بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه شهید چمران اهواز،
خوزستان، ایران.
۱۴-۱۲ بهمن ۱۴۰۰

مطالعهٔ ابتدا به ساکن ویژگی‌های اپتیکی نانو مکسین ایتریوم کاربید (Y_2C)

امیر علی‌اکبری، پیمان امیری، حمداله صالحی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

Amiraliakbari۱۳۶۹@gmail.com, amiri_physics@yahoo.com, salehi_h@scu.ac.ir

چکیده – محا سبات به‌طور عمده با ا ستفاده از بستهٔ محا سباتی کوانتوم-ا سپر سو و روش شبه‌پتانسیل در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و تقریب چگالی موضعی انجام شده است . از نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک چنین نتیجه می‌شود؛ که جذب از انرژی‌های بسیار کوچک شروع شده است که این امر بیانگر این واقعیت است که نانو مکسین Y_2C گاف انرژی ندارد و ماهیت فلزی را نشان می‌دهد. طیف اتلاف انرژی نشان می‌دهد که قله‌های تیز انرژی پلاسمونیک برای نانو مکسین Y_2C در راستاهای x، y و z به‌ترتیب ۶٫۵ ، ۶٫۷۳ و ۶٫۷۵ الکترون‌ولت بدست آمده است. بنابراین در انرژی‌های مذکور بیشترین اتلاف انرژی وجود دارد و در انرژی‌های بالاتر تابع اتلاف انرژی به سمت مقادیر صفر میل میکند.

کلید واژه: تابع اتلاف انرژی، ماهیت فلزی، نانو مکسین، نظریهٔ تابعی چگالی، ویژگی‌های اپتیکی.

Ab-initio study of the optical properties nano-MXene of Yttrium Carbide (Y_2C)

Amir Aliakbari, Peiman Amiri, Hamdollah Salehi

Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran

Amiraliakbari۱۳۶۹@gmail.com, amiri_physics@yahoo.com, salehi_h@scu.ac.ir

Abstract- The calculations are mainly performed using the quantum-espresso calculation package and quasi-potential method in density functional theory and local density approximation. The imaginary contribution diagram of the dielectric function follows; The absorption starts from tiny energies, which indicates that Y_2C nano-MXene has no energy bandgap and shows the metallic nature. The energy loss spectrum shows that the sharp plasmonic energy peaks for Y_2C nano-MXene in the x, y, and z directions are ٦٫٥, ٦٫٧٣, and ٦٫٧٥ eV, respectively. Therefore, there is the most energy loss in the mentioned energies, and in higher energies, the energy loss function tends to zero values.

Keywords: Energy loss function, Metallic nature, Nano-MXene, Density functional theory, Optical properties.

Commented [T۱]: ادرس داشگاه نوشته شود

Commented [ft۲]: خط زیر کلمات حذف شود

Commented [ft۳]: کنار چکیده بیاید

Commented [ft٤]: به ترتیب الفبا شود. وسطچین

Commented [fto]: اول کلمات عنوان با حروف بزرگ بیاید

Commented [ft٦]: خط زیر کلمات حذف شود

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-06]

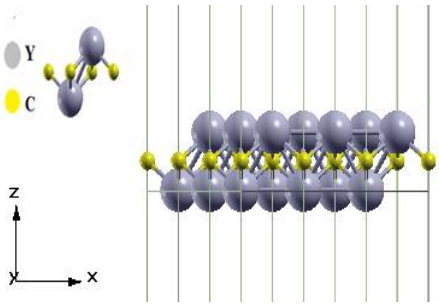
Commented [TV]: خط پاورقی برای هر ستون چپ چین شود

