

بررسی خواص الکترونی و اپتیکی نانوساختارهای تک لایه مس، نقره و طلا

جعفر جلیلیان^۱، قاسم رضایی^{۱*}، بهروز واثقی^۱

^۱گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه یاسوج، یاسوج، ایران

اطلاعات مقاله

چکیده

با استفاده از محاسبات شبیه سازی کوانتومی، خواص الکترونی و اپتیکی نانوساختارهای تک لایه ترکیبات مس، نقره و طلا بررسی شده است. نتایج تحقیقات اخیر نشان داد که این ترکیبات در فاز شش گوشه مرکزی پر پایدار بوده و دارای یک ساختار کاملاً مسطح می باشند. این ترکیبات دارای خاصیت فلزی بوده به طوری که اوربیتال های s و d دارای حالت های فلزی در سطح فرمی می باشند. نتایج محاسبات اپتیکی برای ترکیبات نشان می دهد که گذراهای درون نواری در این ترکیبات دارای سهم عمده ای تا انرژی های حدود ۳ الکترون ولت می باشند. فرکانس پلاسمونی ترکیبات در حدود انرژی ۴ الکترون ولت است. همچنین محاسبات ظرفیت کوانتومی ترکیبات بیان کننده قابلیت توانایی بالای این ترکیبات در ذخیره سازی انرژی را نشان می دهد به طوری که در محدوده ولتاژی سیستم های آبی، چگالی بار ذخیره شده برای ترکیب تک لایه مس در حدود $30 \mu C / cm^2$ به دست آمد. نتایج حاصل از این تحقیق نشان داد تک لایه های مس، طلا و نقره دارای پتانسیل بالایی برای استفاده در حسگرهای تشدید پلاسمونی و همچنین به عنوان بستری مناسب برای ذخیره سازی انرژی قرار گیرند.

واژگان کلیدی: ظرفیت کوانتومی، نظریه تابعی چگالی، تشدید پلاسمون سطحی، چگالی حالات الکترونی

تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۰۶/۳۰

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۰۸/۱۸

تاریخ چاپ: ۱۴۰۴/۰۸/۲۰

شاپای چاپی: 2588-493x

شاپای الکترونیکی: 2588-4921

* نویسنده مسئول

grezaei@yu.ac.ir

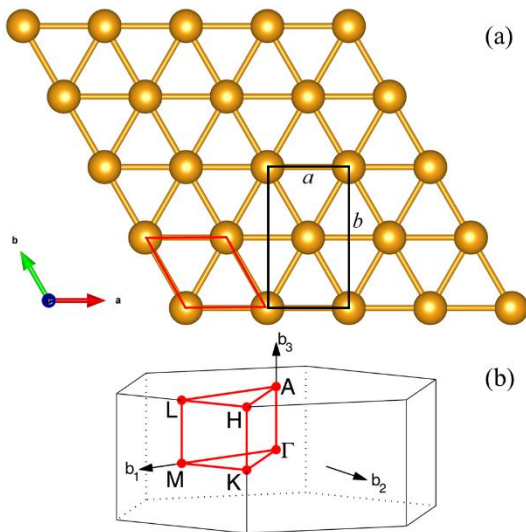


مقدمه

مواد دوبعدی طی سال های اخیر به عنوان یکی از محورهای اصلی پژوهش در حوزه علم نانو مطرح شده اند. کشف گرافن و ویژگی های استثنایی آن در زمینه الکترونیک، استحکام مکانیکی و پایداری حرارتی، زمینه را برای توسعه طیف وسیعی از تک لایه های شبه گرافنی و فلزی فراهم ساخت. این روند نه تنها موجب شناسایی موادی همچون فسفرن، بروفن و سیلیسین شد، بلکه راه را برای تحقق تک لایه های پایدار از فلزات خالص، هموار کرد [۱-۳].

در میان فلزات، طلا به عنوان نخستین نمونه پایدار تک لایه طلا معرفی شد. این ماده با استفاده از روش لایه برداری شیمیایی از ترکیب Ti_3Au_2 سنتز گردید و به دلیل ساختار دوبعدی منظم خود، ویژگی هایی منحصر به فرد از جمله پایداری حرارتی تا دمای ۷۰۰ کلوین، استحکام مکانیکی بالا و رسانایی ذاتی چشمگیر را نشان داد [۴]. نتایج محاسبات مبتنی بر نظریه تابعی چگالی و شبیه سازی های دینامیک مولکولی نیز پایداری دینامیکی و ماهیت فلزی این ماده را تأیید کردند [5,6]. موفقیت در سنتز طلا، الهام بخش معرفی و مطالعه ترکیبات هم گروهی آن در جدول تناوبی شد. بر این اساس، نقره و مس به عنوان تک لایه های دوبعدی نقره و مس پیشنهاد و مورد بررسی نظری قرار گرفتند [7-10].

