

بررسی خواص الکترونی و اپتیکی تک لایه $\text{PbO-}\alpha$ تحت کرنش تک محوره و دومحوره

امین مسیحی^{۱*}، مینا صفا^۲

^{۱*} گروه فیزیک، واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران

^۲ گروه فیزیک، واحد ساوه، دانشگاه آزاد اسلامی، ساوه، ایران

چکیده

اطلاعات مقاله

با استفاده از محاسبه ابتدا به ساکن در چارچوب تئوری تابعی چگالی، خواص الکترونی و اپتیکی تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ مورد بررسی قرار گرفت. در این بررسی از سه تقریب مختلف، یعنی عملکرد هیبریدی DFT-PBE، mBJ و HSE06 استفاده شد. با ارزیابی پارامترهای الکترونی تک لایه مشخص می‌شود که این ماده تک لایه دویعدی رفتار نیمه هادی را نشان می‌دهد و دارای یک شکاف باند مستقیم متوسط 2.55 eV (2.70 eV) است که در سطح تئوری PBE (mBJ, HSE06) محاسبه شده است و می‌تواند به طور موثر توسط اثرات کرنش کنترل شود. تجزیه و تحلیل خواص اپتیکی نشان می‌دهد که تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ به عنوان یک ماده تقریباً شفاف در محدوده نور مرئی عمل می‌کند، با این حال، جذب و بازتاب خوبی در محدوده فرابنفش طیف الکترومغناطیسی نشان می‌دهد. علاوه بر این، محاسبات نشان می‌دهد که اسکن کرنش تک محوری و دو محوری به طور موثری خواص اپتیکی تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ را تعدیل می‌کند. خواص الکترونی و اپتیکی عالی محاسبه شده نشان می‌دهد که تک لایه دو بعدی $\alpha\text{-PbO}$ می‌تواند در فناوری‌های نانو اپتوالکترونیک استفاده شود.

واژگان کلیدی: نیمه هادی، خواص الکترونیکی، خواص اپتیکی

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۹/۱۴

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۸/۲۶

تاریخ چاپ: ۱۴۰۲/۹/۱۲

شاپای چاپی: 2588-493x
شاپای الکترونیکی: 2588-4921

*نویسنده مسئول

amin.masihi20@gmail.com



مقدمه

از جایگزینی آن به جای سیلیکون در مدارهای الکترونی می‌شود [۲]. پس از سنتز گرافن مطالعات زیادی صورت گرفت که منجر به شناسایی خواص جدید و طیف گسترده‌ای از کاربرد عملی، برای نانو مواد دویعدی شده است [۳]. به این ترتیب، نانومواد دویعدی گروه IV، از جمله سیلیکن^۱ [۴]، ژرمانن^۲ [۵]، استنن^۳ [۶] پیشنهاد و آزمایش شده است. در جستجویی برای یافتن جایگزین برای گرافن، دانشمندان دی کالکوژنیدهای فلزات واسطه^۴ (TMD) را در نظر گرفتند که می‌توانند به صورت مواد

با اولین سنتز موفق گرافن در سال ۲۰۰۴، این ماده برای جایگزینی نیمه‌هادی‌های سنتی در ترانزیستورها مورد بررسی قرار گرفت تا بتوان ترانزیستورهایی در ابعاد بسیار کوچک ساخت. گرافن به دلیل ویژگی‌های خاص و دامنه وسیعی از کاربردها به عنوان یک ماده نانو ساختار مورد استفاده قرار گرفته است [۱]. با این حال، گرافن خالص فاقد شکاف نوار الکترونی است که مانع

³ stanene

⁴ Transition Metal Dichalcogenides

¹ silicene

² germanene

بعدی کاربردهای زیادی در الکترونیک، اپتوالکترونیک، حسگرها و فوتوکاتالیست‌ها و ذخیره سازی انرژی پیدا کنند [۱۱].

ویژگی‌های مطلوب PbO عبارتند از خاصیت جذب تابش بالا (به دلیل عدد اتمی بالا و پایداری سرب)؛ مقاومت بالا در برابر نشت در اثر پایداری شدید؛ در دسترس بودن و فراوانی در طبیعت. علاوه بر این گفته شده PbO یک آشکارگر ایده آل هم می‌باشد [۱۲]. به طور خلاصه برای کاربردهایی با برانگیختگی در ناحیه نور مرئی، PbO می‌تواند یک ماده مناسب برای کاربردهایی از جمله فتوولتائیک، اپتوالکترونیک، سنجش مولکولی و فتوکاتالیز باشد.

مطالعاتی با استفاده از نظریه تابعی چگالی در مورد ارزیابی شکاف ورقه‌های اتمی α -PbO انجام شده است و تغییرات شکاف این ماده به عنوان تابعی از تعداد لایه‌ها مورد مطالعه قرار گرفته است [۱۳]. بسیاری از مواد نیمه‌هادی دوبعدی، فقط در حالت تک لایه نمایش قابل توجهی در بازه نور مرئی از خود نشان می‌دهند. اما α -PbO حتی در حالت بالک خود با شکاف ۲.۵eV بستر بسیار خوبی را برای ساخت دستگاه‌ها و سنسورها در ناحیه نور مرئی ایجاد می‌کند و این امر از ساخت تک لایه‌ها جلوگیری می‌کند [۱۴]. علاوه بر شکاف مناسب، تحرک الکترون‌ها که بیانگر سرعت واکنش به عوامل محرک خارجی می‌باشد نیز در α -PbO شرایط خاص و ویژه‌ای دارد. برای تک لایه α -PbO جرم موثر حفره‌ها ۸۳ برابر الکترون‌هاست، درحالی که در حالت بالک آن جرم موثر حفره‌ها فقط ۶ برابر الکترون‌ها می‌باشد [۱۵].

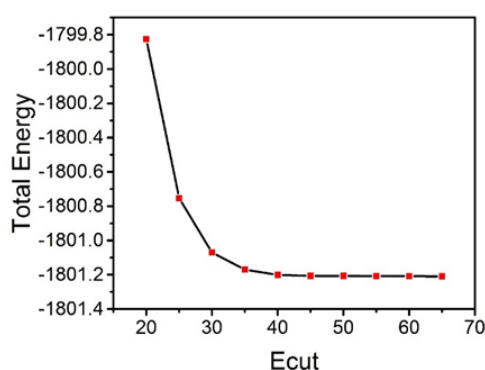
۱- روش تحقیق

آرام سازی نیروی اتمی، بهینه سازی پارامترهای سلولی و تجزیه و تحلیل ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی با استفاده از کد Wien2k انجام شد [۱۶]. به منظور مقایسه نظریه‌های مختلف، از سه تقریب استفاده شد، یعنی تقریب شیب تعمیم یافته با استفاده از تابع

