

## مطالعه ویژگی الکترونی نانورقه‌های کاربید سیلیکون، کاربید ژرمانیم و کاربید قلع با

### استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی و تقریب های LDA, GGA و TB-mBJ

جواد باعدی<sup>۱\*</sup>، محمدرضا بنام<sup>۲</sup>، زهرا برمکی ارجستان<sup>۲</sup>

۱- دانشکده فیزیک، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار

۲- گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، مشهد، خراسان رضوی

**چکیده:** در این مقاله، ویژگی الکترونی نانورقه‌های شبه گرافنی کاربید سیلیکون، کاربید ژرمانیم و کاربید قلع مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات این پژوهش، بر اساس نظریه‌ی تابعی چگالی DFT با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده‌ی خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) و به کارگیری سه تقریب LDA, GGA و TB-mBJ به روش خودسازگار انجام شده است. بررسی چگالی حالت‌ها نشان می‌دهد که اوربیتال‌های p کربن در نوار هدایت و ظرفیت بیش‌ترین سهم را در هر سه نانو ورقه دارند. محاسبات ساختار نوری در هر سه تقریب نشان می‌دهد که نوع گاف انرژی در نانورقه‌ها کاربید سیلیکون، کاربید ژرمانیم و کاربید قلع به ترتیب مستقیم، مستقیم و غیر مستقیم است. همچنین، مقدار گاف در تقریب TB-mBJ برای این نانو به ترتیب برابر ۳/۳۱، ۲/۹۳ و ۱/۳۸ الکترون‌ولت برآورد شد که نسبت به دو تقریب دیگر به طور قابل توجه‌ای بیشتر است. بنابراین، نانورقه‌های کاربید سیلیکون، کاربید ژرمانیم به دلیل دارا بودن گاف انرژی مستقیم و به نسبت بزرگ می‌توانند در صنعت الکترواپتیک مورد توجه واقع شوند. درصد یونی بودن پیوندها با استفاده از رابطه‌ی پائولی و محاسبات چگالی الکترونی بررسی شد. نتایج نشان می‌دهد که نوع پیوند در نانورقه‌های مورد بحث کووالانسی و درصد یونی پیوندها در نانورقه‌های کاربید سیلیکون، کاربید ژرمانیم و کاربید قلع به ترتیب ۱۰، ۷ و ۸ درصد است.

**واژگان کلیدی:** نظریه‌ی تابعی چگالی؛ تقریب TB-mBJ؛ نانورقه‌های شبه گرافنی؛ ویژگی الکترونی

#### ۱- مقدمه

به تازگی ساختارهای دو بعدی، به خصوص ساختارهای شبیه گرافن، به دلیل ساخت تجربی و آزمایشگاهی گرافن و ویژگی منحصر به فرد آن، مورد توجه پژوهشگران نظری و تجربی قرار گرفته است [۱-۲]. یکی از محدودیت‌های مهم گرافن به عنوان ماده‌ی انتخاب جایگزین سیلیکون در ساخت قطعات الکترونی، عدم وجود گاف انرژی آن است [۳]. در واقع وجود گاف انرژی در الکترونیک برای کنترل ویژگی الکترونی لازم است. یکی از راه‌های ایجاد گاف انرژی جایگزینی یکی از عناصر گروه چهارم جدول تناوبی یعنی سیلیکون، ژرمانیم و قلع به جای کربن و ایجاد ساختارهای دو بعدی شبیه گرافن در نانورقه‌های کاربید سیلیکون، کاربید ژرمانیم و کاربید قلع است. در این ساختارها به جای یکی از اتم‌های کربن به ترتیب سیلیکون، ژرمانیم و قلع قرار گرفته است که به ترتیب هر اتم کربن با سه اتم سیلیکون، ژرمانیم و قلع و هر اتم سیلیکون، ژرمانیم و قلع با سه اتم کربن پیوند برقرار کرده

[j.baedi@hsu.ac.ir](mailto:j.baedi@hsu.ac.ir)

است. در این ساختارها پیوند  $\sigma$  و پیوند  $\pi$  وجود دارد. پیوندهای  $\sigma$  بین اوربیتال‌های هیبریدی  $sp^2$  است، سه پیوند  $sp^2$  وجود دارد، در واقع یک اوربیتال  $s$  با سه اوربیتال  $p_x, p_y, p_z$  هیبرید می‌شوند و سه اوربیتال یکسان هیبریدی را تشکیل می‌دهند که در صفحه قرار دارند و زوایای پیوند بین آن‌ها ۱۲۰ درجه است. هر  $sp^2$  یک اتم با  $sp^2$  اتم دیگر در صفحه یک پیوند  $\sigma$  تشکیل می‌دهد. در صفحه پیوندهای کووالانسی قوی  $\sigma$  داریم که بین  $sp^2$  یک اتم با  $sp^2$  اتم دیگر تشکیل می‌شود. یک اوربیتال  $p_z$  از هر اتم باقی می‌ماند که عمود بر صفحه‌ی بلور هستند و از کنار با هم پیوند کووالانسی تشکیل می‌دهند و نوع پیوند  $\pi$  است. این اوربیتال‌های p مسئول هدایت الکتریکی در گرافن هستند، به همین دلیل در امتداد موازی با صفحه هدایت وجود دارد ولی در امتداد عمود بر صفحه هدایت وجود ندارد. با استفاده از محاسبات اصول اولیه نشان داده‌اند که نانورقه‌های کاربید سیلیکون، کاربید ژرمانیم و کاربید قلع در ساختار شبیه گرافن پایدار هستند [۴-۶]. به همین

$$v_X^{TB-mBJ}(r) = c v_X^{BR}(r) + (3c-2) \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{5}{12}} \sqrt{\frac{2t(r)}{\rho(r)}} \quad (2)$$

