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

بررسی اثر ناخالصی سیلیکون بر خواص اپتیکی تک‌لایه‌ی $Sc_2C(OH)_2$ در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی

ریحان نجاتی‌پور، مهرداد دادستانی

دانشکده‌ی علوم، دانشگاه لرستان، خرم‌آباد، لرستان، ایران
nejati.r@lu.ac.ir; dadsetani.m@lu.ac.ir

در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی، خواص اپتیکی ترکیب $Sc_2C(OH)_2$ با و بدون ناخالصی سیلیکون مورد مطالعه قرار می‌گیرد. این ترکیب در حضور ناخالصی سیلیکون، از یک نیم‌رسانا با گاف نواری ۰/۵۷ eV به یک عایق توپولوژیک با گاف نواری صفر و وارونی نواری تغییر ساختار و خواص می‌دهد. منشأ ساختارهای طیفی در ترکیب با و بدون ناخالصی سیلیکون، به‌ترتیب، انتقال الکترون از حالات p سیلیکون و p کربن به حالات d اسکاندیوم و s هیدروژن است. مقادیر ثابت‌های اپتیکی در ساختار ناخالص‌شده نسبت به ساختار بدون ناخالصی افزایش می‌یابد.

کلید واژه- تک‌لایه‌ی $Sc_2C(OH)_2$، خواص اپتیکی، ناخالصی سیلیکون، نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT)، Mxeneها.

The study of the effect of silicon impurity on the optical properties of $Sc_2C(OH)_2$ monolayer by density functional theory

Reihan Nejatipour, Mehrdad Dadsetani

Faculty of Science, Lorestan University, Khoramabad, Lorestan, Iran
nejati.r@lu.ac.ir; dadsetani.m@lu.ac.ir

In the density functional theory, optical properties of $Sc_2C(OH)_2$ with and without silicon impurity are studied. In the presence of silicon impurity, the structure and properties of this compound were changed from a semiconductor with a 0.57 eV band-gap to a topological insulator with a zero band-gap and a band inversion. The origin of spectral features in this compound with and without the silicon impurity is the electron transition from the p-Si and p-C to d-Sc and s-H, respectively. The values of optical constants are increased in the doped-structure with respect to the pure structure.

Keywords: Monolayer $Sc_2C(OH)_2$, Optical properties, Silicon impurity, Density functional theory (DFT), MXenes.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-05-30]

مقدمه

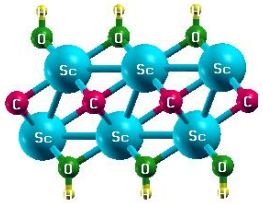
پس از کشف گرافین به عنوان اولین ماده دوبعدی، تلاشها جهت مطالعه‌ی ساختارهای دوبعدی دیگر با خواصی که محدودیت‌های گرافین را جبران کنند گسترش یافت. این مطالعات و پیشرفتهای اخیر در نانوفناوری منجر به تولید ترکیباتی دوبعدی به نام MXenes با فرمول شیمیایی $M_{n+1}X_n$ (M=فلز واسطه، و X=کربن/نیتروژن) شد. پیوند شیمیایی ضعیف بین عناصر M-A در ساختار انبوهه‌ی ترکیبات، با فرمول شیمیایی $M_{n+1}AX_n$، با استفاده از اسیدهیدروفلوئوریک گسسته شده و بلافاصله گروههای عاملی F، O و OH به سطوح Mxeneها متصل می‌شوند. خواص جالب الکترونی، مکانیکی، و گرمایی Mxeneها، نویدبخش کاربردهای صنعتی بسیاری برای این ساختارها شده است [۱]. ترکیب $Sc_2C(OH)_2$ از جمله MXeneهای نیم‌رساناست که در حضور ناخالصی‌های سیلیکون و ژرمانیوم یک عایق توپولوژیک است [۲]. دانش خواص الکترونی و به‌ویژه اپتیکی این ترکیب، لازمه‌ی کاربردهای صنعتی و اپتوالکترونی آن است، و بنابراین، پژوهش حاضر به بررسی ویژگی‌های اپتیکی آن می‌پردازد.

