بررسی خواص ساختاری و الکترونی نانو ساختارپنج گوشی دوبعدی آلومینیوم آرسنیک (AlAs5)

صالحی ، خالد[1]؛مرادی، محمود[1]؛دعوت الحق، سعید[1]

[1]بخش فیزیک دانشگاه شیراز، میدان ارم، شیراز

چکیده

با توجه به تحقیقات بر روی نیم‌رسانای دوبعدی پنتاگرافن، در اینجا نانوساختار دوبعدی $AlAs_5$ در فاز پنج‌گوشی موردبررسی قرارگرفته است. این کار با استفاده از روش ابتدابه‌ساکن بر پایه نظریه تابعی چگالی انجام و خواص ساختاری و الکترونی ماده یادشده محاسبه‌شده است. در این نانوساختار ($AlAs_5$) پایداری دینامیکی با نمودار پاشندگی فونونی و پایداری گرمایی ساختار با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به‌دست‌آمده است. با بررسی‌های انجام‌شده بر روی این ترکیب مشاهده می‌شود که تک لایه پنتا آلومینیوم آرسنیک ($AlAs_5$) یک نیم‌رسانای دارای گاف انرژی غیرمستقیم در حدود 1/72 الکترون‌ولت می‌باشد که با استفاده از روش GGA-PBE *به‌دست‌آمده است.*

Investigating the structural and electronic properties of the two-dimensional nanostructure of penta-aluminum arsenic ($AlAs_5$)

Salehi, Khaled[1]; Moradi, Mahmood[1]; Davatolhagh, Saeed[1]

[1]*Department of Physics, shiraz University, shiraz, Iran*

Abstract

According to the calculations on the two-dimensional pentagraphene semiconductor, we consider the compound of $AlAs_5$ in the pentagonal phase, we obtained the structural and electronic properties by using first principle calculations based on the density functional theory. In this nanostructure ($AlAs_5$), dynamic stability has been obtained with phonon scattering diagram and thermal stability of the structure by molecular dynamic simulation. With the investigations carried out on this compound, it can be seen that the single layer of penta-aluminum arsenic ($AlAs_5$) is a semiconductor with an indirect energy gap of 1.72 eV using GGA-PBE calculations.

مقدمه

بعد از کشف گرافن [1] نانو ساختارهای دوبعدی در حوزه نانو بسیار موردتوجه قرار گرفتند. در ابتدا با مطالعات نظری روی برخی از نانو ساختارهای دوبعدی مانند گرافن و نیترید بور بعضی از خواص جالب آن‌ها پیش‌بینی شدند و سال‌ها بعد فیزیکدانان حوزه تجربی موفق به ساخت و مشخصه یابی آن‌ها شدند [3و2].

درمیان این دسته از نانو ساختارها، ترکیبات نیمه‌رسانا دوبعدی به علت دارا بودن گاف انرژی و کاربردهای الکترواپتیکی بسیار موردتوجه قرارگرفته‌اند [5و4]. در این میان اتم‌های پنتا گرافن که دارای ساختار پنج‌گوشی بوده و از پایداری ساختاری و دینامیکی قابل قبولی برخوردار هستند موردتوجه قرار گرفتند. تفاوت این ساختار با دیگر نانو ساختارهای دوبعدی کربن ازجمله گرافن در این است که برای این ساختار دو نوع پیوند اتم کربن با هیبریداسیون های sp^2 و sp^3 وجود دارد، درصورتی‌که تمام پیوندها در گرافن از نوع sp^2 می‌باشد که هر یک به چهار اتم مجاور خود متصل هستند. وجود هم‌زمان این دو نوع هیبریداسیون سبب شده است که این ساختار دارای یک واپیچش صفحه‌ای باشد. مطالعات مختلفی بر روی این ساختار صورت گرفته است [6].

در سال‌های اخیر مطالعات بسیاری در راستای پیدا کردن نانو ساختارهای دوبعدی با ویژگی‌های مشابه با گرافن صورت گرفته است که منجر به پیش‌یابی و فرآوری تجربی ساختارهای شبه گرافنی بسیاری شده است [7-18].

در این مقاله با استفاده از شبیه‌سازی کوانتومی، خواص ساختاری و الکترونی نانوساختار دوبعدی $Al\,As_5$ در فاز پنج‌گوشی و با استفاده از محاسبات ابتدابه‌ساکن در غالب نظریه تابعی چگالی موردبررسی قرار خواهد گرفت. پایداری دینامیکی و گرمایی این نانوساختار با نمودار پاشندگی فونونی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به ترتیب بررسی‌شده است.