دران پارامتر  $c = A + B \sqrt{\bar{g}}$  مقادیر  $A$  و  $B$  از برازش با داده های تجربی به ترتیب  $-0.12$  و  $1/0.23$  تعیین می شود و  $\bar{g}$  مقدار میانگین  $|\nabla \rho|$  در سلول واحد به حجم  $V_{cell}$  است:

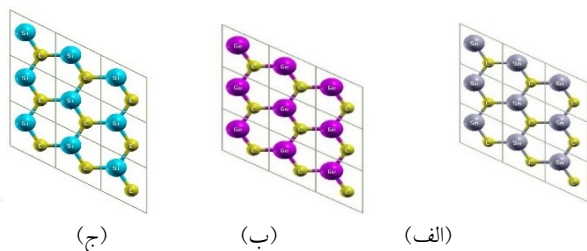
$$\bar{g} = \frac{1}{V_{cell}} \int_{cell} \frac{1}{2} \left( \frac{|\nabla \rho^\uparrow(r)|}{\rho^\uparrow(r)} + \frac{|\nabla \rho^\downarrow(r)|}{\rho^\downarrow(r)} \right) d^3r \quad (3)$$

محاسبه گاف انرژی جامدات با این تقریب منجر به نتایجی می شود که در تطابق خوبی با نتایج تجربی است. هر چند که روش های محاسباتی  $GW_0$  (این روش تقریبی است که برای محاسبه ی خودانرژی سیستم های بس ذره- ای الکترونی به کار گرفته می شود. در این روش عملگر غیرموضعی خودانرژی، برای محاسبه تابع گرین مورد نیاز است) و پتانسیل های تبادلی هیبریدی منجر به برآورد گاف انرژی قابل قیاس با نتایج تجربی می شوند. اما این روش ها بسیار پر از هزینه تر از روش TB-mBJ هستند.

### ۳- نتایج و بحث

#### ۳-۱- تعیین ساختار بلوری

شعاع کره ی مافین تین برای اتم کربن، اتم سیلیسیم، اتم ژرمانیم و اتم قلع به ترتیب برابر  $1/172$ ،  $1/64$ ،  $1/91$  و  $2/22$  بوهر و مقدار انرژی جدایی بین نوارهای مغزه و ظرفیت ۶- ریدبرگ در نظر گرفته شده است.



شکل ۱. ساختار نانو ورقه ها در راستای (۱۱۱) در فضای حقیقی (الف) کاربید سیلیکون. (ب) کاربید ژرمانیم. (ج) کاربید قلع.

برای جلوگیری از برهم کنش لایه های نانورقه ها، فاصله ی آن ها در راستای محور  $Z$ ، ۱۵ آنگستروم انتخاب شد. همان طور که در شکل ۱ نشان داده شده است، نانورقه های کاربید سیلیکون، کاربید ژرمانیم و کاربید قلع ساختار لانه زنبوری یا شش وجهی دارند و در هر سلول واحد دو اتم وجود دارد.

دلیل، در این مقاله به بررسی ساختار الکترونی آن ها با استفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی و به کار بردن تقریب های  $GGA^2$ ،  $LDA$  و  $TB-mBJ^3$  می پردازیم.

### ۲- روش انجام محاسبات

محاسبات این پژوهش، بر اساس نظریه ی تابعی چگالی DFT [۷] با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده ی خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) به کار برده شده در کد محاسباتی WIEN2K [۸] به روش خودسازگار انجام شده است. برای پتانسیل تبادلی- همبستگی از سه تقریب  $GGA$  [۹]،  $LDA$  [۱۰] و  $TB-mBJ$  [۱۱] استفاده شده است. پتانسیل های تبادلی- همبستگی  $GGA$  و  $LDA$  در محاسبات DFT گاف انرژی را کم تر از مقدار تجربی آن برآورد می کنند. به منظور برآورد دقیق تر گاف انرژی و دیگر کمیت ها مورد نظر از روش  $TB-mBJ$  استفاده شده است که در آن نخست از پتانسیل تبادلی پیشنهادی بک جانسون<sup>۴</sup> که به صورت زیر است در محاسبه ی گاف انرژی استفاده شده است [۱۲]:

$$v_X^{BJ} = v_X^{BR}(r) + \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{5}{12}} \sqrt{\frac{2t(r)}{\rho(r)}} \quad (1)$$

که در آن  $\rho = \sum_{i=1}^N |\psi_i(r)|^2$  چگالی الکترونی جنبشی الکترون ها است. در معادله ی ۱، جمله اول پتانسیل تبادلی بک روسی<sup>۵</sup> است [۱۳]. از پتانسیل تبادلی بک جانسون معمولاً برای برآورد کردن پتانسیل تبادلی در اتم ها استفاده می شود. و ترن<sup>۶</sup> همکارانش [۱۴] از این پتانسیل برای محاسبه گاف انرژی جامدات استفاده کردند که منجر به بهبود نسبی در محاسبه دقیق تر گاف انرژی جامدات شد. ترن و بلاها<sup>۷</sup> پتانسیل تبادلی بک جانسون را به صورت رابطه (۲) تغییر دادند که به آن تقریب  $TB-mBJ$  گویند [۱۱].