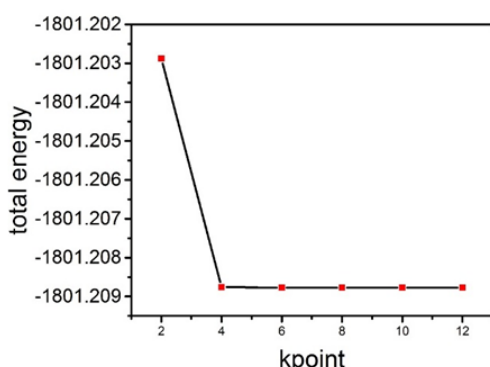
دو بعدی و تک لایه در ضخامت‌های در حد چند مولکول ساخته شوند. تک لایه های TMD دارای خواصی هستند که کاملاً متفاوت از گرافن نیمه رسانا هستند؛ تک لایه‌های دی کالکوژنید فلزات واسطه MoS_2 , WS_2 , MoSe_2 , WSe_2 , MoTe_2 دارای شکاف مستقیم هستند [۱۷]. به علت وجود شکاف انرژی، جریان در TMD ها را می‌توان کنترل کرد که یک ویژگی عالی برای به کارگیری این ماده در ترانزیستور است. همچنین TMD ها در جذب نورهای قطبی دایروی بسیار خوب هستند؛ بنابراین می‌توان از آنها در ساخت آشکارسازها نیز استفاده کرد [۱۸]. اگر چه دی کالکوژنیدهای واسطه به عنوان مواد جدید دوبعدی در فوتونیک و اپتوالکترونیک مورد استفاده قرار می‌گیرند، اما شکاف مرئی (مستقیم) به یک لایه محدود می‌شود [۱۹]. TMD ها در حالت تک لایه دارای شکاف مرئی (مستقیم) هستند در حالی که در فرم چندلایه فاقد شکاف مستقیم مرئی هستند و به دلیل چالش‌های ساخت تک لایه‌ها این امر باعث محدود شدن کاربرد TMD ها می‌شود. برای رفع این محدودیت‌ها، کشف ماده جدید دوبعدی، α -PbO گزارش شده است و رفتار اپتیکی آن مورد بررسی قرار گرفته است. مطالعات اسپکتروسکوپی نشان می‌دهد که شکاف نواری وابسته به تعداد لایه‌ها می‌باشد. به طور خاص مشاهده می‌شود که α -PbO نه تنها در حالت تک لایه که در حالت چندلایه هم دارای شکاف مرئی (مستقیم) می‌باشد که در بین مواد دوبعدی نیمه رسانا نادر است. تحقیقات اسپکتروسکوپی نشان می‌دهد که حتی ورقه‌های α -PbO چند لایه شکاف مستقیم بیشتر از ۲eV دارند که در میان مواد نیمه رسانای دوبعدی نادر است [۱۰]. این مسئله از این حیث مورد اهمیت است که ساخت تک لایه‌ها به دلیل مشکلات ساخت و نقص‌های شبکه کار مشکلی است اما ساخت چند لایه‌ها با مشکلات کمتری همراه است.

از آنجا که α -PbO چندلایه شکاف مرئی (مستقیم) دارد و نتایج تجربی هم نشان می‌دهند که ورقه‌های α -PbO مقاومت حرارتی، پایداری ماکروویو، رفتار ضد خوردگی و مقاومت اسید را نشان می‌دهند؛ انتظار می‌رود که این مواد کم هزینه، فراوان و مقاوم دو

انرژی قطع تابع موج تعداد جملات بسط را مشخص می کند. اگر مقدار انرژی قطع تابع موج زیاد انتخاب شود حجم محاسبات بالا می رود و اگر کم انتخاب شود دقت محاسبات پایین می آید؛ پس باید مقدار آن بهینه شود. برای بهینه سازی انرژی قطع تابع موج ابتدا یک مقدار بزرگ و ثابت ۱۰ ۱۰ ۱ برای مش بندی k به عنوان پیش فرض در نظر گرفته شد. مقادیر انرژی قطع از ۲۰ تا ۶۵ تغییر داده و فایل های ورودی مجزا برای هر کدام ایجاد شد و هر بار سیستم بهینه سازی گردید در نهایت نمودار انرژی کل بر حسب انرژی های قطع رسم شد. (شکل ۱ الف)) جایی که شیب نمودار به صفر میل کرد دیگر هیچکدام از پایه های خارج از این انرژی در تشکیل تابع موج نقش ندارند و آن مقدار به عنوان انرژی جنبشی قطع بهینه انتخاب شد. که در این جا عدد ۶۰ به عنوان انرژی جنبشی قطع استفاده شد.



الف



ب

شکل ۱ الف) - نمودار انرژی کل بر حسب انرژی های قطع مختلف تک لایه α -PbO (ب) نمودار انرژی کل بر حسب K-POINT مختلف برای تک لایه α -PbO

همبستگی تبدیلی^۵ (GGA-PBE) [۱۶]، بکه جانسون اصلاح شده^۶ [۱۷] (mBJ)، و سطح تئوری های عملکردی ترکیبی^۷ (HSE06). برای گسترش توابع موج کوهن-شم^۸، از امواج صفحه تقویت شده خطی با پتانسیل کامل به اضافه اوربیتال محلی^۹ (FPLAPW+lo) استفاده گردید. هنگام ارزیابی خواص الکترونی و اپتیکی، مش بندی ساختار شبکه ای $1 \times 12 \times 12$ و $1 \times 22 \times 22$ بر اساس طرح Monkhorst-Pack [۱۸] برای شناسایی اولین منطقه بریلوین در نظر گرفته شدند. همچنین هنگام محاسبه خصوصیات الکترونی از ورودی های محاسباتی $R_{MTK_{max}}=7$ ، $G_{max}=14 \text{ Ry}^{1/2}$ و $l_{max}=10$ استفاده شد. همچنین یک لایه خلاء $15 \text{ \AA}$ در جهت غیر تناوبی (محور z) به منظور اجتناب از برهمکنش لایه های همسایه استفاده شد.

محاسبات براساس کدمحاسباتی کوانتوم اسپرسو و با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA-PBE) انجام شد. در ابتدا با استفاده از داده های تجربی و کارهای قبلی [۱۹] فایل متنی با فرمت vasp را برای ساختار تک لایه α -PbO ایجاد شد. باتوجه به این که تک لایه α -PbO دارای ساختار تتراگونال می باشد ثابت شبکه $a=b=3.97 \text{ \AA}$ گرفته شد و چون محاسبات برای تک لایه α -PbO است برای به حداقل رساندن اثر دیگر لایه ها فاصله ی لایه ها $c=12.5 \text{ \AA}$ گرفته شد. سپس جایگاه اتم ها مطابق ساختار تتراگونال وارد گردید.

۲- نتایج و بحث

۲-۱- بهینه سازی انرژی قطع

برای حل معادلات کوهن-شم باید این معادلات بر حسب توابع پایه بسط داده شوند و چون این توابع پایه مجموعه ای از امواج تخت هستند و در حالت کلی تعداد این امواج تخت بی شمار است حجم و هزینه ی محاسبات بسیار بالا می رود. برای کاهش حجم محاسبات جملات این بسط باید در جایی خاتمه ببابند. مقدار

^۸ Kohn-Sham

^۹ full potential linear augmented plane waves plus local orbital (FPLAPW+lo)

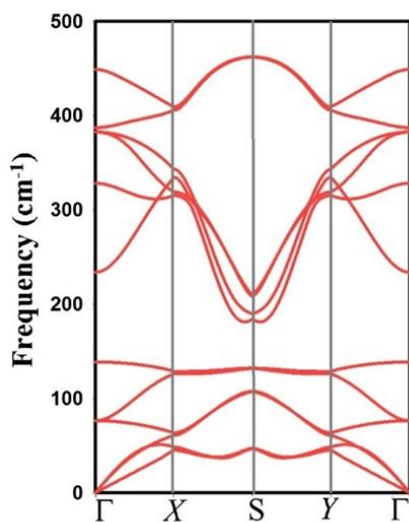
^۵ generalized gradient approximation using Perdew-Burke-Ernzerhof exchange-correlation functional (GGA-PBE)

^۶ modified Becke Johnson

^۷ Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE06)