بصورت مستطیل مشکی رنگ شکل 1-a با پارامتر شبکه های a و b می باشد.



شکل 1: (a) ساختار بلوری تک لایه Cu، Ag، و Au. لوزی قرمز رنگ سلول واحد پیشنهادی در این پژوهش. مستطیل مشکی، سلول واحد در نظر گرفته شده در مطالعات پیشین. (b) منطقه اول بریلوئن برای ساختار شش گوشه و مسیر پر تقارن $\Gamma - M - K - \Gamma$.

به منظور بررسی دقت محاسبات و نتایج بهینه سازی ساختاری، پارامتر شبکه این ترکیبات با مطالعات پیشین مقایسه و در جدول 1 ارائه شده است.

جدول 1- پارامتر شبکه بلوری بهینه شده و مقایسه با نتایج مطالعات پیشین. مقادیر همگی بر حسب آنگستروم می باشند.

	a	b	Ref.
Cu	2.428	4.206	This work
	2.45	4.2	10
Ag	2.794	4.839	This work
	2.75	4.87	10
Au	2.756	4.773	This work
	2.72	4.77	10
	2.74	4.73	5

به منظور بررسی خواص الکترونی این ترکیبات، ساختار نواری انرژی، چگالی حالات کل و جزئی آنها رسم شده است. ساختار نواری انرژی در مسیر $\Gamma - M - K - \Gamma$ رسم شده است. به خوبی پیداست که این ترکیبات دارای خاصیت رسانایی بوده و ترازهای انرژی آنها تراز فرمی را قطع می کند (شکل

با این حال، مطالعات پیشین نشان می دهد که تمرکز عمده بر بررسی پایداری ساختاری و ویژگی های الکترونی این مواد بوده و بررسی جامع ویژگی های کاربردی آنها، به ویژه در زمینه ذخیره سازی انرژی و اپتوالکترونیک، به ندرت صورت گرفته است. در حالی که ظرفیت کوانتومی شاخصی کلیدی برای ارزیابی توانایی ذخیره و تبادل بار در الکترودها محسوب می شود، خواص اپتیکی و رفتار پلاسمونی نیز می توانند نقش تعیین کننده ای در عملکرد این مواد در ادوات فوتونیک و نانو الکترونی ایفا کنند. به ویژه، موقعیت و شدت قله های پلاسمونی در طیف جذب نوری تک لایه های فلزی می تواند اطلاعات ارزشمندی فراهم آورد.

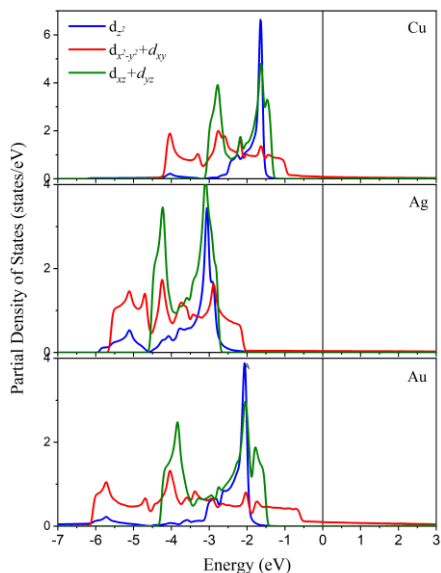
در پژوهش حاضر، برای نخستین بار یک مطالعه جامع و مقایسه ای بر روی سه تک لایه فلزی Au، Ag و Cu ارائه می کنیم که همزمان دو جنبه کلیدی را پوشش می دهد: ظرفیت کوانتومی و ویژگی های اپتیکی-پلاسمونی. در این راستا، ضمن محاسبه و تحلیل ظرفیت کوانتومی این سه فلز بر اساس نظریه تابعی چگالی، طیف اپتیکی و موقعیت قله های پلاسمونی آنها نیز بررسی شده است.