<sup>1</sup> Local Density Approximation

<sup>2</sup> Generalized Gradient Approximation

<sup>3</sup> Tran-Blaha modified Becke-Johnson

<sup>4</sup> Becke-Johnson

<sup>5</sup> Becke-Roussel

<sup>6</sup> Tran

<sup>7</sup> Blaha

## ۳-۲ محاسبه‌ی انرژی همدوسی

انرژی همدوسی هر یک از نانو ورقه‌ها را از رابطه‌ی زیر محاسبه شده است [۴].

$$E_{coh}^{AB-NS} = E_{tot}^{AB-NS} - (E_{tot}^A + E_{tot}^B) \quad (4)$$

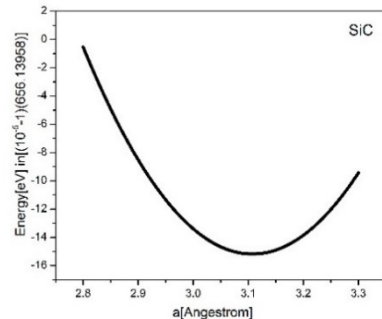
که در آن  $E_{tot}^{AB-NS}$  انرژی کل نانو ورقه‌های کاربید سیلیکون، کاربید ژرمانیم و کاربید قلع است. انرژی کل جفت اتم‌های نانو ورقه‌ی کاربید سیلیکون، کاربید ژرمانیم و کاربید قلع که به ترتیب برابر  $۸۹۲۴/۷۲$ ،  $۵۸۱۳۰/۸۲$ ، و  $۱۶۹۱۰۶/۲۴$  الکترون‌ولت است.  $E_{tot}^A$  و  $E_{tot}^B$  انرژی کل اتم‌های آزاد کربن، سیلیسیم، ژرمانیم و قلع است که به ترتیب برابر  $۷۸۸۳/۳۲$ ،  $۱۰۲۷/۱۹$ ،  $۵۷۰۹۰/۵۳$  و  $۱۶۸۰۶۸/۲۶$  الکترون‌ولت به دست آمد. انرژی همدوسی به ازای هر جفت اتم با استفاده از فرمول (۴) برای کاربید سیلیکون  $۱۴/۲۱$ ، برای کاربید ژرمانیم  $۱۲/۳۳$  و برای کاربید قلع  $۱۰/۷۷$  الکترون‌ولت به دست می‌آید که در جدول ۲ گزارش شده است. همان‌گونه که اعداد جدول ۲ نشان می‌دهد، نتایج به دست آمده در این مقاله با نتایج دیگر پژوهشگران قابل مقایسه است [۴].

با توجه به جدول ۲ انرژی همبستگی ترکیب کاربید قلع کم‌ترین مقدار و انرژی همبستگی کاربید سیلیکون بیش‌ترین مقدار را دارد و این موضوع می‌تواند بدین دلیل باشد که در یک ستون در جدول عناصر از بالا به پایین شعاع اتمها افزایش و عدد الکترونگاتیویته نیز کاهش می‌یابد. بنابراین، قدرت همبستگی پیوند کاهش می‌یابد.

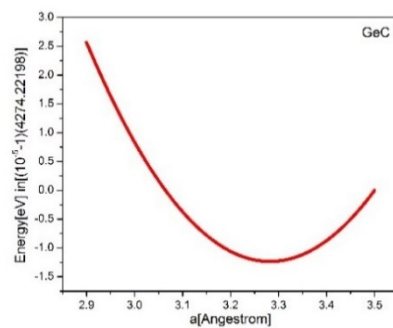
جدول ۲. انرژی کل جفت اتم‌های نانو ورقه‌ها،  $E_{tot}^{AB-NS}$ ، انرژی هر اتم آزاد  $E_{tot}^A$  و انرژی همدوسی جفت اتمها  $E_c$  بازای واحد شبکه.

انرژی کل جفت اتم‌های نانوورقه‌ها	SiC	GeC	SnC
$E_{tot}^{AB-NS}$	-۸۹۲۴/۷۲	-۵۸۱۳۰/۸۲	-۱۶۹۱۰/۲۴
$E_{tot}^A$	-۷۸۸۳/۳۲	-۵۷۰۹۰/۵۳	-۱۶۸۰۶۸/۲۶
$E_{tot}^B$	-۱۰۲۷/۱۹	-۱۰۲۷/۱۹	-۱۰۲۷/۱۹
$E_c$	-۱۴/۲۱ -۱۵/۲۵[۴]	-۱۲/۳۳ -۱۳/۳۳[۴]	-۱۰/۷۷ -۱۱/۶۳[۴]

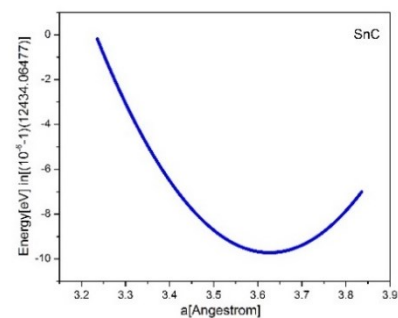
ثابت شبکه‌ی بهینه شده از کمینه کردن انرژی کل به دست می‌آید. نمودار تغییرات انرژی کل برحسب ثابت شبکه در شکل ۲ رسم شده است.



(الف)



(ب)



(ج)

شکل ۲. انرژی کل برحسب ثابت شبکه‌ی تعادلی در نانورقه‌های (الف) کاربید سیلیکون، (ب) کاربید ژرمانیم، (ج) کاربید قلع.

ثابت‌های شبکه تعادلی در جدول ۱ گزارش و با نتایج دیگران مقایسه شده است. مشاهده می‌شود، این نتایج سازگاری به نسبت خوبی با نتایج دیگران دارد.

جدول ۱: ثابت شبکه‌ی تعادلی برحسب آنگستروم

نانورقه	محاسبه کنونی	محاسبه‌ی دیگران [۴]
SiC	۳/۱۰	۳/۰۷
GeC	۳/۲۱	۳/۲۲
SnC	۳/۶۰	۳/۵۵

وابسته به عدد هم‌آرایی و طول پیوند ترکیبات مورد نظر در جدول ۴ گزارش و با مقادیر محاسبه شده دیگر مقایسه شده است.

جدول ۴. شعاع یونی اتم‌ها، تصحیح وابسته به عدد هم‌آرایی و طول پیوند برحسب آنگستروم.

