



محاسبات اصول اولیه ساختار الکترونی نانوساختارهای دو بعدی جدید: مطالعه‌ی DFT، تابعی GGA-PBE و تابعی هیبریدی HSE06

سیما رستگار^{۱،۲،۳*}، علیرضا راستکار ابراهیم‌زاده^{۱،۲،۳}، جابر جهان‌بین سردرودی^{۲،۳،۴}

۱- گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز، ایران

۲- آزمایشگاه شبیه‌سازی مولکولی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز، ایران

۳- گروه محاسباتی (CNRG)، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز، ایران

۴- گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز، ایران

چکیده: در این مطالعه، با محاسبه‌ی ویژگی ساختاری، الکترونی، نوری و فتوکاتالیستی تک‌لایه‌های مکسین، یک خانواده از مواد دو بعدی با کاربردهای گسترده‌ی آن‌ها به دلیل ویژگی برجسته‌شان، از جمله Hf_2CO_2 و Zr_2CO_2 ، این تک‌لایه‌ها را با استفاده از تابعی-های GGA-PBE و HSE06 مورد مقایسه قرار می‌دهیم. این محاسبات با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) انجام شده است. سلول واحد این ساختارها و موقعیت اتمی آن‌ها کامل بهینه شده است. نتایج نشان می‌دهد که ثابت‌های شبکه برای نانوساختارهای دو بعدی Hf_2CO_2 و Zr_2CO_2 به ترتیب $3/3592$ و $3/3771$ آنگستروم است. گاف نواری این نانوساختارها از نوع غیرمستقیم است. بر اساس اطلاعات بدست آمده مقدار گاف نواری آن‌ها با تابعی GGA-PBE به ترتیب $0/92$ و $0/89$ الکترون‌ولت است. همچنین با تابعی هیبریدی HSE06، گاف نواری بدست آمده به ترتیب $1/75$ و $1/72$ الکترون‌ولت است. مشاهده می‌شود که با تابعی هیبریدی HSE06، میزان گاف نواری بهبود می‌یابد. بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک به منظور بررسی ویژگی نوری این ساختارها محاسبه شده است. محاسبات نشان می‌دهند که مواد مورد مطالعه در مناطق مرئی و فرابنفش از جذب بالایی برخوردار هستند. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که این نانوساختارهای دو بعدی می‌توانند به عنوان فتوکاتالیست مناسب در فرایند شکافت آب مورد استفاده قرار گیرند.

واژگان کلیدی: ویژگی ساختاری، ویژگی الکترونی، ویژگی نوری، فتوکاتالیست، نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT)، نانوساختارهای دو بعدی.

*s.rastegar@azaruniv.ac.ir

۱- مقدمه

در دنیای امروز، فعالیت‌های روزمره انسان‌ها همچنان به منابع انرژی سنتی وابسته است [۴-۱]. بر این اساس، سازمان ملل متحد در دسترس بودن انرژی پاک و مقرون به صرفه را پیشنهاد کرده است [۵]. بنابراین، بسیار ضروری است که به دنبال منابع دیگر انرژی که تجدیدپذیر، تمیز و است، باشیم تا بتوانیم وابستگی‌مان را به منابع انرژی سنتی از بین ببریم. انرژی هیدروژن دارای مزایای بسیاری از جمله ارزش حرارتی بالا و حفاظت از محیط‌زیست است [۴]. با توسعه مکانیسم فتوکاتالیستی برای فرایند شکافت آب، یافتن مواد فتوکاتالیستی جدید و بسیار کارآمد برای این فرایند به کانون اصلی توجه تبدیل شده است. از اینرو، نانوساختارهای دو بعدی بسیاری را می‌توان به عنوان فتوکاتالیست مناسب برای فرایند شکافت آب در نظر گرفت [۶،۷].

پس از کشف گرافین در سال ۲۰۰۴ و مطالعات گسترده‌ای در مورد ویژگی شکافت‌انگیز آن [۸-۱۰]، دیگر مواد دو بعدی (2D) مانند دی‌چالکوجنایدزهای فلز انتقالی، مونوچالکوجنایدزها و نیمه-رساناهای دو بعدی تک عنصری بسیاری در زمینه‌های تئوری و تجربی در سرتاسر جهان مورد توجه قرار گرفته‌اند. علاوه بر این، کاربردها و کربنیت‌های فلز انتقالی دو بعدی (MXene) به دلیل ویژگی‌های جذابشان توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند [۱۱-۱۹]. به طور کلی MXene ها از فاز MAX ساخته می‌شوند. فاز MAX با فرمول شیمیایی $M_{n+1}AX_n$ (که M: یک فلز انتقالی اولیه، A: یک عنصر از گروه‌های ۱۳ یا ۱۴ و X: اتم کربن یا نیتروژن که $n=1,2,3,4$ است) [۲۰،۲۱]، ماده اصلی تشکیل دهنده‌ی MXene ها هستند که اتم‌های A بعد از فرایند لایه‌برداری از فاز MAX جدا می‌شوند، زیرا پیوندهای نسبتاً ضعیف M-A در مقایسه با M-X وجود دارد که در نهایت منجر به یک مجموعه‌ای از ساختارهای تک‌لایه یا چندلایه که MXene نام دارند، می‌شوند [۲۲-۲۴].

در مورد ویژگی قابل توجه MXene ها می‌توان به کاربردهای گسترده‌ای که توسط بسیاری از پژوهشگران ارائه شده است، اشاره کرد. کاربردهای اولیه‌ی MXene ها در ذخیره انرژی باتری‌های سدیم-یون، باتری‌های لیتیوم-گوگرد و ابرخازن‌ها

است [۲۵-۲۸]. علاوه بر این، آن‌ها می‌توانند به عنوان فتوکاتالیست برای فرایند شکافت آب و از بین بردن آلودگی‌های آب، حسگرهای زیستی و سنسورهای گاز نیز استفاده شوند [۳۲-۲۹]. از دیگر کاربردهای قابل توجه نانوساختار MXene، می‌توان به اپتوالکترونیک، الکترونیک، کاتالیستورها، وسایل اسپینترونیک و مواد ذخیره‌سازی انرژی الکتروشیمیایی اشاره کرد [۳۳-۳۹]. نانوساختار MXene تک‌لایه به دلیل وجود لایه‌های اتمی $(2n+1)$ و ویژگی‌های جمعی گوناگونی مانند ثابت الاستیک بالاتر (c_{11}) نسبت به حجم فاز MAX و استحکام خمشی بیشتری از گرافین دارد [۴۰،۴۱]. مطالعات گذشته در مورد MXene ها نشان می‌دهد که این‌گونه مواد خاصیت فلزی از خود نشان می‌دهند و فاقد گاف نواری هستند. از اینرو، محاسبات تئوری و تجربی بسیاری انجام شده است که نشان می‌دهد MXene ها با عامل‌دار شدن توسط O، F، Cl و OH می‌توانند از فلز به نیمه-رسانا تبدیل شوند [۴۲]. بنابراین، این نوع از نانوساختارهای دو بعدی را می‌توان گزینه‌های مناسبی به عنوان فتوکاتالیست برای فرایند شکافت آب در نظر گرفت.

بر اساس گزارش‌های انجام شده، ویژگی MXene ها به عناصر انتخاب شده برای M و گروه‌های عاملی سطحی بستگی دارند، زیرا آن‌ها بر بسیاری از ویژگی الکترونی و نوری این‌گونه از نانوساختارها تاثیر می‌گذارند. در حال حاضر مطالعات بر روی ویژگی الکترونی و نوری مواد جامد، خصوصاً نیمه‌رساناها، به عنوان یکی از مهم‌ترین مباحث تحقیقاتی در نظر گرفته شده است [۴۳،۴۴]. کاملاً مشهود است که علاوه بر عامل‌دار کردن MXene ها می‌توان با تغییر تابعی انتخاب شده از تابعی GGA-PBE به تابعی هیبریدی HSE06 خصوصیات الکترونی از جمله گاف نواری را بهبود بخشید [۷۶].