1- روش تحقیق

در پژوهش حاضر، خواص الکترونی و اپتیکی نانو ساختارهای تک لایه مس، نقره و طلا با استفاده از محاسبات شبیه سازی کوانتومی مبتنی بر نظریه تابعی چگالی (DFT) مورد مطالعه و بررسی قرار گرفت. این محاسبات با استفاده از نرم افزار شبیه سازی WIEN2k [11] انجام شد. علاوه بر این، از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) ارائه شده توسط Perdew-Burke-Ernzerhof برای بسط جمله تبدیلی-همبستگی استفاده کردیم [12]. همچنین، آستانه همگرایی برای انرژی و نیرو در حل خودسازگار و فرآیند واهلش نیروها به ترتیب برابر با 10^{-6} الکترون ولت و 10^{-5} الکترون ولت بر آنگستروم در نظر گرفته شد. با استفاده از روش منخورست-پک، مش بندی نقاط شبکه برای محاسبات خودسازگار، خواص الکترونی و خواص اپتیکی به ترتیب برابر با مقادیر $12 \times 12 \times 1$ ، $24 \times 24 \times 1$ و $48 \times 48 \times 1$ به کار برده شد.

2- بحث و نتیجه گیری

شکل 1 ساختار بلوری دو بعدی ترکیبات تک لایه مس، نقره و طلا را نشان می دهد. همان طور که دیده می شود فاز بلوری این ترکیبات، شش گوشه مرکز پر سطح می باشد. سلول واحد در نظر گرفته شده در محاسبات حاضر را به شکل لوزی قرمز در شکل 1-a می بینیم. در محاسبات نظری پیشین سلول واحد در نظر گرفته شده

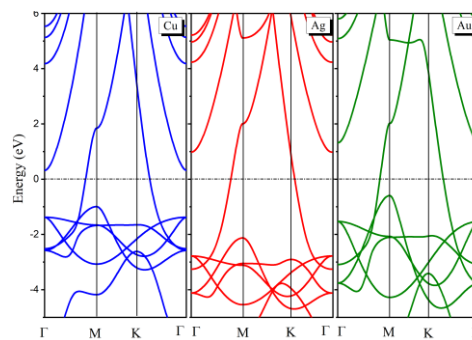


شکل ۴: چگالی حالات جزئی زیر اوربیتال‌های **d** تک لایه‌های **Au** و **Ag, Cu**

۲). با نگاهی دقیق‌تر می‌توان دید که یک تک تراز انرژی در هر سه ترکیب، تراز فرمی را قطع کرده است.

برای بررسی جزئی‌تر، چگالی حالات الکترونی اوربیتال‌های **s**، **d** و زیر اوربیتال‌های اوربیتال **d** رسم شده‌اند (شکل‌های ۳ و ۴). اوربیتال **d** لایه آخر این ترکیبات همگی پر بوده و در انرژی‌های پایین‌تر از تراز فرمی قرار می‌گیرند و اوربیتال **s** لایه آخر آنها می‌باشد. البته چگالی حالات این اوربیتال‌ها نشان می‌دهد که اوربیتال **d** و **s** تا حدودی با هم هیبرید شده و هر دو در تک تراز قطع‌کننده تراز فرمی سهم دارند (شکل ۳).

با رسم چگالی حالات جزئی زیر اوربیتال **d** برای ترکیبات، متوجه می‌شویم که اوربیتال‌های درون صفحه ای d_{xy} و $d_{x^2-y^2}$ حالت‌های پیوندی بوده و با اوربیتال **s** لایه آخر هیبرید شده‌اند. به خوبی از شکل ۴ پیداست که این ترازهای انرژی در سطح فرمی ترکیبات حضور دارند. زیر اوربیتال‌های d_{xz} ، d_{xy} و d_z^2 حالت‌های غیر پیوندی بوده و در انرژی‌های پایین‌تر قرار دارند.