مقدمه

در سال‌های اخیر علاقه‌مندی به ساختارهای دوبعدی حوزهٔ تحقیقاتی جدیدی را ایجاد کرده است [۱]. در میان مواد دوبعدی، مکسین‌ها[۱] خانوادهٔ جدیدی از این‌گونه مواد هستند که برخلاف گرافین که فقط از عنصر کربن بهره‌مند است، از عناصر متعددی تشکیل شده است. مکسین‌ها در حوزه‌های مختلف نظیر استفاده در باتری‌های نسل جدید، ابرخازن‌ها، عایق‌های الکترومغناطیسی، سامانه‌های ذخیرهٔ انرژی، تصفیه آب، حسگرهای گازی و دستگاه‌های الکترونیکی کاربرد دارند [۲]. فازهای مکس خانوادهٔ بزرگی (با بیش از ۷۰ عضو) با ساختار شش‌گوشی سه‌گانه $M_{n+1}AX_n$ هستند که در آن M نشان دهندهٔ یک فلز واسطه مانند {M = Sc, Ti, V, Y, Zr, …} و A نمایانگر عناصر گروه ۱۳ و ۱۴ (IIIA-IVA) جدول تناوبی نظیر Al، Si و … است و X نیز نشان‌گر کربن یا نیتروژن و n= ۱،۲،۳ است. این مواد دوبعدی به‌این خاطر مکسین نامیده می‌شوند که آن‌ها را با کنده‌کاری[۲] از فازهای مکس تولید می‌کنند که به‌عنوان مثال فرمول شیمیایی این کنده‌کاری مطابق $Ti_3AlC_2 + 3HF = AlF_3 + 3/2\ H_2 + Ti_3C_2$ خواهد بود [۳]. تاریخچهٔ مکسین‌ها به سال ۲۰۱۱ باز می‌گردد که توسط یوری گوگوتسی[۳] و میشل بارسوم[۴] استادان علوم در دانشگاه "درکسل" کشف شد. تاکنون بیش از ۲۰ مکسین به‌طور تجربی سنتز شده‌اند که در سال ۲۰۱۱، Ti_3AlC_2 به‌عنوان اولین مکسین سنتز شد [۳]. در سال ۲۰۱۶ جیان هوا هو [۵] ویژگی‌های فیزیکی و الکترونی ساختار دو بعدی لایه‌ای ترکیب ایتریوم کاربید (Y_2C) را در ساختار هگزاگونال با استفاده از اصول اولیه محاسبات در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی مورد بررسی قرار دادند، آنها نشان دادند که تک لایه Y_2C دارای خاصیت فلزی است و می‌تواند به عنوان یک مادهٔ الکتریدی و یک آند فعال برای باتری‌های یونی بر پایهٔ سدیم باشد [۴].

روش محاسبه

محاسبات به‌طور عمده با استفاده از بستهٔ محاسباتی کوانتوم-اسپرسو و روش شبه‌پتانسیل در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی (DFT)[۶] انجام شده است [۵]. در این محاسبات از شبه‌پتانسیل‌های بار پایسته (NC)[۷] با تقریب چگالی موضعی (LDA)[۸] استفاده شده است [۶]. به‌منظور بهینه سازی تعداد نقاط شبکه با تعیین مبنای همگرایی ۰٫۰۱ الکترون‌ولت به انجام محاسبات خودسازگار پرداخته شده است. پس از انجام بهینه‌سازی‌های لازم تعداد نقاط بهینه شبکه برای نانو مکسین Y_2C برابر ۱×۱۵×۱۵، انرژی قطع ۷۰ ریدبرگ و برای جلوگیری از برهم کنش با ساختار مجاور یک لایه خلأ به اندازهٔ ۱۸ آنگستروم برای هر دو سامانه مورد استفاده قرار گرفت. ثابت شبکه بهینه شده برای ترکیب مذکور به‌ترتیب برابر با a=۳٫۴۲ و c=۱۷٫۵۶ بوهر برای ساختار هگزاگونال تعیین شده است. شکل ۱ ساختار بهینه را برای نانو مکسین Y_2C نشان می‌دهد. در محاسبات اپتیکی از تقریب فاز تصادفی استفاده شده است.



[۱] MXenes
[۲] etching
[۳] Yury Gogotsi
[۴] Michel W. Barsoum
[۵] Jianhua Hou
[۶] Density Function Theory (DFT)
[۷] Norm Conserving
[۸] Local Density Approximation

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-06]

شکل ۱: نمای جانبی ساختار بهینهٔ نانو مکسین Y_2C در صفحهٔ xz. کره‌های خاکستری اتم‌های ایتریوم و کره‌های زرد اتم‌های کربن را نشان می‌دهند.