	SiC	GeC	SnC
$r_A^{ion}$	۰/۴۱	۰/۵۳	۰/۷۱
$r_B^{ion}$	۰/۱۵	۰/۱۵	۰/۱۵
$\Delta N$	۰	۰	۰
$r_{AB}^{ion}$	۰/۵۶	۰/۶۸	۰/۸۶
$d$	۱/۷۸	۱/۸۵	۲/۰۹
	۱/۷۷[۴]	۱/۸۶[۴]	۲/۰۵[۴]

### ج) چگالی ابر الکترونی

برای تعیین ویژگی‌های الکترونی جامدها و همچنین، نوع پیوند بین اتم‌های موجود در سه ترکیب، بررسی چگالی ابر الکترونی در فضای سه بعدی ضروری است. مقدار اشتراک ابر الکترونی بین اتم‌های متفاوت نوع پیوندهای شیمیایی بین اتم‌ها را مشخص می‌کند. اگر پربندهای اطراف اتم‌ها به هم راه داشته باشند، نوع پیوند اتم‌ها کووالانسی است؛ اگر پربندها اتصالی نداشته باشند، نوع پیوند یونی است. با توجه به شکل ۳ پربندها به هم راه دارند، بنابراین، نوع پیوند این نانورقه‌ها از نوع کووالانسی هست. همچنین، پربندهای اطراف اتم‌ها حالت تقارن خود را از دست داده و کشیدگی ابر الکترونی وجود دارد که کووالانسی بودن پیوند را تأیید می‌کند.

### ۳-۳- تعیین نوع پیوند بین اتم‌ها

برای تعیین نوع پیوند این مواد از چندین روش می‌توان استفاده کرد:

الف) اختلاف الکترونگاتیویته (ب) مقایسه طول پیوند با پیوند یونی. ج) چگالی بار الکترونی در فضای سه بعدی.

### الف) اختلاف الکترونگاتیویته

با استفاده از فرمول پائولینگ زیر درصد یونی ترکیبات محاسبه شده است:

$$P = \left[ 1 - e^{-\frac{1}{4}(E_N^A - E_N^B)^2} \right] \times 100\% \quad (5)$$

که در آن  $E_N^A$  الکترونگاتیویته هر یک از اتم‌های سیلیکون، ژرمانیم قلع و  $E_N^B$  الکترونگاتیوی اتم کربن است. مقدار الکترونگاتیویته هر اتم در هر سه ترکیب و درصد یونی آن‌ها در جدول ۳ گزارش شده است؛ همان‌طور که مشاهده می‌شود، درصد پیوند یونی در کاربرد سیلیکون بیش‌ترین مقدار است. چون مقدار درصد یونی بودن پیوندها قابل توجه نیست. بنابراین، نوع پیوند هر سه نانورقه بیشتر کووالانسی است.

جدول ۳. مقدار درصد یونی بودن پیوندها.

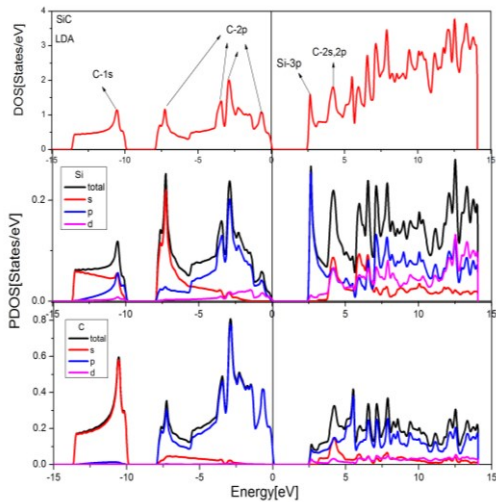
درصد یونی بودن پیوندها	SiC	GeC	SnC
$E_N^A$	۱/۹۰	۲/۰۱	۱/۹۶
$E_N^B$	۲/۵۵	۲/۵۵	۲/۵۵
P	٪۱۰	٪۷	٪۸

### ب) مقایسه طول پیوند با پیوند یونی

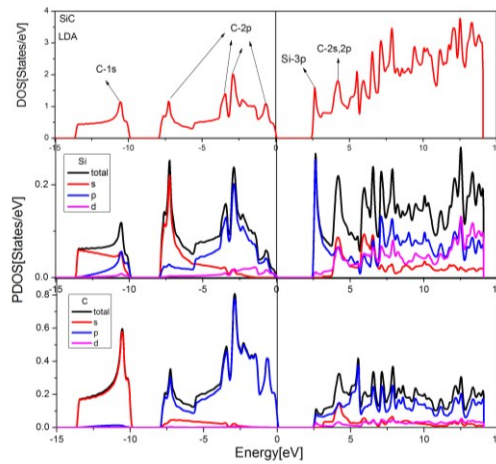
طول پیوند یونی را با استفاده از فرمول ۶ می‌توان به دست آورد [۱۵]:

$$r_A^{ion} + r_B^{ion} + \Delta N = r_{AB}^{ion} \quad (6)$$

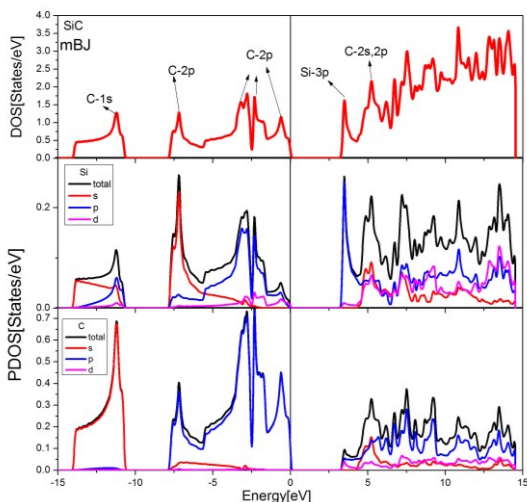
که در آن  $r_{AB}^{ion}$  طول پیوند یونی و  $\Delta N$  تصحیح وابسته به عدد هم‌آرایی است. برای نانورقه‌های شبه گرافنی با عدد هم‌آرایی شش، مقدار  $\Delta N$  برابر صفر است. اگر طول پیوند محاسبه شده ناشی از طول پیوند یونی  $r_{AB}^{ion}$  با مقدار محاسبات نظری شبکه واقعی (d) اختلاف داشته باشد، نوع پیوند کووالانسی در نظر گرفته می‌شود. شعاع یونی با پیکربندی گاز بی اثر اتم‌ها، تصحیح