۲-۱-۱- بهینه سازی تعداد نقاط K

الف



ب

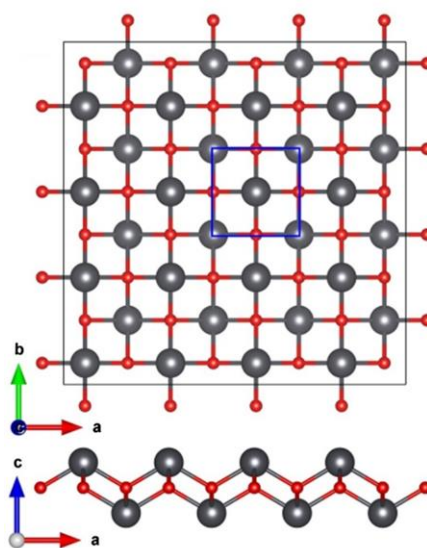
شکل ۲- (الف) ساختار هندسی تک لایه α -PbO از دونه‌های بالا و پهلوی (ب) نمودار فونون تک لایه α -PbO

در شکل ۲ (الف)، سلول واحد بهینه شده ساختار α -PbO مشاهده می‌شود که برای آن ثابت شبکه $a=b=4.04\text{\AA}$ بدست آمد. در شبکه اتمی این تک لایه سه سطح مختلف اتمی وجود دارد. دو صفحه اتمی Pb به صورت مساوی در پایین و بالا صفحه اتمی O با فاصله عمودی $2.37\text{\AA}$ قرار گرفته اند. در این ساختار هر اتم Pb به چهار اتم همسایه O متصل است و هر اتم O با چهار اتم Pb برای ساخت یک ساختار ساده تتراگونال متصل شده است. به طور دقیق‌تر دو مقدار متفاوت 104.99° و 75.008° برای زاویه‌های Pb-O-Pb و O-Pb-O بدست آمد. علاوه بر این طول پیوند Pb-O برابر با $2.35\text{\AA}$ بدست آمد که در مقایسه با خواص ساختارهایی از α -PbO که قبلاً گزارش شده اند [۲۰] توافق خوبی بین نتایج وجود دارد.

پس از بهینه کردن انرژی جنبشی قطع و به منظور بهینه کردن مشبندی شبکه K؛ باقراردادن انرژی قطع بهینه شده در فایل ورودی مقدار مشبندی تغییر داده شد و انرژی کل سیستم استخراج گردید و نمودار K-POINT بر حسب انرژی کل سیستم رسم شد. جایی که شیب نمودار به صفر میل کرد به عنوان مشبندی بهینه مورد استفاده قرار گرفت. (شکل ۱(ب))

۲-۱-۲- بهینه سازی ثابت های شبکه

برای بهینه کردن ثابت‌های شبکه انرژی قطع تابع موج بهینه (60RY) و مشبندی بهینه نقاط K در یک فایل ورودی VC_relax قرار داده و یک اجرای VC_relax گرفته شد. اجرای VC_relax شامل چندین اجرای خودسازگار می‌باشد که خروجی آن علاوه بر ثابت‌های شبکه بهینه، پایدارترین موقعیت اتم‌ها را در شبکه می‌دهد و همچنین انرژی کل با تغییرات جزئی در حوالی حجم تعادلی وردش داده می‌شود تا حجم بهینه سلول واحد را نیز بدست دهد. از فایل خروجی اجرای VC_relax مجدداً ثابت‌های شبکه تعادلی و جایگاه اتم‌ها استخراج شد و از این ثابت شبکه و جایگاه اتم‌ها استفاده گردید. پس از بهینه‌سازی پارامترهای ورودی با استفاده از نرم افزار xcrsden ساختار هندسی تک لایه α -PbO رسم شد که در شکل ۲ مشاهده می‌شود.

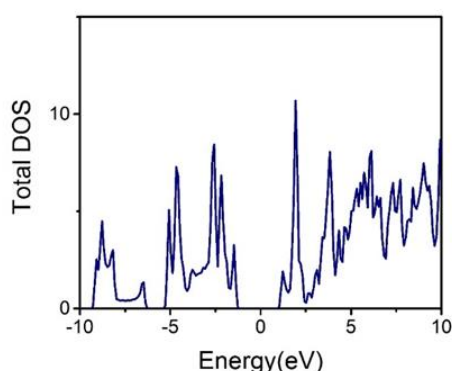


شکل ۳- نمودار ساختار نواری تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ (سمت چپ) و نمودار چگالی حالات جزئی الکترونی (سمت راست)

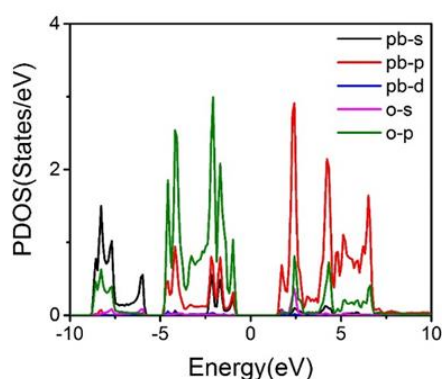
در بررسی ساختار نواری تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ که در شکل ۳ نمایش داده شده است انرژی فرمی بر انرژی صفر منطبق شده است. به علت وجود شکاف تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ یک نیم‌رسانا دارای شکاف مستقیم در حدود 2.55 eV می‌باشد. شکاف در نقطه‌ی Γ و در واقع به ازای یک مقدار K رخ می‌دهد. علاوه بر این، برای به دست آوردن خواص دقیق‌تر الکترونی، از دو تقریب دیگر برای بررسی شکاف باند تک لایه استفاده شد، بر اساس شبیه‌سازی، با استفاده از تقریب‌های HSE06 [۲۱] و mBJ [۲۰]، این ماده‌ی تک لایه دو بعدی، به ترتیب شکاف مستقیم 3.7 و 3.5 الکترون ولت دارد.

۴-۲- محاسبه‌ی چگالی حالت‌ها

شکل ۴ (الف) و (ب) نمودار چگالی حالت کلی و نمودار چگالی حالات جزئی تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ را نشان می‌دهد.



الف



ب

۲-۲- انرژی همدوسی $\alpha\text{-PbO}$ و محاسبات فونون $\alpha\text{-PbO}$

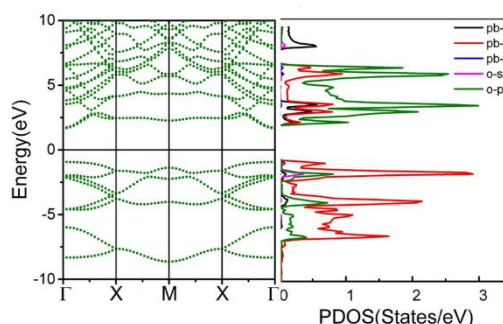
پایداری $\alpha\text{-PbO}$ با بررسی پایداری ترمودینامیکی آن بررسی شد. برای ارزیابی پایداری این تک لایه ابتدا ثبات ترمودینامیکی آن با محاسبه‌ی انرژی همدوسی که با رابطه‌ی ۱ تعریف می‌شود مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت.

$$E_{\text{coh}} = (2E_{\text{Pb}} + 2E_{\text{O}} - E_{\text{PbO}}) / 4 \quad (1)$$

در این معادله E_{Pb} و E_{O} به ترتیب انرژی کل اتم Pb انرژی کل اتم O و انرژی کل سلول واحد تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ است. با استفاده از این رابطه انرژی همدوسی 3.41 eV/atom برای تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ به دست آمد که تأیید می‌کند این تک لایه دارای پایداری ساختاری خوبی است. سپس برای بررسی پایداری دینامیکی تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ پهنای باند فونونی محاسبه شد که در شکل ۲ (ب) ترسیم شده است. برای این کار مسیر متقارن $\Gamma\text{-Y-X-S}$ در نظر گرفته شد. همانطور که مشاهده می‌شود هیچ حالت موهومی در کل منطقه بریلوئن وجود ندارد که ثابت می‌کند تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ به صورت دینامیکی پایدار است و علاوه بر این بیشترین فرکانس فونونی برای تک لایه 462 cm^{-1} است.

