

# بررسی خواص فیزیکی نانونوار تک لایه $P_2Si$ با ساختار لبه‌های مختلف در ساختار پنتاگرافن

برزه کار، المیرا<sup>۱</sup>؛ حکمت‌شعار، محمدحسین<sup>۱</sup>؛ حسین‌پور، پریناز<sup>۱</sup>؛ رضایی، قاسم<sup>۲</sup>؛ جلیلیان، جعفر<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی سهند، تبریز، ایران

<sup>۲</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه یاسوج، یاسوج، ایران

## چکیده

در این مقاله، با استفاده از نظریه تابعی چگالی به بررسی خواص فیزیکی در نانونوارهای یک بعدی  $P_2Si$  با ساختار لبه‌های مختلف فسفر-فسفر، فسفر-سیلیسیم و سیلیسیم-سیلیسیم پرداخته‌ایم. محاسبات ما نشان داد که نانونوارها با هر سه لبه مختلف، دارای پایداری ترمودینامیکی هستند. نانونوار با ساختار لبه فسفر-فسفر دارای خاصیت نیم‌رسانایی است و نانونوارهای با ساختار لبه فسفر-سیلیسیم و سیلیسیم-سیلیسیم دارای خاصیت شبه فلزی می‌باشند و این موضوع وجود خاصیت مغناطیسی در این نانونوارها را آشکار می‌کند. علاوه بر این، ما نشان داده‌ایم که سهم اتم‌های لبه در خواص الکترونی غالب‌تر از اتم‌های مرکزی در نانونوارها است. یافته‌های ما نشان می‌دهد که نانونوارهای پنتا  $P_2Si$  با ساختار لبه‌های مختلف می‌توانند به عنوان نامزدهای امیدوارکننده‌ای برای کاربردهای الکترونیکی و اپتوالکترونیکی استفاده شوند.

واژه‌های کلیدی: پنتاگرافن، چگالی حالت‌های جزئی، تئوری تابعی چگالی، گاف انرژی.

## Investigation of physical properties of $P_2Si$ monolayer nanoribbon with different edge structure in Penta-graphene structure

Barzekar, Elmira<sup>1</sup>; Hekmatshoar, Mohammad Hossein<sup>1</sup>; Hosseinpour, Parinaz<sup>1</sup>; Rezaei, Ghasem<sup>2</sup>; Jalilian, Jaafar<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran

<sup>2</sup> Department of Physics, University of Yasouj, Yasouj, Iran

## Abstract

*In this article, we have investigated the physical properties of  $P_2Si$  nanoribbons with different edge structures of phosphorus-phosphorus, phosphorus-silicon, and silicon-silicon, by using the density functional theory. Our calculations showed that nanoribbons with all three different edges have thermodynamically stabilities. The nanoribbon with phosphorus-phosphorus edge structure are semiconductors with different energy gaps for spin up and down, and the nanoribbons with phosphorus-silicon and silicon-silicon edge structure have quasi-metallic properties. These findings exhibit existence of magnetic properties in these nanoribbons. Furthermore, we have shown that the contribution of edge atoms to the electronic properties is more dominant than that of central atoms in nanoribbons. Our findings show that Penta- $P_2Si$  nanoribbons with different edge structures can be used as promising candidates for electronic and optoelectronic applications.*