روش محاسبات

محاسبات حاضر در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) بر پایه‌ی روش امواج تخت بهبودیافته‌ی خطی با پتانسیل کامل (FPLAPW)، اعمال‌شده در کد WIEN2k است. تابعی تبادلی-همبستگی از تقریب شیب تعمیم‌یافته (GGA)، با تابعیِ پردو و همکاران [۳] محاسبه گردید. پارامتر $R_{MT}K_{Max}$ برابر با ۴، بیشینه‌ی عدد کوانتومی l_{Max} برای بسط توابع موج درون کره‌های اتمی برابر ۱۰، و G_{Max}، بیشینه بردار در فضای وارون برای بسط پتانسیل برابر با ۱۴ تنظیم شدند. اعمال ناخالصی با جایگزینی یک اتم کربن با سیلیکون در ابرياخته‌ای با ابعاد ۱×۳×۳ صورت گرفت. انتگرال‌گیری‌های ناحیه‌ی اول بریلوئن نیز برای محاسبات ابرياخته با استفاده از روش تتراهدرون و فضای k با ابعاد ۱×۵×۵ در ناحیه کاهش‌ناپذیر صورت گرفت. برای محاسبه‌ی طیف‌های اپتیکی از تقریب فاز کاتوره‌ای (RPA) استفاده شد.

نتایج و بحث

در شکل ۱، ساختار لایه‌ی $Sc_2C(OH)_2$ نشان داده شده است.



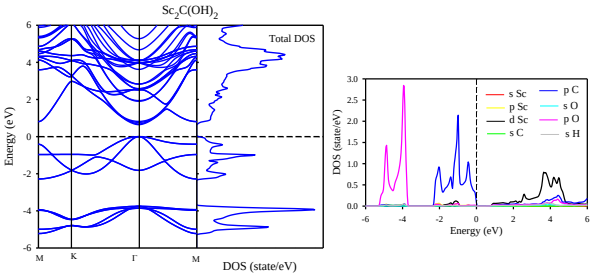
شکل ۱: نمای جانبی ساختار تک‌لایه‌ی $Sc_2C(OH)_2$.

طول پیوند Sc-C در ساختار خالص، ۲/۲۸ Å است درحالیکه جایگزینی سیلیکون طول Sc-Si را به ۲/۴۷۶ Å افزایش می‌دهد.

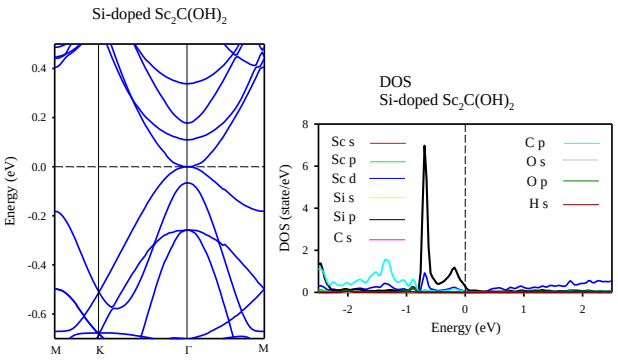
تحلیل چگالی حالتها و ساختار نواری ترکیب $Sc_2C(OH)_2$ در شکل ۲ نشان می‌دهد که این تک‌لایه یک نیم‌رسانا با گاف نواری ۰/۵۷ eV است. مطابق با منحنی چگالی حالات این ترکیب، سهم‌های عمده‌ی اربیتالی در نوارهای ظرفیت، شامل الکترونهای p اتم کربن و d اتم اسکاندیوم، و در نوار رسانش، شامل الکترون‌های s اتم هیدروژن است، در حالیکه حضور سیلیکون این روند را تغییر می‌دهد. شکل ۳، نشان می‌دهد که در نوار ظرفیت ساختار ناخالص‌شده، حالتهای p اتم سیلیکون سهم عمده‌ی اربیتالی را به عهده دارند و این در تطابق با گزارش محاسباتی موجود است [۲]. ضمن اینکه، گاف نواری به صفر کاهش می‌یابد، یعنی اربیتالهای p-Si منجر به افزایش انرژی بالاترین حالات اشغال‌شده می‌گردد. بعلاوه، حالات سطحی اشغال‌نشده‌ی s-H در پایین‌ترین نوار رسانش ساختار خالص، در دومین حالت اشغال‌نشده‌ی بالای تراز فرمی ساختار ناخالص قرار می‌گیرند. حالات Sc-C-Si اکنون سهم عمده‌ی پایین‌ترین حالات اشغال‌نشده را بعنوان نوارهای سطحی تشکیل

