

پیش‌یابی و بررسی خواص الکتریکی و نوری نانوساختار شبه گرافن ژرمانیم دی سولفید (GeS_2) به روش نظریه‌ی تابعی چگالی

لاله فرهنگ‌متین*^۱، مصیب ناصری^۲، حسین حسن‌بوذری^۱

۱. گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد تهران شمال، صندوق پستی: ۱۶۵۱۱۵۳۳۱۱، تهران - ایران
۲. گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد کرمانشاه، صندوق پستی: ۶۷۱۸۹۹۷۵۵۱، کرمانشاه - ایران

مقاله‌ی پژوهشی

تاریخ دریافت مقاله: ۹۷/۱۱/۲۶ تاریخ پذیرش مقاله: ۹۸/۳/۲۵

چکیده: در این مقاله با استفاده از روش نظریه‌ی تابعی چگالی و بسته نرم‌افزار (کد) محاسباتی وین^۲، نانوساختار دو بعدی جدید ژرمانیم دی سولفید (GeS_2) پیش‌یابی شده است. با محاسبه‌ی انرژی هم‌دوسی و پاشندگی فونونی با استفاده از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو، پایداری ترمودینامیکی و دینامیکی نانوساختار GeS_2 تأیید شد. نتیجه‌های روش شبیه‌سازی نشان داد که تک لایه‌ی ژرمانیم دی سولفید یک نیم‌رسانا با گاف انرژی غیرمستقیم حدود ۰٫۹ eV است که با اعمال کشش و کرنش دو بعدی، قابل تنظیم است. محاسبه‌های نوری نشان داد که تک لایه‌ی پیشنهاده‌ی در ناحیه‌ی دیدگانی در برابر تابش فرودی، جذب و بازتاب کمی دارد در صورتی که ماده‌ی پیش‌گفته‌ی (GeS_2) در ناحیه‌ی فرابنفش، نه تنها جاذب خوبی است بلکه بازتابش نسبتاً بالایی نیز دارد. نتیجه‌های این پژوهش نشان داد که نانوساختار ژرمانیم دی سولفید می‌تواند در ساخت ابزارهای نوری و به طور خاص در ساخت حفاظ نور فرابنفش مورد استفاده قرار گیرد.

کلیدواژه‌ها: ژرمانیم دی سولفید (GeS_2)، ساختار شبه گرافنی، نظریه‌ی تابع چگالی، خواص الکتریکی و نوری

Prognosis and investigation of the electrical and optical properties of pseudo graphene GeS_2 Nano-structure by the method of density functional theory (DFT)

L.F. Matin*¹, M. Naseri², H.H. Bouzari¹

1. Department of Physics, Faculty of Science, Islamic Azad University, North Tehran Branch, P.O.Box: 1651153311, Tehran-Iran
2. Department of Physics, Faculty of Science, Islamic Azad University, Kermanshah Branch, P.O.Box: 6718997551, Kermanshah-Iran

Abstract: In this paper, the new Nano-structure of Germanium disulfide (GeS_2) was forecasted using Wien2k computing software by the method of density functional theory (DFT). The stability of the nanostructure was confirmed by cohesive energy calculation as well as the phonon dispersion calculation. The results of the simulation approach show that the GeS_2 monolayer is an indirect band gap semiconductor with a band gap of about 0.9 eV, which is adjustable by a two-dimensional stretching and strain. Besides, the study of the properties of the optics of GeS_2 shows that it has minimal absorption and reflection in the visible region of the electromagnetic spectrum, while the GeS_2 in the ultraviolet region of the electromagnetic waves is not only a good absorbent but also has a relatively high reflection. The results of this study suggest that the considered structure (GeS_2) has a good application in the new generation of the opto-electronic devices, especially as a UV protection layer.

