

## مطالعه خواص الکترونیکی و نوری تک لایه سولفید گالیم آلاینش شده با محاسبات اصول اولیه

رضیه السادات حسینی المدواری<sup>۱</sup>، مریم نیری<sup>۲\*</sup> و سمیه فتوحی<sup>۳</sup>

اطلاعات مقاله	چکیده
دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۰۱/۲۷	مقاله حاضر به بررسی رفتار الکترونیکی و نوری سولفید گالیم تک لایه، به عنوان ماده مونو کالکوژنید فلزات واسطه، آلاینده با اتم های گروه چهارم و پنجم جدول تناوبی می پردازد. محاسبات در بسته نرم افزاری سیاستا و مبنی بر نظریه تابعی چگالی، با استفاده از تابع همبستگی تبادلی و تقریب شیب تعمیم یافته صورت گرفته است. آنالیز ساختار الکترونیکی این ماده نشان می دهد تک لایه سولفید گالیم خالص دارای شکاف نوار $2/3 \text{ eV}$ و غیرمستقیم می باشد. به منظور بررسی اثرات ناخالصی بر روی این ساختار، اتم های ناخالصی گروه های ۴ و ۵ در موقعیت اتم گوگرد و گالیم اعمال شدند. غلظت ناخالصی ساختارهای آلاینده $1/14\%$ می باشد. نتایج شبیه سازی نشان می دهند حضور این ناخالصی بسته به نوع اتم ناخالصی و قرارگیری در موقعیت مکانی، منجر به گذاری از ماهیت نیمه هادی به فلز، نیمه هادی غیرمستقیم به مستقیم و یا حالت غیرمغناطیسی به مغناطیسی در این ساختار می گردد. بطوری که به عنوان نمونه بکارگیری اتم ناخالصی Sb در موقعیت اتم گوگرد منجر به مغناطیسی شدن ماده و مستقیم شدن شکاف انرژی نیمه هادی می شود، در حالیکه جایگزینی آن با اتم گالیم ماهیت نیمه هادی بودن ساختار با شکاف نوار غیرمستقیم را با انرژی شکاف کمتر حفظ می کند. علاوه بر خواص الکترونیکی، خواص نوری ساختار آلاینده نیز مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. نتایج نشان می دهند ساختار GaS تک لایه آلاینده با عناصر گروه چهارم و پنجم راهی را برای کاربردهای نانو الکترونیک، الکترونیک نوری و اسپینترونیک باز می کند.
پذیرش مقاله: ۱۴۰۰/۰۷/۱۸	
واژگان کلیدی: سولفید گالیم، تابع دی الکترونیک، ناخالصی، اصول اولیه.	

### ۱- مقدمه

در آن گردیده است و این موضوع مانع از استفاده آن در افزاره های نانوالکترونیکی می شود [۷]. در این زمینه، تحقیقات در خصوص مواد دوبعدی نوین از اهمیت اساسی برخوردار است، زیرا ممکن است فرصت های جدیدی را با ویژگی های خاص جهت کاربردهای مختلف ارائه دهند. نانومواد دوبعدی دیگر، مشابه گرافن از قبیل سیلیسن [۸]، ژرمانن [۹]، فسفرن [۱۰] و دی کالکوژنید<sup>۳</sup> فلزات واسطه [۱۱] به دلیل دارا بودن خواص رضایت بخش

پس از کشف گرافن و لایه برداری موفقیت آمیز آن به عنوان یک ماده دوبعدی، تحول عمیقی برای توسعه نسل بعدی ادوات نانوالکترونیک صورت گرفته است [۶-۱]. از ویژگی های بارز گرافن می توان به رسانش الکترونی بالستیک، رسانندگی گرمایی بالا و سختی زیاد اشاره کرد. با این وجود ساختار نواری خطی در مجاورت تراز فرمی منجر به ظهور الکترون های بی جرم و فرمیون های دیراک

\* پست الکترونیک نویسنده مسئول: nayeri@iauyazd.ac.ir

۱. گروه مهندسی برق، واحد یزد، دانشگاه آزاد اسلامی، یزد، ایران  
۲. گروه مهندسی برق، واحد یزد، دانشگاه آزاد اسلامی، یزد، ایران  
۳. گروه مهندسی برق، واحد اسلامشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، اسلامشهر، ایران

<sup>3</sup> Dichalcogenide

ناخالصی در ادوات الکترونیک نوری، نیمه‌هادی به خوبی شناخته شده‌است و مقدار تابع کار برای سولفید گالیم بکر و آلئیده شده با اتم‌های گروه دوم و چهارم (Be, Mg, Ca, C, Si, Ge) نشان می‌دهد که مقدار آن در حدود تابع کار گرافن و  $\text{MoS}_2$  است. علاوه بر آن، آلیش ساختار سولفید گالیم با اتم‌های مذکور سبب می‌شود در بخش موهومی تابع دی الکترونیک سولفید گالیم آلئیده شده، بیشینه‌های جدیدی در منطقه مرئی ایجاد شود که نشان‌دهنده آن است که این ماده نمی‌تواند در دیوده‌های نوری و کاتالیزگر نوری استفاده شود. همچنین رفتار انتقالی این ساختارها مشخصه اهمی-فلزی را نشان می‌دهند [۲۱]. در مطالعات تئوری نشان داده‌اند که تک‌لایه‌های سولفید گالیم آلئیده با تلوریم بهترین گزینه برای کاتالیزگر نوری شکافت آب هستند [۲۲]. اخیراً ساخت ترانزیستور مبتنی بر سولفید گالیم فوق نازک با نسبت جریان حالت روشن به حالت خاموش (ON/OFF) و قابلیت تحرک الکترونی بالا گزارش شده‌است [۲۳]. چن و همکارانش نیز با استفاده از محاسبات اصول اولیه، تأثیر ناخالصی را با بکارگیری شش نوع اتم غیر فلزی (H, B, C, N, O, F) و شش نوع اتم فلز واسطه (V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) بر روی ویژگی‌های الکترونیکی و مغناطیسی تک‌لایه GaS مورد مطالعه قرار دادند [۲۴]. آن‌ها دریافتند تهی جای S در تک‌لایه GaS به سختی توسط ناخالصی‌های فلز واسطه به طور خود به خودی اشغال می‌شود و در میان تمام خالصی‌های مورد اشاره، N کاندید مناسبی برای ناخالصی نوع p است. چون نه تنها حالات ناخالصی آن نزدیکتر به بیشینه نوار ظرفیت است بلکه، دارای انرژی جانشینی منفی، معادل با ۰/۲۷۲- الکترون-ولت می‌باشد. با توجه به مطالعات و تحقیقات فراوان، آلیش مواد سبب تنظیم خواص فیزیکی و شیمیایی آن‌ها شده و بنابراین مطالعه ساختارهای سولفید گالیم آلئیده‌شده از اهمیت بالایی برخوردار است. با وجود کاربردهای فراوان این مواد در صنایع نوری متأسفانه تاکنون مطالعه نظری جامعی در خصوص ویژگی‌های اپتیکی آن‌ها گزارش نشده‌است. به همین منظور در تحقیق حاضر، به بررسی ویژگی‌های نوری این مواد با اعمال اتم‌های ناخالصی مختلف می‌پردازیم. این پژوهش با به‌کارگیری محاسبات ابتدا به ساکن، تأثیر جایگزینی اتم‌های گالیم و گوگرد را در

و کاربرد وسیع آنها در صنایع الکترونیک، اپتوالکترونیک، کاتالیزورها و وسایل ذخیره انرژی، زمینه‌های تحقیقاتی و پژوهشی فوق‌العاده زیادی را به خود اختصاص داده‌اند [۱۳-۱۲]. اخیراً تک‌لایه‌های سولفید گالیم که یک گروه پایدار از مواد مونوکالکوژنید<sup>۱</sup> فلزات واسطه دویعدی هستند، به طور موفقیت‌آمیزی با استفاده از چندین روش تجربی سنتز شده‌اند. یکی از این روش‌ها استفاده از تکنیک برش میکرومکانیکی بر روی بسترهای  $\text{Si/SiO}_2$  است [۱۵-۱۴]. سولفید گالیم، نیمه‌هادی دو بعدی از گروه III-V جدول تناوبی است. اتم‌ها در لایه‌های سولفید گالیم، پیوندهای یونی-کووالانسی قوی با یکدیگر برقرار می‌کنند.

