

بررسی ظرفیت کوانتومی به منظور ذخیره سازی بار الکتریکی در نانونوار آلومینیوم نیتريد آلاییده با اتم منگنز مبتنی بر نظریه تابعی چگالی

کیوان مرادیان کوچکسرایي^۱، مجید واعظ زاده^{۱*}

^۱گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران

چکیده

اطلاعات مقاله

در این پژوهش با استفاده از محاسبات شبیه سازی کوانتومی مبتنی بر نظریه تابعی چگالی به بررسی رفتار الکترونی و ظرفیت کوانتومی نانونوار AIN با حضور ناخالصی مغناطیسی اتم منگنز پرداخته شده است. نتایج الکترونی نشان می دهد که آلایش این نانونوار با اتم منگنز، سبب ایجاد یک قطبش اسپینی اطراف سطح فرمی شده و تراکم چگالی حالات در دو کانال اسپینی اطراف سطح فرمی متفاوت می باشد. همچنین در ادامه ظرفیت کوانتومی این ترکیب و چگالی بار سطحی الکتریکی که ناشی از تجمع بار الکتریکی در حالت های اطراف سطح فرمی می باشد، مورد بررسی و مطالعه قرار گرفته است. تمامی پیکربندی های احتمالی برای جایگاه اتم آلاییده منگنز مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که موقعیت اتم ناخالصی تاثیر بسیار چشمگیری در ظرفیت کوانتومی و چگالی بار سطحی ترکیب نسبت به حالت خالص را دارا می باشد. نتایج حاصل از این پژوهش می تواند به عنوان زیر بنای جدیدی برای استفاده از نانونوارهای آلاییده با فلزات مغناطیسی به منظور کاربردهای ذخیره بار و انرژی مورد استفاده قرار گیرد.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۹/۲۴

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۳/۱۹

تاریخ چاپ: ۱۴۰۴/۴/۱۶

شاپای چاپی: 2588-493x

شاپای الکترونیکی: 2588-4921

* نویسنده مسئول

majid@kntu.ac.ir



واژگان کلیدی: ظرفیت کوانتومی، نظریه تابعی چگالی، نانونوار AIN، چگالی حالات الکترونی

مقدمه

کلیدی سامانه های مدرن تبدیل شده اند. با این حال، محدودیت چگالی انرژی پایین آن ها نسبت به باتری ها، مانعی قابل توجه در مسیر توسعه این فناوری محسوب می شود [3]. برای رفع این محدودیت، پژوهشگران بر توسعه مواد نوین متمرکز شده اند، زیرا یکی از جنبه های مهم عملکرد ابرخازن ها، مواد الکترودی مورد استفاده در آن هاست. این مواد باید دارای ویژگی هایی نظیر هدایت الکتریکی برجسته، مساحت سطح بالا، پایداری شیمیایی و حرارتی، و ظرفیت ویژه زیاد باشند. از آنجاکه این ویژگی ها به ظرفیت کوانتومی (QC) مواد وابسته است، که نشان دهنده توانایی ذخیره سازی بار و انرژی در مقیاس نانومتری است، مطالعه و بهبود آن اهمیت ویژه ای دارد. ظرفیت کوانتومی مستقیماً تحت تأثیر ساختار الکترونیکی مواد، مانند گاف

روند رو به رشد گرمایش زمین که عمدتاً ناشی از استفاده بی رویه سوخت های فسیلی است، جوامع بشری را به سوی بهره برداری گسترده تر از منابع انرژی تجدید پذیر سوق داده است. انرژی های خورشیدی، بادی و آبی، به دلیل توانایی کاهش اثرات زیست محیطی و تضمین پایداری انرژی، به عنوان راه حل های اساسی در این مسیر شناخته می شوند. با این حال، به کارگیری موثر این منابع مستلزم توسعه فناوری های ذخیره سازی انرژی پیشرفته و کارآمد است [1]. در این میان، باتری های قابل شارژ و ابرخازن های الکتروشیمیایی جایگاه ویژه ای در میان فناوری های ذخیره سازی انرژی پیدا کرده اند [2]. ابرخازن ها به دلیل توانایی ارائه چگالی توان بالا، امکان شارژ و تخلیه سریع، و عمر چرخه ای طولانی، به یکی از اجزای

انرژی و چگالی حالات الکترونی، قرار دارد و عاملی حیاتی در بهینه‌سازی کارایی ابرخازن‌ها به‌شمار می‌رود [4].