شکل ۵: ساختار نواری انرژی تک لایه‌های **Au** و **Ag, Cu**

در ادامه به بررسی خواص اپتیکی ترکیبات مورد نظر می‌پردازیم. با استفاده از تقریب فاز تصادفی (Random Phase Approximation) تابع دی‌الکتریک سیستم را بسط داده ایم [13]:

$$\varepsilon(q, \omega) = 1 - \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{4\pi e^2}{q^2 \Omega} \sum_k A_{k,q}^{l,l} \frac{f(\varepsilon_{k+q}) - f(\varepsilon_k)}{\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k - \omega - i\eta}$$

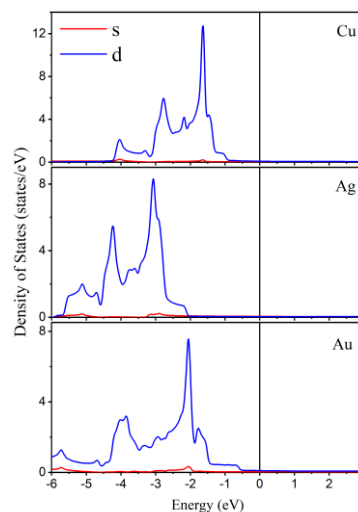
$$A_{k,q}^{l,l} = \delta_{l,l} + (1 - \delta_{l,l}) \frac{q^2}{m\omega_{l,l}^2} |P_{l,l}|^2 \quad (1)$$

که در اینجا $f(\varepsilon_k)$ تابع توزیع فرمی و $P_{l,l}$ ماتریس قطبش می‌باشد. جمله اول در $A_{k,q}^{l,l}$ مربوط به گذارهای درون نواری و جمله دوم مربوط به گذارهای بین نواری می‌باشد. سپس با استفاده از روابط کرامرز-کرونینگ قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک به صورت زیر به دست می‌آید [13]:

$$\text{Im} \varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{4\pi e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{c,v} \int dk \langle c_k | p^\alpha | v_k \rangle \langle v_k | p^\beta | c_k \rangle \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_k - \omega)$$

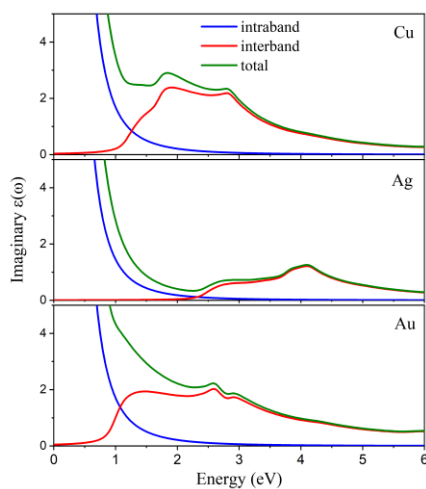
$$\text{Re} \varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \text{Im} \varepsilon_{\alpha\beta}(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (2)$$

در اینجا شاخص‌های v و c به ترتیب بیان‌کننده حالت‌های مربوط به نوار ظرفیت و رسانش می‌باشند. این کمیت‌ها با جمع زنی بر روی همه گذارهای مجاز درون نواری و بین نواری حاصل می‌شوند. شکل ۵ سهم‌های درون نواری، بین نواری و مجموع تابع دی‌الکتریک حقیقی برای هر سه ترکیب را نشان می‌دهد. به خوبی پیداست که سهم الکترون‌های آزاد در گذارهای درون نواری تا انرژی‌های ۳-۴ الکترون‌ولت تاثیر

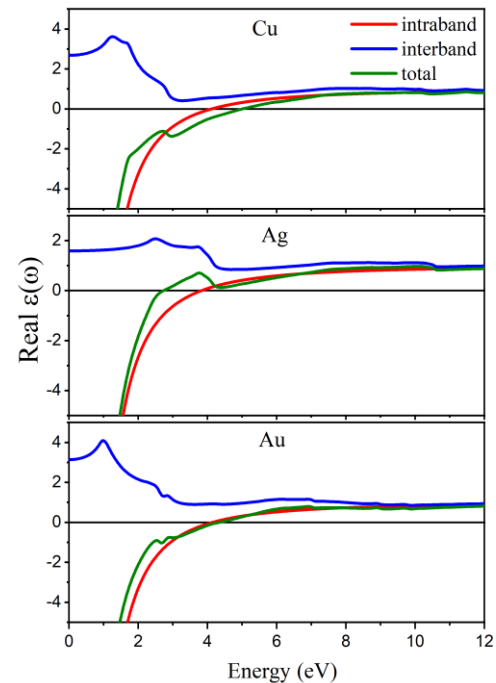


شکل ۶: چگالی حالات جزئی اوربیتال‌های **s** و **d** تک لایه‌های **Au** و **Ag, Cu**