اساساً، فتوکاتالیست یک فرایند چند مرحله‌ای است که شتاب یک واکنش نوری در حضور یک کاتالیستور درگیر می‌شود. از آنجائیکه این فرایند شامل نور خورشید و آب است که خوشبختانه هر دو به فراوانی وجود دارند و پایان‌ناپذیر هستند، به همین دلیل این روش طی نیم قرن گذشته مورد توجه بسیاری در سرتاسر جهان قرار گرفته است. زیرا این پتانسیل را دارد که پاسخگوی تقاضای جهانی انرژی در حال رشد و کاهش انتشار گازهای گلخانه‌ای باشد [۴۵]. اساساً، شکافت آب فتوکاتالیستی شامل دو نیم واکنش

و به مقادیر دقیق تر گاف نواری منجر می‌شود، ولی هزینه محاسباتی استفاده از این تابعی‌ها بسیار بالاست [۷۶]. مقایسه‌ی بین تابعی‌های متفاوت در زمینه‌های زیادی انجام شده است. لی و همکاران در ترکیب LiNbO_3 پایداری تهی‌جای Li و Nb را به وسیله‌ی دو تابعی PBE و HSE06 با محاسبه‌ی انرژی تشکیل بررسی کرده و نشان داده‌اند که این دو تابعی ترتیب پایداری متفاوتی را برای تهی‌جاها پیش‌بینی می‌کنند [۷۶]. همچنین، استفاده از تابعی HSE06 در این کار باعث باز شدن گاف نواری LiNbO_3 به اندازه حدود 2eV شده است. باز شدن گاف نواری در تابعی‌های هیبریدی نسبت به GGA در بسیاری از مقالات ارائه شده و موضوعی شناخته شده است. در این مطالعه، ویژگی ساختاری، الکترونی و نوری دو نانو ساختار Hf_2CO_2 و Zr_2CO_2 با استفاده از محاسبات اصول اولیه مورد بررسی قرار می‌گیرد. ویژگی الکترونی این نانو ساختارها با استفاده از هر دو تابعی GGA-PBE و HSE06 مورد محاسبه قرار می‌گیرد و مقایسه‌ای بین این دو تابع صورت می‌گیرد. سپس نتایج محاسبات با استفاده از هر دو تابعی به منظور یافتن فتوکاتالیست مناسب برای فرایند شکافت آب با داشتن شرایط لازم برای این فرایند که در بالا به آن اشاره شد، با یکدیگر مقایسه می‌شوند.

۲- روش محاسباتی

تمام محاسبات در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) با استفاده از کد محاسباتی VASP [۵۱،۵۰] انجام شده است. VASP یک بسته شبیه‌سازی برای انجام شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی (MD) مکانیک کوانتومی ابتدا به ساکن با استفاده از شبه‌پتانسیل‌ها و مجموعه پایه صفحه موج است. روش بکار رفته در کد VASP بر اساس تقریب چگالی محلی (دمای محدود) با انرژی آزاد به عنوان مقدار متغیر و یک ارزیابی دقیق از حالت پایه الکترونی در هر مرحله زمانی از دینامیک مولکولی است. به منظور بالا بردن دقت محاسبات، طول پیوندها، اندازه‌ی زوایا و همچنین، سلول واحد نیز بهینه شده است. برای واهلش ساختارهای مورد نظر از انرژی تبدیلی-همبستگی الکترون‌ها در تقریب گرادینان تعمیم‌یافته (GGA) [۴۷] که توسط PBE [۴۸] ارائه گردیده، استفاده شده است. از آنجائیکه محاسبات انجام شده توسط تابعی GGA-PBE حداقل مقدار گاف نواری برای

است: اکسایش آب برای تشکیل اکسیژن که در نوار ظرفیت اتفاق می‌افتد و کاهش پروتون‌ها برای تشکیل هیدروژن که در نوار رسانش اتفاق می‌افتد با این شرط که انرژی گاف نواری فتوکاتالیست بیشتر از $1/23$ الکترون‌ولت باشد.

از جمله نانو ساختارهای دو بعدی از نوع MXene میتوان به Ti_2C اشاره کرد. بعد از دوپ کردن اتم Ti در نانو ساختار Ti_2C با اتم‌های Hf و Zr و سپس عامل‌دار کردن آن با اتم O به ترتیب دو نانو ساختار Hf_2CO_2 و Zr_2CO_2 به وجود می‌آید. این دو نانو ساختار دارای گاف نواری مناسب، پایداری فیزیکی و شیمیایی خوبی دارند که به عنوان فتوکاتالیست‌های نیمه‌رسانا برای فرایند شکافت آب مناسب هستند. بنابراین، تحقیق ما بر اساس این دو نانو ساختار Hf_2CO_2 و Zr_2CO_2 است.

از آنجا که بیشتر انرژی نور خورشید در گستره‌ی نور مرئی است، بنابراین برای افزایش بازدهی اینگونه نانو ساختارها در کاربردهای فتوکاتالیستی لازم است که گاف نواری این ترکیب‌ها در گستره انرژی نور مرئی یعنی حدود 2eV باشد. بنابراین چون گاف‌های نواری نانو ساختارهای مورد مطالعه با تابعی GGA-PBE کمتر از مقدار مورد نیاز است، به همین دلیل محاسبات را برای نانو ساختارهای مورد نظر با تابعی هیبریدی HSE06 نیز انجام دادیم که در این حالت شرط لازم بودن این نانو ساختارهای دو بعدی در گستره انرژی نور مرئی مهیا می‌شود.

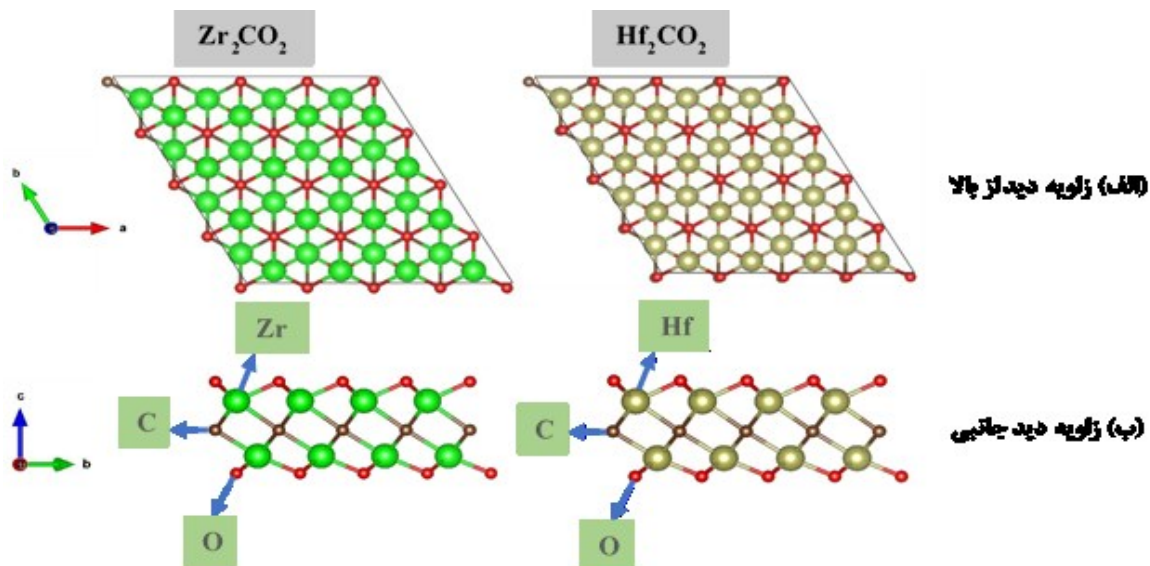
جستجوی ساختارهای جدید با روش‌های محاسباتی، کم‌هزینه‌تر از روش‌های تجربی است. در بین روش‌های محاسباتی برای جستجوی ساختار، روش‌های ابتدا به ساکن از لحاظ محاسباتی پرهزینه هستند. بنابراین روشی ساده برای محاسبه‌ی گاف نواری، استفاده از روش‌های ابتدا به ساکن است. در روش‌های ابتدا به ساکن بر پایه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی، استفاده از تابعی‌های تبدیلی-همبستگی موضعی (مثل تقریب LDA [۴۶]) و نیمه موضعی (مثل تقریب شیب تعمیم‌یافته GGA-PBE [۴۷]) در محاسبه‌ی گاف نواری نیمه‌رساناها باعث می‌شود که گاف تا حد زیادی کمتر از مقدار تجربی به دست آید [۷۶]. استفاده از تابعی-های هیبریدی مثل PBE0 [۴۸] و HSE06 [۴۹] که در آن‌ها تبدیلی غیرموضعی هارتری-فوک با تابعی LDA یا GGA ترکیب می‌شوند، باعث کاهش خطای انرژی خود برهم‌کنش شده

۳-۱- ویژگی ساختاری و الکترونی

پیکربندی تک لایه‌های دو بعدی Zr_2CO_2 و Hf_2CO_2 بعد از عمل بهی بهینه‌سازی از دو دید بالا و جانبی در شکل ۱ نشان داده شده است. همانطور که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، هر دو ساختار دوبعدی در نظر گرفته شده از نوع MXene هستند و شبکه‌ی تشکیل دهنده‌ی آن‌ها شش‌وجهی است و پیکربندی یکسانی دارند. همانطور که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، اتم‌های کربنی که با ۶ اتم M احاطه شده‌اند و تشکیل یک شبکه‌ی ۶ ضلعی را می‌دهند، بین دو لایه از اتم‌های M ای که با لایه‌های اتمی اکسیژن در هر طرف هالوژنه می‌شوند، ساندویچ شده‌اند. این ساختارهای پیش‌بینی شده در اینجا با نتایج گزارش شده در مطالعات پیشین منطبق است [۵۵،۵۴،۱۵۶]. پارامترهای شبکه بهینه شده تک لایه‌های دو بعدی Zr_2CO_2 و Hf_2CO_2 همچنین، طول پیوند در جدول ۱ به صورت خلاصه نوشته شده است. نتایج بدست آمده در توافق بسیار بالایی با نتایج دیگر پژوهش‌ها در این زمینه است [۵۶،۱۵،۵۴،۵].