در همین راستا، تلاش‌ها شامل طراحی مواد نانوساختاری با ظرفیت ویژه بالا، بهبود ساختارهای اتمی برای افزایش پنجره ولتاژی، و توسعه ابرخازن‌های هیبریدی با ویژگی‌های ترکیبی بوده است. به‌ویژه، نانومواد یک‌بعدی به‌دلیل خواص منحصر به فردشان، از جمله رسانا الکتریکی مناسب، مساحت سطح گسترده، و قابلیت مهندسی دقیق ساختارهای الکترونی، به‌عنوان یکی از گزینه‌های برجسته مطرح شده‌اند. این نانومواد، با بهینه‌سازی ظرفیت کوانتومی که نتیجه مستقیم محدودیت‌های ابعادی و ویژگی‌های ساختاری آن‌هاست، می‌توانند تحولی اساسی در عملکرد ابرخازن‌ها ایجاد کنند [5]. در میان این مواد، نانونوارهای ساخته‌شده از گرافن، دی‌کالکوژنیدهای فلزات واسطه (TMDs) مانند MoS_2 [6] و WSe_2 [7] و همچنین نانونوارهای فسفرن [8]، از جمله نمونه‌هایی هستند پژوهش‌ها نشان داده‌اند که بهینه‌سازی عرض این نانونوارها و تغییرات ساختاری، تأثیر چشمگیری بر ظرفیت کوانتومی آن‌ها دارد.

مطالعات متعددی به بررسی ظرفیت کوانتومی نانونوارهای گرافنی پرداخته‌اند. کلیس [9] در پژوهشی اثر کرنش تک‌محوری بر ظرفیت کوانتومی (QC) دستگاه‌های مبتنی بر نانونوارهای گرافنی (GNR) را بررسی کرد. این مطالعه با استفاده از یک مدل تحلیلی، چگالی حامل‌ها و ظرفیت کوانتومی این نانونوارها را محاسبه کرد و نشان داد که کشش تک‌محوری تغییرات قابل توجهی در شکاف نواری و جرم مؤثر ایجاد می‌کند که مستقیماً بر ظرفیت کوانتومی تأثیر می‌گذارد. در پژوهشی دیگر، ظرفیت کوانتومی نانونوارهای هیبریدی گرافن-مس بررسی شد. نتایج این مطالعه نشان داد که عرض نانونوارهای کمتر از ۳ نانومتر باعث افزایش چشمگیری در ظرفیت کوانتومی شده و این ساختارها را برای کاربردهای ذخیره‌سازی انرژی مناسب می‌سازد [10]. همچنین، در مطالعه‌ای دیگر، سه پیکربندی مختلف از نانونوارهای آرمچر گرافنی شامل Cu -AGNR-H، H -AGNR-H و Cu -AGNR-Cu مورد بررسی قرار گرفتند. در این پژوهش، پارامترهایی مانند پایداری ساختاری، پایداری دینامیکی، ظرفیت کوانتومی، و بار سطحی برای ارزیابی عملکرد این نانونوارها به‌عنوان مواد مناسب برای ابرخازن‌ها مطالعه شدند [11].

در ادامه، شواهد تجربی نشان داده‌اند که امکان سنتز نانونوارهای نیتريد گروه III، نظیر آلومینیوم نیتريد (AlNNRs) و گالیم نیتريد (GaNNRs)، وجود دارد [12]. این پیشرفت، مسیر جدیدی برای توسعه مواد نوین گشوده است. پژوهش حاضر با استفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT)، تأثیر آلایش

منگنز بر رفتار الکترونی و ظرفیت کوانتومی نانونوارهای AlN را بررسی کرده است. نتایج نشان داد که جایگاه اتم ناخالصی بر قطبش اسپینی، چگالی حالات اطراف سطح فرمی، و چگالی بار سطحی تأثیر بسزایی دارد.

۱- روش تحقیق

در این پژوهش، خواص الکترونی و ظرفیت کوانتومی در ترکیب نانونوار آلومینیوم نیتريد آلائیده با اتم مغناطیسی منگنز با استفاده از محاسبات شبیه‌سازی کوانتومی مبتنی بر نظریه تابعی چگالی (DFT) مورد بررسی قرار گرفت. این مطالعات با استفاده از نرم‌افزار شبیه‌سازی Quantum ESPRESSO [13] انجام شده و در آن، معادله بس‌ذره‌ای کوهن-شم برای توصیف رفتار الکترون‌ها و خواص سیستم‌های مورد نظر حل می‌شود. توابع موج الکترون‌های ظرفیت در چارچوب رویکرد امواج تخت بسط داده شدند و برای تضمین دقت محاسبات، بیشینه انرژی قطع بردار موج الکترونی و بردار بسط چگالی به ترتیب برابر با ۱۰۰ و ۴۰۰ ریدبرگ انتخاب گردید. به‌منظور بهبود دقت محاسبات تبدالی-همبستگی، از تابع گرادیان تعمیم‌یافته (GGA) $\text{Perdew-Burke-Ernzerhof}$ استفاده شده توسط (PBE) [14]. همچنین، آستانه همگرایی برای انرژی و نیرو در حل خودسازگار و فرآیند واهلش نیروها به ترتیب برابر با 10^{-4} الکترون‌ولت و 10^{-3} الکترون‌ولت بر آنگستروم در نظر گرفته شد. در ادامه، با استفاده از محاسبات ساختار نواری و چگالی حالات (DOS)، اثر آلایش منگنز بر خواص الکترونی، از جمله گاف نواری، قطبش اسپینی، و توزیع چگالی حالت‌های الکترونی در نزدیکی سطح فرمی مورد بررسی قرار گرفته است.