هر لایه از سولفید گالیم از چهار صفحه یکپارچه در دنباله سولفور-گالیم-گالیم-سولفور (S-Ga-Ga-S) تشکیل شده‌است و با نیروی ضعیف واندروالسی به لایه دیگر وصل می‌شود. بنابراین نیروهای پیوند با ناهمسانگردی بسیار بالایی در این ساختار لایه لایه‌ای وجود دارد. با توجه به آنکه برهمکنش بین لایه‌ها، نیروهای واندروالسی ضعیف است، اعتقاد بر آن است که می‌توان تک‌لایه‌ها را با استفاده از روش‌های ساده آزمایشگاهی از ساختار توده جدا کرد [۱۴]. مطالعات قبلی نشان داده‌است برخلاف گرافن تک‌لایه که صفر بودن شکاف انرژی آن منجر به محدودیت‌های بسیاری در کاربردهای نانوالکترونیکی می‌شود، تک‌لایه سولفید گالیم، یک نیمه‌هادی غیرمستقیم با شکاف انرژی در حدود ۲/۳ الکترون-ولت است [۱۹-۱۶]. همچنین ویژگی‌های الکترونیکی و نوری ماده سولفید گالیم تک‌لایه، دو لایه، چهار لایه و توده مورد مطالعه قرار گرفته‌است و نتایج نشان می‌دهد که رفتارهای الکترونیکی و نوری این ماده وابستگی شدیدی به تعداد لایه‌های آن‌ها دارد، به طوری که با کاهش تعداد لایه‌ها شکاف انرژی کاهش می‌یابد و شدت طیف نوری به سمت طول موج‌های بزرگتر انتقال می‌یابد. بنابراین، این مواد می‌توانند کاندیدای مناسبی برای نانوآزاده‌های قابل کنترل باشند [۱۸]. نکته قابل توجه آنکه تک‌لایه سولفید گالیم دارای خواص مکانیکی برجسته‌ای است و ساختار آن قادر است کشش‌های تک‌جهته را به میزان ۱۷٪ تحمل کند و با اعمال کشش‌های دو جهته بزرگ در تک‌لایه سولفید گالیم، نوارهای انرژی آن از حالت نیمه‌هادی به فلز تغییر می‌یابند [۲۰-۱۹]. نقش ترازهای

<sup>۱</sup> Monochalcogenide

حالت‌های اشغال شده به حالت‌های اشغال نشده جمع بسته شود. مولفه‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک از روابط کرامز-کرونیک به شرح زیر قابل محاسبه می‌باشند [۲۷]:

$$\varepsilon_i(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \oint_0^{\infty} \frac{\varepsilon_r(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (1)$$

$$\varepsilon_r - 1 = \frac{2}{\pi} \oint_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_i(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (2)$$

در روابط فوق،  $\oint$  بیانگر این موضوع است که مقدار اصلی<sup>۱</sup> انتگرال باید گرفته شود.  $\varepsilon_r$  و  $\varepsilon_i$  نیز به ترتیب معرف بخش حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک هستند.

### ۳- نتایج و بحث

در این بخش ابتدا بر روی ویژگی‌های ساختاری و فیزیکی سولفید گالیم تک‌لایه دو بعدی بحث می‌کنیم تا بتوان درک بهتری از اثر آلایش بر روی ویژگی‌های این ساختار داشت. در ادامه، ساختار موردنظر با اتم‌های گروه چهار و پنج جدول تناوبی آلایش یافته و اثرات حضور ناخالصی بر خواص الکتریکی و نوری ماده، مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌گیرد.

### ۳-۱- ساختار هندسی GaS خالص و آلاییده شده با

#### اتم‌های گروه چهارم و پنجم جدول تناوبی

ابر سلول سولفید گالیم بکر و خالص در نظر گرفته شده در این مطالعه بعد از انجام محاسبات فرایند آرامش کامل در شکل (۱) نشان داده شده است. کادر لوزی شکل، سلول واحد این ساختار با چهار اتم، شامل دو اتم گالیم و دو اتم گوگرد را نشان می‌دهد. ثابت شبکه محاسبه شده برای سولفید گالیم تک‌لایه ۳/۵۸ انگستروم است و همچنین طول پیوند بین اتمی گالیم با اتم گوگرد در حدود ۱/۷۹ انگستروم است که در توافق خوبی با مقادیر تجربی و تئوری گزارش شده در مقالات اخیر است [۱۹، ۲۸].

در گام بعدی، ساختار GaS را با اتم‌های گروه چهارم و پنجم جدول تناوبی آلایش می‌دهیم. در این مطالعه از اتم‌های گروه چهارم جدول تناوبی شامل D=C, Si, Ge، و از اتم‌های گروه پنجم جدول تناوبی نظیر D=N, Sn, Pb برای آلایش استفاده می‌گردد. به منظور سادگی، اتم‌های ناخالصی با پارامتر D نامگذاری شدند.

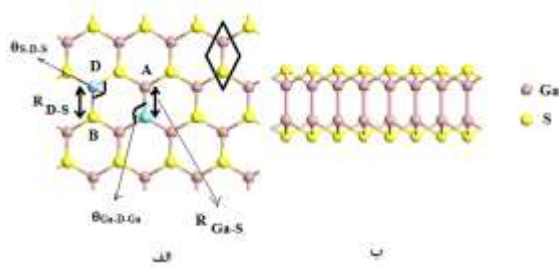
تک لایه سولفید گالیم با اتم‌های گروه چهارم جدول تناوبی شامل C, Si, Ge, Sn و Pb و همچنین اتم‌های گروه پنجم جدول تناوبی شامل N, P, As و Sb بر روی ویژگی‌های الکترونیکی و نوری این ماده بررسی می‌کنیم. نتایج پژوهش حاضر می‌تواند راهی برای گسترش عملکرد تک لایه سولفید گالیم به عنوان یک کاندید بالقوه برای برنامه‌های کاربردی در نانو افزاره‌های نوری فراهم نماید.

### ۲- روش محاسبات

محاسبات بر مبنای رهیافت نظریه تابعی چگالی (DFT) [۲۵] توسط کد محاسباتی سیاستا (SIESTA) بر اساس تقریب شبه پتانسیل انجام شده است و در همه محاسبات، پلاریزه اسپینی لحاظ شده است. کلیه محاسبات الکترونیکی و نوری با استفاده از تابع همبستگی تبادل از مجموعه تقریب شیب تعمیم یافته و بر اساس تابعی PBE [۲۶] در نظر گرفته شده و مجموعه پایه به صورت DZP تعریف شده است. پیکربندی‌های الکترون ظرفیت برای اتم‌های S و Ga به ترتیب  $(3s^2p^4)$  و  $(3d^{10}4s^2p^1)$  است. برای جلوگیری از برهمکنش بین لایه‌های خلاء، فاصله‌ای در حدود ۲۰ انگستروم در راستای جهت Z برای نانو ورقه‌های سولفید گالیم دو بعدی در نظر گرفته شده است. نمونه برداری از منطقه اول بریلوئن با توزیع یکنواخت  $9 \times 9 \times 1$  به روش مونخورست-پک صورت گرفته است. برای بهینه‌سازی هندسه ساختار و محاسبه ویژگی‌های نوری از انرژی جنبشی قطع ۴۰۰ الکترون-ولت استفاده می‌شود. آستانه همگرایی انرژی برای محاسبات خود سازگار  $10^{-6}$  الکترون-ولت تنظیم شد. موقعیت‌های اتمی کاملاً بهینه می‌شوند تا نیروی وارد شده بر هر اتم به کمتر از ۰/۰۱ الکترون-ولت بر متر برسد. محاسبات نوری ساختارها با محاسبه تابع دی‌الکتریک بررسی می‌شود که دارای دو سهم درون نواری و بین نواری است و گذارهای بین نواری به دو نوع گذارهای مستقیم و غیر مستقیم تقسیم می‌شوند. در اینجا برای محاسبه ویژگی‌های نوری از گذارهای بین نواری غیر مستقیم که شامل پراکندگی فونون و دارای سهم اندکی در تابع دی‌الکتریک است، چشم‌پوشی می‌کنیم. برای محاسبه سهم بین نواری مستقیم از قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک، بایستی روی همه گذارهای ممکن از

<sup>1</sup> Principal value

همین امر می‌تواند ویژگی‌های الکترونیکی و نوری ساختارهای سولفید گالیم را تحت تأثیر قرار دهد.