بحث و نتایج

برای بررسی خواص اپتیکی مواد، تابع دی‌الکتریک که پاسخ ماده به امواج الکترومغناطیس است، مورد بررسی قرار می‌گیرد. تابع دی‌الکتریک یک تابع مختلط است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\varepsilon(\omega)=\varepsilon_1(\omega)+i\varepsilon_2(\omega) \qquad (۱)$$

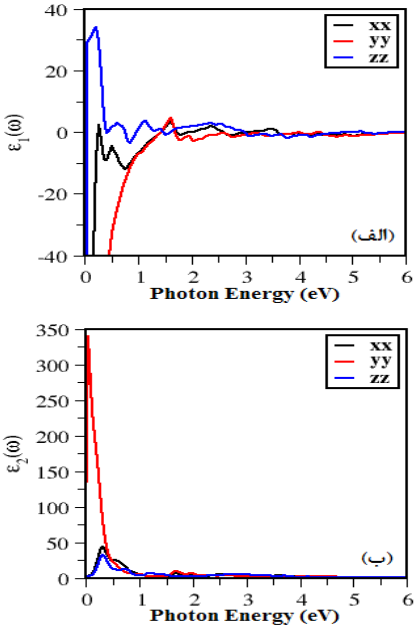
که $\varepsilon_1(\omega)$ قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک است. در ناحیه‌ای که منفی است، امواج منتشر نمی‌شود و فرایندهای جذب و اتلاف غالب هستند. $\varepsilon_2(\omega)$ قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک مستقیماً ناشی از گذارهای بین نواری است. روابط کرامرز-کرونیگ قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک را به هم مرتبط می‌کند و تمام ثابت‌های اپتیکی را می‌توان از این داده‌ها به دست آورد[۱۰].

$$\varepsilon_1(\omega)=1+\frac{2}{\pi}P\int_0^{\infty}\frac{\omega'\varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2-\omega^2}d\omega' \qquad (۲)$$

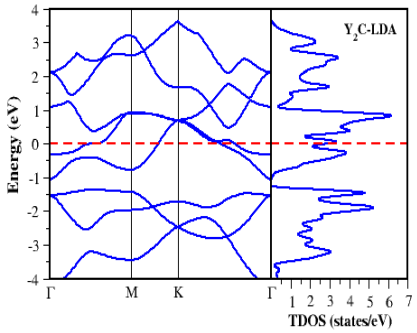
که در آن قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک به‌صورت زیر داده می‌شود:

$$\varepsilon_2(\omega)=-\frac{2}{\omega\pi}P\int_0^{\infty}\frac{\omega'^2[\varepsilon_1(\omega')-1]}{\omega'^2-\omega^2}d\omega' \qquad (۳)$$

قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک نانو مکسین Y_2C بر حسب انرژی فوتون- فرودی در راستاهای x، y و z درشکل ۲ نشان داده شده است. مشاهده می‌گردد که برای نانو مکسین Y_2C ریشه های تابع دی الکتریک در انرژی‌های پایین اتفاق می‌افتد. از نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک چنین نتیجه می‌شود؛ که جذب از انرژی‌های بسیار کوچک شروع شده است که این امر بیانگر این واقعیت است که ماده در ساختار مربوطه گاف انرژی ندارد و ماهیت فلزی ترکیب مذکور را تایید میکند. این نتایج گاف صفر به‌دست آمده از ساختار نوارالکترونی و چگالی حالت-های نانو مکسین Y_2C (شکل ۳) را تأیید می‌کند. بزرگترین قله متعلق به راستای y است که معرف برهم‌کنش بیشتر الکترون با فوتون در این راستا است.



شکل ۲: (الف) قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک و (ب) قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک نانو مکسین Y_2C



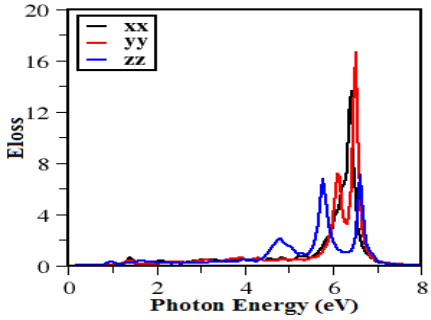
شکل ۳: ساختار نوار الکترونی و چگالی حالت‌های کل نانو مکسین Y_2C

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-06]