۳-۲- محاسبات ساختار نواری تک لایه $\alpha\text{-PbO}$

برای انجام محاسبات ساختار نواری از فایل بهینه‌سازی شده یک اجرای خودسازگار و بعد از آن یک اجرای غیرخودسازگار انجام گرفت و سپس مراحل مربوط به محاسبات ساختار نواری را انجام داده و ساختار نواری $\alpha\text{-PbO}$ مطابق شکل ۳ رسم شد.



شکل ۴- (الف) نمودار چگالی حالت الکترونی کل تک لایه PbO -

α

(ب) نمودار چگالی حالات الکترونی جزئی تک لایه PbO - α

با تجزیه و تحلیل چگالی حالات جزئی مشخص شد که برای یک تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ بیشینه نوار ظرفیت^{۱۱} (VBM) و کمینه نوار رسانش^{۱۲} (CBM) توسط اوربیتالهای O_{2p} و Pb_{6p} تشکیل شده‌اند و این اوربیتالها سهم بیشتری در نوار ظرفیت و رسانش ایفا می‌کنند.

۲-۵- بررسی خواص الکترونی و اپتیکی تک لایه α -

PbO تحت کرنش تک محوره و دو محوره

به منظور بررسی تاثیر اعمال کرنش تک محوره و دو محوره در خواص الکترونیک تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ ، تغییرات خواص الکترونی و اپتیکی این تک لایه در شرایط کرنش مورد مطالعه قرار گرفت. به این منظور برای بررسی کرنش تک محوره ثابت شبکه a به صورت $a = a_0(1 + \tau)$ تغییر می‌کند و برای کرنش دو محوره ثابت-های شبکه a و b به صورت $a = a_0(1 + \tau)$ و $b = b_0(1 + \tau)$ که در آن a_0 و b_0 ثابت‌های شبکه تعادلی و $\tau = 0, +2\%, +4\%, +6\%, +8\%, +10\%, +12\%, +14\%, +16\%, +18\%, +20\%$ برای کرنش کششی و $\tau = -2\%, -4\%, -6\%, -8\%, -10\%$ برای کرنش فشاری است.

برای بررسی خواص الکترونی و اپتیکی تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ حالت بهینه شده ساختار به عنوان نقطه صفر یا حالت تعادلی ساختار در نظر گرفته شد. سپس ابتدا برای حالت کرنش تک محوره ثابت شبکه a از ۰ تا ۲۰ درصد مقدار تعادلی با گام ۲ درصد تحت کرنش کششی قرار داده شد و برای هر مرحله خواص الکترونی و اپتیکی ساختار بررسی گردید. همین کار برای کرنش فشاری انجام شد و ثابت شبکه a را از ۰ تا ۱۰- درصد حالت تعادلی با گام ۲- تحت کرنش فشاری قرار داده شد و کلیه محاسبات ساختار

الکترونی و اپتیکی برای هر مرحله انجام گرفت. در کرنش تک محوره ثابت شبکه فقط در یک جهت تغییر می‌کند و مقدار ثابت شبکه b باید ثابت باشد. برای کرنش دو محوره ثابت‌های شبکه a و b به طور همزمان تغییر می‌کنند و برای کرنش کششی با گام ۲ از ۰ تا ۲۰ درصد مقدارهای تعادلی a_0 و b_0 و برای کرنش فشاری از ۰ تا ۱۰- درصد مقدارهای تعادلی تغییر می‌کنند و خواص ساختار الکترونی و اپتیکی در همه حالت‌ها محاسبه گردید.

۲-۵-۱- بررسی خواص الکترونی تحت کرنش تک

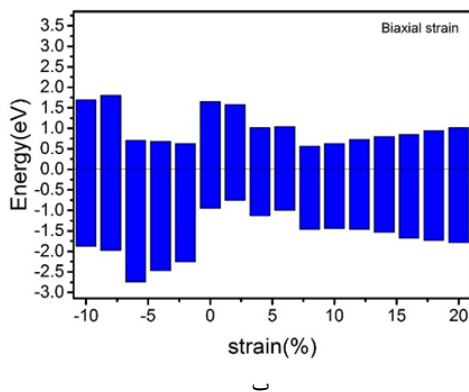
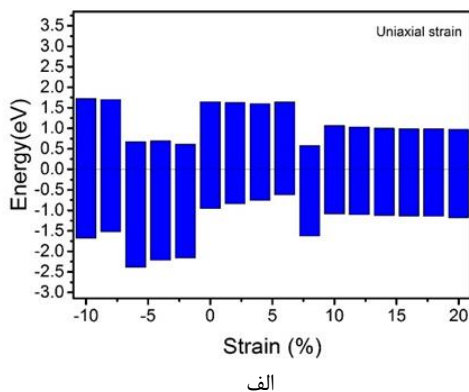
محوره و دو محوره

تغییرات در نمودار ساختار نواری تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ تحت کرنش فشاری و کششی تک محوره در شکل ۵ نمایش داده شده است. در این نمودار روند تغییرات اندازه شکاف و نحوه جابه‌جایی نوارهای رسانش و ظرفیت نسبت به تراز فرمی قابل رویت است. همچنین مشاهده می‌شود که تحت این کرنش‌ها شکاف مستقیم باقی می‌ماند. برای بررسی دقیق‌تر نمودار تغییرات اندازه شکاف انرژی تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ تحت شرایط کرنش دو محوره و تک محوره مختلف با استفاده از تقریب PBE در شکل ۶ نشان داده شده است. همانطور که در شکل ۶ دیده می‌شود، در هر دو تنش دو محوره و تک محوره، شکاف نوار انرژی با افزایش کرنش کششی کاهش می‌یابد ولی با افزایش کرنش کششی اندازه شکاف افزایش می‌یابد. شیب تغییرات در کرنش دو محوره بیشتر از کرنش تک محوره می‌باشد. همچنین انرژی‌های کرنش نسبت به کرنش‌های مختلف محاسبه شده و در شکل ۶ (ب) رسم شده است و در آن، تفاوت بین انرژی حالت پایه و انرژی حالت کشش شده به عنوان انرژی کششی تعریف شده است، یعنی $E_s = (E_0 - E_6) / n$ که در آن n تعداد اتم‌ها در سلول واحد است. شکل ۶ (ب) تایید می‌کند که حالت پایه به دست آمده کاملاً آرام و بهینه شده است. علاوه بر این، در ارزیابی‌های انجام شده، تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ در حالت تنش دو محوره نسبت به تنش تک محوره حساس‌تر است. پارامترهای ساختاری و الکترونی محاسبه شده

¹² conduction band minimum (CBM)

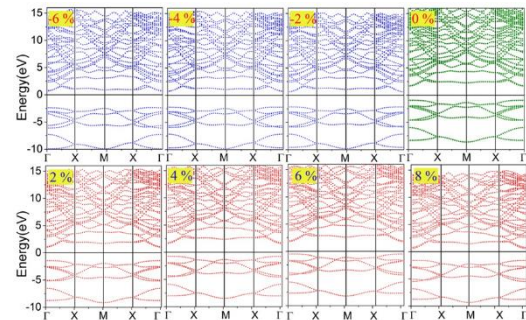
¹¹ valence band maximum (VBM)

ظرفیت تحت کرنش های مختلف تک محوره برای تک لایه نیز مشاهده می شود. طبق این نمودار در کرنش های کششی از ۰ تا +۶ درصد با افزایش کرنش ضمن کاهش شکاف لبه نوار ظرفیت به تراز فرمی نزدیک می شود. اما در +۸ درصد ناگهان لبه نوار رسانش به تراز فرمی نزدیک می شود و از +۸ درصد به بعد فاصله لبه نوار رسانش و ظرفیت تا تراز فرمی تقریباً یکسان می باشد. در کرنش فشاری از ۰ تا -۶ درصد لبه نوار رسانش به تراز فرمی نزدیکتر است و در -۸ درصد هم جابه جایی ناگهانی لبه نوار رسانش دیده می شود. این جابه جایی لبه های نوار رسانش و ظرفیت برای کرنش دوماحوره در شکل ۷ (ب) نشان داده شده است. برای بررسی بیشتر، نمودار تغییرات چگالی حالات جزئی برای کرنش دو محوره تک لایه α -PbO در شکل ۸ رسم شده است.