۲- بحث و نتیجه گیری

نانوریون‌ها به‌طور کلی مواد نیمه‌رسانای با گاف انرژی بزرگ هستند که ویژگی‌های منحصر به فردی در مقایسه با سایر نانومواد دارند. این نانوریون‌ها معمولاً گاف‌های انرژی زیادی دارند که آن‌ها را برای کاربردهای الکتروشیمیایی محدود می‌کند. نانونوار آلومینیوم نیتريد (AlN) نیز از این قاعده مستثنی نیست و دارای گاف انرژی بزرگ از نوع مستقیم است که لبه‌های نوار ظرفیت و رسانش هر دو در راستای نقطه Γ قرار دارند. در این پژوهش، برای بهبود قابلیت‌های ذخیره‌سازی انرژی، نانوریونی با زنجیره عرضی شامل 22

$$\sigma = \int_0^{\varphi_0} C_Q d\varphi \quad (3)$$

بررسی ظرفیت کوانتومی نشان می‌دهد که نانونوار AlN به دلیل چگالی حالت صفر در نزدیکی سطح فرمی، مقدار ظرفیت کوانتومی صفر را دارا می‌باشد. که این امر می‌تواند با استفاده از روش‌هایی مانند آلیش یا تغییرات ساختاری بهبود یابد، به‌طوری‌که چگالی حالت‌ها در نزدیکی سطح فرمی افزایش یابد و در نتیجه ظرفیت کوانتومی سیستم بهبود یابد.

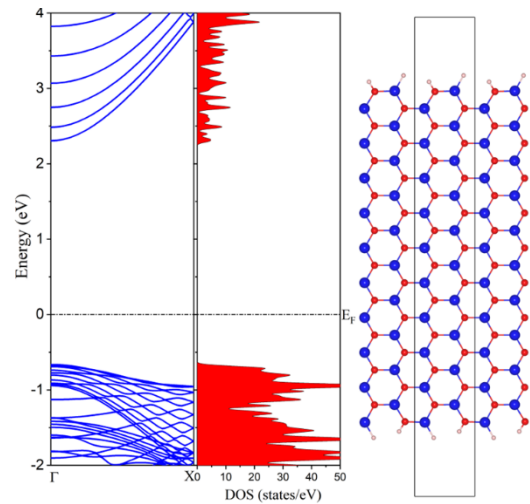
در این مطالعه با آلیش اتمی اتم منگنز در جایگاه‌های مختلف بلوری برای نانوار AlN سعی در بهبود ظرفیت کوانتومی این ترکیب را داریم. برای بررسی تأثیر آلیش اتم منگنز (Mn) در ساختار نانونوار آلومینیوم نیتريد (AlN)، ده پیکربندی مختلف با قرارگیری اتم آلیشی در سایت‌های متنوع ساختاری مورد بررسی قرار گرفته است که در شکل ۲ نمایش داده شده‌اند. اتم منگنز به‌دلیل دارا بودن اوربیتال‌های 3d نیمه‌پر، ویژگی‌های منحصربه‌فردی را نسبت به اتم‌های آلومینیوم ارائه می‌دهد. این اوربیتال‌های d که توانایی تعامل قوی با اوربیتال‌های اتم‌های میزبان (به‌ویژه اوربیتال‌های p اتم‌های نیتروژن و آلومینیوم) دارند، منجر به ایجاد تغییرات قابل توجه در توزیع الکترونی و خواص الکترونی نانونوار می‌شوند. برخلاف اتم‌های آلومینیوم که به‌طور عمده رفتار غیرمغناطیسی با اوربیتال‌های p نشان می‌دهند علاوه بر این، آلیش با Mn منجر به شکست تقارن موضعی و بازآرایی قابل توجهی در توزیع بار در اطراف سطح فرمی می‌شود. این تغییرات ساختاری و الکترونی موجب بروز خواص مغناطیسی جدید در نانونوار AlN می‌گردد.