فتوکاتالیست‌های مورد نظر به منظور انجام فرایند شکافت آب را نمی‌دهد، بنابراین، محاسبات با تابعی هیبریدی HSE06 [۴۹] نیز انجام می‌شود تا بتوان فتوکالیست مناسب برای انجام فرایند شکافت آب را شناسایی کرد. مش‌بندی منخورست-پک [۵۲] برای نمونه‌برداری از منطقه‌ی بریلوئن برای انجام محاسبات ساختاری، الکترونی و نوری به ترتیب با نقاط $1 \times 12 \times 12$ و $1 \times 13 \times 13$ برای سلول واحد در نظر گرفته شده است. معیار همگرایی انرژی برای خاتمه فرایند چرخه حل خود سازگار 10^{-6} الکترون‌ولت در سلول واحد در نظر گرفته شده است. فرایند بهینه‌سازی تا زمانی که حداکثر نیرو در هر اتم به کمتر از $0.05 \text{ eV}/\text{\AA}$ برسد، ادامه می‌یابد. به منظور حذف برهم‌کنش بین لایه‌ها در دو سلول یکه مجاور، فاصله‌ی عمودی بین لایه‌های مجاور در دو سلول یکه مجاور 20\AA در جهت محور z است. ساختارهای اتمی توسط کد VESTA [۵۳] مورد بررسی قرار گرفته است.

۳- نتایج و بحث



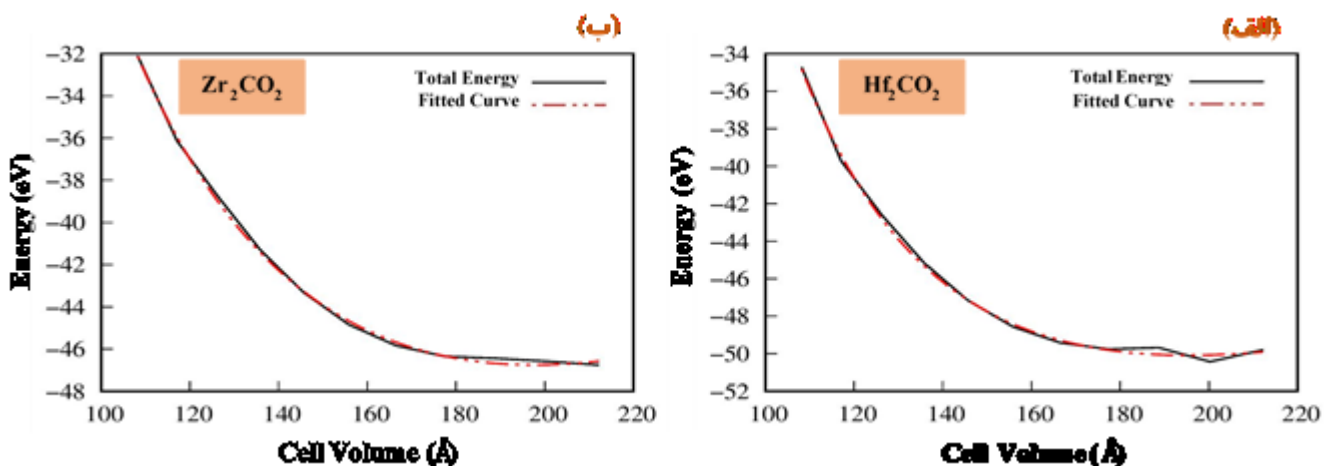
شکل ۱: نمایش طرح‌واره ساختار بهینه شده برای نانوساختارهای Zr_2CO_2 و Hf_2CO_2 . (الف) زاویه دید از بالا و (ب) زاویه دید جانبی.

جدول ۱: ثابت شبکه و طول پیوند برای نانوساختارهای Hf_2CO_2 و Zr_2CO_2 بر حسب آنگستروم.

Structure (2D)	Hf_2CO_2	Zr_2CO_2
$a=b$ (Å) (This work)	۳/۳۵۹۲	۳/۳۷۷۱
$a=b$ (Å) (Others.) (ref. 6)	۳/۲۶۶	۳/۳۰۷
M_1-M_2	۳/۴۱	۳/۴۴
M_1-C	۲/۳۴	۲/۳۶
M_2-C	۲/۴۹	۲/۴۶
M_1-O_1	۲/۱۳	۲/۱۵
M_2-O_2	۲/۱۴	۲/۱۹
GGA-PBE: E_g (eV)	۰/۹۲	۰/۸۹
HSE06: E_g (eV)	۱/۷۵	۱/۷۲

وضوح دیده می‌شود، مقادیر حجم و انرژی با معادله‌ی مرتبه سوم بیرخ-مورناگان [۵۶] برازش و مدول حجمی و مشتق آن و همچنین تراکم‌پذیری برای هر دو فاز محاسبه شد. این مقادیر به همراه نتایج متناظر تجربی و نظری گزارش شده توسط دیگران در جدول ۱ ارائه شده است. با توجه به جدول مقادیر محاسبه شده در این کار با نتایج دیگران در توافق است.

به منظور یافتن ثابت شبکه مناسب برای هر نانوساختار، ساختار مورد نظر را به ازای ثابت شبکه‌های متفاوت بهینه‌سازی کردیم. پس از عمل بهینه‌سازی، از خروجی‌های مربوط به ساختار مورد نظر حجم و انرژی کل مربوط را به دست آوردیم. نمودار انرژی بر حسب حجم و نمودار برازش شده آن در شکل ۲، برای هر دو نانوساختار نشان داده شده است. همانطور که در شکل ۲ به



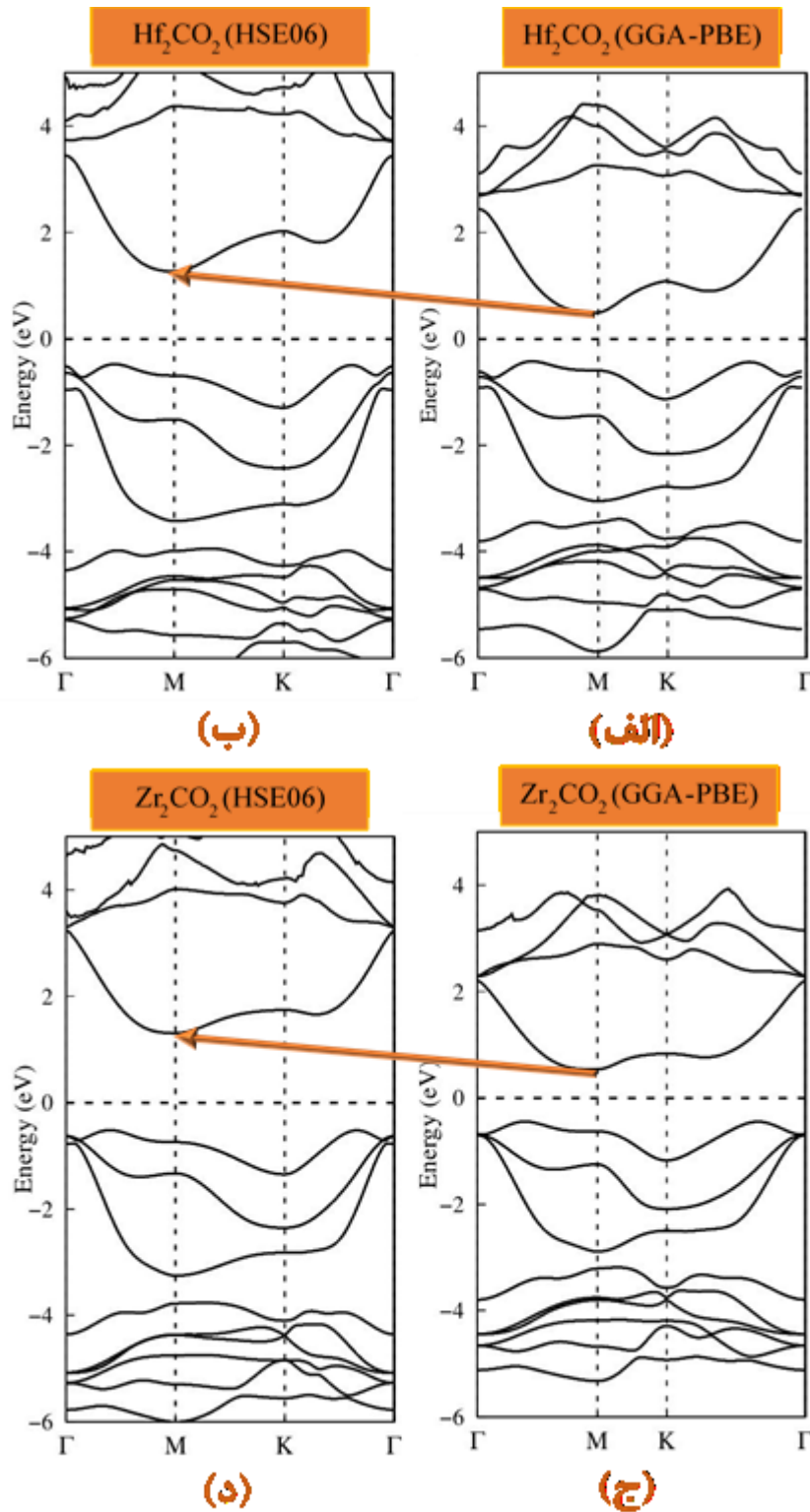
شکل ۲: نمودار انرژی بر حسب حجم برای نانوساختارهای (الف) و (ب) و نمودار برازش شده بیرخ-مورناگان.