شکل ۱- الف: نمای بالا و ب: دید جانبی ابر سلول سولفید گالیم تک لایه خالص. لوزی مشخص شده در الف، بیانگر سلول واحد این ساختار است. موقعیت اتم ناخالصی جایگزین‌شده با اتم گالیم با حرف A و موقعیت اتم ناخالصی جایگزین‌شده با اتم گوگرد با حرف B نشان داده شده‌است. طول و زوایای پیوندها در الف مشاهده می‌شود.

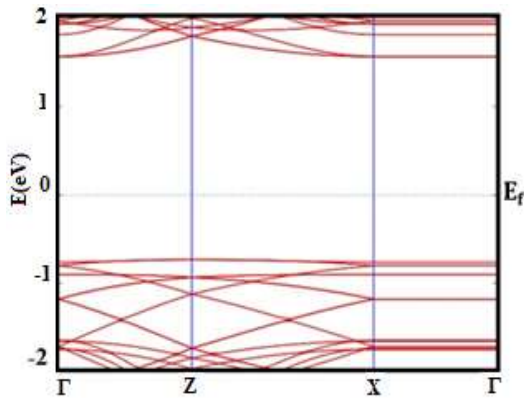
در ساختار GaS دو حالت کلی را برای هر گروه از عناصر جدول تناوبی Si, Ge, Sn, Pb در نظر می‌گیریم. اتم‌های ناخالصی D را در ساختار GaS ابتدا با یک اتم گالیم (در موقعیت A) جایگزین می‌نماییم و سپس هریک از اتم‌های ناخالصی D را در ساختار GaS با یک اتم گوگرد (در موقعیت B) جایگزین می‌نماییم. با توجه به اینکه تعداد اتم‌های کل ساختار ۸۸ اتم است و یک اتم ناخالصی را در ساختارهای آلائیده جایگزین با اتم گالیم یا گوگرد می‌نماییم، غلظت ناخالصی ساختارهای آلائیده ۱/۱۴٪ است. قابل ذکر است ویژگی‌های الکترونیکی توسط خصوصیات ساختاری تحت تأثیر قرار می‌گیرد. اختلاف در شعاع اتمی این ناخالصی‌ها با اتم‌های جایگزین شده سبب می‌شود اغتشاشی در ساختار هندسی سولفید گالیم پدید آید و

جدول ۱- پارامترهای ساختاری محاسبه شده از قبیل طول‌های پیوند ( $R_{D-S}$  و  $R_{Ga-D}$ ) و زوایای پیوند ( $\theta_{D-S-D}$  و  $\theta_{D-Ga-D}$ ) برای ساختارهای آلائیده با اتم‌های گروه چهارم و پنجم جدول تناوبی

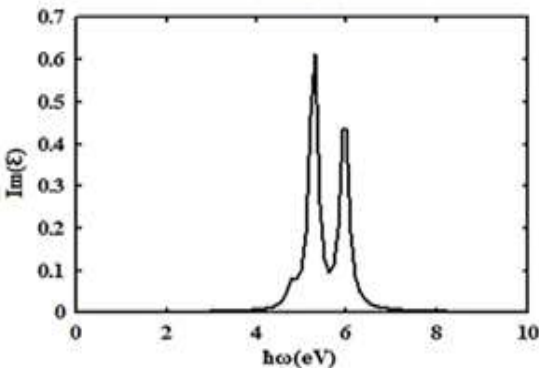
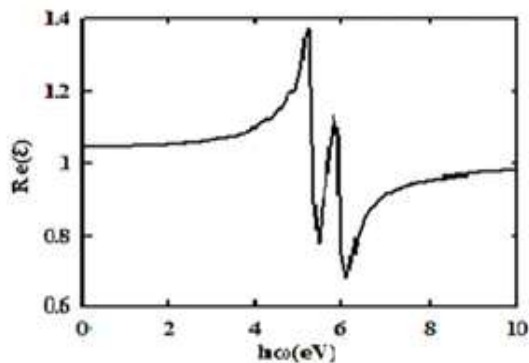
اتم‌های ناخالصی مورد مطالعه	ساختار	طول پیوند (انگستروم)	زاویه پیوند (درجه)
اتم‌های گروه چهارم	اتم ناخالصی جایگزین با یک اتم گالیم در موقعیت A	$R_{Ga-D}(\text{Å})$	$\theta_{Ga-D-Ga}(\text{°})$
	Si	۲/۱۸	۱۰۰/۷۸
	Ge	۲/۳۹	۱۰۲/۵۱
	Sn	۲/۵۷	۹۱/۳۱
	Pb	۲/۳۳	۱۱۱/۷۲
	اتم ناخالصی جایگزین با یک اتم گالیم در موقعیت B	$R_{D-S}(\text{Å})$	$\theta_{S-D-S}(\text{°})$
	Si	۲/۳۱	۱۰۶/۶۱
	Ge	۲/۳۳	۱۰۶/۱۱
	Sn	۲/۴۹	۱۰۲/۱۶
	Pb	۲/۵۱	۱۰۰/۲۷
اتم‌های گروه پنجم	اتم ناخالصی جایگزین با یک اتم گالیم در موقعیت A	$R_{Ga-D}(\text{Å})$	$\theta_{Ga-D-Ga}(\text{°})$
	N	۱/۷۴	۱۲۴/۷۲
	P	۲/۲۰	۱۰۲/۱۱
	As	۲/۴۲	۱۰۲/۱۰
	Sb	۲/۵۸	۱۰۰/۲۷
	اتم ناخالصی جایگزین با یک اتم گالیم در موقعیت B	$R_{D-S}(\text{Å})$	$\theta_{S-D-S}(\text{°})$
	N	۱/۹۳	۱۱۳/۴۸
	P	۲/۳۰	۱۰۲/۹۰
	As	۲/۳۷	۱۰۱/۱۳
	Sb	۲/۳۵	۹۶/۵۲

مشاهده می‌شود این ساختار نسبت به حالت خالص به نیمه‌هادی نوع n تبدیل شده است.

نتایج نوارهای انرژی پلاریزه اسپینی ساختارهایی با اتم ناخالصی Si, Ge, Sn, Pb در موقعیت A و B (شکل ۳ و ۴) نشان می‌دهد که کلیه ترازهای نوارهای اسپینی بالا و پایین بر روی یکدیگر منطبق بوده و هیچ جداشدگی بین آنها مشاهده نمی‌شود. نتایج بیانگر این موضوع است که کلیه ساختارهای مذکور غیرمغناطیسی هستند.



(الف)



(ب)

شکل ۲- الف) نوار انرژی ساختار GaS تک لایه خالص و ب) طیف تابع دی الکتریک این ساختار.