روش محاسباتی

محاسبات صورت گرفته در این کار بر اساس روش امواج تخت بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) و کد محاسباتی Wein2k انجام‌شده است [19] ، که برای بسط پتانسیل تبادلی-همبستگی سیستم از تقریب شیب تعمیم‌یافته (GGA-PBE) استفاده‌شده است [20] .

پارامتر همگرایی $R_{Kmax} = 7$ ، G_{max}=14 Ry، $l_{max} = 10$، انرژی جداسازی 8 ریدبرگ، همچنین با روش منوخارست-پک [21] محاسبات الکترونی را با مش بندی ساختار شبکه‌ای 1×10×10 و 1×20×20 در منطقه‌ی اول بریلوئن، بازه‌ی همگرایی بار برابر 0.0001 الکترون‌ولت، در نظر گرفته و محاسبه‌شده است.

از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو (Quantum Espresso) برای محاسبه نمودار پاشندگی فونونی و بررسی پایداری دینامیکی استفاده‌شده است [22]. و سپس در ادامه روند محاسبات از شبه‌پتانسیل Martin-Troullier استفاده‌شده است [23]. همچنین برای ارزیابی پایداری گرمایی از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از بسته محاسباتی $Dmol^3$ در غالب نرم‌افزار Materials Studio انجام‌شده است [24]. در این شبیه‌سازی پایداری ساختار در دمای 500 و 1000 و 1500 درجه کلوین تا مدت زمان 10 پیکوثانیه و با گام‌های زمانی 2 فمتو ثانیه شبیه‌سازی و موردمحاسبه قرارگرفته است.

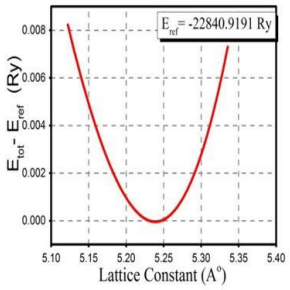
برای اینکه بتوانیم به شکل اولیه نانوساختار دوبعدی $Al\,As_5$ دست‌یابیم به یک سلول پنتا گرافن واحد نیاز داریم که دارای شش اتم کربن با دو هیبریداسیون sp^2 و sp^3 باشند. بطوریکه دو اتم کربن که دارای هیبرید sp^2 هستند و در صفحه میانی قرار دارند با اتم‌های آلومینیوم و آرسنیک و همچنین به چهار اتم کربن که با هیبرید sp^3 که در صفحات بالایی و پایینی وجود داشته را با اتم‌های آرسنیک جایگزین می‌کنیم.

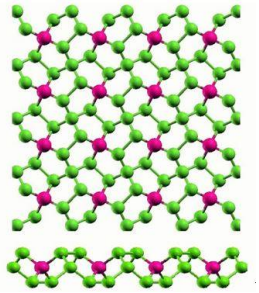
برای دست یافتن به سلول واحد بهینه این نانوساختار، بهینه‌سازی هم‌زمان مختصات اتمی و ابعاد یاخته صورت گرفته است. پس از بهینه‌سازی مختصات اتمی، برای دستیابی به ساختار بهینه‌شده سلول واحد، از رابطه حالت ترمودینامیکی Brich-Murnaghun به شرح زیر استفاده می‌کنیم [25]:

$$E(V) = E_0 + \frac{9B_0V_0}{16}\left\{\left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{2/3} - 1\right]^3 B_0'\right\} + \frac{9B_0V_0}{16}\left\{\left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{2/3} - 1\right]^2 \left[6 - 4\left(\frac{V_0}{V}\right)^{2/3}\right]\right\} \qquad (1)$$