آلیش اتم‌های Mn بر ویژگی‌های الکترونی نانونوار AlN تأثیرات قابل توجهی دارد. شکل ۳ چگالی حالت‌های کل (DOS) در ده پیکربندی مختلف را نشان می‌دهد که حاکی از تغییرات چشمگیر در ساختار نواری نانونوار به‌دلیل حضور اتم‌های Mn است. این تغییرات شامل افزایش چگالی حالت‌ها در نوار رسانش، به‌ویژه در انرژی‌های نزدیک به سطح فرمی، می‌باشد. این افزایش ناشی از انتقال الکترون از اوربیتال‌های 3d اتم Mn به نوارهای رسانش نانونوار است.

علاوه بر این، شکل ۴ چگالی حالت‌های جزئی (PDOS) مربوط به اوربیتال d اتم Mn را نشان می‌دهد که نقش کلیدی این اوربیتال‌ها را در تغییرات ساختاری و الکترونی برجسته می‌سازد. شکست تقارن موضعی ناشی از آلیش،

اتم و عرض 32 آنگستروم (۳,۲ نانومتر) مورد بررسی قرار گرفته است.

شکل ۱ ساختار بلوری و ساختار نواری این نانوریون را نشان می‌دهد. ساختار نواری حاکی از وجود گاف انرژی 3 الکترون‌ولت است. پارامتر شبکه در شبکه بلوری $b = 5.39168$ آنگستروم محاسبه شده که با داده‌های پیشین همخوانی دارد. به‌دلیل وجود گاف انرژی قابل توجه در این ترکیب و عدم حضور چگالی حالت‌ها، این ترکیب نمی‌تواند در فرآیندهای رسانش و تبادل الکترونی از جمله ذخیره سازی بار و استفاده به عنوان الکتروود شرکت کند.



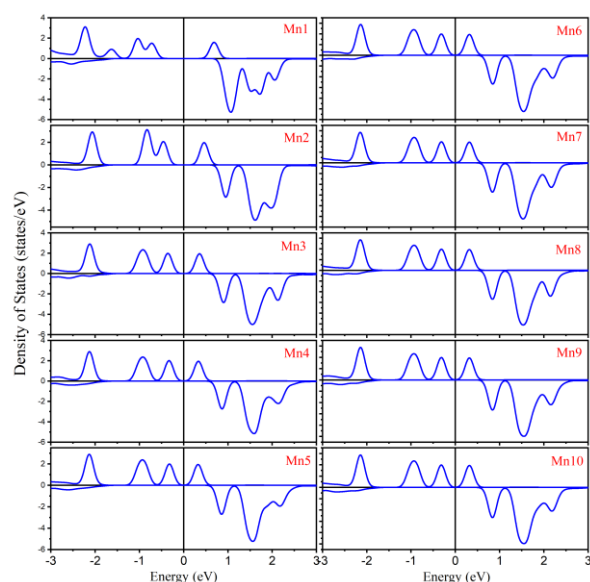
شکل ۱: ساختار کریستالی، ساختار نواری انرژی و چگالی حالات کل ترکیب خالص نانونوار AlN مورد بررسی.

در ادامه به بررسی فرآیند ذخیره سازی بار الکترونی در نانومواد با استفاده از محاسبه ظرفیت کوانتومی آنها خواهیم پرداخت. ظرفیت کوانتومی، که با C_Q نمایش داده می‌شود، و برابر با $C_Q = \frac{dQ}{d\varphi}$ است، یکی از ویژگی‌های مهم در بررسی عملکرد ذخیره‌سازی انرژی در مواد است. ظرفیت کوانتومی به‌طور مستقیم با چگالی حالت‌های الکترونی (DOS) در نزدیکی سطح فرمی مرتبط است و از رابطه زیر محاسبه می‌شود [15]:

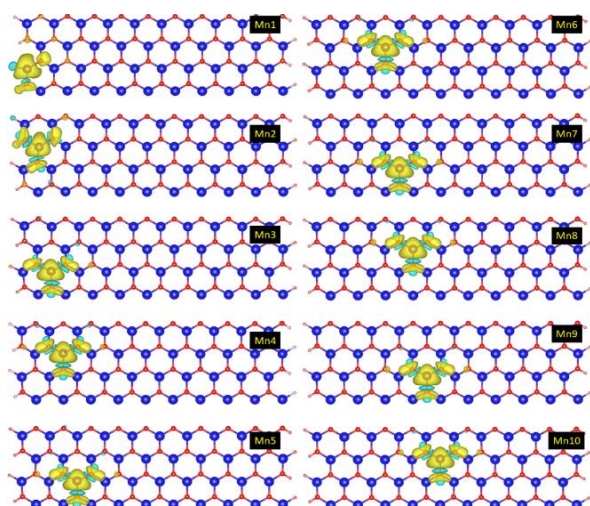
$$C_Q = e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} D(E) F_T(E - e\varphi) dE \quad (1)$$