پارامترهای ساختاری از قبیل طول‌های پیوند ( $R_{Ga-D}$  و  $R_{D-S}$ ) و زوایای پیوند ( $\theta_{D-S-D}$  و  $\theta_{D-Ga-D}$ ) در جدول ۱ ارائه شده‌اند.

طول پیوند گالیم و یا گوگرد با اتم‌های ناخالصی به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش و یا افزایش می‌یابد، علاوه بر آن زوایای پیوندی نیز تغییر می‌کند. این موضوع به واسطه اندازه کوچک و یا بزرگ اتم‌های ناخالصی نسبت به اتم گالیم یا گوگرد است.

### ۳-۲- ویژگی‌های الکترونیکی و نوری ساختار GaS

#### بکر و خالص

ابتدا رفتار الکترونیکی ساختار سولفید گالیم خالص را با محاسبه ساختار نوار انرژی آن مورد بررسی قرار می‌دهیم. شکل (۲-الف) ساختار نوار انرژی پلاریزه اسپینی تک‌لایه سولفید گالیم بکر و خالص را در طول جهت  $\Gamma-Z-X-\Gamma$  ناحیه بریلوئن نشان می‌دهد.

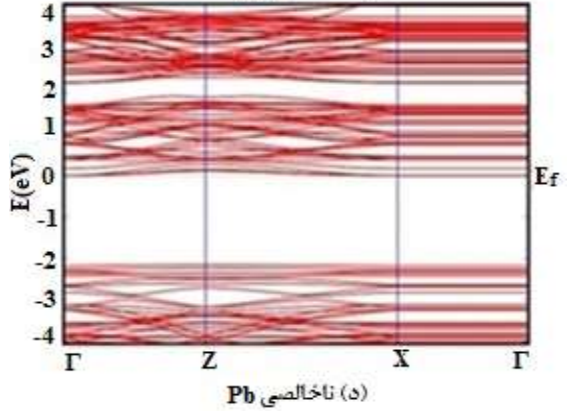
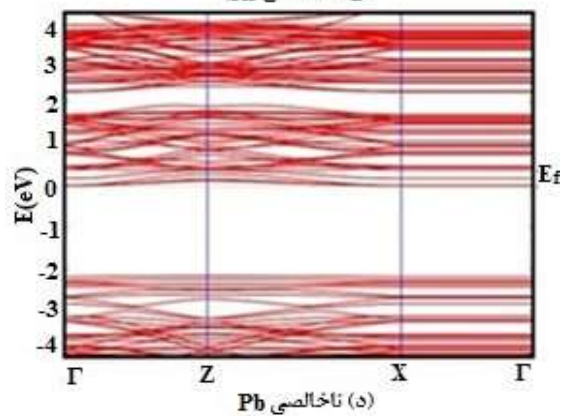
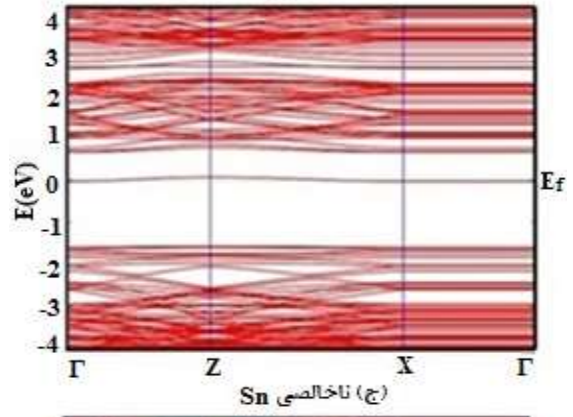
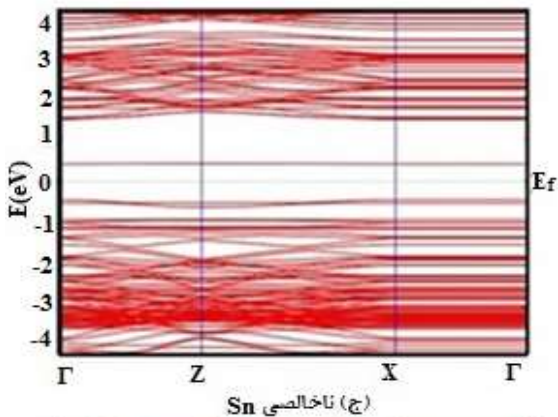
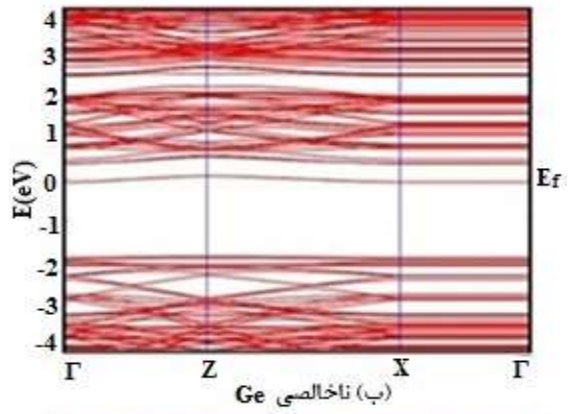
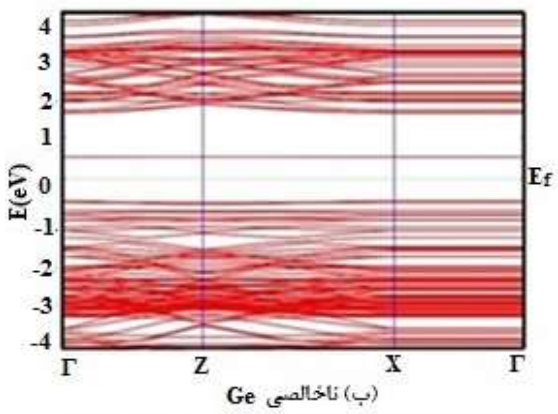
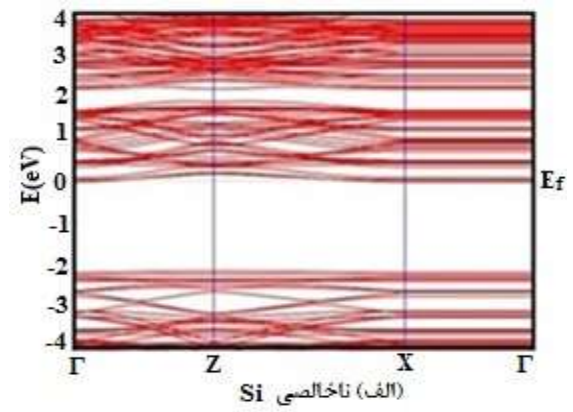
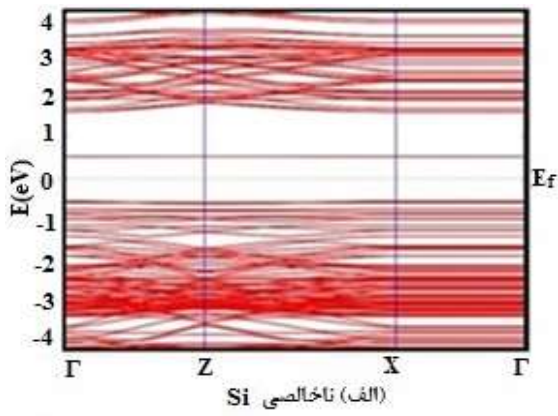
همانطور که مشاهده می‌شود نوارهای انرژی اسپین بالا و پایین بر هم منطبق بوده و تبهگنی بین نوارهای انرژی دیده می‌شود. همچنین تک‌لایه سولفید گالیم بکر و خالص یک نیمه‌هادی غیرمغناطیسی با شکاف انرژی غیرمستقیم ۲/۳ الکترون‌ولت است که در توافق مناسبی با نتایج حاصله در [۱۶ و ۱۸-۱۹] می‌باشد. بخش موهومی و حقیقی طیف تابع دی الکتریک نیز در شکل (۲-ب) قابل مشاهده است.