الکترون های آزاد ترکیب می شود. در یک انرژی خاص بیشترین انتقال انرژی از پرتو الکترونی تابیده به الکترون های نمونه را شاهد هستیم. این بیشینه انتقال انرژی در فرکانس تشدید پلاسمون نمونه رخ می دهد. پس قله موجود در طیف ELOSS با فرکانس پلاسمونی ترکیب مطابقت دارد. برای الکترون های آزاد سطحی و همچنین الکترون های پیوندی ترکیبات قله های مختلفی را شاهد هستیم. قله تیز موجود در سهم درون نواری مربوط به نوسانات پلاسمون های سطحی الکترون های آزاد موجود در نوارهای نیمه پر می باشند. مقدار فرکانس پلاسمونی برابر با $\omega_p^{Cu} = 4.12$, $\omega_p^{Ag} = 3.83$, $\omega_p^{Au} = 4.15$ می باشد.

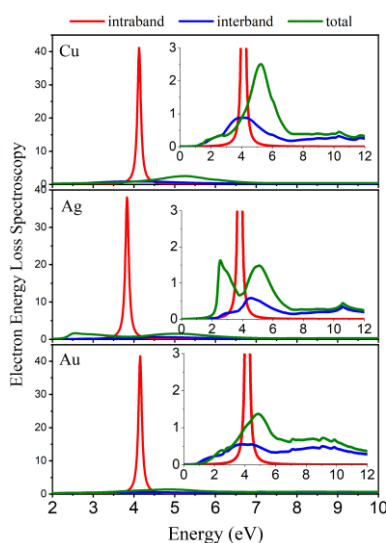


خود را بر طیف اپتیکی می گذارد. به دلیل غالب بودن گذارهای درون نواری در انرژی های پایین، نقش این سهم در تابع دی الکتریک حقیقی کل چشمگیر تر از سهم بین نواری است. سهم بین نواری بیشتر در انرژی های بالاتر نقش خود را نشان می دهد.



شکل ۵: تابع دی الکتریک حقیقی برای سهم های درون نواری و بین نواری در هر سه ترکیب تک لایه

شکل ۶: تابع دی الکتریک موهومی برای سهم های درون نواری و بین نواری در هر سه ترکیب تک لایه

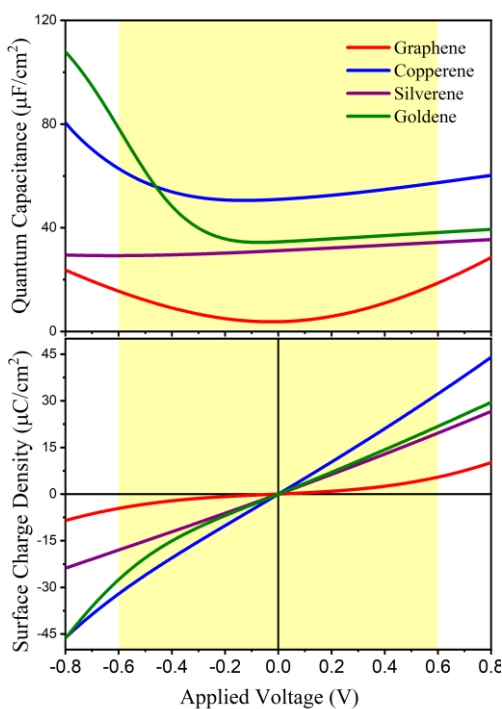


شکل ۷: تابع ELOSS برای سهم های درون نواری و بین نواری در هر سه ترکیب تک لایه

برای تابع دی الکتریک قسمت موهومی نیز که بیشتر معرف جذب و گذارهای اپتیکی می باشد، سهم درون نواری در انرژی های پایین غالب می باشد که البته با ساز و کار جذب اپتیکی تطابق دارد. همان طور که از ساختار نواری و چگالی حالات سیستم ها دیدیم، اوربیتال های نیمه پر **s** و **d** در اطراف سطح فرمی گسترده شده اند. همین امر باعث می شود تا انرژی های حدود ۲-۵/۱ الکترون ولت، گذارها مربوط به الکترون های موجود در نوارهای نیمه پر باشند (شکل ۶).