(الف)

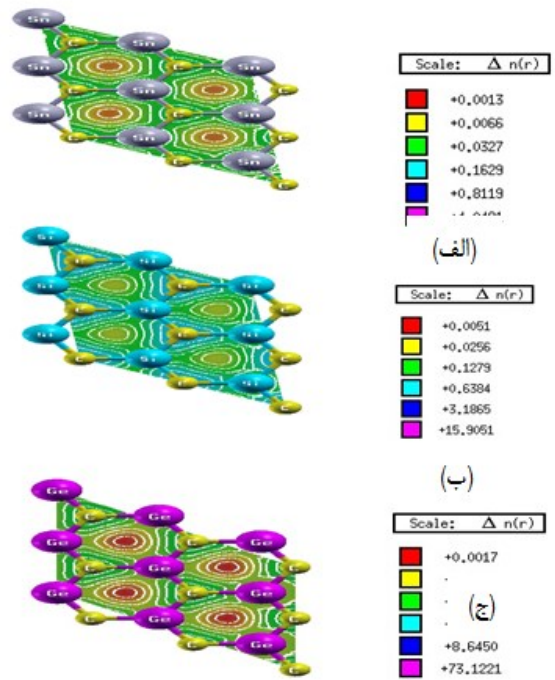


(ب)



(ج)

شکل ۴. چگالی حالت کلی و جزئی کاربید سیلیکون با سه تقریب الف) GGA (ب) LDA (ج) TB-mBJ



شکل ۳. چگالی ابر الکترونی اطراف اتمها در نانورقه‌های الف) کاربید سیلیکون ب) کاربید ژرمانیم ج) کاربید قلع در فضای حقیقی.

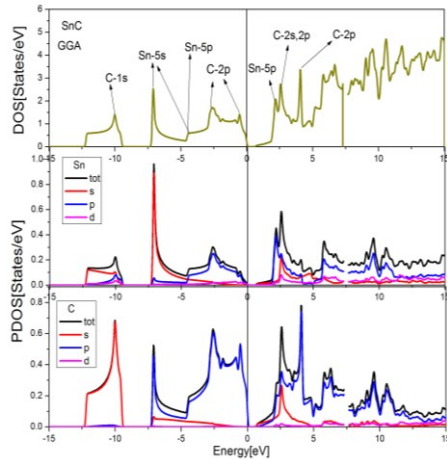
### ۳-۴- چگالی حالت‌های الکترونی

توزیع الکترون‌ها در طیف انرژی به وسیله‌ی چگالی حالت‌ها توصیف می‌شود و می‌تواند در آزمایش‌های جذب نور اندازه‌گیری شود. برای تعیین ویژگی‌های الکترونی جامدها، بررسی چگالی حالت‌های کلی اطراف فرمی ضروری است. با مقایسه چگالی‌های کلی ترکیب با چگالی‌های کلی هر یک از اتم‌ها در ترکیب می‌توان در مورد حالت‌هایی که در رسانش الکترونی مؤثر هستند می‌توان بحث کرد.

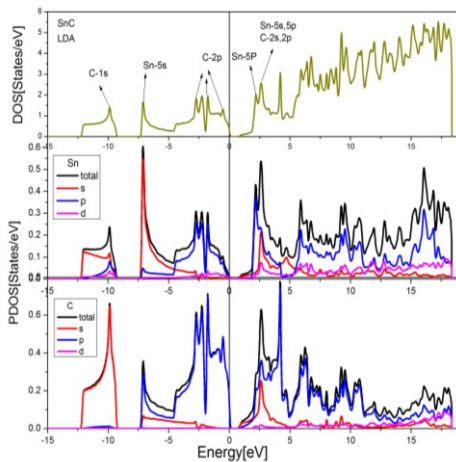
در شکل ۴، چگالی حالت کاربید سیلیکون با سه تقریب GGA, LDA و TB-mBJ نشان داده شده است. بر روی هر شکل اربیتال‌هایی که بیشترین چگالی را نزدیک فرمی دارند مشخص شده است. همان‌طور که در شکل‌ها نشان داده شده است؛ در نوار هدایت اوربیتال‌های Si-3p و در نوار ظرفیت اربیتال‌های C-2p بیشترین مشارکت را دارند. بنابراین، گذار از اربیتال‌های C-2p نوار ظرفیت به Si-3p نوار هدایت محتمل‌ترین است.



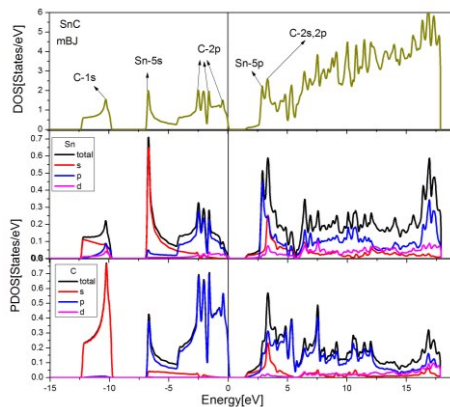
در شکل ۶ چگالی حالت کلی و جزئی کاربرد قلع را نشان داده شده است. نزدیک سطح فرمی در نوار ظرفیت اوربیتال های Sn-5s و در نوار ظرفیت C-2p چگالی بیشتری دارند؛ بنابراین، محتمل ترین گذار از اوربیتال های C-2p نوار ظرفیت به اوربیتال های Sn-5s نوار هدایت است.