### ۳-۳- ویژگی‌های الکترونیکی و نوری ساختار GaS

#### آلاییده شده با اتم‌های گروه چهارم جدول تناوبی

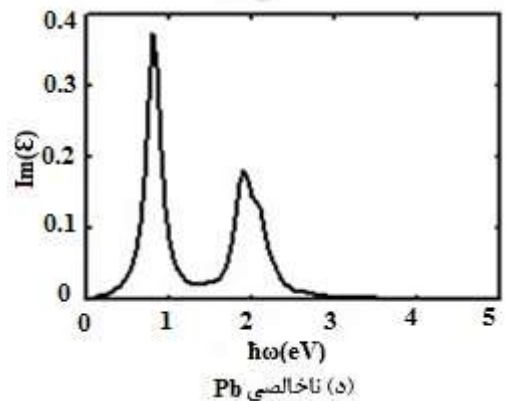
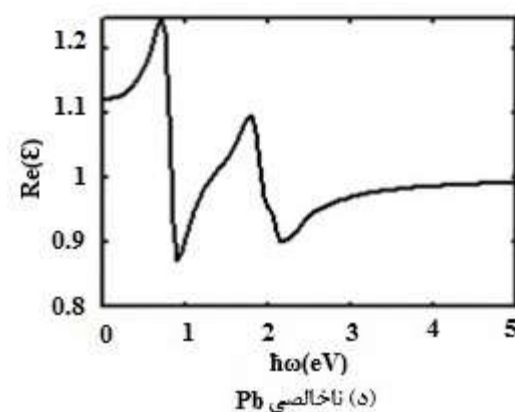
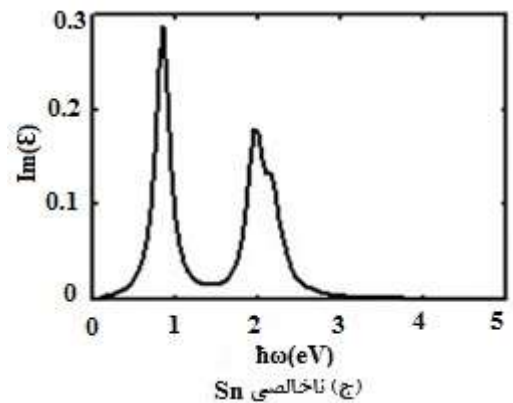
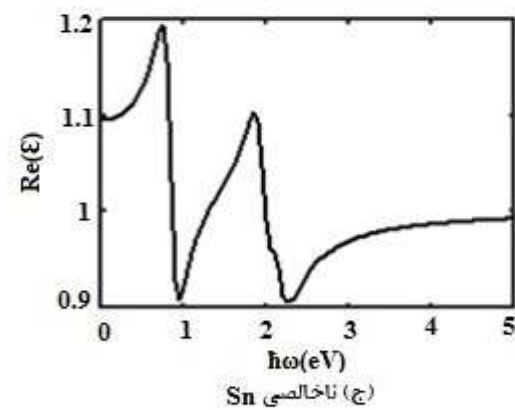
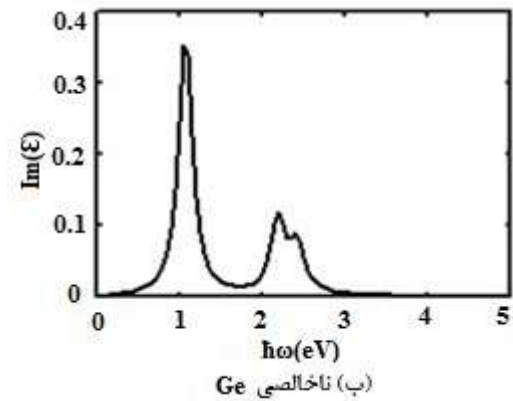
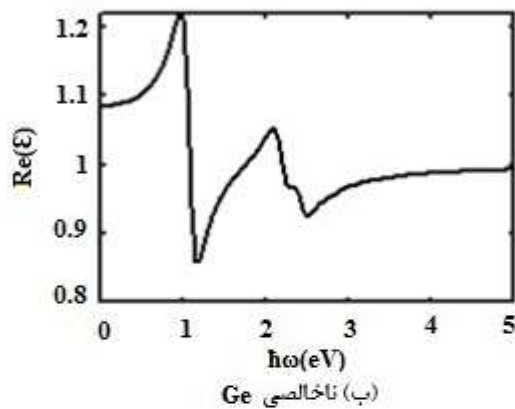
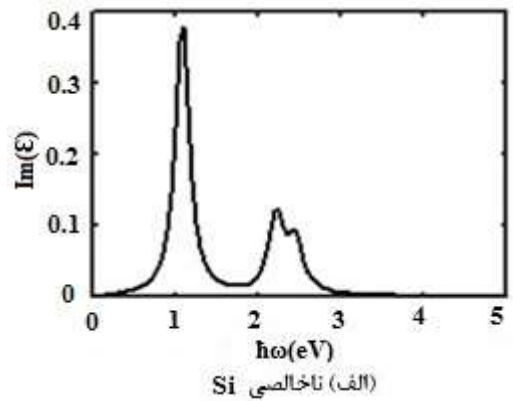
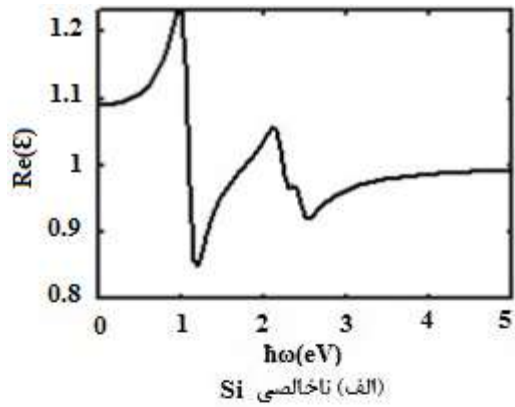
شکل‌های (۳) و (۴) ساختار نوارهای انرژی پلاریزه اسپینی سولفید گالیم، در حالتی که به ترتیب یک اتم گالیم و یک اتم گوگرد با اتم ناخالصی Si, Ge, Sn, P در موقعیت A و یا B جایگزین شده باشد، را نشان می‌دهد.

نتایج نوارهای انرژی در شکل (۳) نشان می‌دهد که ساختارهای دارای اتم ناخالصی Si, Ge, Sn در موقعیت A، هیچ شکاف انرژی بین نوار هدایت و نوار ظرفیت دیده نمی‌شود و تمامی ساختارها فلز هستند به عبارت دیگر بکارگیری اتم‌های ناخالصی فوق در ساختار گالیم سولفید منجر به گذاری از نیمه‌هادی به فلز می‌گردد و تنها در حالتی که اتم ناخالصی Pb جایگزین اتم گالیم می‌شود، ساختار مورد نظر نیمه‌هادی با شکاف انرژی غیرمستقیم و شکاف انرژی ۲/۱ الکترون‌ولت است. همانگونه که از شکل (۳-د)



شکل ۴- ساختار نوار انرژی GaS تک‌لایه در حالت جایگزینی یک اتم گوگرد با الف) اتم ناخالصی Si، ب) اتم ناخالصی Ge، ج) اتم ناخالصی Sn و د) اتم ناخالصی Pb.

شکل ۳- ساختار نوار انرژی GaS تک‌لایه در حالت جایگزینی یک اتم گالیم با الف) اتم ناخالصی Si، ب) اتم ناخالصی Ge، ج) اتم ناخالصی Sn و د) اتم ناخالصی Pb.