[Downloaded from opsi.ir on 2026-05-30]

می‌دهند. بنابراین، یک جابجایی نواری در نقطه‌ی گاما نزدیک تراز فرمی مشهود است، که این ویژگی‌ها ساختار ناخالص‌شده‌ی $Sc_2C(OH)_2$ را یک عایق توپولوژیک معرفی می‌کند.

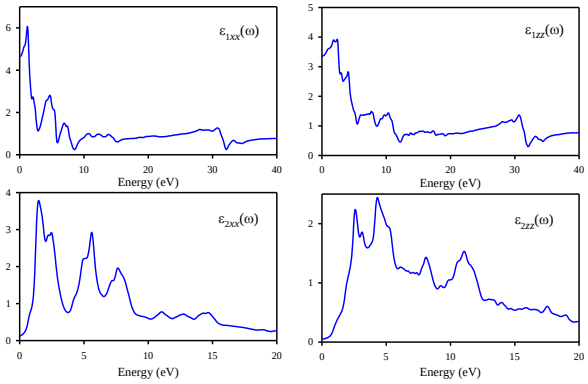


شکل ۲: ساختار نواری و چگالی حالات ساختار $Sc_2C(OH)_2$.



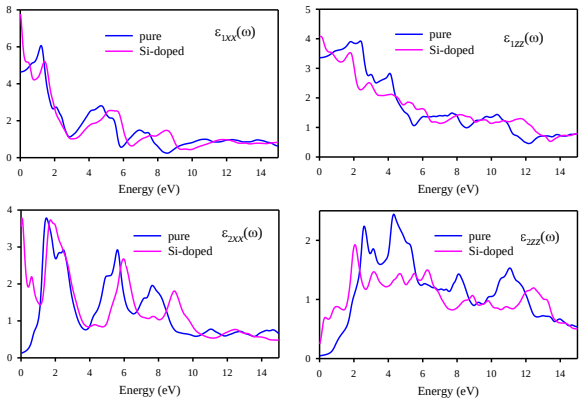
شکل ۳: ساختار نواری و چگالی حالات $Sc_2C(OH)_2$ در حضور ناخالصی سیلیکون.

در ادامه طیفهای اپتیکی ساختارهای با و بدون ناخالصی $Sc_2C(OH)_2$ را مقایسه می‌کنیم. بدلیل تقارن ششگوشی، توابع اپتیکی این ترکیب دارای دو مؤلفه‌ی مستقل *xx* و *zz* هستند. مطابق با شکل‌های ۴ و ۵، ثابت دی‌الکتریک ($\varepsilon_1(\omega=0)$) ساختار خالص در راستاهای *x* و *z*، به‌ترتیب ۴/۶۳ و ۳/۳۶ است، و این مقادیر در ساختار ناخالص به ۷/۷۷ و ۴/۰۸ افزایش می‌یابد. مقایسه‌ی روند کلی طیف‌ها نشان می‌دهد که با افزودن ناخالصی، برای مولفه *x* (*z*) یک جابجایی آبی (قرمز) رخ می‌دهد. بعلاوه، ناهمسانگردی در پاسخ اپتیکی ترکیب مورد مطالعه مشهود است. تحلیل ساختار نواری نشان می‌دهد که بیشینه‌های طیفی در قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک ($\varepsilon_2(\omega)$) ساختار خالص، ناشی از انتقالات اپتیکی از حالات p-C به حالات d-Sc و عمدتاً s-H است.