**Keywords:** Penta-graphene, partial density of states, density functional theory, band gap.

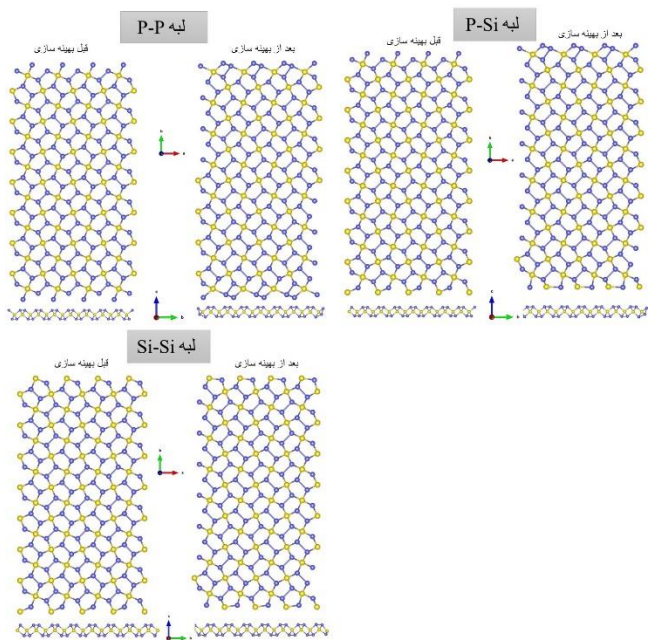
PACS No. 73, 81

می‌باشند. این مواد در زمینه‌هایی مانند فتولتائیک‌ها، نیم‌رساناها، الکترودها و تصفیه آب کاربرد دارند. در دو دهه اخیر، کشف گرافن [۱] و ویژگی‌های استثنایی الکترونی و مغناطیسی آن توجه بسیاری

## مقدمه

مواد دو بعدی، که گاهی اوقات به عنوان مواد تک‌لایه مورد اشاره قرار می‌گیرند، موادی کریستالی متشکل از یک یا چند لایه از اتم‌ها

مختلف، که در شکل ۱ از نمای بالایی و جانبی نشان داده شده، انجام می‌شود.



شکل ۱: نمای بالایی و جانبی از ساختار نانونوار با عرض هشت برابر یاخته پایه با سه ساختار لبه‌ی مختلف

محاسبات این پژوهش براساس محاسبات تابعی چگالی کوهن-شم می‌باشد و از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو [۱۴] استفاده شده است. در این بسته محاسباتی، الکترون‌های مغزی که تأثیر محسوسی در خواص الکترونی و پیوندهای شیمیایی ندارند، با شبه‌پتانسیل‌های مناسب جایگزین می‌شوند. در این محاسبات با استفاده از روش مونخورست-پک نقاط فضای وارون در ناحیه اول بریلوئن به صورت  $12 \times 12 \times 1$  برای محاسبات الکترونی شبکه‌بندی شده است. همچنین برای حذف برهمکنش بین نانونوارهای مجاور، در دو راستای عمود و همچنین در راستای عرض نانونوارها، خلأ ۱۲ آنگستروم را ایجاد کرده‌ایم.

### بحث و نتیجه‌گیری

انرژی همبستگی نانونوارها به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$E_{\text{coh}} = \frac{(E_{P_2Si} - n_p E_p - n_{Si} E_{Si})}{n_p + n_{Si}}$$

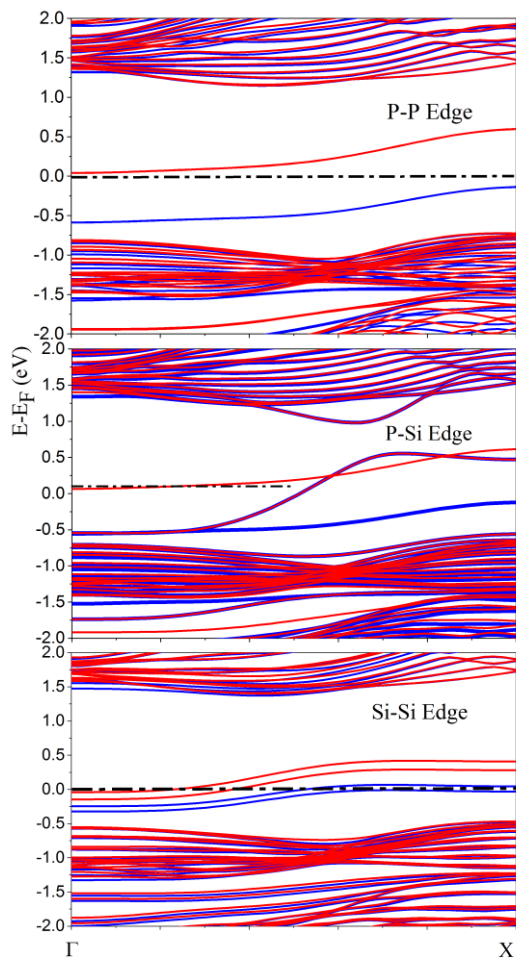
از دانشمندان را به خود جلب کرده است. در این میان، نتایج تحقیقات دانشمندان نشان داد که مشتقات گرافنی از جمله نانونوارهای گرافنی و ریزساختارهای نانومتری آن، برای استفاده در صنایع اسپینترونیک و نانوآلکترونیک مناسب هستند. بجز گرافن، آلوتروپ‌های مختلف دوبعدی زیادی تاکنون بررسی شده‌اند.