(الف)



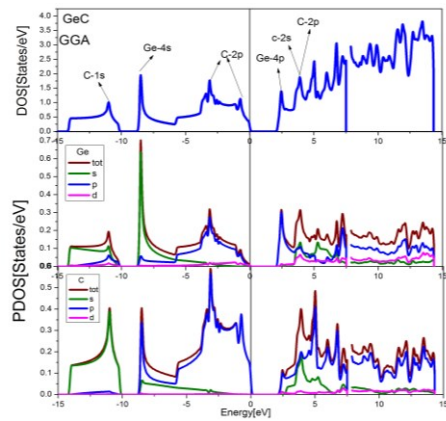
(ب)



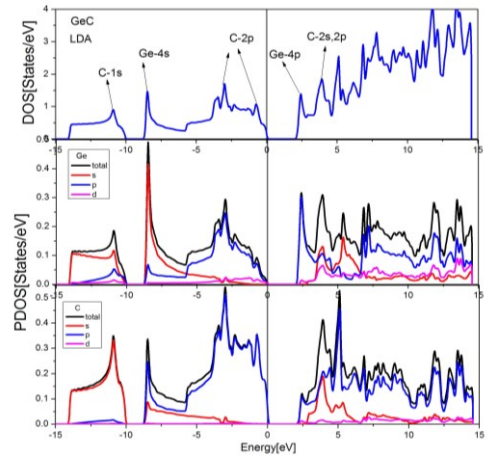
(ج)

شکل ۶ چگالی حالت کلی و جزئی کاربرد قلع با سه تقریب الف) GGA  
ب) LDA ج) TB-mBJ

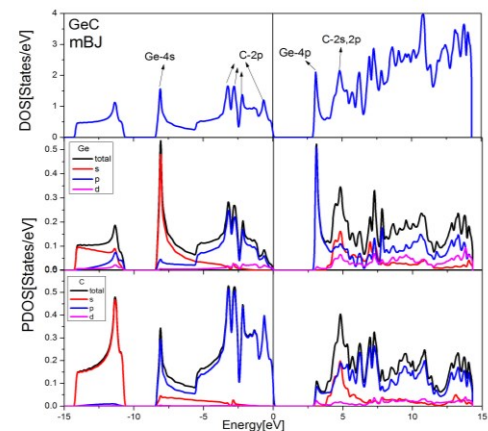
در شکل ۵، چگالی حالت کلی و جزئی کاربرد ژرمانیم با سه تقریب GGA, LDA و TB-mBJ رسم شده است. در نوار هدایت و در مجاورت سطح فرمی اوربیتال های Ge-4p و در نوار ظرفیت اوربیتال های C-2p بیشترین چگالی را دارند. محتمل ترین گذار از اوربیتال های C-2p نوار ظرفیت به اوربیتال های Ge-4p نوار هدایت است.



(الف)



(ب)

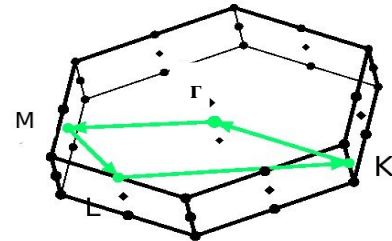


(ج)

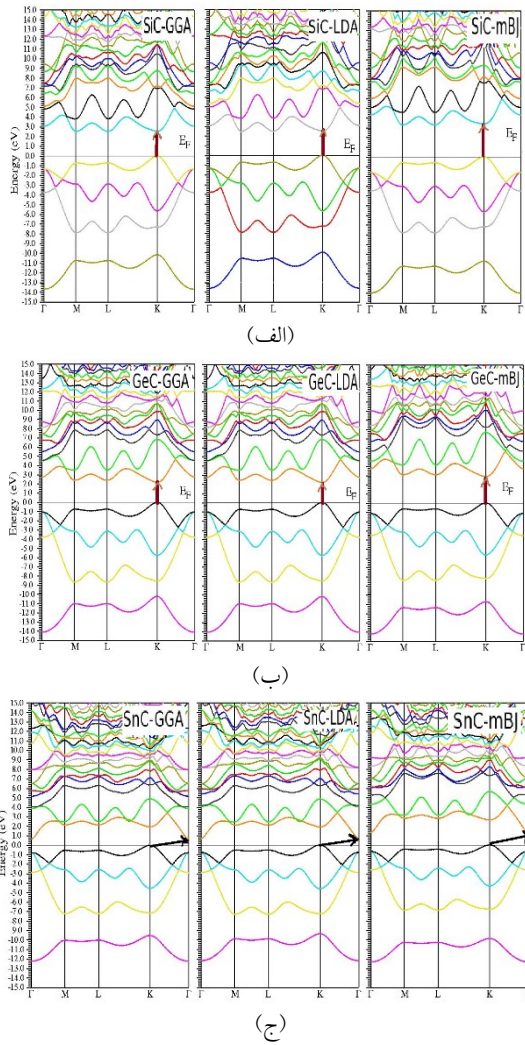
شکل ۵. چگالی حالت کلی و جزئی کاربرد ژرمانیم با سه تقریب الف) GGA  
ب) LDA ج) TB-mBJ

## ۳-۵- ساختار نواری

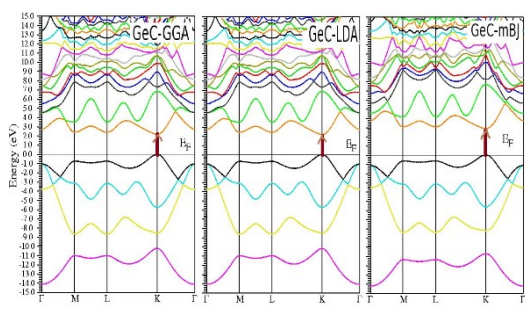
ابتدا، برای هر سه نانورقه نقاط پر تقارن  $\Gamma, M, L, K$  در منطقه‌ی نخست بریلوئن انتخاب و سپس، ساختار نواری در امتداد مسیرهای مشخص شده در شکل ۷ رسم شده است.