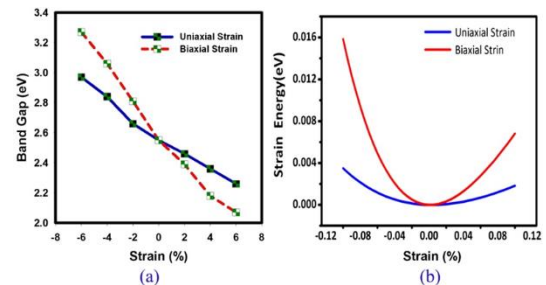


شکل ۷- نمودار تغییرات اندازه شکاف و جابه جایی لبه نوار رسانش و لبه نوار ظرفیت تحت کرنش های مختلف (الف) تک محوره (ب) دو محوره برای تک لایه α -PbO

در سلول واحد تک سلولی α -PbO تحت شرایط مختلف تک محوره و دوماحوره در جدول های ۱ و ۲ خلاصه شده است.



شکل ۸- نمودار تغییرات ساختار نواری تک لایه α -PbO تحت کرنش فشاری و کششی تک محوره



شکل ۹- نمودار تغییرات اندازه شکاف انرژی تک لایه α -PbO تحت شرایط کرنش دو محوره و تک محوره مختلف با استفاده از تقریب PBE

جدول ۱- خواص ساختاری و شکاف انرژی تک لایه α -PbO تحت شرایط

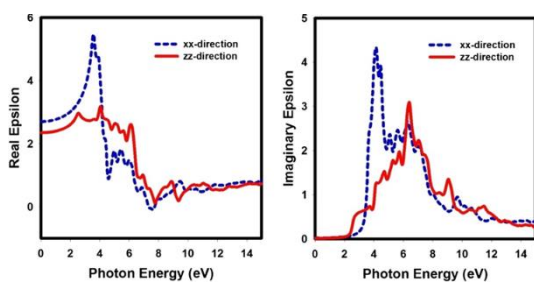
	مختلف کرنش تک محوره						
	-۶٪	-۴٪	-۲٪	۰	+۲٪	+۴٪	+۶٪
a (Å)	۳٫۷۹	۳٫۸۷	۳٫۹۵	۴٫۰۴	۴٫۱۲	۴٫۲۰	۴٫۲۸
b (Å)	۴٫۰۴	۴٫۰۴	۴٫۰۴	۴٫۰۴	۴٫۰۴	۴٫۰۴	۴٫۰۴
Gap-PBE (eV)	۲٫۹۷	۲٫۸۴	۲٫۶۶	۲٫۵۵	۲٫۴۶	۲٫۳۶	۲٫۲۶
Es (eV/atom)	۰٫۰۲۱	۰٫۰۰۸	۰٫۰۰۶	۰	۰٫۰۰۱	۰٫۰۰۴	۰٫۰۱۰
Δ (Å)	۲٫۴۳	۲٫۴۱	۲٫۳۶	۲٫۳۷	۲٫۳۳	۲٫۲۹	۰٫۹۶

جدول ۲- خواص ساختاری و شکاف انرژی تک لایه α -PbO تحت شرایط

	مختلف کرنش دوماحوره					
	-۶٪	-۴٪	-۲٪	۰	+۲٪	+۶٪
a = b (Å)	۳٫۷۹	۳٫۸۷	۳٫۹۵	۴٫۰۴	۴٫۱۲	۴٫۲۰
Gap-PBE (eV)	۳٫۲۷	۳٫۰۶	۲٫۸۱	۲٫۵۵	۲٫۳۹	۲٫۱۸
Es (eV/atom)	۰٫۰۰۶	۰٫۰۰۲	۰٫۰۰۰۶	۰	۰٫۰۰۰۳	۰٫۰۰۲
Δ (Å)	۲٫۵۳	۲٫۴۷	۲٫۴۱	۲٫۳۷	۲٫۳۱	۲٫۱۹

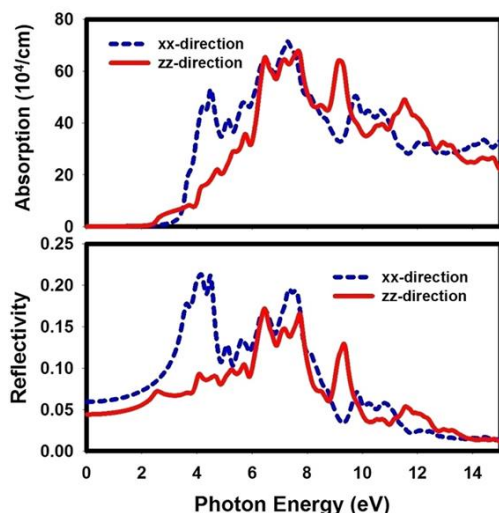
در یک بررسی دیگر با توجه به شکل ۷ (الف) علاوه بر مشاهده تغییرات اندازه شکاف، جابه جایی لبه نوار رسانش و لبه نوار

همین نقطه پیک دیده می‌شود که بیانگر این مطلب است که در این نقطه گذارهای بین نواری اتفاق می‌افتد و می‌توان شکاف اپتیکی α -PbO را تشخیص داد و می‌توان گفت تابع دی‌الکتریک شکاف اپتیکی خوبی را نشان می‌دهد. همانطور که در شکل ۱۰ دیده می‌شود، لبه‌های موهومی از تابع دی‌الکتریک با لبه‌های نمودار جذب مربوطه مطابقت دارد [۲۳].