الکترونی هر دو ساختار دو بعدی را با تابعی GGA-PBE نشان می‌دهد. همانطور که در شکل ۲ به طور کامل واضح مشخص است، ساختار نوار الکترونی هر دو MXene مورد مطالعه در امتداد جهت‌های با تقارن بالا (G M K G) در نخستین منطقه‌ی

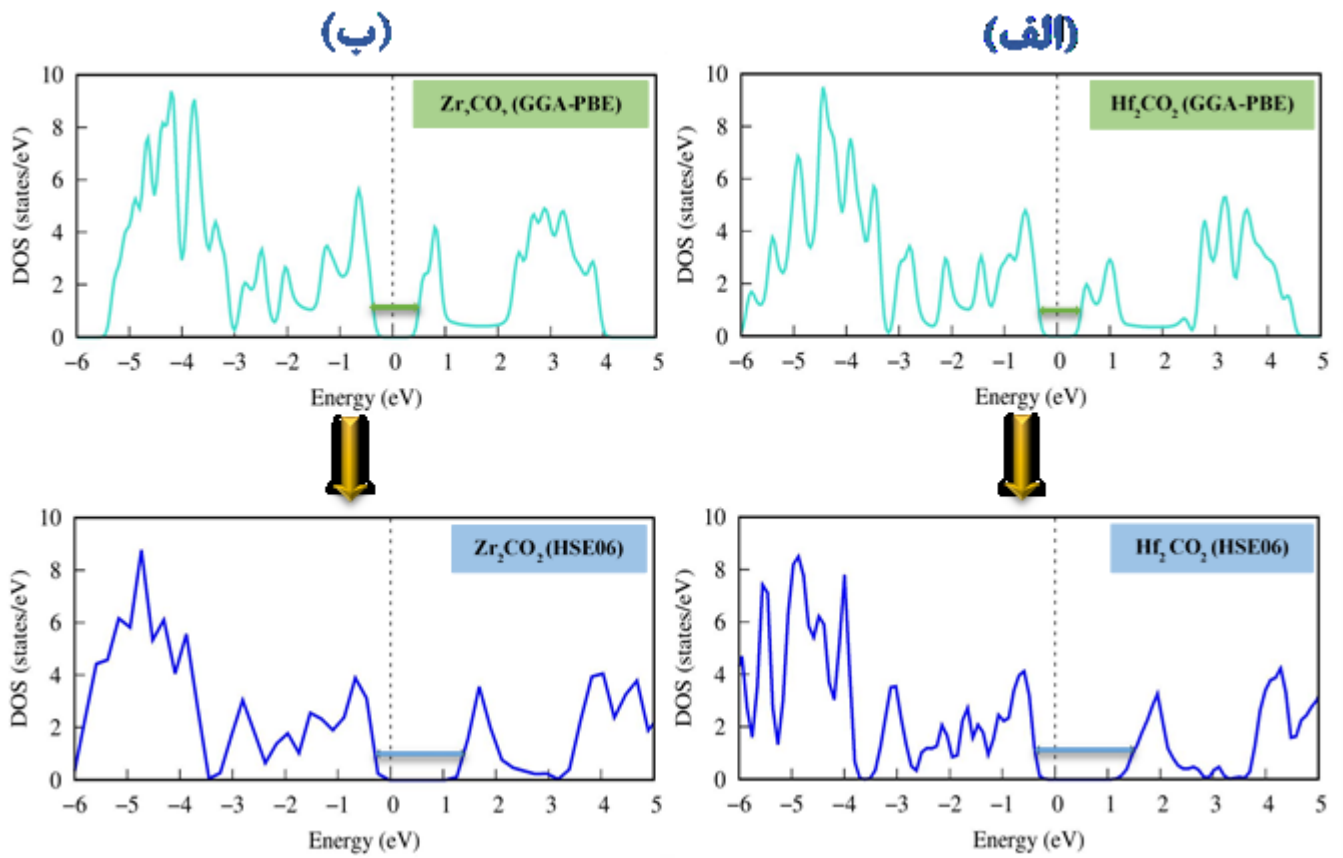
ساختار نوار الکترونی ابزاری قدرتمند برای مطالعه‌ی مواد و کاربرد آن‌ها در صنعت نیم‌رسانا است. در حقیقت خصوصیات نوری برجسته‌ای که با استفاده از مواد به نمایش گذاشته می‌شود، به دلیل گاف نواری آن‌ها است. شکل ۲ (الف و ب)، ساختار نوار

میزان گاف نواری را در مقایسه با تابعی GGA-PBE بهبود بخشید که این امر کامل با نتایج تجربی در مطالعات گذشته سازگار است [۶۱،۶۰،۱۵،۶]. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که تک‌لایه‌های دو بعدی Hf_2CO_2 و Zr_2CO_2 با تابعی GGA-PBE، به ترتیب نیم‌رسانا با گاف‌های نواری ۰/۹۲ و ۰/۸۹ الکترون‌ولت هستند.

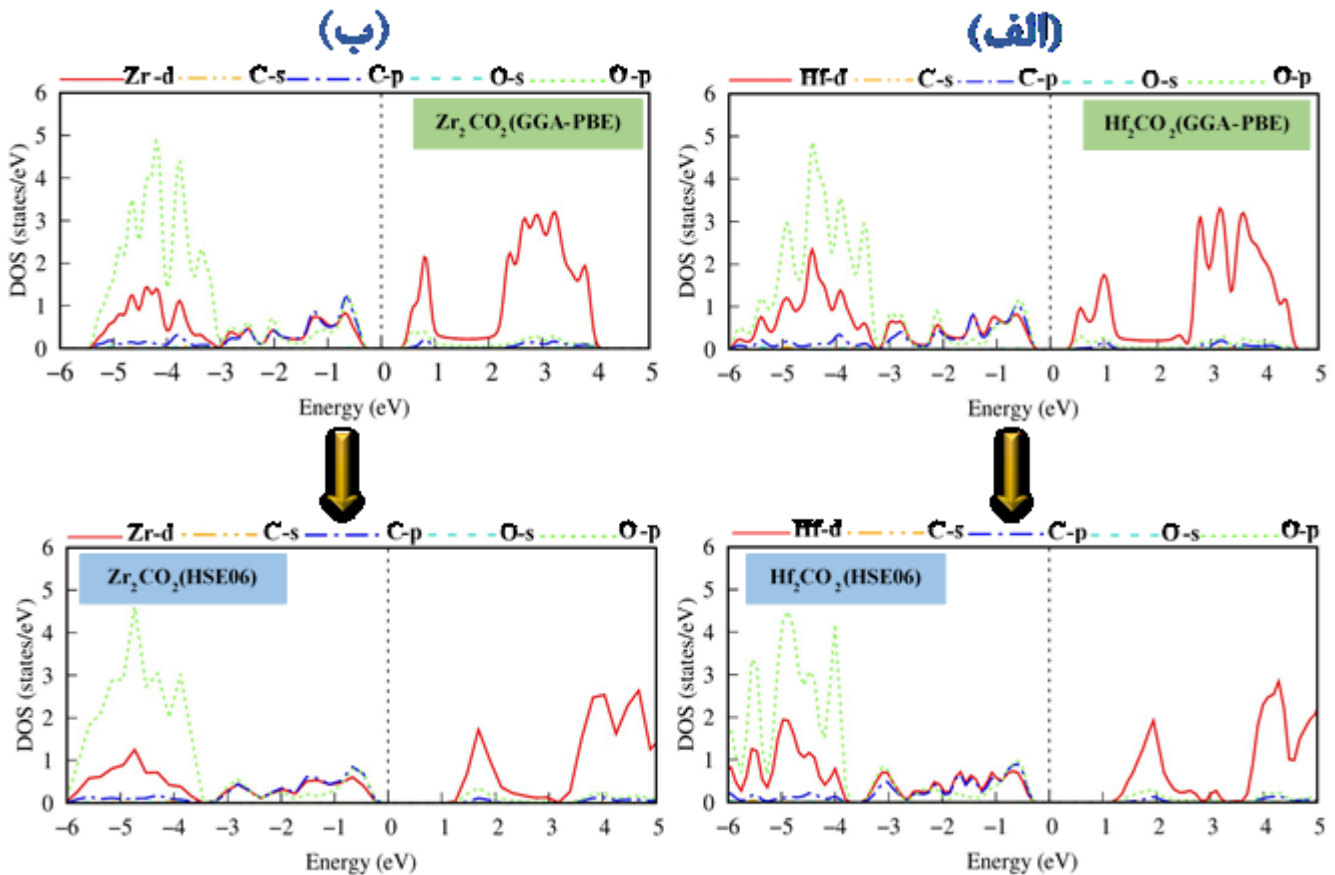
بریلوئن محاسبه شده است. با توجه به نتایج، هر دو تک‌لایه دو بعدی نیم‌رسانا با گاف نواری غیر مستقیم هستند که گاف نواری آن‌ها از G تا M است. همانطور که پیشین در روش‌های محاسباتی ذکر شده است، از هر دو روش GGA-PBE و HSE06 برای بدست آوردن مقدار گاف نواری استفاده می‌شود. با این حال، با توجه به اینکه تابعی GGA-PBE مقدار گاف نواری را بسیار کم می‌دهد که این می‌تواند به دلیل خطای برهم‌کنش در تابعی تبادل باشد، انتظار می‌رود که تابعی هیبریدی HSE06



شکل ۳: نمودار ساختار نواری برای نانوساختار دو بعدی Hf_2CO_2 با تابعی‌های (الف) GGA-PBE و (ب) HSE06، و نانوساختار دو بعدی Zr_2CO_2 با تابعی‌های (الف) GGA-PBE و (ب) HSE06.