این گستره انرژی پهن برای الکترون های درون نواری، سبب می شود که این مواد قابلیت و توانایی مناسبی برای کاربردهای مبتنی بر تحریکات الکترون های آزاد از قبیل تشدید پلاسمون های سطحی را دارا باشند. در این راستا طیف تابع افت انرژی الکترون (ELOSS) برای این ترکیبات نیز مورد بحث و بررسی قرار گرفته است. شکل ۷، تابع افت انرژی الکترون را برای هر سه ترکیب نشان می دهد. ساز و کار این طیف اپتیکی به این صورت می باشد که باریکه ای از الکترون های پر انرژی به نمونه تابیده شده و از اختلاف انرژی اولیه باریکه الکترون های تابیده و باریکه الکترون های عبوری رسیده به آشکارساز، مقدار انرژی انتقال یافته به الکترون های نمونه اندازه گیری می شود. این انرژی انتقال یافته صرف به نوسان درآوردن

با چگالی بار سطحی، مشاهده می‌شود که با افزایش ولتاژ اعمالی، شیب تغییرات برای تک لایه مس بیشترین مقدار بوده و بار سطحی آن در محدوده $V \approx 0.6$ به حدود $30 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ می‌رسد. این موضوع نشان‌دهنده توانایی بالای تک لایه مس در ذخیره‌سازی بار سطحی و در نتیجه قابلیت بالقوه آن در کاربردهای ابرخازنی است. در مقابل، گرافن کمترین تغییرات بار سطحی را تجربه می‌کند که دلیل آن همان محدودیت در ظرفیت کوانتومی و تراکم حالت‌های الکترونی است. تک لایه های نقره و طلا نیز با شیب‌های نزدیک به هم قرار دارند و در بازه‌ی مثبت ولتاژ بار سطحی قابل توجهی را ذخیره می‌کنند که آن‌ها را برای کاربردهای مشابه در محدوده‌های کاتدی و آندی مناسب می‌سازد.



شکل ۸: ظرفیت کوانتومی و چگالی بار سطحی برای هر سه ترکیب تک لایه

به منظور ارزیابی مناسب بودن مواد به کاررفته به عنوان الکترودهای کاتد و آند، انتگرال سطح بار سطحی (S) در بازه‌ی -0.6 تا 0.6 ولت برای سیستم‌های الکترولیتی آبی بررسی شدند (همان‌گونه که در شکل نشان داده شده است). بر اساس مطالعات پیشین [14]، معیارهایی را که برای کاربرد الکترودها تعیین کرده‌ایم عبارتند از: برای آند $S_a/S_c > 1.05$ ، برای کاتد $S_a/S_c < 0.95$ و برای الکترودهای متقارن $1.05 < S_a/S_c < 0.95$. بنابراین، انواع الکترودهای خود را بر اساس این معیارها مورد بررسی قرار می‌دهیم. برای گرافن این نسبت بیش از واحد بوده که بیانگر

در ادامه به بررسی نحوه‌ی ذخیره‌سازی بار الکتریکی در نانومواد با تمرکز بر محاسبه‌ی ظرفیت کوانتومی آن‌ها می‌پردازیم. ظرفیت کوانتومی، که با نماد C_Q نشان داده می‌شود و رابطه‌ی آن به صورت $C_Q = \frac{dQ}{d\phi}$ تعریف شده است، یکی از پارامترهای کلیدی در ارزیابی عملکرد مواد در زمینه‌ی ذخیره‌سازی انرژی به شمار می‌رود. این کمیت به‌طور مستقیم با چگالی حالت‌های الکترونی (DOS) در ناحیه‌ی نزدیک به سطح فرمی مرتبط است و بر اساس رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود [14]:

$$C_Q = e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} D(E) F_T(E - e\phi) dE \quad (3)$$

در این رابطه، $D(E)$ بیانگر چگالی حالت‌های الکترونی و $F_T(E)$ تابع توزیع گرمایی است که طبق رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود [14]:

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

با توجه به ظرفیت کوانتومی، می‌توان چگالی سطحی بار σ را نیز تعریف کرد. این کمیت از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\sigma = \int_0^{\phi_0} C_Q d\phi \quad (5)$$