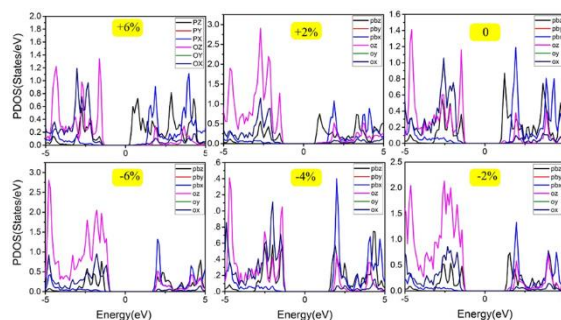
شکل ۹- قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط برای

تک لایه α -PbO



شکل ۱۰- نمودار جذب اپتیکی (بالا) و بازتاب (پائین) α -PbO برای فوتون‌های ورودی عمود بر سطح (ZZ جهت)، و موازی سطح (XX جهت)

برای بررسی بیشتر خواص اپتیکی تک لایه α -PbO، جذب اپتیکی و همچنین بازتاب از این ماده برای فوتون‌های ورودی



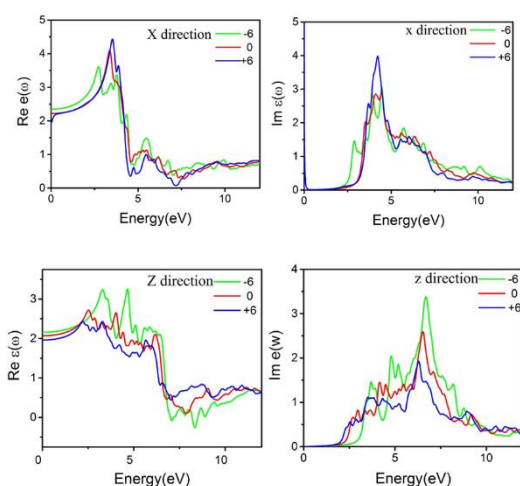
شکل ۸- نمودار تغییرات چگالی حالات جزئی برای کرنش دو محوره

تک لایه α -PbO

۲-۶- خواص اپتیکی

در شکل ۹ قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط برای تک لایه α -PbO ارائه شده است. با توجه به شبیه‌سازی‌ها، هنگامی که نور به صورت عمود (zz-direction) به سطح تک لایه α -PbO اعمال می‌شود، مقدار ثابت دی‌الکتریک استاتیک به ۲,۳۴ محاسبه می‌شود. قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک گذارهای میان نواری 13 در هنگام برانگیخته شدن الکترون‌ها را میان نوار ظرفیت و رسانش نشان می‌دهد. تابع دی‌الکتریک دارای دو سهم گذار بین نواری و درون نواری می‌باشد. با مقایسه‌ی پیک‌های قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک و ساختار نواری تک لایه α -PbO به خوبی می‌توان فرآیند گذارهای الکترونی را پس از جذب فوتون‌هایی با انرژی‌های مختلف بررسی کرد. پیک اصلی در این نمودارها مربوط به جذب اپتیکی میان اولین نوار ظرفیت و اولین نوار رسانش است.

با توجه به اینکه شکاف تجربی تک لایه α -PbO ۲,۲ الکترون‌ولت گزارش شده است [۲۲] و مقدار محاسبه شده توسط محاسبات برابر ۲,۵۵ الکترون‌ولت است در نمودار قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک تک لایه α -PbO (شکل ۹) اولین پیکی که مشاهده می‌شود در حدود انرژی ۲,۵۵ eV است. همانطور که در قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک دیده می‌شود تغییرات تابع دی‌الکتریک تا حدود نقطه ۲,۵۵ eV بسیار ناچیز است و در



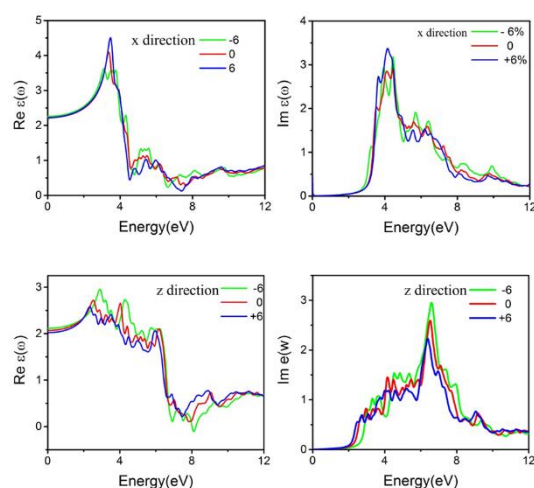
شکل ۱۲- نمودارهای قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک تک

لایه $\alpha\text{-PbO}$ برای کرنش دو محوره و در راستاهای Z و X

همانطور که در شکل ۱۳ و ۱۴ مشخص است تغییرات این نمودارها با تغییر کرنش کششی و فشاری بسیار کم است و نمودارها بسیار به یکدیگر نزدیک هستند. اما در جهت X تغییرات کرنش کششی کمی بیشتر از کرنش فشاری است و در جهت Z تغییرات کرنش فشاری کمی بیشتر از کرنش کششی است. همچنین مشاهده می گردد که در کرنش تک محوره و دو محوره پیک اصلی در قسمت موهومی تابع دی الکتریک با افزایش کرنش فشاری دارای شیفته آبی و با افزایش کرنش کششی شیفته قرمز دارد. شکل های ۱۳ و ۱۴ تغییرات ثابت دی الکتریک استاتیک برای کرنش تک محوره و دو محوره را در بازه -10% تا $+10\%$ نشان می دهد.

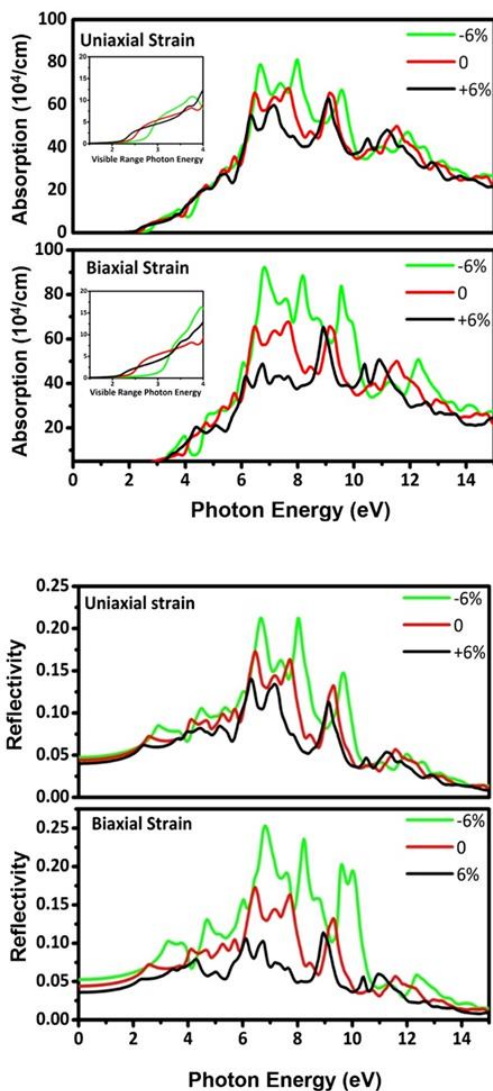
مطابق نمودارها ثابت دی الکتریک استاتیک تغییرات بسیار کمی دارد و روند تغییرات در جهت Z برای کرنش تک محوره و دو محوره به صورت تقریباً خطی می باشد و برای هر دو کرنش تک محوره و دو محوره در جهت Z با افزایش کرنش کششی ثابت دی الکتریک کاهش و با افزایش کرنش فشاری ثابت دی الکتریک افزایش می یابد و برای کرنش تک محوره مقدار آن از -10% تا $+10\%$ از $2,147$ تا $1,986$ (شکل ۱۳) و برای کرنش دو محوره مقدار آن از -10% تا $+10\%$ از $2,243$ تا $1,870$ تغییر می کند. (شکل ۱۴)

عمود بر سطح (ZZ) جهت و موازی سطح (XX) جهت محاسبه شده و در شکل ۱۰ (بالا و پایین) ترسیم شده است. همانطور که در این شکل دیده می شود، نیمه هادی تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ جذب قابل توجهی را نشان نمی دهد و انعکاس بسیار کم (کمتر از 10%) در محدوده قابل رویت نور است [۲۴]. همچنین اولین پیک جذب قابل توجه برای فوتون ورودی با انرژی حدود 6 الکترون ولت ظاهر می شود، جایی که جذب حدود 65 است (104 cm^{-1}) و بازتاب حدود 17% است. علاوه بر این، روشن است که جذب و بازتابی اصلی این تک لایه در رنج نور فرابنفش (UV) طیف الکترومغناطیسی ظاهر می شود. در نهایت، تاثیر تنش های دوماحوره و تک محوره در تغییر خواص اپتیکی تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ بررسی شد. به این منظور، تغییرات تابع دی الکتریک و ثابت دی الکتریک و جذب اپتیکی و بازتاب از این ماده تحت شرایط مختلف تنش دوماحوره و تک محوره مختلف محاسبه شد. ابتدا تابع دی الکتریک تحت کرنش های تک محوره و دوماحوره بررسی شد. نمودارهای قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ برای کرنش تک محوره و در راستاهای Z و X در شکل ۱۱ و برای کرنش دو محوره در شکل ۱۲ برای درصدهای $+6\%$ ، -6% و 0% رسم شده است.