بررسی نتایج

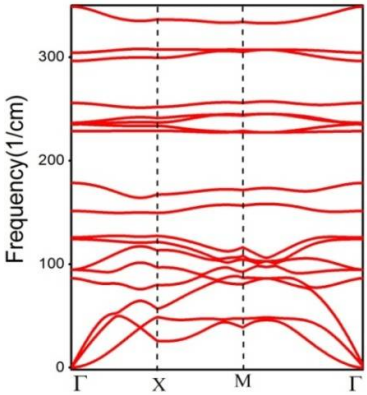
با استفاده ازآنچه که در بالا گفته شد برای بررسی خواص یادشده اقدام به انجام محاسبات نموده‌ایم. با استفاده از این محاسبات مقدار ثابت شبکه سلول به اندازه $5/23\ A^o$ به‌دست‌آمده است. تغییرات انرژی سلول واحد این نانوساختار برحسب حجم سلول واحد آن محاسبه‌شده و با استفاده از این تغییرات انرژی سلول واحد برحسب ابعاد سلول واحد (ثابت شبکه) محاسبه‌شده در نمودار شکل (1-الف) نشان داده‌شده است. شکل (1-ب) نشان‌دهنده این ساختار به‌دست‌آمده در شبکه مکعبی می‌باشد.





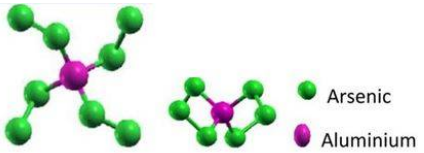
شکل1: (سمت چپ-الف) نمودار تغییرات انرژی سلول واحد برحسب ثابت شبکه. (سمت راست-ب) ساختار در دمای صفر درجه کلوین.

در ادامه برای بررسی پایداری ساختار موردنظر، پاشندگی فونونی آن را که با استفاده از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو محاسبه و در شکل شماره 2 نشان داده‌شده، که حد فرکانس بالای محاسبه‌شده برای این نانو ساختار دوبعدی (cm^{-1}) 394 می‌باشد. ازآنجایی‌که هیچ‌گونه مد منفی در ساختار فونونی مشاهده نمی‌شود بنابراین این مسئله نشان‌دهنده پایداری دینامیکی این نانو ساختار دوبعدی است. در این نمودار گاف هایی وجود دارد که این گاف ها در ناحیه بین شاخه‌های اپتیکی قرارگرفته‌اند که این مقدار فرکانس‌ها در محدوده شاخه‌های اپتیکی است. در شکل 3 نمای روبرو و کناری سلول واحد نشان داده‌شده است.

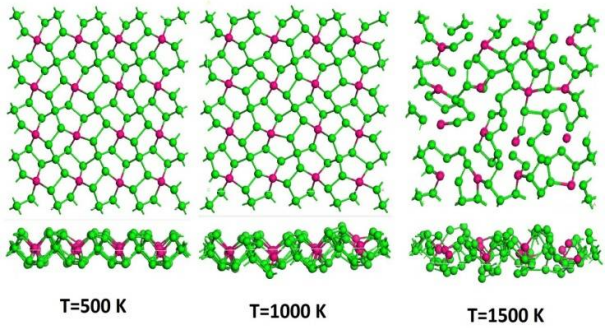


شکل 2: نمودار پاشندگی طیف فونونی ساختار دوبعدی پنتا آلومینیوم آرسنیک.

همچنین برای ارزیابی پایداری گرمایی این نانوساختار با ساختن ابرپاخته به ابعاد 1×4×4 که شامل 96 اتم می‌باشد، رفتار آن را در دماهای 500 و 1000 و 1500 درجه کلوین با استفاده از بسته محاسباتی دینامیک مولکولی Dmol[3] در غالب نرم‌افزار Materials Studio شبیه‌سازی‌شده که در شکل 4 نشان داده‌شده است.



شکل 3: نمای روبرو و کناری سلول واحد.



شکل 4: نمای روبرو و کناری نانوساختار دوبعدی آلومینیوم آرسنیک در دماهای 500 و 1000 و 1500 درجه کلوین بعد از10 پیکو ثانیه.

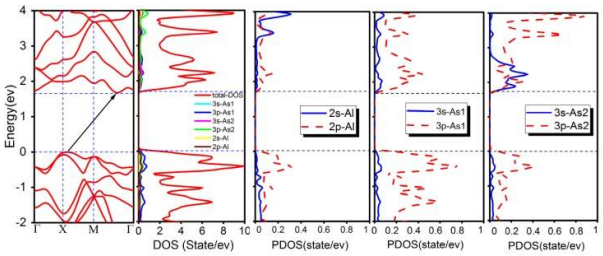
در این شبیه‌سازی پایداری ساختار در برابر دمای 500 و 1000 و 1500 درجه کلوین تا مدت زمان 10 پیکو ثانیه و با بازه‌ی زمانی 2 فمتو ثانیه مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان می‌دهد که این نانوساختار در دماهای 500 و 1000 درجه کلوین پایداری بسیار خوبی دارد ولی در دمای 1500 درجه کلوین پایداری این نانوساختار به هم می‌ریزد. که به این نتیجه خواهیم رسید که دمای ناپایداری این ساختار بالاتر از 1000 درجه کلوین و بین 1000 تا 1500 درجه کلوین می‌باشد. بااین‌همه کارایی زیادی در دستگاه‌های الکترونیکی با دمای بالا را برای این سیستم به ارمغان می‌آورد.