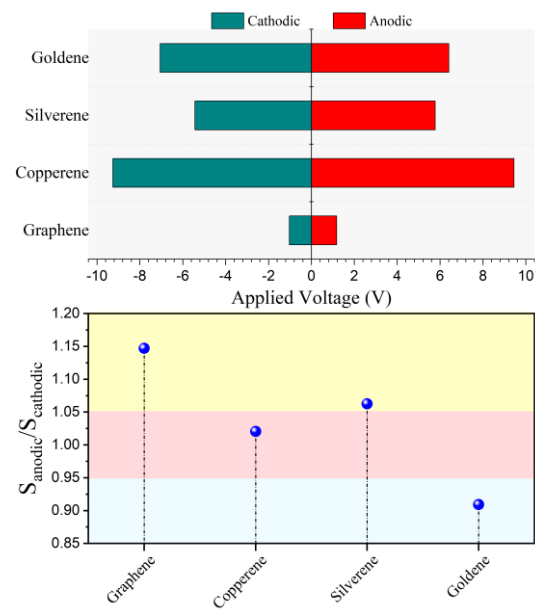
که در آن C_Q ظرفیت کوانتومی و $d\phi$ تغییر پتانسیل الکتریکی است. این رابطه بیان می‌کند که تغییرات بار سطحی در یک نانوماده، مستقیماً متناسب با ظرفیت کوانتومی و تغییرات پتانسیل اعمال شده خواهد بود.

در شکل ۸، تغییرات ظرفیت کوانتومی و چگالی بار سطحی به‌عنوان تابعی از ولتاژ اعمالی برای گرافن، مس، طلا و نقره نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، ظرفیت کوانتومی گرافن در بازه‌ی پتانسیلی -0.6 تا 0.6 ولت نسبتاً پایین‌تر از سایر مواد باقی می‌ماند و حداقل آن در نزدیکی ولتاژ صفر به‌وضوح قابل مشاهده است. به علت گذر سطح فرمی از نقطه دیراک و فقدان حالت‌های الکترونی در انرژی صفر، ظرفیت کوانتومی در ولتاژهای نزدیک به صفر به حداقل می‌رسد و تغییرات چگالی بار سطحی نیز محدود باقی می‌ماند. در مقابل، مس در ناحیه کاتدی مقدار ظرفیت کوانتومی تا حدود $80 \mu\text{F}/\text{cm}^2$ را نشان می‌دهد که از افزایش شدید چگالی حالت‌ها در سطح فرمی ناشی می‌شود. با حرکت به سمت ولتاژهای مثبت، ظرفیت کوانتومی مس کاهش یافته و به حدود $60 \mu\text{F}/\text{cm}^2$ می‌رسد. تک لایه نقره و طلا نیز رفتاری بینابین از خود نشان می‌دهند، به‌گونه‌ای که ظرفیت کوانتومی آن‌ها تقریباً یکنواخت‌تر از تک لایه مس ولی بالاتر از گرافن است؛ این پایداری به توزیع متوازن‌تر چگالی حالت‌ها در ساختارهای آن‌ها باز می‌گردد. در ارتباط

منابع

- [1] D. Zhan, *et al.*, “Engineering the electronic structure of graphene”, *Advanced Materials*, vol. 24(30), 4055-4069, 2012.
- [2] X. Peng, Q. Wei, A. Copple, “Strain-engineered direct-indirect band gap transition and its mechanism in two-dimensional phosphorene”, *Physical Review B*, vol. 90(8), 085402, 2014.
- [3] K. Pang, *et al.*, “Modulation of the electronic band structure of silicene by polar two-dimensional substrates”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 22(37), 21412-21420, 2020.
- [4] S. Kashiwaya, *et al.*, “Synthesis of goldene comprising single-atom layer gold”, *Nature Synthesis*, vol. 3(6), 744-751, 2024.
- [5] B. Mortazavi, “Goldene: An anisotropic metallic monolayer with remarkable stability and rigidity and low lattice thermal conductivity”, *Materials*, vol. 17(11), 2653, 2024.
- [6] T. Taylor, R. Muenchausen, M. Hoffbauer, “The structure and morphology of Ag film growth on Cu (110)”, *Surface Science*, vol. 243, 65-82, 1991.
- [7] J. Jalilian, *et al.*, “Quantum capacitance of decorated and doped B₉ boron monolayer as electrodes for supercapacitors: Density Functional theory”, *Journal of Energy Storage*, vol. 107, 114843, 2025.
- [8] A. Oje, *et al.*, “Silver thin film electrodes for supercapacitor application”, *Applied Surface Science*, 488, 142-150, 2019.
- [9] A. Zulfiqar, *et al.*, “Silverene: An Atomically Thin Metallene with Superior Quantum Capacitance”, *Surfaces and Interfaces*, vol. 72, 107452, 2025.
- [10] E. J. dos Santos, *et al.*, “Exploring Novel 2D Analogues of Goldene: Electronic, Mechanical, and Optical Properties of Silverene and Copperene”, *ACS Omega*. Vol. 25, 26892-26900, 2025.