شکل ۱۱- نمودارهای قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک

تک لایه $\alpha\text{-PbO}$ برای کرنش تک محوره و در راستاهای Z و X

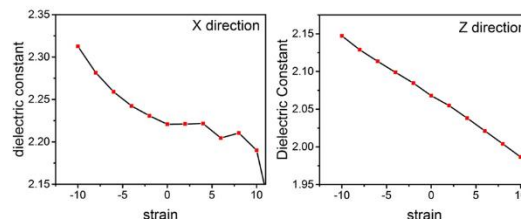


شکل ۱۵- نمودار تغییرات جذب و بازتاب خواص تک لایه α -PbO تحت شرایط مختلف (الف) کرنش تک محوره (ب) کرنش دوماحوره

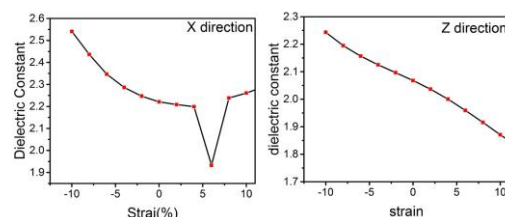
۳- نتیجه گیری

پس از ایجاد فایل ورودی اولیه و بهینه سازی پارامترهای محاسباتی (بهینه سازی انرژی قطع، بهینه سازی تعداد نقاط K و بهینه سازی ثابت های شبکه) نتایج زیر در قسمت های مختلف حاصل شد:

تک لایه α -PbO دارای ساختار تتراگونال می باشد و پارامترهای ساختاری آن به صورت زیر به دست آمد: ثابت شبکه $a=b=4.04 \text{ \AA}$ ؛ فاصله عمودی صفحات Pb برابر $2.37 \text{ \AA}$ ؛ زاویه Pb-O-Pb برابر 104.99° و زاویه O-Pb-O برابر 75.008° ؛ طول



شکل ۱۳- تغییرات ثابت دی الکتریک استاتیک تک لایه α -PbO برای کرنش تک محوره در بازه -10% تا $+10\%$



شکل ۱۴- تغییرات ثابت دی الکتریک استاتیک تک لایه α -PbO برای کرنش دوماحوره در بازه -10% تا $+10\%$

تغییر در جذب و بازتاب خواص تک لایه α -PbO تحت شرایط مختلف کرنش تک محوره و دو محوره برای مقادیر کرنش $\pm 6\%$ به ترتیب در شکل ۱۵ ارائه شده است. همانطور که در این شکل ها دیده می شود تحت هر دو شرایط تنش دوماحوره و تک محوره بازتاب و جذب تک لایه α -PbO تحت کرنش فشاری افزایش می یابد، در حالی که آن تحت شرایط کرنش کششی کاهش می یابد. علاوه بر این، همانطور که در این شکل ها دیده می شود، ضریب کرنش افزایش می یابد و مقدار کمی شیفت آبی در طیف جذب و بازتابی تک لایه α -PbO ظاهر می شود.

کرنش کششی کاهش می‌یابد. علاوه بر این، ضریب کرنش افزایش می‌یابد و مقدار کمی شیفت آبی در طیف جذب بازتابی تک لایه α -PbO ظاهر می‌شود.

منابع

- [1] P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M. C. Asensio, A. Resta, B. Ealet, and G. Le Lay, "Silicene: compelling experimental evidence for graphene-like two-dimensional silicon," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 155501, 2012.
- [2] M. E. Dávila, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, and G. LeLay, "Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene," *New J. Phys.*, vol. 16, p. 095002, 2014.
- [3] Y. Xu, B. Yan, H. J. Zhang, J. Wang, G. Xu, P. Tang, W. Duan, and S.-C. Zhang, "Large-gap quantum spin hall insulators in tin films," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 111, p. 136804, 2013.
- [4] X. Tan, F. Li, and Z. Chen, "Metallic BSi3 silicene and its one-dimensional derivatives: unusual nanomaterials with planar aromatic D6h six-membered silicon rings," *Phys. Chem. C*, vol. 118, p. 25825, 2014.
- [5] Y. Li, Y. Liao, P. V. R. Schleyer, and Z. Chen, "Al2C monolayer: the planar tetracoordinate carbon global minimum," *Nanoscale*, vol. 6, p. 10784, 2014.

پیوند Pb-O برابر $2.35 \text{ \AA}$ پایداری ترمودینامیکی ساختار تک لایه α -PbO با محاسبه انرژی همدوسی که 3.41 eV/atom اندازه گیری شد.

ساختار نواری و رسم نمودار ساختار نواری شکاف مستقیم تک لایه α -PbO برابر با $2,55$ الکترون ولت اندازه گیری شد. با محاسبه و رسم نمودار چگالی حالت کل و جزئی مشخص شد که برای یک تک لایه α -PbO بیشینه نوار ظرفیت (VBM) و کمینه نوار رسانش (CBM) توسط اوربیتال‌های $\text{Pb-}2p$ و $\text{O-}2p$ تشکیل شده اند و این اوربیتال‌ها سهم بیشتری در نوار ظرفیت و رسانش ایفا می‌کنند. از آن جا که ممکن است خواص یک تک لایه تحت تاثیر عواملی چون گرما، ضربه، اثرات زیرلایه و... تغییر کند در این پژوهش اثرات کرنش کششی و فشاری تک محوره و دو محوره روی خواص الکترونی و اپتیکی تک لایه- α PbO مورد بررسی قرار گرفت. مشاهده شد که شکاف این ساختار تغییرات زیادی نداشت و برای کرنش تک محوره $+6$ تا -6 درصد از 2.26 eV تا 2.97 eV تغییر کرد و همچنان در بازه طیف مرئی قرار داشت. برای کرنش دومحوره $+6$ تا -6 درصد هم از 2.07 eV تا 3.27 eV تغییر کرد و همچنان در بازه طیف مرئی قرار داشت. در بررسی خواص اپتیکی و تابع دی الکتریک ساختار تک لایه α -PbO تحت مقادیر مختلف کرنش‌های کششی و فشاری تک محوره و دومحوره نمودار تابع دی الکتریک کمترین تغییرات را نشان داد و ثابت دی الکتریک استاتیک برای کرنش تک محوره $+10$ تا -10 درصد از 2 تا 2.15 تغییر کرد و برای کرنش دو محوره $+10$ تا -10 درصد از 1.9 تا 2.25 به طور منظم تغییر کرد و از آنجایی که این تغییرات بسیار کم و به طور منظم اتفاق افتاد یعنی خواص اپتیکی تک لایه α -PbO تحت کرنش تک محوره و دومحوره تغییرات زیادی ندارد. در نهایت تغییر در جذب و بازتاب خواص تک لایه α -PbO تحت شرایط مختلف کرنش تک محوره و دو محوره برای مقادیر کرنش $\pm 6\%$ ، مورد بررسی قرار گرفت و مشاهده شد که تحت هر دو شرایط کرنش دومحوره و تک محوره بازتاب و جذب تک لایه α -PbO تحت کرنش فشاری افزایش می‌یابد، در حالی که آن تحت شرایط