در میان مواد دوبعدی جدید، ساختار پنتاگرافن [۲]، که شامل اتم‌های کربن با هیبریداسیون  $sp^2$  و  $sp^3$  در ساختار پنج ضلعی می‌باشد، توجه ویژه‌ای را به خود جلب کرده است. این ساختار دارای تقارن  $p-421m$  است و می‌تواند تا دمای  $1000\text{K}$  را تحمل کند و دارای خاصیت نیم‌رسانایی با گاف انرژی غیرمستقیم  $3/25\text{ eV}$  است و می‌توان خواص الکترونی آن را با روش‌های مختلف تغییر داد. با برش صفحات دوبعدی پنتاگرافن در جهت‌های مختلف کریستالوگرافی، نانونوارهای پنتاگرافن یک‌بعدی با لبه‌های مختلف زیگزاگ، آرمچیر و دندان‌های بدست می‌آید [۳]. نانونوارهای یک‌بعدی به دلیل اثرات محصور شدن کوانتومی، گاف انرژی بزرگتری از ساختار دوبعدی‌شان دارند. همچنین خواص الکترونی آن‌ها تحت تأثیر ماهیت لبه‌های نانونوارها می‌باشد. تعداد محدودی از نانونوارهای پنتاگونال تاکنون بررسی شده‌اند [۴-۱۳]. ما خواص ساختاری و الکترونی نانونوارهای پنتاگونال  $P_2Si$  با ساختار لبه‌های مختلف فسفر-فسفر (P-P)، فسفر-سیلیسیم (P-Si) و سیلیسیم-سیلیسیم (Si-Si) را با استفاده از تئوری تابعی چگالی مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

### روش انجام محاسبات

در این تحقیق از ابریاخته‌هایی با عرض‌های مختلف از دو تا هشت برابر یاخته سلول واحد نانونوار  $P_2Si$ ، که در راستای عرض نانونوار با سه ساختار لبه مختلف P-Si، P-P و Si-Si گسترش یافته، استفاده می‌شود. برای یافتن نانونوار با عرض بهینه، چگالی حالت‌های جزئی برای همه نانونوارها با ساختار لبه‌های مختلف محاسبه شد. سپس با مقایسه چگالی حالت‌های جزئی برای اتم در مرکز نانونوارها با چگالی حالت‌های جزئی همان اتم در ساختار دوبعدی  $P_2Si$ ، نانونوار با عرض هشت برابر یاخته سلول واحد، به عنوان عرض بهینه تعیین شد. همه محاسبات برای عرض بهینه در سه ساختار لبه

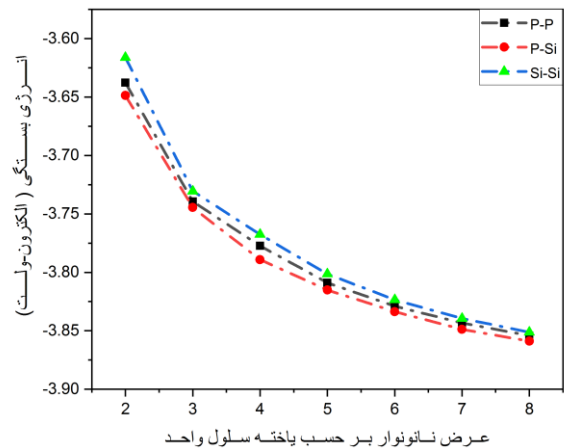
خاصیت شبه‌فلزی از خود نشان می‌دهد، این موضوع نشان دهنده وجود خاصیت مغناطیسی در این ساختارها می‌باشد.