شکل ۴: طیف چگالی حالت‌های کل با تابعی‌های GGA-PBE و HSE06 برای نانوساختارهای دو بعدی (الف) Hf_2CO_2 و (ب) Zr_2CO_2 .



شکل ۵: چگالی حالات جزئی با تابعی‌های GGA-PBE و HSE06 برای نانوساختارهای دو بعدی (الف) Hf_2CO_2 و (ب) Zr_2CO_2 .

۳-۲- ویژگی نوری

همانطور که در بخش پیشین بحث شد، MXene های دو بعدی Zr_2CO_2 و Hf_2CO_2 با توجه به گاف نواری مناسبی که دارند، مواد امیدوار کننده‌ای در دستگاه‌های اپتوالکترونی محسوب می‌شوند. بنابراین، مطالعه‌ی ویژگی نوری این‌گونه مواد دو بعدی بسیار ضروری به نظر می‌رسد. برای مطالعه‌ی ویژگی نوری، از تابع دی‌الکتریک استفاده می‌شود که پاسخ سیستم به یک میدان الکتریکی خارجی است و به صورت معادله‌ی زیر از دو بخش حقیقی و موهومی تشکیل شده است:

$$\varepsilon(\omega) = \Re\varepsilon(\omega) + \Im\varepsilon(\omega), \quad (1)$$

که برای محاسبه‌ی بخش موهومی تابع دی‌الکتریک ($\Im\varepsilon(\omega)$) از تقریب فاز تصادفی (RPA) استفاده می‌شود:

$$\Im\varepsilon^{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{4\pi e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{i,f} \int \frac{2d^3k}{(2\pi)^3} \left\{ \left| \langle ik | P_\alpha | fk \rangle \right|^2 f_i^k (1-f_f^k) \delta(E_f^k - E_i^k - \hbar\omega) \right\} \quad (2)$$

گذارهای بین نواری نوری، مابین هر دو حالات اشغال شده (ik) و اشغال نشده (fk) است [۵۷]. در اینجا i و f به ترتیب حالت‌های اولیه و نهایی را نمایش می‌دهند، و E_i^k ویژه‌مقدار است، f_i^k توزیع فرمی را نشان می‌دهد و P_α عملگر تکانه مولفه- α ی است. علاوه بر این، با توجه به معادله‌ی ۳، بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک ($\Re\varepsilon(\omega)$) را می‌توان با استفاده از روابط کرامرز-کرونینگ بدست آورد [۵۸]:

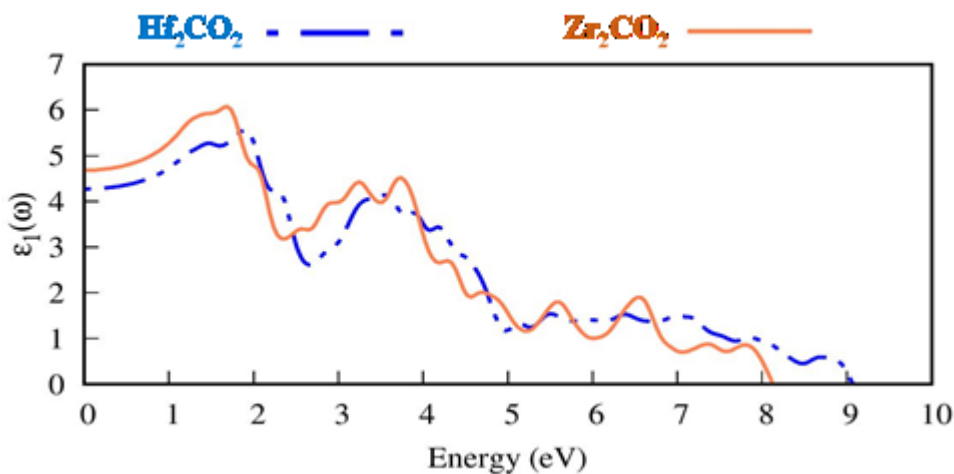
$$\Re\varepsilon^{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} \text{Pr} \int_0^\infty \frac{\omega' \Im\varepsilon^{\alpha\beta}(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} d(\omega'), \quad (3)$$

جائیکه Pr مقدار اصلی انتگرال بر روی ω' است. ویژگی نوری

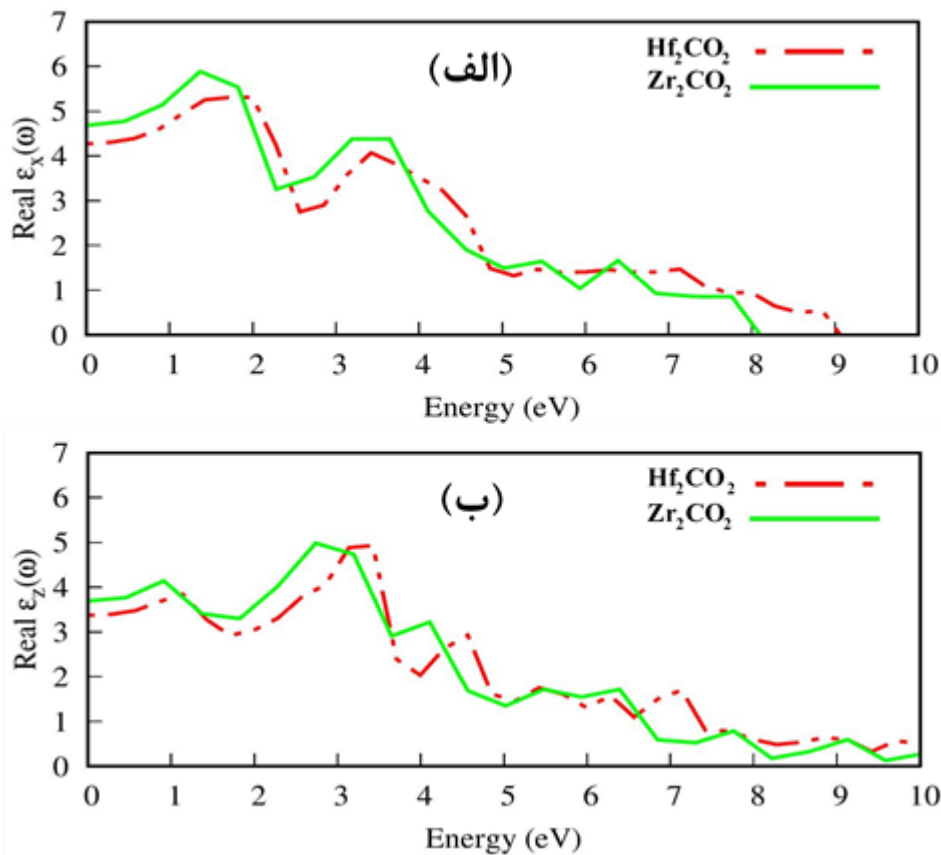
شکل اندیس‌های X و Z راستای قطبش میدان الکتریکی را نشان می‌دهند. با توجه به شکل مشاهده می‌شود که این ساختارها از نظر نوری رفتارهای ناهمسانگردی در راستاهای متفاوت از خود نشان می‌دهند. قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر، ثابت دی‌الکتریک استاتیکی را بدست می‌دهد. با افزایش انرژی، $\Re\epsilon(\omega)$ کاهش می‌یابد. مقدار $\Re\epsilon(\omega)$ برای هر دو نانوساختار دو بعدی Zr_2CO_2 و Hf_2CO_2 بزرگتر از صفر است.

مانند ضریب شکست، ضریب خاموشی، ضریب جذب و ضریب انعکاس براساس قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک محاسبه می‌شوند [۵۹].

در حالت کلی نتایج بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک برای تک-لایه‌های Zr_2CO_2 و Hf_2CO_2 در شکل ۶ به وضوح نشان داده شده است. شکل ۷، بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک را برای هر دو نانوساختار ذکر شده در دو راستای X و Z نشان می‌دهد. در این



شکل ۶: بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک برای نانوساختارهای دو بعدی Zr_2CO_2 و Hf_2CO_2 .