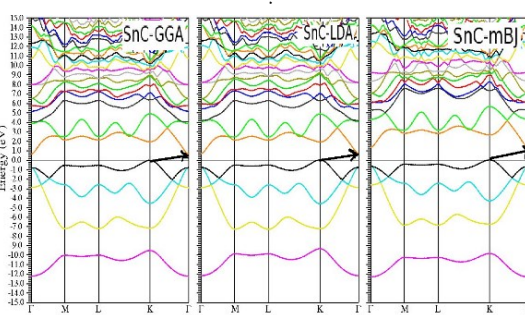
شکل ۷: مسیر انتخابی در منطقه‌ی اول بریلوئن برای رسم ساختار نواری نانو ورقه-های شبه‌گرافنی کاربید سیلیکون، کاربید ژرمانیم و کاربید قلع



(الف)



(ب)



(ج)

شکل ۸. ساختار نواری نانو ورقه‌های الف) کاربید سیلیکون. ب) کاربید ژرمانیم. ج) کاربید قلع.

ساختار نواری نانورقه‌های کاربید سیلیکون، کاربید ژرمانیم و کاربید قلع با سه تقریب LDA, GGA و TB-mBJ محاسبه و در شکل ۸ نشان داده شده است. با توجه به شکل ۸-الف، نوع گاف نانورقه‌ی کاربید سیلیکون مستقیم و مقدار آن با تقریب GGA برابر  $2/56$  الکترون‌ولت، با تقریب LDA برابر  $2/52$  الکترون‌ولت و با تقریب TB-mBJ برابر  $3/31$  الکترون‌ولت به دست آمده این اعداد با مقدار گاف به دست آمده از نمودار چگالی حالت‌ها تقریباً یکسان است. مشاهده می‌شود، مقدار گاف در تقریب TB-mBJ (در مقایسه با) دو روش دیگر بیش‌تر شده است ولی نوع گاف (انرژی) تغییر نکرده است. به علاوه بیشترین مشارکت در قله‌ی نوار ظرفیت و کف نوار هدایت به ترتیب مربوط به اوربیتال‌های C-2p و Si-3p است. بنابراین، گذار الکترون‌ها از اوربیتال C-2p به اوربیتال Si-3p محتمل‌ترین خواهد بود. ساختار نواری نانورقه‌ی شبه‌گرافنی کاربید ژرمانیم با سه روش GGA, LDA, TB-mBJ محاسبه و در شکل ۸-ب نشان داده شده است.

مشاهده می‌شود که نانورقه‌ی کاربید ژرمانیم دارای گاف مستقیم است و مقدار این گاف با تقریب GGA برابر  $2/17$  الکترون‌ولت، با تقریب LDA برابر  $2/23$  الکترون‌ولت و با تقریب TB-mBJ برابر  $2/93$  الکترون‌ولت است. گاف گزارش شده با روش TB-mBJ بیش‌تر از مقدار گاف با روش GGA و LDA است. پهنای نوارها و مقدار گاف نمودار ساختار نواری و چگالی حالت با هم در تطابق کامل هستند. اوربیتال‌های C-2p و Ge-4p به ترتیب در قله‌ی نوار ظرفیت و کف نوار هدایت بیشترین مشارکت را دارند. بنابراین، گذار الکترون‌ها از اوربیتال C-2p به اوربیتال Ge-4p محتمل‌ترین خواهد بود. ساختار نواری کاربید قلع نیز با سه تقریب LDA, GGA و TB-mBJ در شکل ۸-ج نشان داده شده است. با توجه به این نمودار نوع گاف نانو ورقه‌ی کاربید قلع غیرمستقیم و مقدار آن با تقریب GGA مقدار  $0/67$

نسبت به مقادیر تجربی، گاف انرژی محاسبه شده با این تقریب ها باید به مقادیر تجربی نزدیکتر باشد. نمودار ساختار نواری و چگالی حالتها محاسبه و مشاهده شد که اربیتالهای C-2p نقش عمده را در نوار ظرفیت هر سه ترکیب دارد. این ترکیبات به دلیل دارا بودن گاف پهن قابلیت استفاده در صنعت نانوالکترونیک و اپتوالکترونیک را دارا هستند.

## مراجع

- [1] A.K. Geim, K.S. Novoselov, The rise of graphene. Nature materials. 6(3), 183-91, 2007.
- [2] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, & A. A. Firsov, Y. Zhang, Y.W.Tan, H.L. Stormer and P. Kim. Nature 438, 201-210, 2005.
- [3] M. S. Nevius, M. Conrad, F. Wang, A. Celis, M.N. Nair, A. Taleb-Ibrahimi, & E.H. Conrad, Semiconducting graphene from highly ordered substrate interactions, Physical review letters 115(13), 136802-16810, 2015.
- [4] H. Şahin, S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Bekaroglu, E. Akturk, R. T. Senger, & S. Ciraci, Physical Review B 80(15), 155453-155458, 2005.
- [5] T. Y. Lü, X. X. Liao, H. Q. Wang, & J. C. Zheng, "Tuning the indirect-direct band gap transition of SiC, GeC and SnC monolayer in a graphene-like honeycomb structure by strain engineering a quasiparticle GW", Journal of Materials Chemistry, 22(19), 10062-10068, 2012.
- [6] C. L. Freeman, F. Claeysens, N. L. Allan and J. H. Harding, Phys. Rev. Lett., 96, 066102-066110, 2006.
- [7] Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. B864, 136-143, 1984.
- [8] P. Blaha, K. Schwarz, G. K.H. Madsen, and D. Kvasnicka, & J. Luitz, wien2k: An augmented plane wave local orbitals program for calculating crystal properties, 2001.
- [9] K. Burke, J. P. Perdew, & M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple, Phys. Rev. Lett. 77, 3865-3871, 1994.
- [10] W. Kohn, & L. J. Sham, Self-consistent equations including exchange and correlation effects. Physical review, 140(4A), A1133-1143, 1965.
- [11] F. Tran, & P. Blaha, Accurate band gaps of semiconductors and insulators with a semilocal exchange-correlation potential. Physical review letters, 102(22), 22601-22610, 2006.
- [12] A. D. Becke and E. R. Johnson, J. Chem. Phys. 124, 221101-221110, 2006.