خواص الکترونی

در این مرحله خواص الکترونی نانوساختار دوبعدی پنتا آلومینیوم آرسنیک ($Al\ As_5$) موردبررسی قرار می‌گیرد. به‌منظور بررسی خواص الکترونی این ترکیب از ساختار نواری انرژی با تقریب GGA-PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) استفاده‌شده. نمودار ساختار نواری، چگالی حالات کل و همچنین چگالی حالات جزئی تک لایه این نانوساختار در شکل 5 نشان داده‌شده است.

با توجه به شکل (a) 5 می‌توان گفت که این ماده یک نیم‌رسانای غیرمستقیم با گاف نواری 1/72 الکترون‌ولت با استفاده از محاسبات PBE به‌دست‌آمده است. همان‌گونه که مشاهده می‌کنیم، بیشینه حالت نوار ظرفیت آن در نقطه X و کمینه

حالت‌های نوار رسانش در نقطه‌ای بین M و Γ در منطقه اول بریلوئن قرارگرفته‌اند. برای شکل 5 (c,d,e) چگالی حالات جزئی رسم شده است. در حالت تک ساختاری که در شکل 5 (b) مشاهده می‌شود یک نوع اتم آلومینیوم و دو نوع اتم آرسنیک به‌صورت As_2 و Al با هیبریداسیون sp^2 که قابلیت پیوند با چهار اتم As_1 وجود دارند که در ناحیه‌ی میانی ساختار قرارگرفته و اتم As_1 با هیبریداسیون sp^3 که در نواحی بالایی و پایینی واقع‌شده و قابلیت پیوند با سه اتم را دارند که هر اتم As_1 با دو اتم As_2 و یک اتم Al پیوند دارد. همان‌طور که از شکل‌های 5 (c,d,e) مشاهده می‌شود اوربیتال p نه‌تنها در تشکیل نوار ظرفیت بلکه در شکل‌گیری تراز رسانش نیز نقش قابل‌توجهی دارند. در این میان نقش اوربیتال p اتم As_1 در نوار ظرفیت و نقش اوربیتال p اتم As_2 در نوار رسانش نقش بیشتری دارند.



شکل5: (a) ساختار نواری. (b)چگالی حالت‌های الکترونی کل. (c,d,e) چگالی حالات جزئی نانو ساختار دوبعدی آلومینیوم آرسنیک.

و در نهایت می‌توان این‌گونه نتیجه گرفت که ماده موردبررسی دارای پایداری مناسبی می‌باشد و این پایداری را طبق محاسبات ما تا دماهای بالایی حفظ می‌کند و این می‌تواند نوید این باشد که ماده موردبررسی ما قابلیت کاربرد در قطعات الکترونیکی خاصی که لازم است تا دماهای بالا قابلیت خود را حفظ کند داشته باشد. و این یکی از مزیت‌های این ساختار می‌باشد چراکه خنک‌سازی و تهویه دستگاه‌های الکترونیک مستلزم صرف هزینه و انرژی الکتریکی بالایی برای تهویه در دستگاه‌هایی مانند کامپیوترها می‌باشد و به کار بردن قطعاتی با ترکیب این ماده می‌تواند باعث صرفه‌جویی مناسبی شود.

مرجع‌ها

[۱] K.S. Novoselov, et al, "*Electric field effect in atomically thin carbon films*", *Science*. **306** (2004) 666.

[۲] C. R. Dean and A. F. Young and I. Meric and C. Lee and L. Wang and S. Sorgenfrei and K. Watanabe and T. Taniguchi and P. Kim and K. L. Shepard and et. al., "*Boron Nitride Substrates for High-Quality Graphene Electronics*";*Nat. Nanotechnol*. **5** (2010) 722-726.