در این رابطه $D(E)$ چگالی حالت‌های الکترونی، و $F_T(E)$ تابع توزیع گرمایی است که به‌صورت زیر تعریف می‌شود [16]:

$$F_T(E) = (4k_B T)^{-1} \text{sech}^2(E / 2k_B T) \quad (2)$$



شکل ۴: چگالی حالات الکترونی اتم Mn در نانونوارهای آلاییده

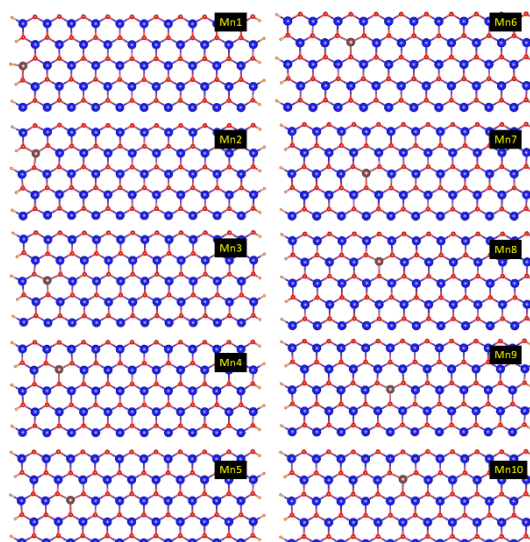


شکل ۵: چگالی الکترونی اسپین قطبیده سه بعدی برای تمامی پیکربندی های آلاییده با اتم منگنز. مقدار واحد هم خط برای رسم چگالی برابر ۰.۰۰۰۹ می باشد.

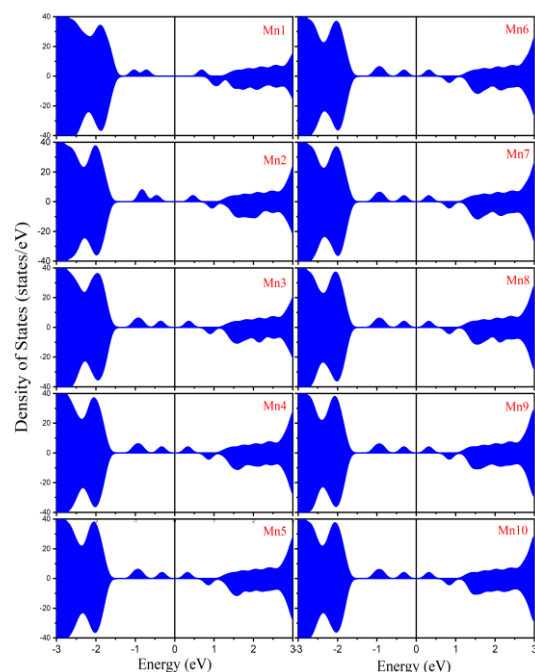
برای بررسی پایداری ساختارهای آلاییده با Mn، انرژی بستگی (E_{coh}) برای هر یک از ده پیکربندی محاسبه شده است و نتایج آن در جدول ۱ ارائه شده است. انرژی بستگی با استفاده از رابطه زیر محاسبه شد:

$$E_{coh} = \frac{E_{tot} - E_{Mn} - nE_{Al} - mE_N - lE_H}{N} \quad (4)$$

چگالی حالت های موضعی جدیدی را در نزدیکی سطح فرمی ایجاد کرده است. حضور اتم Mn همچنین باعث تغییر مکان سطح فرمی به سمت انرژی های بالاتر یا پایین تر می شود که این تغییر به موقعیت اتم آلاییده و برهمکنش آن با اتم های میزبان Al و N وابسته است. افزون بر این، اوربیتال های d اتم Mn موجب ایجاد قطبش اسپینی در ساختار شده است (شکل ۵).



شکل ۶: ساختار کریستالی نانونوارهای آلاییده با اتم منگنز



شکل ۷: چگالی حالات الکترونی کل نانونوارهای آلاییده

بالا در اطراف اتم Mn به وضوح قابل مشاهده است، که این امر بیانگر تمرکز تکانه‌های مغناطیسی در این ناحیه است.

به منظور بررسی ظرفیت کوانتومی ترکیبات، ظرفیت کوانتومی و چگالی بار سطحی برای هر ۱۰ سیستم آلاییده در شکل ۶ نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهد که ظرفیت کوانتومی ترکیبات به جایگاه اتم ناخالصی وابسته می‌باشد. بطوریکه ظرفیت کوانتومی برای اتم آلاییده در لبه و زیر لبه تفاوت‌های چشمگیری با اتم‌های نزدیک به موقعیت مرکزی نانونوار دارد. اتم منگنز زمانی که در لبه نانونوار قرار می‌گیرد، به علت پیوندهای آویزان قوی تر، جفت شدن الکترون‌ها در این اتم قوی تر رخ می‌دهد و در نتیجه چگالی حالات در انرژی‌های پایین تر تجمع پیدا می‌کند. این منجر به این نتیجه می‌شود که برای ساختار آلاییده با اتم منگنز موجود در لبه نانونوار، ظرفیت کوانتومی در بازه پتانسیل -۰.۴ ولت تا ۰.۴ ولت وجود ندارد. برای اتم زیر لبه این بازه پتانسیلی کاهش می‌یابد به -۰.۲ تا ۰.۲ ولت که نشان می‌دهد ظرفیت کوانتومی بهبود پیدا کرده است. این تغییرات به خوبی در چگالی بارهای سطحی هر دو حالت هم دیده می‌شود.

