

## بررسی نظری تاثیر کرنش بر خواص الکترونیکی تک لایه آنتیمونین

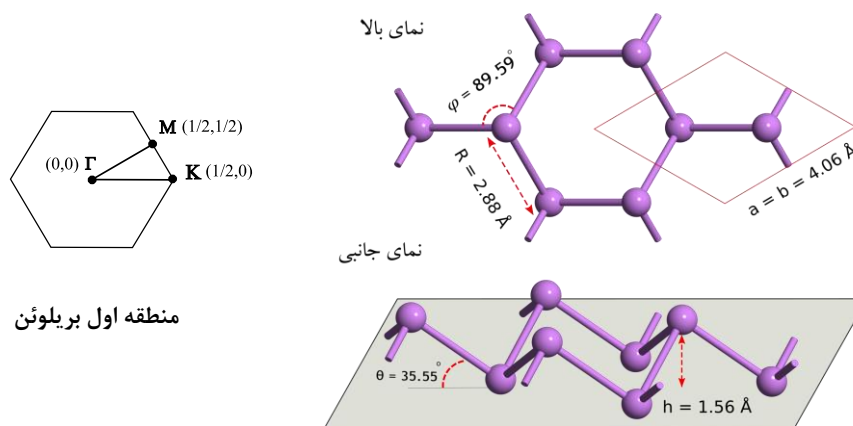
شیر محمدی مزوشی<sup>۱</sup>، سحر ایزدی ویشکایی<sup>۱</sup>، میثم باقری تاجانی<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup> دانشگاه گیلان، دانشکده علوم پایه

### چکیده

در این مطالعه، تأثیر کرنش بر خواص الکترونیکی تک لایه آنتیمونین را به صورت نظری و با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) بررسی نمودیم. ساختار نواری محاسبه شده برای حالت پایه، پیش بینی می کند که آنتیمونین یک نیمه رسانای با گاف غیر مستقیم به اندازه  $1.23 \text{ eV}$  است. با اعمال کرنش کششی دو محوره، می توان گاف نواری را در این ماده تنظیم کرد. در کرنش  $4\%$  یک گذار غیرمستقیم - مستقیم دیده می شود و اندازه گاف نواری به مقدار بیشینه  $1.58 \text{ eV}$  می رسد. گاف قابل تنظیم و گذار مستقیم، می تواند نوید بخش کاربرد های بالقوه آنتیمونین در اپتو الکترونیک و ترانزیستور های اثر میدان (FET) باشد.

مواد دو بعدی (2D) مانند گرافن، آرسنن، و فسفرن، به خاطر خواص منحصر بفرد و کاربردهای نوید بخش شان در زمینه قطعات الکترونیکی، کامپوزیت ها، ذخیره انرژی و حسگرها، توجه پژوهشی زیادی را به خود جلب نموده اند [۱]. اخیراً تک لایه های عناصر گروه V به عنوان مواد دو بعدی جدیدی با خواص الکترونیکی نیمه رسانایی مطرح شده اند [۲]. پایداری نوع جدیدی از مواد دو بعدی، آنتیمونین<sup>۱</sup>، شامل تک لایه اتم های آنتیمون مورد تایید قرار گرفته است [۳]. آنتیمونین  $\beta$  پایدار ترین آلوتروپ آنتیمونین [۱]، به صورت یک شبکه لانه زنبوری خمیده می باشد. در این مطالعه خواص الکترونیکی آنتیمونین  $\beta$  را به طور نظری بررسی کردیم.



منطقه اول بریلوئن

شکل ۱ پیکر بندی ساختاری و منطقه اول بریلوئن تک لایه آنتیمونین با ساختار شش گوشه خمیده. اندازه سلول واحد، طول پیوند و زاویه پیوند ها به ترتیب  $4.06 \text{ \AA}$ ،  $2.88 \text{ \AA}$  و  $89.59^\circ$  محاسبه شد. همچنین ساختار دارای یک خمیدگی به ارتفاع  $1.56 \text{ \AA}$  است که باعث می شود بر خلاف گرافن، در یک صفحه قرار نداشته باشد.

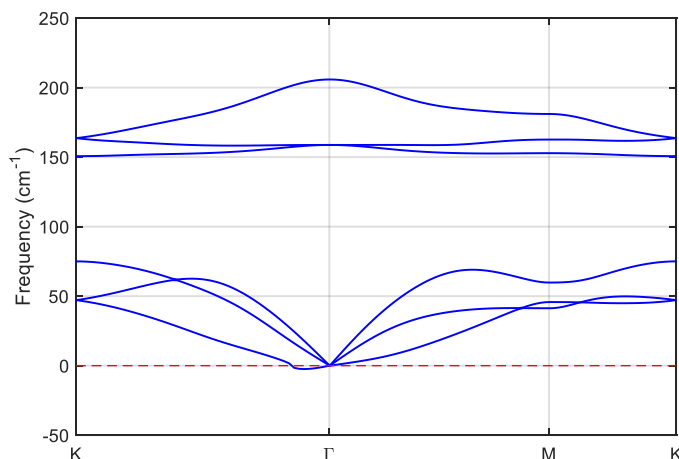
در مطالعه حاضر، برای محاسبات اصول اولیه از نظریه تابعی چگالی (DFT)، از طریق نرم افزار محاسباتی Virtual NanoLab (Atomistix ToolKit) استفاده کردیم. پتانسیل های تبادل-همبستگی از طریق تابعی تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) با پارامتر بندی پرده، بورک و اورنرزهوف<sup>۲</sup> (PBE) [۴] تقریب زده شد. برای تقسیم بندی