شکل ۷: بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک برای نانوساختارهای دو بعدی Hf_2CO_2 و Zr_2CO_2 در راستاهای قطبش میدان الکتریکی (الف) x و (ب) z.

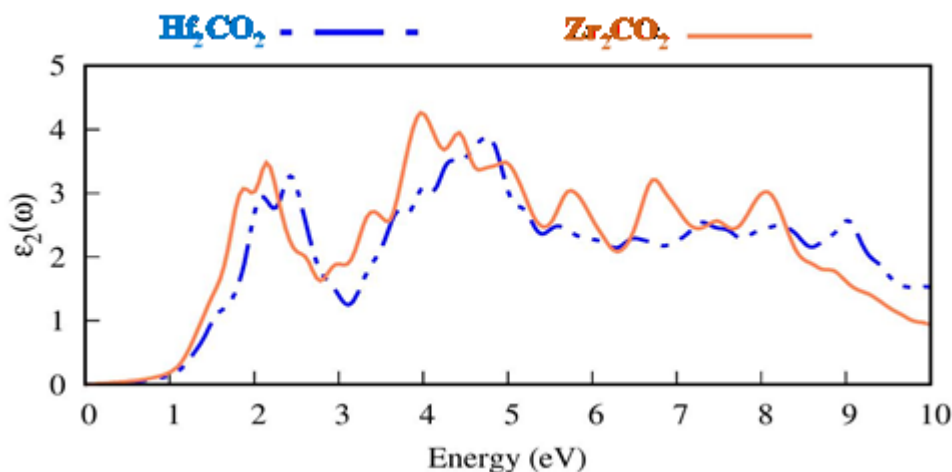
هر دو ساختار ذکر شده، $\text{Im} \epsilon_x(\omega)$ در انرژی‌های کمتر از ۳ الکترون‌ولت دارای پیک کوچکتری هستند و با افزایش انرژی فوتون افت و خیزها کمتر می‌شوند. از طرفی در نیمه‌رساناها الکترون‌ها می‌توانند بین دو حالت انرژی گذاری ایجاد کنند و فوتون‌ها را خلق یا نابود کنند. در اصل، گذارها ما بین نوار رسانش و نوار ظرفیت (گذارهای بین نواری) از نظر نوری فعال هستند، زیرا نوار رسانش پایین‌تر عموماً از حالت‌های s مانند و نوار ظرفیت بالاتر از حالت‌های p مانند تشکیل می‌شوند.

در بخش‌های گذشته به منظور درک رفتار فتوکاتالیستی مکسین‌های مورد مطالعه در این پژوهش به منظور کاربرد آن‌ها در فرایند شکافت آب، بسیاری از ویژگی ذاتی آن‌ها از جمله ویژگی ساختاری، الکترونی و نوری آن‌ها را محاسبه کردیم. تمامی محاسبات را هم با تابعی GGA-PBE و هم با تابعی هیبریدی HSE06 انجام دادیم. نتایج محاسبات گویای این امر بود که برای اینکه بتوانیم مکسین‌های مورد مطالعه در این پژوهش را به عنوان فتوکاتالیست مناسب در نظر بگیریم، بایستی از نتایج محاسبات تابعی هیبریدی HSE06 استفاده کنیم.

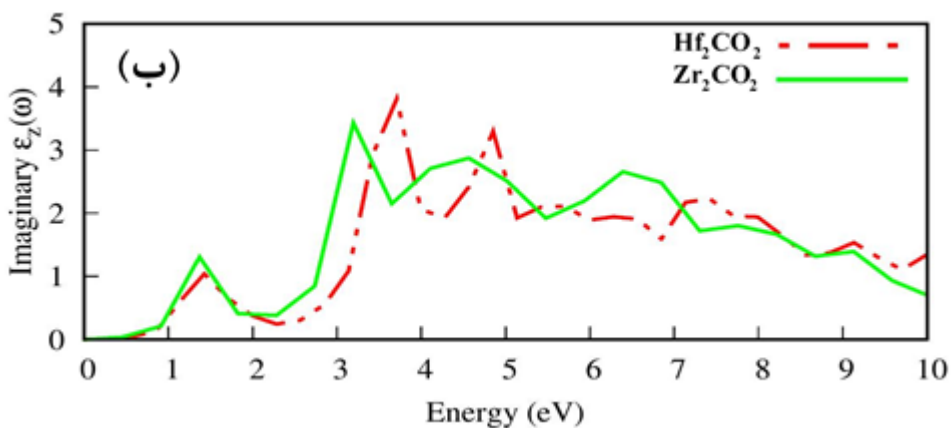
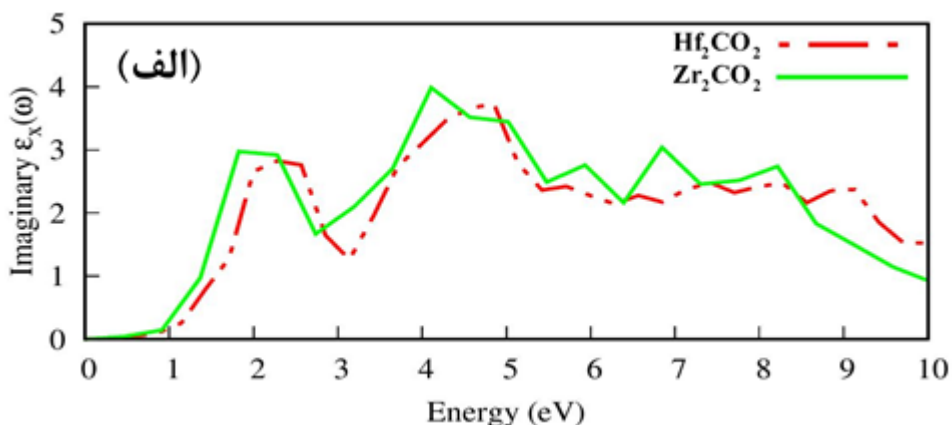
قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک نمایانگر گذار الکترون‌هاست که شامل گذارهای درون‌نواری و بین‌نواری هستند. ویژگی جذب نوری ساختارهای دو بعدی MXene را می‌توان بر اساس بخش موهومی محاسبه شده‌ی تابع دی‌الکتریک تجزیه و تحلیل کرد. در حالت کلی بخش موهومی تابع دی‌الکتریک برای دو نانوساختار Hf_2CO_2 و Zr_2CO_2 در شکل ۸ نشان داده شده است. همانطور که در این شکل مشاهده می‌کنید، رفتار نوری مربوط به این دو نانوساختار با همدیگر متفاوت است. دیده می‌شود که این دو نانوساختار دو بعدی دارای پیک‌های نسبتاً بزرگی در انرژی‌های پایین هستند که نمایانگر گذار بین‌نواری هستند و با افزایش انرژی میزان افت و خیزها کم و یکنواخت می‌شود. سهم موهومی تابع دی‌الکتریک برای دو نانوساختار Hf_2CO_2 و Zr_2CO_2 در دو راستای x و z در شکل ۹ به وضوح نشان داده شده است. همانطور که در شکل ۹ مشاهده می‌کنید، برای ساختارهای Hf_2CO_2 و Zr_2CO_2 دارای پیک‌های نسبتاً بزرگی در انرژی‌های پایین هستند که نمایانگر گذار بین‌نواری هستند و با افزایش انرژی، مقادیر آن‌ها کاهش می‌یابد. در

به این حقیقت دست یافتیم که طبق گفته‌های تجربی نیز تابعی هیبریدی HSE06 در بهبود گاف نواری نانوساختارهای دو بعدی مکسین کامل نقش تأثیرگذاری دارد [۶۱۶۰۶].

سرانجام برای اعتبارسنجی نتایج به دست آمده از پژوهش حاضر، از تحلیل‌های نظری و تجربی مطالعات گذشته استفاده کردیم. با مقایسه‌ی نتایج محاسبات ما با نتایج تجربی در مطالعات گذشته



شکل ۸: بخش موهومی تابع دی‌الکتریک برای نانوساختارهای دو بعدی Hf_2CO_2 و Zr_2CO_2 .



شکل ۹: بخش موهومی تابع دی‌الکتریک برای نانوساختارهای دو بعدی Hf_2CO_2 و Zr_2CO_2 در راستاهای قطبش میدان الکتریکی (الف) x و (ب) z.

جدول ۲: نقاط بیک محاسبه شده در دو جهت $E \parallel x$ و $E \parallel z$.

Structure	Hf ₂ CO ₂	Zr ₂ CO ₂
Real (E \parallel x)	۱/۹۹	۱/۳۷
Real (E \parallel z)	۱/۱۴	۰/۹۱ ، ۲/۷۴
Imaginary (E \parallel x)	۲/۲۸	۱/۸۲
Imaginary (E \parallel z)	۱/۴۲	۱/۳۷

tungstate based nanocomposites under visible light irradiation”, *Int J Hydrogen Energy*, 45, 22833-47, 2020.