زمانی که جایگاه اتم‌های آلاییده به سمت مرکز نانونوار می‌رود، چگالی حالات اطراف سطح فرمی افزایش می‌یابد. در نتیجه ظرفیت کوانتومی سیستم در محدوده پتانسیل بین -۰.۶ تا ۰.۶ افزایش می‌یابد. این کمیت تقریباً از حالت Mn3 تا Mn10 یکسان می‌باشد. که نشان می‌دهد که تقریباً جایگاه آلایش این اتم‌ها منجر به نتایجی یکسانی می‌شود. این تایید را به خوبی می‌توان با محاسبه مساحت زیر سطح منحنی چگالی بار سطحی در دو بازه پتانسیلی 0 تا 0.6+ و 0 تا -0.6- بررسی نمود. این نتایج را می‌توان برای سیستم‌های مورد بررسی، در جدول‌های ۲ و ۳ مشاهده نمود.

نتایج نشان می‌دهد که با تغییر موقعیت اتم ناخالصی Mn از لبه نانونوار به سمت ناحیه مرکزی، پتانسیل ذخیره بار الکتریکی در این نانونوار آلاییده افزایش می‌یابد.

که در این رابطه E_{tot} انرژی کل ساختار آلاییده‌شده، m و n به ترتیب تعداد اتم‌های آلومینیوم، نیتروژن، و هیدروژن در سیستم هستند. E_{Mn} ، E_{Al} ، E_N و E_H انرژی اتم‌های ایزوله آلومینیوم، نیتروژن، منگنز و هیدروژن می‌باشد و N تعداد کل اتم‌ها در سیستم است.

با توجه به جدول ۱، انرژی‌های بستگی برای همه پیکربندی‌ها مقدار تقریباً یکسانی دارند. تفاوت جزئی در انرژی بستگی مربوط به پیکربندی اول است که در آن اتم Mn در لبه نانونوار قرار گرفته و رقم سوم اعشار با سایر پیکربندی‌ها کمی متفاوت است. این تفاوت ناشی از تغییر در قدرت پیوندهای اتم Mn با اتم‌های میزبان آلومینیوم و نیتروژن است. در لبه نانونوار، اتم Mn با تعداد کمتری از اتم‌های میزبان پیوند برقرار می‌کند، و مجبور است برای به دست آوردن حالت پایدار همپوشانی بین ابر الکترونی با اتم‌های میزبان را بیشتر و طول پیوند را کوتاه تر کند که این عمل انرژی بستگی بزرگتری را نتیجه می‌دهد. هر چقدر جایگاه Mn به سمت مرکز نانونوار جابجا می‌شود، انرژی بستگی به مقدار یکسانی نزدیک می‌شود. این روند طبیعی است، زیرا قرارگیری اتم آلاییده در مرکز ساختار باعث افزایش تعداد پیوندهای اتم Mn با اتم‌های میزبان آلومینیوم و نیتروژن می‌شود، و در نتیجه اثرات سطحی کاهش می‌یابد.

این نتایج نشان می‌دهند که پایداری ساختارهای آلاییده به موقعیت مکانی اتم Mn و قدرت پیوندهای آن با اتم‌های میزبان بستگی دارد.

جدول ۱: انرژی‌های بستگی محاسبه شده ساختارهای آلاییده بر حسب الکترون

ولت بر اتم					
Mn5	Mn4	Mn3	Mn2	Mn1	پیکربندی
-۲.۳۴	-۲.۳۴	-۲.۳۴	-۲.۳۴	-۲.۳۴	انرژی بستگی
Mn10	Mn9	Mn8	Mn7	Mn6	پیکربندی
-۲.۳۴۰	-۲.۳۴	-۲.۳۴	-۲.۳۴	-۲.۳۴	انرژی بستگی

برای تحلیل خواص مغناطیسی ناشی از آلایش اتم منگنز در نانونوار آلومینیوم نیتريد چگالی اسپینی برای هر یک از ده پیکربندی محاسبه شده و در شکل 5 نمایش داده شده است. حضور اتم Mn ساختار را به صورت موضعی مغناطیسی می‌کند، که این موضوع مطابق با چگالی حالت‌های کل و جزئی ارائه شده است. چگالی اسپینی نشان می‌دهد که اسپین‌های الکترونی در اطراف اتم Mn به شدت قطبیده شده‌اند. این قطبش اسپینی به دلیل اوربیتال‌های d نیمه پر اتم Mn است که نقش اصلی را در تولید تکانه مغناطیسی ایفا می‌کنند. در توزیع چگالی اسپینی، نواحی با چگالی