شکل ۳: نمودار ساختار نواری برای سه ساختار لبه مختلف با عرض بهینه هشت برابر سلول واحد برای نانونوارهای P<sub>2</sub>Si

یکی دیگر از کمیت‌های محاسبه شده، چگالی حالت‌های جزئی برای نانونوارهای Penta-P<sub>2</sub>Si است. چگالی حالت‌های جزئی یک کمیت فیزیکی بسیار مفید است که به طور کامل تمام ویژگی‌های اصلی ساختارهای نواری یک بعدی و مشارکت‌های هر کدام از اوربیتال‌های مداری در باندهای انرژی را نشان می‌دهد. منطقه خالی در چگالی حالت‌های جزئی بین بالاترین حالت اشغال شده و پایین‌ترین حالت اشغال نشده بدین معناست که هیچ حالتی در نوار انرژی برای اشغال شدن وجود ندارد و گاف انرژی در ساختارهای نواری یک بعدی را نشان می‌دهد. در شکل ۴ چگالی حالت‌های جزئی برای اتم‌های مرکزی و اتم‌های لبه در نانونوارها رسم شده

که در آن  $E_{P_2Si}$ ،  $E_P$  و  $E_{Si}$  به ترتیب برابر انرژی کل نانونوار P<sub>2</sub>Si و انرژی کل اتم‌های منزوی فسفر و سیلیسیم است و  $n_p$  و  $n_{si}$  تعداد اتم‌های فسفر و سیلیسیم در سوپرسل هستند. نمودار تغییرات انرژی همبستگی برحسب عرض نانونوارها برای سه ساختار با لبه‌های مختلف P-P، P-Si و Si-Si در شکل ۲ نشان داده شده است.



شکل ۲: نمودار تغییرات انرژی همبستگی برحسب عرض نانونوارها برای سه ساختار لبه مختلف

مقدار انرژی همبستگی منفی نشان دهنده آن است که ساختار از نظر انرژی مطلوب است و نانونوار پایداری ترمودینامیکی دارد. انرژی همبستگی با افزایش عرض نانونوارها، کاهش یافته و سیستم پایدارتر می‌شود. همانطور که از روی نمودار ملاحظه می‌شود، نانونوار با ساختار لبه P-Si کمترین انرژی همبستگی را دارد و پایدارترین نانونوار در مقایسه با نانونوارهای دیگر است.

پراکندگی انرژی در امتداد نقاط پرتقارن در ساختارهای نواری می‌تواند خواص الکترونی ساختارها را مشخص کند. برای بررسی خواص الکترونی نانونوارها، ساختار نواری نانونوارها را محاسبه کرده‌ایم. ساختار نواری نانونوارها با سه ساختار لبه مختلف در شکل ۳ نشان داده شده است. نمودارهای قرمز مربوط به ساختار نواری با اسپین پایین و نمودارهای آبی مربوط به ساختار نواری با اسپین بالا هستند. نانونوار با ساختار لبه P-P خاصیت نیم‌رسانایی با گاف انرژی غیرمستقیم ۰/۲۸ eV برای اسپین بالا و ۰/۷۶ eV برای اسپین پایین نشان می‌دهند و برای نانونوارهای با ساختار لبه P-Si و Si-Si

## مرجع ها

[1] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D. E., Zhang, Y., Dubonos, S. V., ... & Firsov, A. A. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, 306(5696), 666-669.

[2] Zhang, S., Zhou, J., Wang, Q., Chen, X., Kawazoe, Y., & Jena, P. (2015). Penta-graphene: A new carbon allotrope. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 112(8), 2372-2377.

[3] Yuan, P. F., Zhang, Z. H., Fan, Z. Q., & Qiu, M. (2017). Electronic structure and magnetic properties of penta-graphene nanoribbons. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19(14), 9528-9536.

[4] Dantas, M. A. L., Frazão, N. F., Azevedo, D. L., & Lima, J. R. (2021). Electronic, magnetic and optical properties of penta-BN2 nanoribbons: A first principles study. *Computational Materials Science*, 190, 110275.

[5] Correa, J. D., Pacheco, M., Bravo, S., & Chico, L. (2020). Electronic and magnetic properties of pentagonal nanoribbons. *Carbon*, 162, 209-219.

[6] Mi, T. Y., Khanh, N. D., Ahuja, R., & Tien, N. T. (2021). Diverse structural and electronic properties of pentagonal SiC2 nanoribbons: A first-principles study. *Materials Today Communications*, 26, 102047.

[7] Tien, N. T., Van On, V., Thi Bich Thao, P., & Le Thanh, N. Insights on Modulating Electronic and Transport Properties of the Sawtooth-Sawtooth Penta-SiC2 Nanoribbons Under Uniaxial Strain by First Principles Calculations.