رفتار آندی بار سطحی است. در مقابل، گلدن با نسبت کمتر از یک نشان می‌دهد که در این ماده فرآیندهای کاتدی غالب‌تر هستند. تک لایه مس و نقره با نسبت‌های نزدیک به واحد رفتار متقارن‌تری در هر دو ناحیه از خود بروز می‌دهند که ناشی از توازن میان دسترسی به حالت‌های الکترونی در نواحی مثبت و منفی ولتاژ است.



شکل ۹: مساحت زیر نمودار چگالی بار سطحی و نوع الکترودی هر یک از مواد.

۳- نتیجه گیری

با استفاده از محاسبات کوانتومی نظریه تابعی چگالی، خواص الکترونی و اپتیکی تک لایه‌های ترکیبات مس، نقره و طلا مورد بررسی قرار گرفت. نتایج ساختاری نشان داد که این ترکیبات دارای فاز بلوری شش گوشه مرکزی پر می‌باشند. چگالی حالات الکترونی و ساختار نواری ترکیبات نشان دهنده ماهیت فلزی آنها می‌باشد. طیف تابع افت انرژی الکترون ELOSS برای ترکیبات نشان داد که تشدید پلاسمون‌های سطحی این ترکیبات در انرژی نزدیک به ۴ الکترون ولت قرار دارد که می‌تواند کاندید مناسبی برای بستر حسگرهای تشدید پلاسمونی ناحیه فرابنفش باشد. همچنین ظرفیت کوانتومی محاسبه شده برای ترکیبات نشان داد که در مقایسه با گرافن، این ترکیبات می‌توانند جایگزین مناسبی برای بسترهای مفید در ساخت ابرخازن‌های ذخیره انرژی باشند و رفتار الکترودی تقریباً متقارنی از خود نشان می‌دهند، یعنی این قابلیت را دارند که در ساختار یک ابرخازن هم نقش کاتد را بازی کنند هم آند.

- [14] J. Jalilian *et al.*, “Quantum capacitance of decorated and doped B₉ boron monolayer as electrodes for supercapacitors: Density Functional theory”, *Journal of Energy Storage* vol. 107, 114843, 2025.
- [11] P. Blaha *et al.*, WIEN2k: An APW+lo program for calculating the properties of solids, *Journal of Chemical Physics*, Vol. 152, 074101, 2020.
- [12] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, “Generalized Gradient Approximation Made Simple”, *Physical Review Letters*, vol. 77, 3865, 1996.
- [13] C. Ambrosch-Draxl, J.O. Sofo, “Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented plane-wave method”, *Computer Physics Communications*, vol. 175, 1-14, 2006.

Investigation of electronic and optical properties of copper, silver and gold monolayers

¹ Jaafar Jalilian, ^{1*} Ghasem Rezei, ¹ Behrooz Vaseghi

^{1*} Department of Physics, College of Sciences, Yasouj University, Yasouj, Iran

Article details

Received: 2025/09/21

Accepted: 2025/11/9

Published: 2025/11/11

ISSN: 2588-493x

eISSN: 2588-4821

Correspondence email:

grezaei@yu.ac.ir



Abstract

Using quantum computational calculations, the electronic and optical properties of monolayer nanostructures of copper, silver, and gold compounds were investigated. The results of recent studies revealed that these compounds are stable in a centrosymmetric hexagonal phase and possess a completely planar structure. These materials exhibit metallic characteristics, such that the s and d orbitals contribute metallic states at the Fermi level. Optical calculations further demonstrate that intraband transitions play a dominant role up to energies of about 3 eV. The plasmonic frequency of these compounds appears around 4 eV. Moreover, quantum capacitance calculations indicate their remarkable capability for energy storage; specifically, within the potential window of aqueous systems, the charge storage density for the copper monolayer was obtained to be significant. The findings suggest that copper, silver, and gold monolayers hold great potential for applications in plasmonic resonance sensors as well as promising platforms for energy storage.

Keywords: Quantum capacitance, Density Functional Theory, Surface Plasmon Resonance, Electronic Density of States