ضریب اتلاف متناسب با احتمال اتلاف انرژی در واحد طول برای الکترون در حال عبور از محیط است. وجود قله در نمودار ضریب اتلاف به‌عنوان قله‌ی پلاسمونی شناخته می‌شود که بیان‌گر برانگیختگی‌های حجمی چگالی بار الکترون‌های عبوری است. در یک بلور امکان وجود چند قله‌ی پلاسمونی است. بلندترین قله متناظر با پلاسمون حجمی و بسامد متناظر با آن بسامد پلاسما نامگذاری می‌شود. تابع اتلاف انرژی به صورت زیر با تابع دی‌الکتریک رابطه دارد:

$$L(\omega)=\frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega)+\varepsilon_2^2(\omega)} \qquad (۴)$$

این رابطه نشان می‌دهد که تابع اتلاف انرژی با تابع دی‌الکتریک رابطه معکوس دارد که بدین معناست که در بازه‌هایی که تابع اتلاف دارای قله است قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مقادیر بسیار کوچکی دارند. مقدار قله‌های تیز انرژی پلاسمون برای نانو مکسین Y_2C در راستاهای x، y و z به‌ترتیب ۶٫۵، ۶٫۷۳ و ۶٫۷۵ الکترون‌ولت بدست آمده است. بنابراین در انرژی‌های مذکور که بیشترین اتلاف انرژی وجود دارد، شدت انتقال بین نواری بسیار کم است و در انرژی‌های بالاتر از آن تابع اتلاف انرژی به سمت مقادیر صفر میل میکند.



شکل ۴: طیف اتلاف انرژی نانو مکسین Y_2C

نتیجه‌گیری

در این مقاله محاسبات با استفاده از بستهٔ محاسباتی کوانتوم-اسپرسو و روش شبه‌پتانسیل در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و تقریب چگالی موضعی انجام شده است . از نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نتیجه می‌شود؛ که جذب از انرژی‌های بسیار کوچک شروع شده است که این امر بیانگر این واقعیت است که نانو مکسین Y_2C گاف انرژی ندارد و ماهیت فلزی را نشان می‌دهد. طیف اتلاف انرژی نشان می‌دهد که قله‌های تیز انرژی پلاسمونیک برای نانو مکسین Y_2C در راستاهای x، y و z به‌ترتیب ۶٫۵ ، ۶٫۷۳ و ۶٫۷۵ الکترون‌ولت بدست آمده است. بنابراین در انرژی‌های مذکور بیشترین اتلاف انرژی وجود دارد.

مرجع‌ها

[۱] D. Akinwande, C. J. Brennan, J. S. Bunch, P. Egberts, J. R. Felts, H. Gao, R. Huang, J. S. Kim, T. Li, Y. Li, and K. M. Liechti, "A review on mechanics and mechanical properties of ۲D materials—Graphene and beyond", Extreme Mechanics Letters, Vol. ۱۳, pp.٤۲-۷۷, ۲۰۱۷.

[۲] S. J. Kim, H. J. Koh, C. E. Ren, O. Kwon, K. Maleski, S. Y. Cho, B. Anasori, C. K. Kim, Y. K. Choi, J. Kim, and Y. Gogotsi, "Metallic $Ti_2C_2T_x$ Mxene gas sensors with ultrahigh signal-to-noise ratio", ACS Nano, Vol. ۱۲, pp. ۹۸٦-۹۹۳, ۲۰۱۸.

[۳] M. Naguib, M. Kurtoglu, V. Presser, J. Lu, J. Niu, M. Heon, L. Hultman, Y. Gogotsi, and M. W. Barsoum, "Two-dimensional nanocrystals produced by exfoliation of Ti_2AlC_2", Advanced Materials, Vol. ۲۳, pp. ٤۲٤۸-٤۲٥۳, ۲۰۱۱.

[٤] J. Hou, K. Tu, and Z. Chen, "Two-dimensional Y_2C electride: a promising anode material for Na-Ion batteries", The Journal of Physical Chemistry C, Vol. ۱۲۰, pp. ۱۸٤۷۳-۱۸٤۷۸, ۲۰۱٦.

[٥] P. Giannozzi, et al., "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open source software project for quantum simulations of materials," J.Phys. Condens Matter, Vol. ۲۱, pp. ۱-۳٦, ۲۰۰۹.

[٦] P. J. Perdew, and Y. Wang, "Pair- distribution function and its coupling constant average for the spin-polarized electron gas," Phys. Rev. B, Vol. ٤٦, pp. ۱۲۹٤۷-۱۲۹٥۹, ۱۹۹۲.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-06]