شکل ۴: قسمتهای حقیقی ($\varepsilon_1(\omega)$) و موهومی ($\varepsilon_2(\omega)$) تابع دی‌الکتریک ترکیب $Sc_2C(OH)_2$.

مقایسه‌ی طیف‌های اپتیکی و تحلیل ساختار نواری ترکیبات با و بدون ناخالصی نشان می‌دهد که در ساختار ناخالص، سهم عمده در انتقالات اپتیکی حاصل از انتقال الکترون‌های p-Si به d-Sc و عمدتاً s-H است.

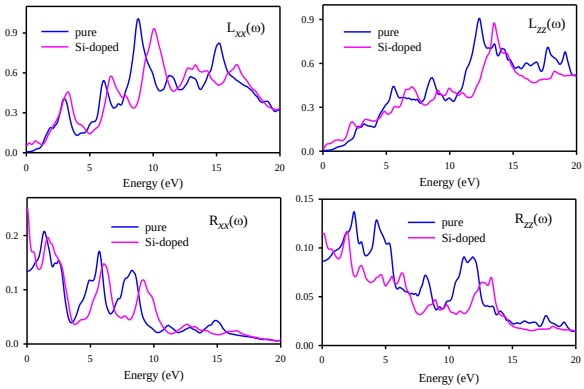


شکل ۵: مقایسه‌ی قسمتهای حقیقی (بالا) و موهومی (پایین) تابع دی‌الکتریک ترکیب $Sc_2C(OH)_2$ با و بدون ناخالصی سیلیکون.

تابع اتلاف انرژی الکترونی که مطابق با معادله $L(\omega) = -\mathrm{Im}(1/\varepsilon(\omega))$، به تابع دی‌الکتریک $\varepsilon(\omega)$ مرتبط است، در شکل ۶ نمایش داده شده است. به دلیل اینکه هر بیشینه ناشی از انتقالات بین‌نواری در تابع اتلاف را می‌توان به بیشینه‌ی متناظر در تابع دی‌الکتریک نسبت داد، به‌ترتیب در هر دو مؤلفه‌ی *xx* و *zz* تابع اتلاف متعلق به ساختار خالص (ناخالص)، بیشینه‌های اصلی اول در انرژی‌های ۲/۳۳ و ۵/۹۱ eV (۲/۴۵ و ۶/۰۵ eV) ناشی از انتقالات بین‌نواری است. به ازای مقادیر کوچک تابع دی‌الکتریک، تابع اتلاف انرژی دارای بیشینه‌ای اصلی موسوم به بیشینه‌ی پلاسمونی است، و این بیشینه متعلق به اتلاف

[Downloaded from opsi.ir on 2026-05-30]

انرژی آن دسته از الکترون‌هایی است که حین عبور از ماده، سبب برانگیختگی جمعی چگالی بار می‌شوند. ساختارهای طیفی اصلی در مولفه‌های *xx* و *zz* تابع اتلاف ترکیب خالص (ناخالص) به‌ترتیب در انرژی‌های ۸/۵۵ و ۱۲/۱۷ eV (۹/۳۷ و ۱۳/۴۲ eV)، بیشینه‌های پلاسمونی هستند. بنابراین داده‌ها، ساختارهای اصلی طیفی در ترکیب ناخالص‌شده، نسبت به ترکیب خالص، در انرژی‌های بالاتر رخ داده‌اند.