جدول ۲: مساحت زیر نمودار چگالی بار سطحی در بازه پتانسیل 0 تا 0.6+

پیکربندی	Mn1	Mn2	Mn3	Mn4	Mn5
چگالی بار	۰.۰۶۴	۰.۶۶۴	۱.۱۲۴	۱.۲۴	۱.۲۷۶
پیکربندی	Mn6	Mn7	Mn8	Mn9	Mn10
چگالی بار	۱.۳۱۴	۱.۳۱۴	۱.۳۱۶	۱.۳۱۱	۱.۳۰۶

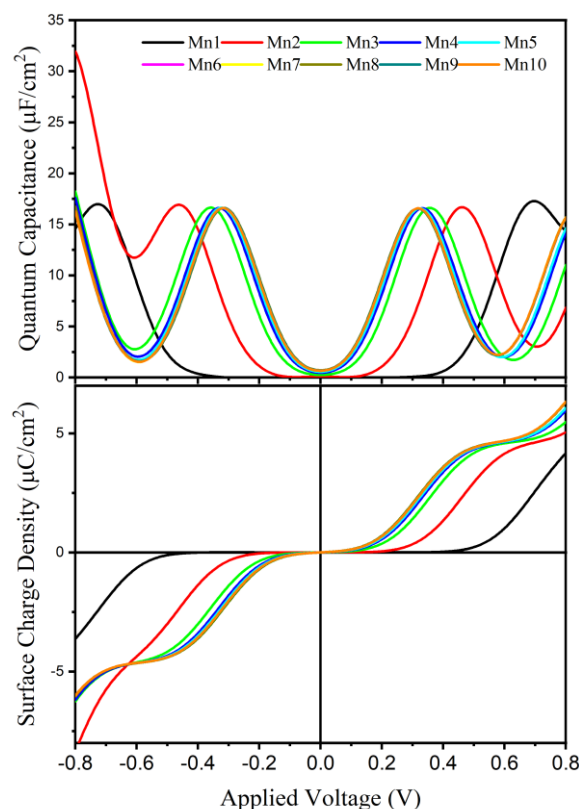
جدول ۳: مساحت زیر نمودار چگالی بار سطحی در بازه پتانسیل 0 تا 0.6-

پیکربندی	Mn1	Mn2	Mn3	Mn4	Mn5
چگالی بار	۰.۰۳۷	۰.۶۸۹	۱.۱۲۴	۱.۲۴	۱.۲۴۶
پیکربندی	Mn6	Mn7	Mn8	Mn9	Mn10
چگالی بار	۱.۲۸۱	۱.۳۲۱	۱.۳۲۱	۱.۳۱۵	۱.۳۰۷

با اتم منگنز پرداخته شده است. نتایج نشان داد که نانونوار خالص آلومینیوم نیتراید دارای یک گاف نواری انرژی بزرگ حدود ۳ الکترون ولت می باشد. به منظور بهبود خاصیت ذخیره سازی بار الکتریکی و افزایش ظرفیت کوانتومی این ترکیب، اتم های منگنز را در نقاط مختلف نانونوار به عنوان ناخالصی وارد کردیم. نتایج نشان داد که ظرفیت کوانتومی و چگالی بار سطحی به موقعیت نسبی اتم منگنز در نانونوار وابسته است. بطوریکه برای حالات های واقع در مرکز نانونوار دارای ظرفیت کوانتومی بیشتری نسبت به حالت های آلاییده لبه و زیر لبه با اتم منگنز می باشیم. نتایج حاصل از این تحقیق نشان داد که افزایش فلزات واسطه به نانونوارهای می تواند سبب افزایش ظرفیت کوانتومی آنها شود که به نوبه خود تحویلی در فرآیند ذخیره سازی بار در نانونوارهای نیمه رسانا می باشد.