[3] X. Gao, C. Liang, K. Gao, X. Li, J. Liu, Q. Li, “Z-scheme heterojunction Ag₃PO₄/BiVO₄ with exposing high-active facets and stretching spatial charge separation ability for photocatalytic organic pollutants degradation”, *Appl Surf Sci*, 524, 146506-16, 2020.

[4] A. Belhadi, L. Boudjellal, S. Boumaza, M. Trari, “Hydrogen production over the heterojunction MnO₂/SiO₂”, *Int J Hydrogen Energy*, 43, 3418-23, 2018.

[5] A.L. Salvia, W.L. Filho, L.L. Brandli, J.S. Griebeler, “Assessing research trends related to Sustainable Development Goals: local and global issues”, *J Clean Prod*, 208, 841-9, 2019.

[6] Z. Guo, J. Zhou, L. Zhu, Z. Sun, “Mxene: a promising photocatalyst for water splitting”, *Journal of Materials Chemistry A*, 4(29), 11446-11452, 2016.

[7] C.F. Fu, X. Li, Q. Luo, and J. Yang, “Two-dimensional multilayer M₂CO₂ (M= Sc, Zr, Hf) as photocatalysts for hydrogen production from water splitting: a first principles study”, *Journal of Materials Chemistry A*, 5(47), 24972-24980, 2017.

[8] C. Soldano, A. Mahmood, and E. Dujardin, “Production, properties and potential of graphene”, *Carbon*, 48, 2127–2150, 2010.

[9] P.D. Kaushik, M. Rodner, G. Lakshmi, I.G. Ivanov, G. Greczynski, J. Palisaitis, J. Eriksson, P. Solanki, A. Aziz, A.M. Siddiqui, *et al.*, “Surface functionalization of epitaxial graphene using ion implantation for sensing and optical applications”, *Carbon*, 157, 169–184, 2020.

۴- نتیجه گیری

به منظور بررسی ویژگی الکترونی و نوری تک لایه‌های دو بعدی Hf₂CO₂ و Zr₂CO₂ از محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT) استفاده شد. رفتار نیمه‌رسانایی برای تک لایه‌های دو بعدی Hf₂CO₂ و Zr₂CO₂ با گاف نواری غیرمستقیم به ترتیب ۱/۷۵ و ۱/۷۲ الکترون ولت بدست آمد. با توجه به چگالی حالات جزئی الکترونی، حالت‌های d نقش عمده‌ای را در حالت‌های نوار ظرفیت نزدیک سطح فرمی با یک همپوشانی کوچک با اوربیتال‌های s و p بازی می‌کنند. بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک برای تک لایه‌های دو بعدی Hf₂CO₂ و Zr₂CO₂ محاسبه شد. توافق بسیار بالایی مابین جذب و گاف نواری مواد وجود دارد. ماکزیمم پیک بخش موهومی تابع دی‌الکتریک برای تک لایه‌های دو بعدی Hf₂CO₂ و Zr₂CO₂ در گستره‌های طیفی ماورابنفش و مرئی قابل مشاهده است. نتایج نشان می‌دهد که پیک‌های جذبی برای تمامی ساختارها در نواحی ماورابنفش و مرئی وجود دارد. نتایج الکترونی و نوری محاسبه شده حاکی از آن است که تک لایه‌های دو بعدی Hf₂CO₂ و Zr₂CO₂ می‌توانند به عنوان مواد امیدوارکننده برای فرایند شکافت آب در نظر گرفته شوند.

مراجع

[1] R. Boudries, A. Khellaf, A. Aliane, L. Ihaddaden, F. Khida, “PV system design for powering an industrial unit for hydrogen production”, *International journal of hydrogen energy*, 39(27), 15188-95, 2014.

[2] M.B. Tahir, T. Nawaz, G. Nabi, M. Sagir, M. Rafique, A. Ahmed, *et al.*, “Photocatalytic degradation and hydrogen evolution using bismuth

- [20] M. Naguib, V.N. Mochalin, M.W. Barsoum, and Y. Gogotsi, “25th anniversary article: Mxenes: a new family of two-dimensional materials”, *Advanced Materials*, 26, 992–1005, 2014.
- [21] S. Sarikurt, D. Çakır, M. Keçeli, and C. Sevik, “The influence of surface functionalization on thermal transport and thermoelectric properties of mxene monolayers”, *Nanoscale*, 10, 8859–8868, 2018.
- [22] D. Horlait, S.C. Middleburgh, A. Chroneos, and W.E. Lee, “Synthesis and dft investigation of new bismuth-containing max phases”, *Scientific reports*, 6, 18829, 2016.
- [23] M. Khazaei, A. Ranjbar, K. Esfarjani, D. Bogdanovski, R. Dronskowski, and S. Yunoki, “Insights into exfoliation possibility of max phases to mxenes”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20, 8579–8592, 2018.
- [24] X. Zhang and Y. Xie, “Recent advances in free-standing two-dimensional crystals with atomic thickness: design, assembly and transfer strategies”, *Chemical Society Reviews*, 42, 8187–8199, 2013.
- [25] X. Wang, S. Kajiyama, H. Iinuma, E. Hosono, S. Oro, I. Moriguchi, M. Okubo, and A. Yamada, “Pseudocapacitance of mxene nanosheets for high-power sodium-ion hybrid capacitors”, *Nature communications*, 6, 1–6, 2015.
- [26] X. Xie, M.Q. Zhao, B. Anasori, K. Maleski, C.E. Ren, J. Li, B.W. Byles, E. Pomerantseva, G. Wang, and Y. Gogotsi, “Porous heterostructured mxene/carbon nanotube composite paper with high volumetric capacity for sodium-based energy storage devices”, *Nano Energy*, 26, 513–523, 2016.
- [27] Y. Xie, M. Naguib, V.N. Mochalin, M.W. Barsoum, Y. Gogotsi, X. Yu, K.W. Nam, X.Q. Yang, A.I. Kolesnikov, and P.R. Kent, “Role of surface structure on li-ion energy storage capacity of two-dimensional transitionmetal carbides”, *Journal of the American Chemical Society*, 136, 6385–6394, 2014.
- [10] F. Ostovari, M. Hasanpoori, M. Abbasnejad, and M. A. Salehi, “Dft calculations of graphene monolayer in presence of fe dopant and vacancy”, *Physica B: Condensed Matter*, 541, 6–13, 2018.
- [11] Y. Zhang, L. Wang, N. Zhang, and Z. Zhou, “Adsorptive environmental applications of mxene nanomaterials: a review”, *RSC advances*, 8, 19895–19905, 2018.
- [12] Z. Wei, Z. Peigen, T. Wubian, Q. Xia, Z. Yamei, and S. ZhengMing, “Alkali treated $t_{i_3}c_2t_x$ mxenes and their dye adsorption performance”, *Materials Chemistry and Physics*, 206, 270–276, 2018.
- [13] J. Pang, R.G. Mendes, A. Bachmatiuk, L. Zhao, H.Q. Ta, T. Gemming, H. Liu, Z. Liu, and M.H. Rummeli, “Applications of 2d mxenes in energy conversion and storage systems”, *Chemical Society reviews*, 48, 72–133, 2019.
- [14] H. Kim, Z. Wang, and H.N. Alshareef, “Mxetronics: Electronic and photonic applications of mxenes”, *Nano Energy*, 60, 179–197, 2019.
- [15] S. Rastegar, A. Rastkar Ebrahimzadeh, J. Jahanbin Sardroodi, “Mxene-based nanostructures for water splitting process using the density functional theory”, *Journal of Nanoanalysis*, 2021.
- [16] A. Mostafaei, E. Faizabadi, and E.H. Semiromi, “Electronic structures and optical properties of two-dimensional $(W_{2/3}X_{1/3})_2CO_2$ ($x=sc,y$) imxene by first-principles calculations”, *Materials Chemistry and Physics*, 248, 122896, 2020.
- [17] R. Khaledialidusti, A.K. Mishra, and A. Barnoush, “Atomic defects in monolayer ordered double transition metal carbide $(Mo_2TiC_2t_x)$ mxene and CO_2 adsorption”, *Journal of Materials Chemistry C*, 8, 4771–4779, 2020.
- [18] A. Mostafaei, E. Faizabadi, and E. H. Semiromi, *Nanotechnology*, 32(1), 015703, 2020.
- [19] A. Mostafaei, E. Faizabadi, and E.H. Semiromi, “Tuning the electronic and optical properties of sc_2cf_2 mxene monolayer using biaxial strain”, *energy conversion*, 25, 26, 2020.

“Theoretical prediction of two-dimensional functionalized MXene nitrides as topological insulators”, *Phys. Rev. B Condens. Matter*, 96, 195414, 2017.

[37] H. Zhang, et al., “2D α -Fe₂O₃ doped Ti₃C₂ MXene composite with enhanced visible light photocatalytic activity for degradation of Rhodamine B”, *Ceram. Int*, 44 (16), 19958–19962, 2018.