الکترونولت، با تقریب LDA برابر  $0.72$  الکترونولت و با تقریب TB-mBJ برابر  $1/38$  الکترونولت است. همچنین، مشاهده می شود که مقدار گاف محاسبه شده با تقریب TB-mBJ از دو روش دیگر بیشتر است. قلهی نوار ظرفیت و کف نوار هدایت به ترتیب مربوط به اربیتالهای C-2p و Sn-5p است. بنابراین در گذارهای الکترونی گذار از اربیتال C-2p به اربیتال Sn-5p محتملترین خواهد بود. در جدول ۵، مقادیر و نوع گاف الکترونی نانورقه های شبه گرافنی کاربید سیلیکون، کاربید ژرمانیم و کاربید قلع گزارش و با نتایج دیگران مقایسه شده است. مشاهده می شود که گاف انرژی در دو تقریب LDA و GGA تفاوت محسوسی ندارد و مقدار گاف محاسبه شده با تقریب TB-mBJ افزایش یافته است. همچنین، بیشترین مقدار گاف مربوط به کاربید سیلیکون و کمترین مقدار گاف مربوط به کاربید قلع است.

جدول ۵: گاف انرژی الکترونی نانو ورقه های شبه گرافنی کاربید سیلیکون، کاربید ژرمانیم و کاربید قلع.

نانورقه ها	$E_G (eV)$		$E_G (eV)$ تجربی [۱۶]
	LDA-GW <sub>0</sub> [4]	GGA-LDA-TB-mBJ	
SiC	$2/52 - 4/19$ KM	$-2/54 - 3/31$ KK $2/52$	$3/23 - 7$ هگزگونال
GeC	$2/09 - 3/83$ KK	$-2/23 - 2/93$ KK $2/17$	$2/5$ وردسایت
SnC	$1/18 - 6/18$ FK	$0/67 - 0/72 - 1/38$ KT	$1/5$ حدود

## ۴- نتیجه گیری

در این پژوهش، نشان داده شد که نانورقه های شبه گرافنی کاربید سیلیکون، کاربید ژرمانیم و کاربید قلع نیم رسانا هستند و هر سه نانورقه دارای پیوند کووالانسی هستند؛ مقدار درصد یونی بودن پیوند آنها بسیار ناچیز است. نانورقه های شبه گرافنی کاربید سیلیکون از پایداری بالاتری نسبت دو ترکیب دیگر برخوردار است. کاربید سیلیکون و ژرمانیم دارای گاف مستقیم و کاربید قلع دارای گاف غیرمستقیم هستند. اندازهی گاف انرژی محاسبه شده در تقریب TB-mBJ نسبت به دو تقریب دیگر بیشتر است که با توجه به برآورد پایین گاف انرژی با دو تقریب LDA و GGA.



- [13] A.D. Becke, & M.R. Roussel, Exchange holes in inhomogeneous systems: A coordinate-space model. *Physical Review A*, 39(8), 3761-3768, 1985.
- [14] F., Tran, P. Blaha, & K. Schwarz, Band gap calculations with Becke–Johnson exchange potential, *Journal of Physics:Condensed Matter* 19(19), 196208-196212, 2007.
- [15] C. Kittel, *Introduction to solid state physics*. Wiley, 2005.
- [16] A. Mahmood, L. Enrique Sansores, *Journal of Materials Research*, 20, 5, 1101-1106, 2005.

## Study the electronic properties of SiC, GeC and SnC nano-sheets using density functional theory with GGA, LDA and TB-mBJ approximations

**J.Baedi<sup>1,\*</sup>, M.R. Benam<sup>2</sup>, Z. Barmaki Argestan<sup>2</sup>**

1- Faculty of Physics, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Iran.

2- Department of Physics, Payame Noor University(PNU), P. O. Box 19395-3697, Iran.

**Abstract:** In this paper, electronic properties of nano-sheets of silicon carbide, germanium carbide and tin carbide have been investigated. The calculations were performed based on the density functional theory (DFT) using full potential augmented plane wave (FP-LAPW) method. In our calculation we used GGA, LDA and TB-mBJ approximations for the exchange-correlation potential. Density of states calculations shows that the carbon p-orbitals have the highest contribution to the conduction and valance bands in the three nano-sheets. The band structure calculations show that the band gap in SiC, GeC and SnC nano-sheets is direct, direct and indirect, respectively. The band gaps calculated by the TB-mBJ approximation for these nano-sheets were obtained about 3.31, 2.93 and 1.38 eV, respectively, which are significantly higher than the band gap calculated by the two other approximations. Therefore, due to the direct and relatively large energy bands, SiC and GeC nano-sheets can be considered in the nano electro-optic devices. The percentage of ionization of the bonds was investigated using Pauli's relation and electron density calculations. The results show that the type of the bonds is covalent and the percentage of ionization of the bonds in the SiC, GeC and SnC are 10, 7 and 8 percent, respectively.

**Keywords:** Nano-sheets; Density Functional Theory; GGA; LDA; TB-mBJ.