- Interdisciplin. Rev.: Comput. Molecular Sci.*, vol. 5, no. 5, pp. 360-371, 2015.
- [12] X. Zhang, E. S. Peney, and B. I. Yakobson, "Two-dimensional boron: structures, properties and applications," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 46, pp. 6746-6763, 2017.
- [13] L. Li, S. Z. Lu, J. Pan, Z. Qin, Y. Q. Wang, Y. Wang, G. Y. Cao, S. Du, and H. J. Gao, "Buckled germanene formation on Pt(111)," *Adv. Mater.*, vol. 26, no. 28, pp. 4820-4824, 2014.
- [14] F. F. Zhu, W. J. Chen, Y. Xu, C. L. Gao, D. D. Guan, C. H. Liu, D. Qian, S. C. Zhang, and J. F. Jia, "Epitaxial growth of two-dimensional stanene," *Nat. Mater.*, vol. 14, no. 10, pp. 1020-1025, 2015.
- [15] G. Cassabois, P. Valvin, and B. Gil, "Hexagonal boron nitride is an indirect bandgap semiconductor," *Nature Photon.*, vol. 10, pp. 262-266, 2016.
- [16] H. S. Tsai, S. W. Wang, C. H. Hsiao, C. W. Chen, H. Ouyang, Y. L. Chueh, H. C. Kuo, and J. H. Liang, "Direct synthesis and practical bandgap estimation of multilayer arsenene nanoribbons," *Chem. Mater.*, vol. 28, no. 2, pp. 425-430, 2016.
- [17] H. S. Tsai, C. W. Chen, C. H. Hsiao, H. Ouyang, and J. H. Liang, "The advent of multilayer antimonene nanoribbons with room temperature orange light emission," *Chem. Commun.*, vol. 52, no. 54, pp. 8409-8412, 2016.
- [6] S. Zhang, M. Xie, F. Li, Z. Yan, Y. Li, E. Kan, W. Liu, Z. Chen, and H. Zeng, "Semiconducting group 15 monolayers: a broad range of band gaps and high carrier mobilities," *Angew. Chem. Int. Ed.*, vol. 55, no. 5, pp. 1666-1669, 2016.
- [7] L. Chen, C. C. Liu, B. Feng, X. He, P. Cheng, Z. Ding, S. Meng, Y. Yao, and K. Wu, "Evidence for Dirac fermions in a honeycomb lattice based on silicon," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 109, no. 5, p. 056804, 2012.
- [8] K. Shehzad, Y. Xu, C. Gao, and X. Duan, "Three-dimensional macro-structures of two-dimensional nanomaterials," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 45, no. 20, pp. 5541-5554, 2016.
- [9] P. Z. Tang, P. C. Chen, W. D. Cao, H. Q. Huang, S. Cahangirov, L. D. Xian, Y. Xu, S. C. Zhang, W. H. Duan, and A. Rubio, "Stable two-dimensional dumbbell stanene: a quantum spin hall insulator," *Phys. Rev. B*, vol. 90, no. 12, p. 121408, 2014.
- [10] S. Rachel and M. Ezawa, "Giant magnetoresistance and perfect spin filter in silicene, germanene, and stanene," *Phys. Rev. B*, vol. 89, no. 19, p. 195303, 2014.
- [11] Q. Tang, Z. Zhou, and Z. Chen, "Innovation and discovery of graphene-like materials via density-functional theory computations," *Wiley*

- [22] P. T. T. Le, N. N. Hieu, L. M. Bui, H. V. Phuc, B. D. Hoi, B. Aming, and Ch. V. Nguyen, "Structural and electronic properties of a van der Waals heterostructure based on silicene and gallium selenide: effect of strain and electric field," *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 20, pp. 27856-27864, 2018.
- [23] D. Muoi, N. N. Hieu, H. T. T. Phung, H. V. Phuc, B. Amin, B. D. Hoi, N. V. Hieu, L. C. Nhan, C. V. Nguyen, and P. T. T. Le, "Electronic properties of WS₂ and WSe₂ monolayers with biaxial strain: a first-principles study," *Chem. Phys. Lett.*, vol. 519, pp. 69-75, 2018.
- [24] K. D. Pham, N. N. Hieu, L. M. Bui, H. V. Phuc, B. D. Hoi, L. T. N. Tu, L. G. Bach, V. V. Ilyasov, B. Amin, M. Idrees, and C. V. Nguyen, "Vertical strain and electric field tunable electronic properties of type-II band alignment C₂N/InSe van der Waals heterostructure," *Chem. Phys. Lett.*, vol. 716, pp. 155-160, 2018.
- [18] J. Ji, X. Song, J. Liu, Z. Yan, C. Huo, S. Zhang, M. Su, L. Liao, W. Wang, Z. Ni, Y. Hao, and H. Zeng, "Two-dimensional antimonene single crystals grown by Van Der Waals Epitaxy," *Nat. Commun.*, vol. 7, p. 13352, 2016.
- [19] P. Kumr, J. Liu, P. Ranjan, Y. Hu, S. S. Yamijala, S. K. Pati, J. Irudayaraj, and G. J. Cheng, "Alpha lead oxide (α -PbO): a new 2D material with visible light sensitivity," *Small*, 2018.
- [20] S. Das, G. Shi, N. Sanders, and E. Kioupakis, "Electronic and optical properties of two-dimensional α -PbO from first principles," *Chem. Mater.*, vol. 30, pp. 7124-7129, 2018.
- [21] S. A. Khan, B. Amin, L. Y. Gan, and Iftikhar Ahmad, "Strain engineering of electronic structures and photocatalytic responses of MXenes functionalized by oxygen," *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 19, pp. 14738-14745, 2017.



Investigation of electronic and optical properties of PbO- α monolayer under uniaxial and biaxial strain

Amin Masihi^{1*}, Mina Safa²

^{1*} Department of Physics, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran

² Department of Physics, Saveh Branch, Islamic Azad University, Saveh, Iran

Article details

Received: 2023/12/5

Accepted: 2024/11/16

Published: 2024/12/2

ISSN: 2588-493x

eISSN: 2588-4821

Correspondence email:

amin.masihi20@gmail.com



Abstract

By using first-principles calculations based on density functional theory, the electronic and optical properties of α -PbO monolayer were investigated. In this study, three different approximations were used, i.e. DFT-PBE hybrid function, mBJ and HSE06. By evaluating the electronic parameters of the single layer, it is clear that this two-dimensional single layer material shows semiconductor behavior, and has an average direct band gap of 2.55 (2.50 eV, 2.70 eV) which is calculated at the PBE level of theory (mBJ, HSE06) and can be effectively controlled by strain effects. The analysis of the optical properties shows that the α -PbO monolayer acts as a nearly transparent material in the visible light range, however, it shows good absorption and reflection in the ultraviolet range of the electromagnetic spectrum. In addition, calculations show that uniaxial and biaxial strain scanning effectively modulates the optical properties of α -PbO monolayer. The calculated excellent electronic and optical properties show that the two-dimensional α -PbO monolayer can be used in nano-optoelectronic technologies.

Keywords: semiconductor, Electronic properties, Optical properties