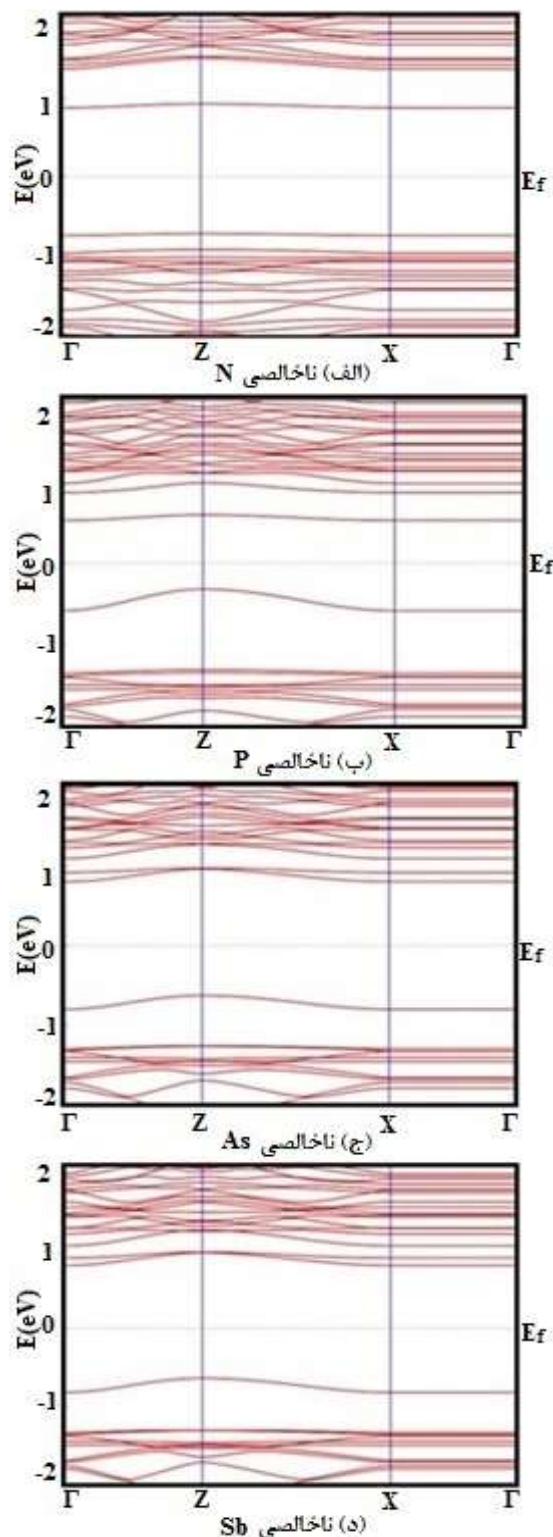
شکل ۶- الف-د) قسمت حقیقی تابع دی الکتریک برای ساختارهای GaS، هنگامی که یک اتم گوگرد با اتم ناخالصی Si، Ge، Sn و Pb جایگزین شده باشد.

شکل ۵- الف-د) قسمت موهومی تابع دی الکتریک برای ساختارهای GaS، در حالتی که یک اتم گوگرد به ترتیب جایگزین اتم ناخالصی Si، Ge، Sn و Pb شده باشد

نیمه‌هادی و دارای شکاف انرژی مستقیم هستند. بیشترین شکاف انرژی مربوط به ساختار دارای اتم ناخالصی Si در موقعیت B به میزان  $1/8$  الکترون‌ولت است. از این موضوع می‌توان برای مهندسی شکاف نوار در افزاره‌های نانو و اپتوالکترونیک استفاده نمود. در ادامه با توجه به اهمیت به کارگیری نانو مواد تحت بررسی در ادوات نوری به محاسبه ویژگی‌های نوری ساختارهایی با شکاف انرژی مستقیم می‌پردازیم. این گونه سیستم‌ها برای کاربرد در ادوات نوری موثر می‌باشند زیرا گذارهای بین نواری غیرمستقیم شامل پراکندگی فونون هستند و دارای اتلاف انرژی هستند. سهم حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک برای ساختارهای مورد مطالعه با شکاف انرژی مستقیم در شکل (۵) و (۶) نشان داده شده‌است. شکل‌های (۵) و (۶) قسمت حقیقی و موهومی را برای ساختارهای با شکاف انرژی مستقیم نشان می‌دهد. موقعیت مکانی اولین قله در قسمت موهومی در نزدیکی مقدار انرژی شکاف نوار انرژی است. با جایگزینی اتم‌هایی با عدد اتمی و شعاع اتمی بزرگتر این موقعیت از منطقه مرئی به منطقه ماوراء بنفش شیفت می‌یابد. اولین پیک طیف موهومی تابع دی الکتریک در منطقه مرئی قرار دارد و در منطقه ماوراء بنفش تقویت می‌شود.

### ۳-۴- ویژگی‌های الکترونیکی و نوری ساختار GaS آلاییده شده با اتم‌های گروه پنجم جدول تناوبی

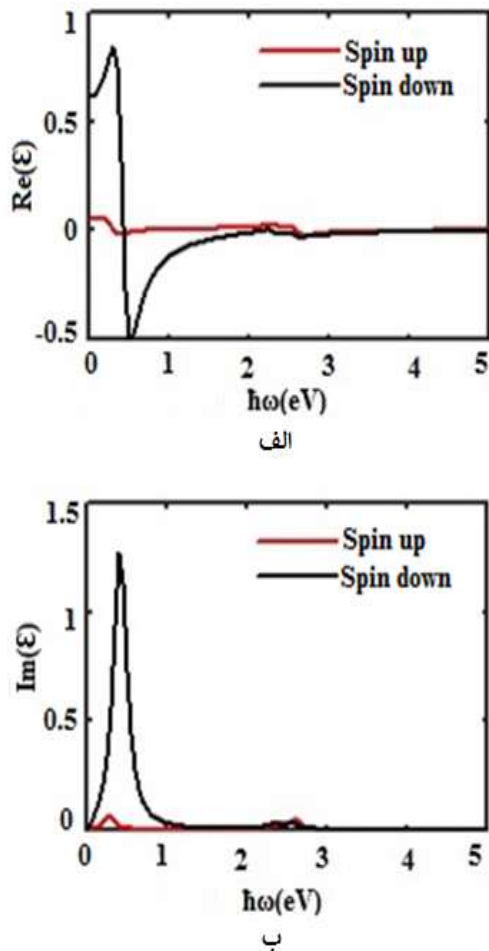
شکل‌های (۷) و (۸)، ساختار نوارهای انرژی پلاریزه اسپینی سولفید گالیم را هنگامی که یک اتم ناخالصی As, Sb, P, N با یک اتم گالیم و گوگرد به ترتیب در موقعیت A یا B جایگزین شده‌باشد، نشان می‌دهند. همانگونه که از شکل (۷) مشاهده می‌گردد در تمامی حالات، جایگزینی اتم گالیم با اتم‌های ناخالصی گروه پنجم در سولفید گالیم سبب شده که سولفید گالیم رفتار نیمه‌هادی غیرمغناطیسی با شکاف نواری غیرمستقیم را نشان دهد. مقادیر انرژی شکاف نوار این ساختارها در جدول ۲ لیست شده‌اند. نتایج نوارهای انرژی پلاریزه اسپینی ساختارهای دارای اتم ناخالصی As, Sb و P, N در موقعیت B (شکل‌های ۸الف-د) نشان می‌دهد که نوارهای اسپینی بالا و پایین بر یکدیگر منطبق نیستند و تبهگنی بین آن‌ها از بین رفته است و این موضوع گویای آن است که اگر اتم گوگرد در موقعیت B با اتم‌های مورد مطالعه گروه ۵ جایگزین شود، ساختارهای غیرمغناطیسی ایجاد می‌شود.



شکل ۷-الف-د) نوارهای انرژی ساختار GaS در حالتی که یک اتم گالیم با یک اتم ناخالصی As, P, N و Sb جایگزین شده‌باشد.