[۳] G. R. Bhimanapati and L. Zhang, "*Recent Advances in Two – Dimensional Materials beyond graphene*"; *ACS Nano*9, No. **12** (2015) 11509–11539.

[٤] J. Hicks and A. Tejeda and M. S. Nevius, "*A wide band gap metal-semiconductor-metal nanostructure made entirely from graphene*"; *NATURE PHYSICS VOLUME 9* (2012) 49-54.

[٥] F. Pengyu and Y. Zongfu and F. Shanhui, "*Optical Fano resonance of an individual semiconductor nanostructure*"; *NATURE MATERIALS***13** (2014) 471-475.

[٦] W. Xufei and V. Varshney; "*Hydrogenation of Penta-Graphene Leads to Unexpected Large Improvement in Thermal Conductivity*"; *Nano Lett***16** (2016) 3925–3935.

[٧] S. Zhang, et al, "*Penta-graphene: A new carbon allotrope*", *Proc. Natl. Acad. Sci*. **112** (2015) 2372.

[٨] S. Cahangirov, et al, "*Two- and One-Dimensional Honeycomb Structures of Silicon and Germanium*", *Phys. Rev. Lett*. **102** (2009) 236804.

[٩] M. Wu, et al, "*Nine new phosphorene polymorphs with non-honeycomb structures: A much extended family*", *Nano lett.* **15** (2015) 3557.

[١٠] S.L. Zhang, et al, "*Atomically Thin Arsenene and Antimonene: Semimetal–Semiconductor and Indirect– Direct Band - Gap Transitions*", *Angew. Chem. Int. Ed*. **54** (2015) 3112.

[١١] S. L. Zhang, et al, "*Semiconducting Group 15 Monolayers: A Broad Range of Band Gaps and High Carrier Mobilities*", *Angew. Chem. Int. Ed.* **128** (2016) 1698.

[١٢] E. Aktürk, O.Ü. Aktürk, S. Ciraci, "*Single and bilayer bismuthene: Stability at high temperature and mechanical and electronic properties*", *Phys. Rev. B*. **94** (2016) 014115.

[١٣] S. Zhang, et al, "*Semiconductor-topological insulator transition of two-dimensional SbAs induced by biaxial tensile strain*", *Phys. Rev. B.* **93** (2016) 245303.

[١٤] J. Ji, et al, "*Two-dimensional antimonene single crystals grown by van der Waals epitaxy*", *Nat. Commun*. **7** (2016) 13352.

[١٥] S. Zhang, et al, *Antimonene Oxides: Emerging Tunable Direct Bandgap Semiconductor and Novel Topological Insulator*", *Nano Lett.* **17**, 3434 (2017).

[١٦] A. Lopez-Bezanilla, P.B. Littlewood, "*σ–π-Band Inversion in a Novel Two-Dimensional Material*", *J. Phys. Chem. C.* **119** (2015) 19469.

[١٧]. S. Zhang, et al, "*Beyond Graphitic Carbon Nitride: Nitrogen-Rich Penta-CN2 Sheet*", *J. Phys. Chem. C.* **120** (2016) 3993.

[١٨] F. Li, et al, "*Flexible structural and electronic properties of a pentagonal B2C monolayer* via *external strain: a computational investigation*", *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 24151.

[١٩] P. Blaha, et al, "*An augmented PlaneWave+ Local Orbitals Program for calculating crystal properties revised edition WIEN2k 13.1 (release 06/26/2013)* ". *Wien2K Users Guide, ISBN* 3-95010 31-1-2.

[٢٠] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, "*Generalized Gradient Approximation Made Simple*", *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865.

[٢١] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, "*Special points for Brillouin-zone integrations*", *Phys. Rev. B* **13** (1976) 5188.

[٢٢] P. Giannozzi, et al, "*Quantum espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials*", *Journal of Physics Condensed Matter*. **21** (2009) 395502.

[٢٣] N. Troullier, J.L. Martins, "*Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations*", *Phys. Rev. B.* **43** (1991) 1993.

[٢٤] B. Delley, *From molecules to solids with the DMol3 approach, The Journal of Chemical Physics.* **113** (2000) 7756.

[٢٥] F. Birch, "*Equation of state and thermodynamic parameters of NaCl to 300 kbar in the high - temperature domain*", *J. Geophys. Res. B.* **83** (1978) 1257.