Keywords: Germanium disulfide (GeS_2), Pseudo graphene structure, Density functional theory, Electrical & optical properties

۱. مقدمه

پیش‌یابی و فراوری مواد جدید با ویژگی‌های الکتریکی و نوری، می‌تواند نقش مهمی در توسعه‌ی ابزارهای الکتریکی و نوری نوین داشته باشد. پس از کشف گرافن در سال ۲۰۰۴ [۱]، خواص منحصر به فرد این ساختار دوبعدی از کربن سبب شد که مطالعه‌های گسترده‌ای برای پیدا کردن نانوساختارهای دوبعدی با ویژگی‌های مشابه گرافن انجام شود.

در سال‌های اخیر نانوساختارهای شبه گرافنی متعددی پیش‌یابی شده و مورد مطالعه قرار گرفته است [۲-۴]. در سال ۲۰۱۴ تک لایه‌ی شبه گرافنی جدیدی از بریلیم کاربید با خاصیت نیم‌رسانایی پیشنهاد شد [۵]. مطالعه‌ی خواص الکتریکی این ماده نشان داده است که این ساختار یک نیم‌رسانای مستقیم با گاف انرژی حدود 1.52 eV است که با اعمال کشش و کرنش دو بعدی به خوبی قابل تنظیم است [۶]. همچنین مطالعه‌ی خواص نوری نانوساختار دو بعدی بریلیم کاربید نشان داد که این ماده دارای خواص نوری منحصر به فردی است که قابلیت کاربرد در ابزارهای جدید نوری را دارد [۷].

شبکه‌ی بلوری بریلیم کاربید دارای ساختار شش گوش (هگزاگونال) و سلول واحد آن، با ثابت شبکه‌ی 2.99 \AA از یک اتم کربن و دو اتم بریلیم تشکیل شده است. شبکه بلوری آن از سه صفحه تشکیل شده است که اتم‌های کربن در صفحه میانی و اتم‌های بریلیم در دو صفحه‌ی مجزا که هر کدام به اندازه‌ی 0.46 \AA از صفحه‌ی میانی فاصله دارند قرار گرفته‌اند.

مقاله با الهام گرفتن از ساختار بلوری تک لایه‌ی بریلیم کاربید، پیش‌یابی یک نانوساختار دو بعدی جدید از ژرمانیم سولفید را گزارش می‌کند. در نانوساختار تک لایه‌ی جدید، اتم ژرمانیم جانشین اتم کربن و اتم گوگرد جانشین اتم بریلیم می‌شود. ضمن بررسی و اثبات پایداری ساختاری و پویای تک لایه‌ی پیشنهادی، خواص الکتریکی و نوری GeS_2 با مطالعه‌های مبتنی بر نظریه‌ی تابعی چگالی مورد بررسی قرار می‌گیرد.

۲. شبیه‌سازی

برای شبیه‌سازی از موج‌های تخت بهبود یافته‌ی خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT)، توسط کد محاسباتی وین ۲ کی^۱، استفاده شد [۸]. همچنین برای بسط پتانسیل تبدیلی-همبستگی، سیستم تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA-PBE) به کار گرفته شد [۹].

عبارت $R_{\text{MT}}K_{\text{max}}$ که در آن R_{MT} کوچک‌ترین شعاع کره‌ی مافین تین^۲ و K_{max} بردار موج قطع است، پارامتر هم‌گرایی است. شعاع کره‌ی مافین تین برابر 7 a.u. (یکای اختیاری و انرژی جداسازی 8 Ry - لحاظ شده است. همچنین با در نظر گرفتن تقریب مونخورست-پک^۳ در محاسبه‌های الکتریکی و نوری به ترتیب مش بندی ساختار شبکه‌ای $12 \times 12 \times 2$ و $30 \times 30 \times 5$ در منطقه‌ی اول بریلوئن^۴ در نظر گرفته شد [۸]. برای انجام دقیق محاسبات در اجرای برنامه‌ی بازه‌ی هم‌گرایی، بار مؤثر برابر با 0.1001 e در نظر گرفته شد.