همانگونه که از شکل (۴) مشاهده می‌گردد، هنگامی که یک اتم سولفور از ساختار GaS با یک اتم ناخالصی C, Si, Ge, Sn در موقعیت B جایگزین شود، ساختارهای جدید همه



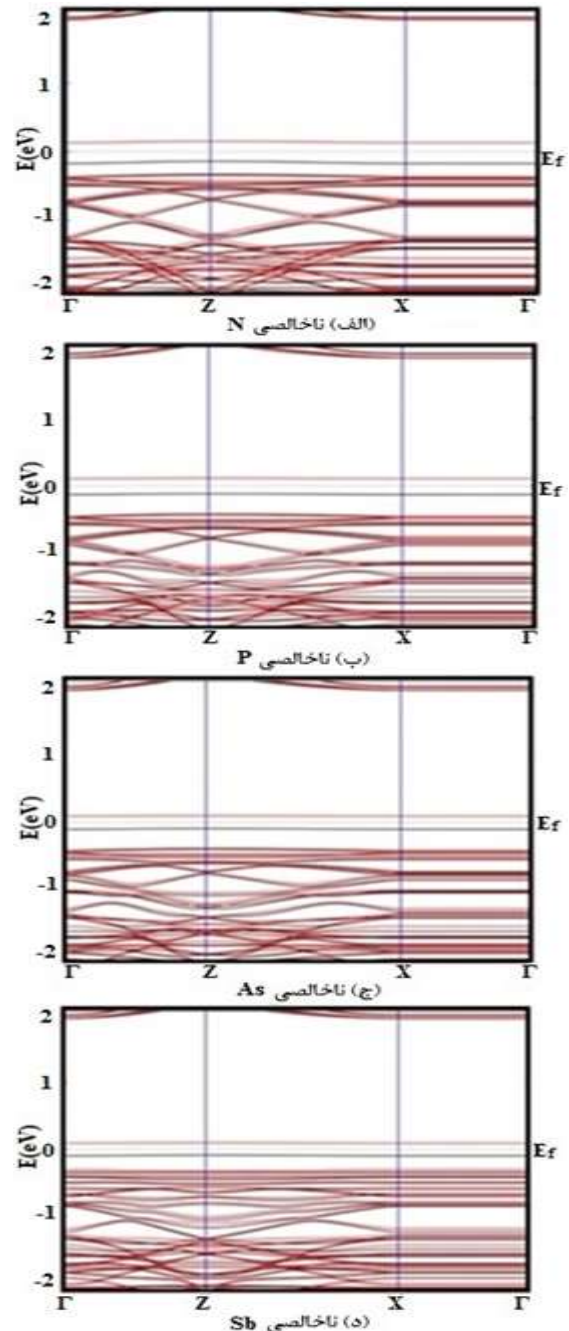


شکل ۹ - الف) قسمت حقیقی و ب) بخش موهومی تابع دی الکتریک برای اسپین بالا و پایین برای ساختار سولفید گالیم آلاینده با اتم Sb در موقعیت B. در این دو شکل منحنی قرمز رنگ اسپین بالا و مشکی رنگ اسپین پایین را نشان می‌دهد. همچنین تنها در حالت جایگزینی با اتم Sb شکاف نوارهای انرژی اسپین‌های بالا و پایین، مستقیم است و همین امر موجبات بکارگیری این مواد در ادوات اسپینترونیک نوری را فراهم نماید.

جدول ۲ انرژی شکاف نوار و ثابت استاتیک ساختار سولفید گالیم تک لایه را در حضور اتم‌های ناخالصی در موقعیت‌های مکانی A و B را ارائه می‌دهد.

شکل (۹) نیز قسمت حقیقی و موهومی ساختار سولفید گالیم آلاینش یافته با اتم ناخالصی Sb را در موقعیت B نشان می‌دهد.

موقعیت مکانی اولین قله در قسمت موهومی برای اسپین بالا قبل از موقعیت مکانی اولین قله برای اسپین پایین است که این موضوع با شکاف‌های نوارهای انرژی مطابقت دارد.



شکل ۸- نوارهای انرژی ساختار GaS هنگامی که یک اتم گوگرد با اتم ناخالصی الف) N، ب) P، ج) As و د) Sb جایگزین می‌گردد.

مطابق نتایج شکل (۸-الف و ج)، شکاف نوارهای انرژی برای اسپین‌های بالا و پایین در حالت جایگزینی اتم گوگرد با اتم N و As غیرمستقیم است ولیکن همانطور که در شکل (۸-ب) (جایگزینی با اتم P) دیده می‌شود، شکاف انرژی اسپین بالا غیرمستقیم و شکاف انرژی اسپین پایین، مستقیم است.

جدول ۲- شکاف انرژی (الکترون‌ولت)، ثابت استاتیک و نوع نیمه‌هادی ساختارهای آراییده مورد مطالعه

نوع نیمه‌هادی مستقیم: D غیرمستقیم: In	ثابت استاتیک	شکاف انرژی (الکترون-ولت)	اتم ناخالصی	
--	--	Gapless	اتم ناخالصی جایگزین با	Si
			یک اتم گالیم در	Ge
			موقعیت A	Sn
				Pb
D	۱/۰۸	۱/۸	اتم ناخالصی جایگزین با	Si
			یک اتم گوگرد در	Ge
			موقعیت B	Sn
				Pb
In	۱/۰۱	۱/۶۰	اتم ناخالصی جایگزین با	N
			یک اتم گالیم در	P
			موقعیت A	As
				Sb
In Up: In Down: D	۰/۴۸ ۰/۰۱	Up: ۲/۰۵ Down: ۰/۴۵	اتم ناخالصی جایگزین با	N
			یک اتم گوگرد در	P
			موقعیت B	As
				Sb
In	۰/۴۲ ۰/۰۳	Up: ۲/۰۱ Down: ۰/۴۶	اتم ناخالصی جایگزین با	N
			یک اتم گوگرد در	P
			موقعیت B	As
				Sb
D	۰/۶۱ ۰/۰۵	Up: ۲/۰۴۷ Down: ۰/۳۹	اتم ناخالصی جایگزین با	N
			یک اتم گوگرد در	P
			موقعیت B	As
				Sb

#### ۴- نتیجه گیری

به منظور مطالعه اثر ناخالصی بر روی ساختار سولفید گالیم تک‌لایه، ویژگی‌های الکترونیکی و نوری این ماده در حضور ناخالصی و در حالت ذاتی با بکارگیری DFT محاسبه گردید. ناخالصی‌های مورد مطالعه در این پژوهش شامل عناصر گروه چهارم و پنجم جدول تناوبی می‌باشند که در موقعیت اتم‌های گالیم و گوگرد قرار گرفتند. نتایج شبیه‌سازی حاکی از آن است که حضور اتم‌های ناخالصی Si، Ge و Sn در مکان اتم گالیم منجر به رفتار فلزی ساختار می‌شود در حالیکه جایگزینی اتم گالیم با اتم ناخالصی Pb، رفتار نیمه‌هادی ساختار را حفظ می‌کند. علاوه بر این حضور

اتم‌های ناخالصی فوق‌الذکر در موقعیت مکانی اتم گوگرد گذاری از نیمه‌هادی غیرمستقیم به نیمه‌هادی مستقیم با انرژی‌های شکاف نوار متفاوتی را موجب می‌شوند که این موضوع در بکارگیری این ساختار برای کاربرد در ادوات اپتیکی حائز اهمیت است. همچنین استفاده از عناصر گروه پنجم جدول تناوبی در موقعیت اتم گوگرد منجر به- مغناطیسی شدن ماده می‌گردد. این یافته‌ها نشان می‌دهند حضور ناخالصی در این ساختار می‌تواند راهی برای مهندسی شکاف نوار و تنظیم خواص اپتیکی و مغناطیسی مواد دوبعدی برای کاربرد در ادوات اپتوالکترونیک و اسپینترونیک فراهم نماید.