[38] M. Khazaei, A. Ranjbar, M. Arai, T. Sasaki, S. Yunoki, “Electronic properties and applications of MXenes: a theoretical review”, *J. Mater. Chem. C*, 5 (10), 2488–2503, 2017.

[39] H. Weng, A. Ranjbar, Y. Liang, Z. Song, M. Khazaei, S. Yunoki, M. Arai, Y. Kawazoe, Z. Fang, X. Dai, “Large-gap twodimensional topological insulator in oxygen functionalized MXene”, *Phys. Rev. B*, 92 (7), 075436, 2015.

[40] N. Zhang, et al., “Superior structural, elastic and electronic properties of 2D titanium nitride MXenes over carbide MXenes: a comprehensive first principles study”, *2D Mater*, 5 (4), 045004, 2018.

[41] S. Wang, J.X. Li, Y.L. Du, C. Cui, “First-Principles study on structural, electronic and elastic properties of graphene-like hexagonal Ti₂C monolayer”, *Comput. Mater. Sci*, 83, 290293, 2014.

[42] J.C. Lei, X. Zhang, and Z. Zhou, “Recent advances in mxene: Preparation, properties, and applications”, *Frontiers of Physics*, 10, 276–286, 2015.

[43] J. Jalilian, et al., “Tuning of the electronic and optical properties of single-layer indium nitride by strain and stress, *Phys. E Low-dimens*”, *Syst. Nanostruct*, 83, 372–377, 2016.

[44] Sh. Tamleh, Gh. Rezaei, J. Jalilian, “Stress and strain effects on the electronic structure and optical properties of ScN monolayer”, *Phys. Lett*, 382 (5), 339–345, 2018.

[28] J. Yan, C.E. Ren, K. Maleski, C.B. Hatter, B. Anasori, P. Urbankowski, A. Sarycheva, and Y. Gogotsi, “Flexible mxene/graphene films for ultrafast supercapacitors with outstanding volumetric capacitance”, *Advanced Functional Materials*, 27, 1701264, 2017.

[29] Y. Cheng, Y. Zhang, Y. Li, J. Dai, and Y. Song, “Hierarchical ni₂p/cr₂ctx (mxene) composites with oxidized surface groups as efficient bifunctional electrocatalysts for overall water splitting”, *Journal of Materials Chemistry A*, 7, 9324–9334, 2019.

[30] Q. Zhang, J. Teng, G. Zou, Q. Peng, Q. Du, T. Jiao, and J. Xiang, “Efficient phosphate sequestration for water purification by unique sandwich-like mxene/magnetic iron oxide nanocomposites”, *Nanoscale*, 8, 7085–7093, 2016.

[31] F. Wang, C. Yang, M. Duan, Y. Tang, and J. Zhu, “TiO₂ nanoparticle modified organ-like ti₃c₂ mxene nanocomposite encapsulating hemoglobin for a mediator-free biosensor with excellent performances”, *Biosensors and Bioelectronics*, 74, 1022–1028, 2015.

[32] X.f. Yu, Y.c. Li, J.b. Cheng, Z.b. Liu, Q.z. Li, W.z. Li, X. Yang, and B. Xiao, “Monolayer ti₂co₂: a promising candidate for nh₃ sensor or capturer with high sensitivity and selectivity”, *ACS applied materials & interfaces*, 7, 13707–13713, 2015.

[33] K. Huang, et al., “Two-dimensional transition metal carbides and nitrides (MXenes) for biomedical applications”, *Chem. Soc. Rev*, 47 (14), 5109–5124, 2018.

[34] Y. Aierken, et al., “MXenes/graphene heterostructures for Li battery applications: a first principles study”, *J. Mater. Chem*, 6 (5), 2337–2345, 2018.

[35] H. Lashgari, et al., “Electronic and optical properties of 2D graphene-like compounds titanium carbides and nitrides: DFT calculations”, *Solid State Commun*, 195, 61–69, 2014.

[36] Y. Liang, M. Khazaei, A. Ranjbar, M. Arai, S. Yunoki, Y. Kawazoe, H. Weng, Z. Fang,

- [59] S. Saha, T. P. Sinha, and A. Mookerjee, *Physical Review B*, 62, 8828, 2000.
- [60] X.H. Zha, Q. Huang, J. He, H. He, J. Zhai, J.S. Francisco, S. Du, “The thermal and electrical properties of the promising semiconductor MXene Hf_2CO_2 ”, *Scientific reports*, 6, 27971, 2016.
- [61] Z.W. Seh, K.D. Fredrickson, B. Anasori, J. Kibsgaard, A.L. Strickler, M.R. Lukatskaya, A. Vojvodic, “Two-dimensional molybdenum carbide (MXene) as an efficient electrocatalyst for hydrogen evolution”, *ACS Energy Letters*, 1(3), 589-594, 2016.
- [45] W. Yiou, S. Hajime, X. Jijia, T. Osamu, M.D. James, H. Masanobu, K. Dan, A. Ryu, T. Junwang, *Chem. Rev.*, 118, 5201–5241, 2018.
- [46] W. Kohn, L.J. Sham, “Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects”, *Physical Review*, 140, A1133-A1138, 1965.
- [47] J.P. Perdew, Y. Wang, *Phys. Rev. B*, 45, 13244, 1992.
- [48] J.P. Perdew, K. Burke, Y. Wang, *Phys. Rev. B*, 54, 16533, 1996.
- [49] J. Heyd, G.E. Scuseria, M. Ernzerhof, *J. Chem. Phys.*, 118, 8207, 2003.
- [50] G. Kresse, J. Furthmuller, *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* 54, 11169-11186, 1996.
- [51] G. Kresse, J. Furthmuller, *Comput. Mater. Sci.*, 6, 15-50, 1996.
- [52] H.J. Monkhorst, J.D. Pack, *Phys. Rev. B*, 13, 5188, 1976.
- [53] K. Momma, F. Izumi, *J. Appl. Crystallogr.*, 44, 1272, 2011.
- [54] M. Khazaei, M. Arai, T. Sasaki, C.Y. Chung, N.S. Venkataramanan, M. Estili, Y. Sakka, Y. Kawazoe, *Adv. Funct. Mater.*, 23, 2185-2192, 2013.
- [55] L. Li, *J. Phys. Chem. C*, 120, 24857-24865, 2016.
- [56] B.H. Lee, S. Park, M. Kim, A.K. Sinha, S.C. Lee, E. Jung, W.J. Chang, K.S. Lee, J.H. Kim, S.P. Cho, H. Kim, “Reversible and cooperative photoactivation of single-atom Cu/TiO_2 photocatalysts”, *Nature materials*, 18(6), 620-6, 2019.
- [57] R. Abt, C. Ambrosch-Draxl, and P. Knoll, “Optical response of high temperature superconductors by full potential lapw band structure calculations”, *Physica B: Condensed Matter*, 194, 1451–1452, 1994.
- [58] D. Ter Haar, “The Collected Papers of H. A. Kramers”, *Nature*, 178(4529), 337-8, 1956.



First-principles calculations of Electronic Structure of Novel 2D Nanostructures: a DFT, GGA-PBE functional and hybrid functional HSE06 study

Sima Rastegar^{1,2,3,*}, Alireza Rastkar Ebrahimzadeh^{1,2,3}, Jaber Jahanbin Sardroodi^{2,3,4}

1. Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz, Iran

2. Molecular Simulation Laboratory (MSL), Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz, Iran

3. Computational Nanomaterials Research Group (CNRG), Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz, Iran

4. Department of Chemistry, Faculty of Basic Sciences, Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz, Iran

Abstract: In this paper, the structural, electronic, optical, and photocatalytic properties of MXene monolayers are studied. MXenes are a new class of two-dimensional (2D) transition metal carbides and nitrides with the chemical formula $M_{n+1}X_n$ ($M = \text{Sc, Ti, V, Cr, Zr, Nb, Mo, Hf, Ta}$; $X = \text{C, N}$; $n = 1-3$) that etching MAX phases have recently synthesized. We study Hf_2CO_2 and Zr_2CO_2 nanostructures, comparing them with the GGA-PBE and HSE06 functionals. These calculations were performed using density functional theory (DFT). The unit cell of these structures and their atomic positions are fully optimized. The results show that the lattice constants for two-dimensional nanostructures Hf_2CO_2 and Zr_2CO_2 are 3.3592 and 3.3771 angstroms, respectively. The band gap of these nanostructures is of the indirect type. Based on the information obtained, their band gap values with GGA-PBE functional are 0.92 and 0.89 eV, respectively. The results of calculations with HSE06 hybrid functional show that both Hf_2CO_2 and Zr_2CO_2 nanostructures are semiconductors with band gaps of 1.75 and 1.72 eV. It can be seen that with an HSE06 hybrid functional, the amount of band gap improves. The real and imaginary parts of the dielectric function have been calculated to investigate the optical properties of these structures. In addition, the studied materials have high absorption in visible and ultraviolet regions. The obtained results show that these nanostructures may apply in designing optoelectronic devices.

Keywords: Structural Properties, Electronic Properties, Optical Properties, Photocatalyst, Density Functional Theory (DFT), Two-Dimensional Nanostructures.