<sup>۱</sup> Antimonene

<sup>۲</sup> J. P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof

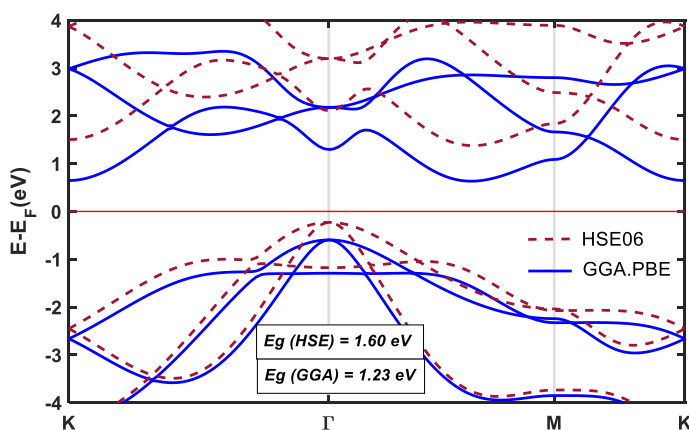
منطقه بریلوئن از تعداد  $1 \times 21 \times 21$  نقطه  $k$  در فضای وارون استفاده کردیم. بهینه کردن ساختار از طریق کمینه کردن نیرو و تنش، به ترتیب تا اندازه‌های  $0.001 \text{ eV/\AA}$  و  $0.001 \text{ GPa}$  انجام گرفت.

ساختار پایه آنتیمون  $\beta$ ، شش گوشه خمیده (به معنای وجود پیوندهای خارج از صفحه)، و دارای دو اتم آنتیموان در یک سلول واحد می‌باشد (شکل ۱). پس از بهینه سازی، اندازه ثابت شبکه و طول پیوند، به ترتیب  $4.06 \text{ \AA}$  و  $2.88 \text{ \AA}$  محاسبه شد. نتایج ما توافق خوبی را با کارهای نظری پیشین دارد [۱, ۵, ۶]. با محاسبه پاشندگی فونونی، هیچ مود موهومی ای مشاهده نکردیم، بدین ترتیب ساختار ما از نظر ارتعاشی پایدار ارزیابی می‌شود.



شکل ۲ پاشندگی فونونی آنتیمون. به غیر از یک نرم شدگی جزئی در نزدیکی نقطه  $\Gamma$  هیچ مود موهومی مشاهده نمی‌شود.

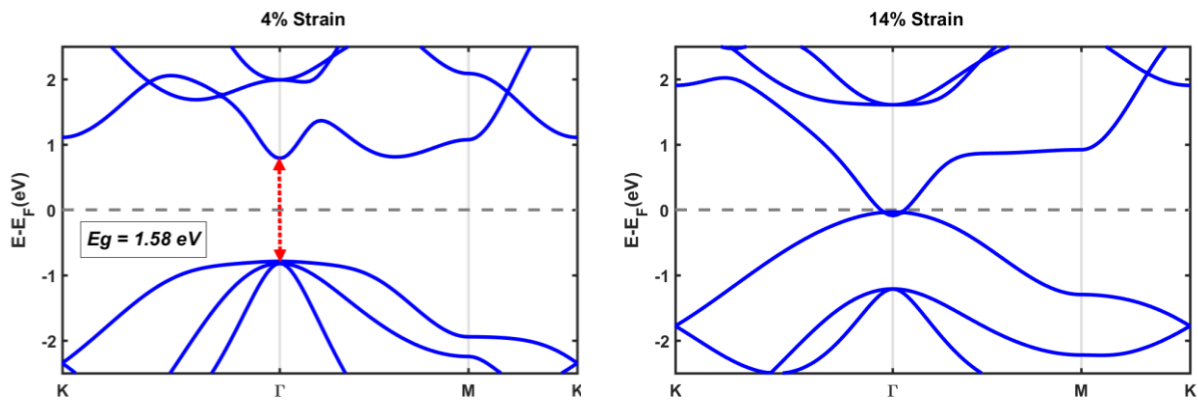
ساختار نواری حالت تعادل (بدون کرنش) (شکل ۳) برای آنتیمون، در سطح نظری GGA، یک گاف نواری غیر مستقیم در ناحیه میان نقاط  $\Gamma$  و  $K$  به اندازه  $1.23 \text{ eV}$ ؛ و در سطح نظری HSE یک گاف نواری غیر مستقیم در ناحیه بین نقاط  $\Gamma$  و  $M$ ، به اندازه  $1.60 \text{ eV}$  را پیش بینی می‌کند. این نتایج در مورد آنتیمون، و دیگر تک‌لایه های گروه V با مطالعات دیگر در توافق است [۳, ۷, ۸].