#### مراجع

- [1] A. Bhardwaj, G. Sharma, and S. Gupta, "Nanotechnology Applications and Synthesis of Graphene as Nanomaterial for Nanoelectronics", *Nanomaterials and Environmental Biotechnology*, Springer, Cham, 2020, Pp. 251-269.
- [2] A. A. Sagade, and A. Nyayadhish. "A carbon nanotube-graphene nanoribbon seamless junction transistor", *Nanoscale Advances* 2.2, 2020, pp. 659-663.

- [3] M. Nayeri, M. Fathipour, and A. Yazdanpanah Goharrizi, "Behavior of the dielectric function of monolayer MoS<sub>2</sub> under Uniaxial Strain", *Journal of Computational Electronics*, Vol.15, No. 4, 2016, pp. 1388-1392.
- [۴] سمیه فتوحی، "طراحی و مدل سازی اتمی سوئیچ الکترومکانیکی لغزشی چند حالتی مبتنی بر نانو نوارگرافینی آلفا دو لایه"، نشریه مدل سازی در مهندسی، دوره ۱۸، شماره ۶۲، پاییز ۱۳۹۹، ۱۹۱۲. doi: 10.22075/jme.2020.20591.1912.
- [۵] سمیه فتوحی و سید سعید حاجی نصیری، "طراحی اینورتر گرافنی یکپارچه و مدل سازی ماتریس انتقال آن"، نشریه مدل سازی در مهندسی، دوره ۱۸، شماره ۶۱، تابستان ۱۳۹۹، ۱۸۴۶. doi: 10.22075/jme.2020.19686.1846.
- [۶] سید سعید حاجی نصیری و محمدکاظم مروج فرشی و رحیم فائز، "مدل مداری و ماتریس انتقال خطوط ارتباطی نانولوله های کربنی چندلایه ناهمسان باندل شده"، نشریه مدل سازی در مهندسی، دوره ۱۷، شماره ۵۸، پاییز ۱۳۹۸، صفحه ۱۱۳-۱۲۶.
- [7] A. K. Geim, and K. S. Novoselov, "The rise of graphene", *Nanoscience and technology: a collection of reviews from nature journals*, Vol. 6, March 2010, pp 11-19.
- [8] H. Chen, P. Yan, J. Li, C. He, T. Ouyang, C. Zhang, C. Tang, and J. Zhong, "Tunable photoelectronic properties of hydrogenated-silicene/halogenated-silicene superlattices for water splitting", *Journal of Applied Physics*, Vol. 127, No. 8, February 2020, pp. 084301.
- [9] A. Ayatollahi, M.R. Roknabadi, M. Behdani, N. Shahtahmassebi, and B. Sanyal, "Density functional investigations on the adsorption characteristics of nucleobases on germanene nanoribbons", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 117, Vol. 117, March 2020, pp. 113772.
- [10] M. Y. Bakir, H. D. Ozaydin, T. Gorkan, O. U. Akturk, G. Gokoglu, E. Akturk, and S. Ciraci, "Free-standing and supported phosphorene nanoflakes: Shape-and size-dependent properties", *Applied Surface Science*, Vol. 506, March 2020, pp. 144756.
- [11] Y. Suzuki, and K. Watanabe, "Excitons in two-dimensional atomic layer materials from time-dependent density functional theory: mono-layer and bi-layer hexagonal boron nitride and transition-metal dichalcogenides", *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 22, No. 5, 2020, pp. 2908-2916.
- [12] C. Li, Y. Xu, w. Sheng, W. -J. Yin, G. -Z. Nie, and Z. Ao, "A promising blue phosphorene/C 2 N van der Waals type-II heterojunction as a solar photocatalyst: a first-principles study", *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 2, No. 8, February 2020, pp. 5155-5164.
- [13] L. F. Kremer, and R. J. Baierle, "Graphene and silicene nanodomains in a ultra-thin SiC layer for water splitting and hydrogen storage. A first principle study", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 45, No. 22, February 2020, pp. 615-623.
- [14] D. Late, B. Liu, H. S. Matte, and C. N. R. Rao, "Rapid characterization of ultrathin layers of chalcogenides on SiO<sub>2</sub>/Si substrates", *Advanced Functional Materials*, Vol. 22, No. 353, February 2012, pp. 1894-1905.
- [15] P. Hu, Z. Wen, L. Wang, P. Tan, and K. Xiao, "Synthesis of few-layer GaSe nanosheets for high performance photodetectors", *ACS nano*, Vol. 6, No. 7, June 2020, pp. 5988-5994.
- [16] R. H. Almadvari, M. Nayeri, and S. Fotoohi, "Engineering of electronic and optical properties of monolayer gallium sulfide/selenide in presence of intrinsic atomic defects", *Materials Research Express*, Vol. 7, No. 1, January 2020, pp. 015915.
- [17] C. Ren, S. Wang, H. Tian, Y. Luo, J. Yu, Y. Xu, and M. Sun, "First-principles investigation on electronic properties and band alignment of group III monochalcogenides", *Scientific reports*, Vol. 9, No. 1, September 2019, pp. 1-6.
- [18] Y. Ma, Y. Dai, m. Guo, l. Yu, and B. Huang, "Tunable electronic and dielectric behavior of GaS and GaSe monolayers", *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 15, No. 19, Mar 2013, pp. 7098-7105.
- [19] M. Yagmurcukardes, R. T. Senger, F. M. Peeters, and H. Sahin, "Mechanical properties of monolayer GaS and GaSe crystals", *Physical Review B*, Vol. 94, No. 24, December 2016, pp. 245407.
- [20] K. D. Pham, V. T. T. Vi, D. V. Thuan, N. V. Hieu, C. V. Nguyen, H. V. Phuc, B. D. Hoi, L. T. T. Phuong, N.Q. Cuong, D. V. Lu, and N. N. Hieu, "Tuning the electronic properties of GaS monolayer by strain engineering and electric field", *Chemical Physics*, Vol. 524, August 2019, pp. 101-105.
- [21] M. Sharma, and P. K. Ahluwalia, "Exceptionally tunable electronic, optical and transport properties of two dimensional GaS doped with group II and group IV a elements", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Vol. 120, June 2016, pp. 114040.

- [22] Y. Bai, Q. Zhang, G. Luo, Y. Bu, L. Zhu, L. Fan, and B. Wang, "GaS 0.5 Te 0.5 monolayer as an efficient water splitting photocatalyst", *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 19, No.23, May 2017, pp. 15394-15402.
- [23] D. J. Late, B. Liu, j. Luo, A. Yan, H. S. S. R. Matte, M. Grayson, C. N. R. Rao, and V. P. Dravid, "GaS and GaSe ultrathin layer transistors", *Advanced materials*, Vol. 24, No. 26, June 2012, pp. 3549-3554.
- [24] H. Chen, Y. Li, L. Huang, and J. Li, "Influential electronic and magnetic properties of the gallium sulfide monolayer by substitutional doping", *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 119, No. 52, Dec 2015, pp. 29148-29156.
- [25] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. Garcia, J. Junquera, P. Ordejon, and D. S. –Portal, "The SIESTA method for ab initio order -N materials simulation", *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 14, No. 11, March 2002, pp. 2745.
- [26] J. P. Perdew, . Burke, and M. Ernzerhof, "Generalized gradient approximation made simple", *Physical review letters*, Vol. 77, No. 18, October 1996, pp. 3865.
- [27] M. Nayeri, and M. Fathipour, "A numerical analysis of electronic and optical properties of the zigzag MoS<sub>2</sub> nanoribbon under uniaxial strain", *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 65, No. 5, May 2018, pp. 1988-1994.
- [28] H. R. Jappor, "Electronic structure of novel GaS/GaSe heterostructures based on GaS and GaSe monolayers", *Physica B: Condensed Matter*, Vol. 524, November 2017, pp. 109-117.