 8290-8299.
<https://doi.org/10.1021/acsomega.7b01232>
- [23] Z-Q. Wang, T-Y, Lü, H-Q. Wang, Y. P. Feng, J-C. Zheng, Review of borophene and its potential applications. *Frontiers of Physics* **14** 3 (2019) 33403.
[10.1007/s11467-019-0884-5](https://doi.org/10.1007/s11467-019-0884-5)
- [24] X. Wu, J. Dai, Y. Zhao, Z. Zhuo, J. Yang, X.C. Zeng, Two-dimensional boron monolayer Sheets. *ACS Nano* **6** (2012) 7443-7453.
<https://doi.org/10.1021/nn302696v>
- [25] S.F. Taghizadeh, Z.G. Majd, P. Amiri, B. Vaseghi, Effect of adsorption h-BN nano layer on the electronic and structural properties of WS2 monolayer by using first-principles study, *Journal of Research on*