[8] Mi, T. Y., Triet, D. M., & Tien, N. T. (2020). Adsorption of gas molecules on penta-graphene nanoribbon and its implication for nanoscale gas sensor. *Physics Open*, 2, 100014.

[9] He, C., Wang, X. F., & Zhang, W. X. (2017). Coupling effects of the electric field and bending on the electronic and magnetic properties of penta-graphene nanoribbons. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19(28), 18426-18433.

[10] Li, Y. H., Yuan, P. F., Fan, Z. Q., & Zhang, Z. H. (2018). Electronic properties and carrier mobility for penta-graphene nanoribbons with nonmetallic-atom-terminations. *Organic Electronics*, 59, 306-313.

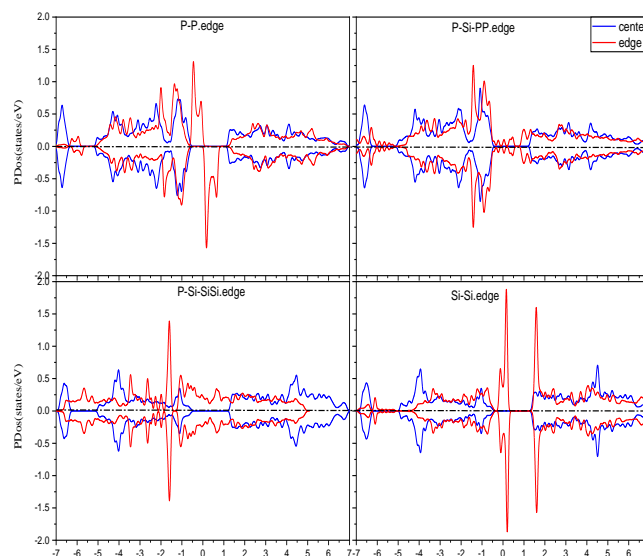
[11] Yuan, P. F., Zhang, Z. H., Fan, Z. Q., & Qiu, M. (2017). Electronic structure and magnetic properties of penta-graphene nanoribbons. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19(14), 9528-9536.

[12] Tien, N. T., Thao, P. T. B., & Chuong, D. H. (2022). First-principles study of electronic and optical properties of defective sawtooth penta-graphene nanoribbons. *Computational Materials Science*, 203, 111065.

[13] Wu, T., Yao, M., Li, J., Li, M., & Long, M. (2020). First-principles prediction of the electronic property, carrier mobility and optical absorption in edge-modified pristine sawtooth penta-graphene nanoribbons (SSPGNRs). *Results in Physics*, 17, 103103.

[14] Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... & Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of physics: Condensed matter*, 21(39), 395502.

است. همانطور که مشاهده می شود، سهم اتم های لبه در نزدیکی تراز فرمی در ترازهای انرژی غالب تر از اتم های غیر لبه است.



شکل ۵: چگالی حالت های جزئی برای اتم های لبه و اتم های مرکزی نانونوارها با ساختار لبه های مختلف در  $P_2Si$

## نتیجه گیری

در این کار ما نانونوارهای پنتاگونال  $P_2Si$  با ساختار لبه های مختلف را بررسی کرده و عرض بهینه را در عرض هشت برابر یافته پایه نانونوار  $P_2Si$  بدست آوردیم. نانونوار با ساختار لبه P-Si کمترین انرژی همبستگی را دارد و پایدارترین نانونوار است. همچنین نانونوار با ساختار لبه P-P خاصیت نیم رسانایی با گاف انرژی غیرمستقیم ۱/۲۸ eV برای اسپین بالا و ۰/۷۶ eV برای اسپین پایین نشان می دهند و نانونوارهای با ساختار لبه Si-Si و P-Si خاصیت شبه فلزی از خود نشان می دهد که این موضوع نشان دهنده وجود خاصیت مغناطیسی در این ساختارها می باشد. علاوه بر این، ما نشان داده ایم که سهم اتم های لبه در خواص الکترونی غالب تر از اتم های مرکزی در نانونوارها است. یافته های ما نشان می دهد که نانونوارهای Penta- $P_2Si$  با ساختار لبه های مختلف می توانند به عنوان نامزدهای امیدوارکننده ای برای کاربردهای الکترونیکی و اپتوالکترونیکی استفاده شوند.