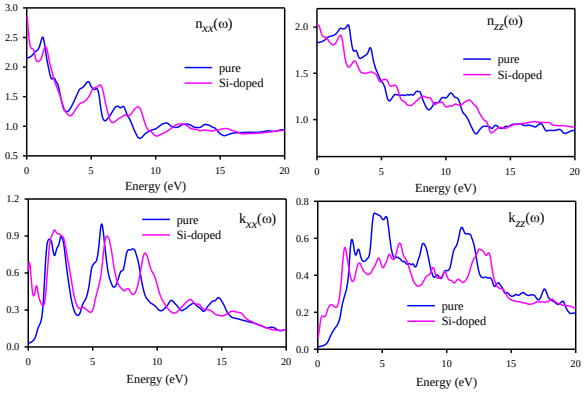


شکل ۶: مقایسه‌ی طیفهای اتلاف انرژی (بالا) و ضرایب بازتاب (پایین) ترکیب $Sc_2C(OH)_2$ با و بدون ناخالصی سیلیکون.

شکل ۶ نشان می‌دهد که بیشترین بازتاب به ازای انرژی‌های ۱/۳۰ و ۲/۳۷ eV به‌ترتیب برای مولفه‌های *xx* و *zz* در ساختار خالص، و ۰/۰۶ و ۱/۹۱ eV در ساختار ناخالص رخ داده است. بنابراین، طیف بازتاب در ساختار ناخالص‌شده به سمت انرژی‌های کمتر متمایل است.

مطابق با شکل ۷، ضرایب شکست استاتیک، $n(\omega=0)$، برای مؤلفه‌های *xx* و *zz* در ساختار بدون ناخالصی به‌ترتیب ۲/۱۵ و ۱/۸۳ و در ساختار ناخالص ۲/۸۵ و ۲/۰۲ است. بنابراین، ضریب شکست استاتیک در حضور ناخالصی سیلیکون در ترکیب $Sc_2C(OH)_2$ افزایش می‌یابد.

ضریب خاموشی یک ماده نشان‌دهنده‌ی میزان جذب پرتو الکترومغناطیسی توسط آن ماده است، بطوریکه اگر موج الکترومغناطیسی به آسانی از آن ماده عبور کند، ضریب خاموشی پایین و اگر به سختی در آن نفوذ کند، ضریب خاموشی بالاست. بیشینه‌ها در مؤلفه‌های *xx* و *zz* ساختار خالص در انرژی‌های ۵/۶۱ و ۴/۴۶ eV و در ساختار دارای ناخالصی در انرژی‌های ۲/۰۲ و ۶/۲۴ eV قرار دارند. بنابراین، نفوذ موج الکترومغناطیسی با فرکانس‌هایی در مقادیر یادشده، به درون ماده‌ی مورد بررسی به سختی رخ خواهد داد.



شکل ۷: مقایسه‌ی طیفهای ضرایب شکست (بالا) و خاموشی (پایین) ترکیب $Sc_2C(OH)_2$ با و بدون ناخالصی سیلیکون.

نتیجه‌گیری

با تزریق سیلیکون، اربیتال‌های p اتم کربن در نوار ظرفیت، با اربیتال‌های p اتم سیلیکون جایگزین شده و یک جابجایی نواری در سطح فرمی ایجاد می‌شود. این تغییرات ساختاری، پاسخ اپتیکی ماده را نیز دستخوش تغییر می‌کند. علاوه بر جابجایی انرژی طیفهای اپتیکی، برهم‌کنش باریکه‌ی نوری با ترکیب مورد مطالعه، موجب انتقال الکترون از حالتهای p اتم کربن در ساختار خالص و p اتم سیلیکون در ساختار ناخالص به حالت‌های d اتم اسکاندیوم و عمدتاً s اتم هیدروژن می‌گردد.

مراجع

[1] M. Khazaei, A. Ranjbar, M. Aria, T. Sasaki, & S. Yunoki, "Electronic properties and applications of MXenes: a theoretical review" *J. Mater. Chem.* C, Vol. 5, pp. 2488-2503, 2017.

[2] E. Balcı, Ü.Ö. Akkuş, & S. Berber, "Doped $Sc_2C(OH)_2$ MXene: new type s-pd band inversion topological insulator", *J. Phys: Cond. Matter*, Vol. 30, pp. 155501-155512, 2018.

[3] J.P. Perdew, K. Burke, & M. Ernzerhof, "Generalized Gradient Approximation Made Simple", *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 77, pp. 3865-3868, 1996.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-05-30]