منابع

- [1] S. Kapse, B. Benny, P. Mandal, and R. Thapa, "Design principle of MoS₂/C heterostructure to enhance the quantum capacitance for supercapacitor application", *Journal of Energy Storage*, vol. 44, 103476, 2021.
- [2] K. Himalay, P. N. Gajjar, and Gupta. Sanjeev, "Unraveling quantum capacitance in supercapacitors: Energy storage applications." *Journal of Energy Storage*, vol. 81, 110354, 2024.
- [3] Q. Zhou, W. Li, J. Weiwei, S. Dongtao, Z. Juncheng, Y. Yongliang, and W. Shilin Wu. "Quantum capacitance of graphene-like/graphene heterostructures for supercapacitor electrodes". *Electrochimica Acta* vol. 46, 142655, 2023.
- [4] T. Sanglaow, K. Prasert, C. Chanthad, M. Liangruksa, and T. Sutthibutpong, "A DFT study on the fundamental mechanisms of quantum capacitance enhancement within



شکل 6: ظرفیت کوانتومی و چگالی بار سطحی در حالت های آلاییده با اتم منگنز

۳- نتیجه گیری

با استفاده از محاسبات کوانتومی نظریه تابعی چگالی، خواص الکترونی و ظرفیت کوانتومی نانونوار آلومینیوم نیتراید آلاییده

Microscopy". *ACS nano*, vol. 18, 3405, 2024.

[11] M.K. Bera, "Analytical Modeling of Current and Quantum Capacitance of Single-Electron Transistor with Island Made of Armchair WSe₂ Nanoribbon". *Journal of Electronic Materials*, vol. 49, 7400, 2020.

[12] M. Beshkova, and R. Yakimova, "Properties and potential applications of two-dimensional AlN". *Vacuum*, vol.176, 109231, 2020.

[13] P. Giannozzi, O. et.al, *J.Phys.: Condens.Matter* 29 (2017) 465901.

[14] J.P. Perdew, K. Burke, M.s Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Phys. Rev. Lett.* 77 (1996) 3865.

[15] A. Tiwari, G. Bansal, S.J. Mukhopadhyay, A. Bhattacharjee, and S. Kanungo, "Quantum capacitance engineering in boron and carbon modified monolayer phosphorene electrodes for supercapacitor application: a theoretical approach using ab-initio calculation". *Journal of Energy Storage*, vol. 73, 109040, 2023.

the carbon-based electrodes through different classes of doped configurations from biomass-derived elements". *Results in Materials*, vol. 21, 100529 2024.

[5] Q. Zhou, J. W, Y. Yong, Q. Zhang, Y. Liu, and J. Li, "Effect of the N/P/S and transition-metal co-doping on the quantum capacitance of supercapacitor electrodes based on mono-and multilayer graphene". *Carbon*, vol. 170, 368, 2020.

[6] G.M. Yang, H.Z. Zhang, X.F. Fan, and W.T. Zheng, "Density functional theory calculations for the quantum capacitance performance of graphene-based electrode material". *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 119, 6464, 2015.

[7] Z. Bo, W. Wen, Y. Chen, X. Guo, H. Yang, J. Yan, K. Cen, and Z. Liu, "Effect of nitrogen and transition-metal co-doping on quantum capacitance enhancement of graphene as supercapacitor electrodes: A density functional theory study". *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, vol. 680, 132686, 2024.

[8] X.H. Li, S.S. Li, X.H. Cui, R.Z. Zhang, and H.L. Cui, "First-principle study of electronic properties and quantum capacitance of lithium adsorption on pristine and vacancy-defected O-functionalized Ti₂C MXene". *Applied Surface Science*, vol. 563, 150264, 2021.

[9] G.S. Kliros, "Strain effects on the quantum capacitance of graphene nanoribbon devices". *Applied Surface Science*, vol. 502, 144292, 2020.

[10] C. Di Giorgio, and et al, "Imaging the Quantum Capacitance of Strained MoS₂ Monolayers by Electrostatic Force

Title of your Article Title of your Article Title of your Article Title of your Article Title of your Article (Time New Roman 14)

¹ Keyvan Moradi Koochaksaraei, ^{1*} Majid Vaezzadeh

^{1*} Faculty of Physics, K.N. Toosi University of Technology, 41, Shahid Kavian St., 15418-49611
Tehran, Iran.

Article details

Received: 2025/01/13
Accepted: 2025/06/9
Published: 2025/07/07

ISSN: 2588-493x
eISSN: 2588-4821

Correspondence email:
majid@kntu.ac.ir



Abstract

In this study, quantum simulation calculations based on density functional theory (DFT) were used to investigate the electronic behavior and quantum capacitance of an AlN nanoribbon with a manganese magnetic impurity. The electronic results indicate that doping this nanoribbon with a manganese atom creates spin polarization around the Fermi level, and the density of states in the two spin channels differs around the Fermi level. Furthermore, the quantum capacitance of this compound and the surface electric charge density, arising from the accumulation of electric charge in the states around the Fermi level, were examined. All possible configurations for the position of the doped manganese atom were investigated. The results showed that the impurity atom's location significantly impacts the quantum capacitance and surface charge density of the compound compared to its pure state. The findings of this study can serve as a new foundation for utilizing nanoribbons doped with magnetic metals for charge and energy storage applications.

Keywords: Quantum capacitance, Density Functional Theory, AlN nanoribbon, Density of States.