شکل ۳ ساختار نواری آنتیمون  $\beta$  در حالت تعادل. انرژی فرمی به نقطه صفر منتقل شده است. سطوح نظری GGA و HSE به ترتیب با خطوط آبی پر و قهوه ای خط چین نمایش داده شده اند. گاف نواری برای GGA،  $1.23 \text{ eV}$ ، و برای HSE،  $1.60 \text{ eV}$  محاسبه شد.

یک گاف نواری غیر مستقیم می تواند برای تولید ترانزیستور های اثر میدان (FET) نوید بخش باشد؛ ولی برای کاربرد های اپتوالکترونیکی، مانند سلول های خورشیدی، یک گاف نواری مستقیم از اهمیت بالایی برخوردار است. آیا می توان با اعمال کرنش در ساختار، گاف نواری را تنظیم کرد، و یک گذار غیر مستقیم به مستقیم مشاهده نمود؟

کرنش دو محوره به صورت  $\epsilon = \frac{a_0 - a}{a_0}$  تعریف می شود، که در آن  $a_0$  و  $a$  به ترتیب ثابت های شبکه در حالت های تعادل و کرنش یافته هستند [۹]. به خوبی می دانیم که اعمال کرنش می تواند نقش مهمی را در تنظیم و بهبود خواص الکترونیکی مواد داشته باشد. از طریق محاسبه منحنی تنش بر حسب کرنش، قدرت ایده آل را  $9.48 \text{ GPa}$  در کرنش بحرانی 14% محاسبه کردیم. این بدان معنا است که تکلایه آنتیمون می تواند تا کرنش 14% پایداری خود را حفظ نماید. با اعمال 2% کرنش، گاف نواری GGA تا اندازه  $1.46 \text{ eV}$  افزایش می یابد. در کرنش 4% در نقطه گاما یک گذار غیر مستقیم به مستقیم در گاف نواری رخ می دهد، و اندازه آن نیز به بیشینه خود، یعنی  $1.58 \text{ eV}$  می رسد. از آن به بعد، اندازه گاف نواری مستقیم کاهش می یابد و در نهایت گاف نواری در کرنش 14%، بسته می شود.



شکل ۴ ساختار های نواری آنتیمون، تحت کرنش های مختلف در سطح نظری GGA. انرژی فرمی به نقطه صفر منتقل شده است. در کرنش 4% یک گذار غیر مستقیم به مستقیم در گاف نواری رخ می دهد، و در کرنش 14% ماده به فلز تبدیل می شود.

## نتیجه گیری

ما این پیش بینی را تأیید می کنیم که اتم های آنتیمون، می توانند ماده دوبعدی تشکیل بدهند. غیبت مود های موهومی در پاشندگی فونونی، پایداری ماده را تا حد زیادی تأیید می کند. با توجه به گاف نواری قابل تنظیم آنتیمون، و مشاهده گذار غیر مستقیم به مستقیم در نتیجه کرنش، می توان آنتیمون را به عنوان نامزد مناسبی برای استفاده در ترانزیستور های اثر میدان، و کاربرد های اپتوالکترونیکی، مانند سلول های خورشیدی و آشکار ساز های اپتیکی مطرح کرد.

## مرجع ها

- [1] G. Wang, R. Pandey, and S. P. Karna, *ACS Applied Matter Interfaces*, **7**, 11490-6, (2015)
- [2] H. Liu *et al.*, *ACS nano*, **8**, 4033-4041, (2014)
- [3] S. Zhang, Z. Yan, Y. Li, Z. Chen, and H. Zeng, *Angewandte Chemie*, **127**, 3155-3158, (2015)
- [4] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Physical Review Letters*, **78**, 1396, (1997)
- [5] M. Zhao, X. Zhang, and L. Li, *Scientific reports*, **5**, 16108, (2015)
- [6] O. Ü. Aktürk, V. O. Özçelik, and S. Ciraci, *Physical Review B*, **91**, 235446, (2015)
- [7] A. N. Rudenko, M. I. Katsnelson, and R. Roldán, *Physical Review B*, **95**, 081407, (2017)
- [8] W. Xu *et al.*, *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, **23**, 214-218, (2017)
- [9] F. Guinea, *Solid State Communications*, **152**, 1437-1441, (2012)