۳. خواص ساختاری تک لایه‌ی ژرمانیم سولفید

شکل ۱ ابرسلول 3×3 تک لایه‌ی ژرمانیم سولفید را از نمای روبه‌رو و نمای کناری نشان می‌دهد. در ابتدا ساختار سلول واحد نانوساختار گرافنی GeS_2 ، با استفاده از رابطه‌ی حالت ترمودینامیکی بریش-مورناگام^۵ بهینه گردید [۸].

$$E(V) = E_0 + \frac{1}{16} B_0 V_0 \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{r,r} - 1 \right] B'_0 \right\} + \frac{1}{16} B_0 V_0 \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{r,r} - 1 \right] \left[-4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{r,r} \right] \right\} \quad (1)$$

که در آن، V_0 حجم اولیه، V حجم بهینه شده، B_0 مدول ساختار انبوهه و B'_0 مشتق مدول ساختار انبوهه نسبت به فشار است. استفاده از رابطه‌ی ۱ نمودار انرژی بر حسب حجم، برای

1. Wien2k
2. Muffin-tin
3. Monkhorst-pack
4. Brillouin
5. Brich-Murnaghun

آن‌گاه با استفاده از ثابت شبکه‌ی بهینه شده، سلول واحد نانو ساختار تشکیل شد. برای جلوگیری از اثرهای لایه‌های مجاور، خلأ به طول 15 \AA ، در راستای عمود بر صفحه‌ی نانولایه در نظر گرفته شد. در نهایت برای به دست آوردن پایدارترین حالت، سلول واحد بهینه شد و مقدار 2.44 \AA برای پیوند S-Ge به دست آمد.

برای بررسی میزان پایداری ترکیب، انرژی همدوسی^۱ سیستم محاسبه شد.

$$E_{coh} = \frac{E_{GeS_r}^{tot} - mE_S^{isolated} - nmE_{Ge}^{isolated}}{m+n} \quad (2)$$

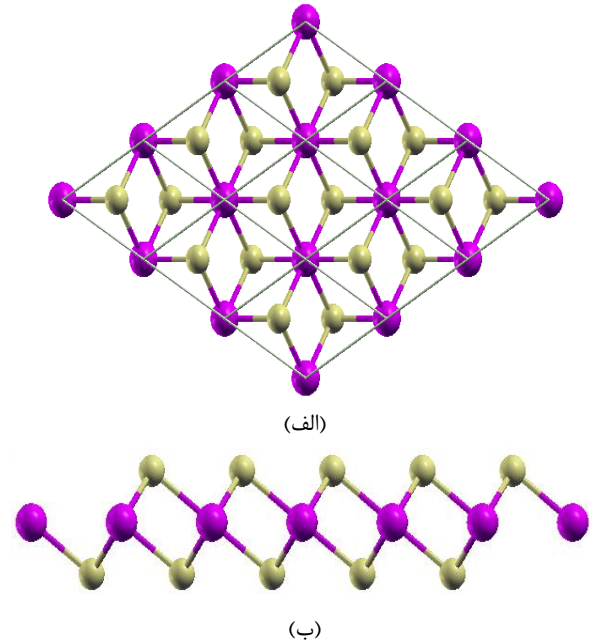
در این جا m و n به ترتیب تعداد اتم‌های گوگرد و ژرمانیم موجود در سلول واحد است. عبارت‌های $E_{GeS_r}^{tot}$ ، $E_S^{isolated}$ و $E_{Ge}^{isolated}$ به ترتیب انرژی کل سلول واحد ژرمانیم دی سولفید، انرژی تک اتم گوگرد و انرژی تک اتم منفرد ژرمانیم و اتم منفرد گوگرد و انرژی سلول واحد ژرمانیم دی سولفید به ترتیب برابر با -20.18 ، -7.58 و -48.83 Ry به دست آمد.

بر اساس رابطه‌ی (۲)، مقدار منفی انرژی همدوسی، به معنی پایدار بودن سیستم است. انرژی همدوسی برابر -4.02 eV بر اتم، محاسبه شد که بیان‌گر پیوند قوی اتم‌های موجود و پایداری ساختار از لحاظ ترمودینامیکی است.

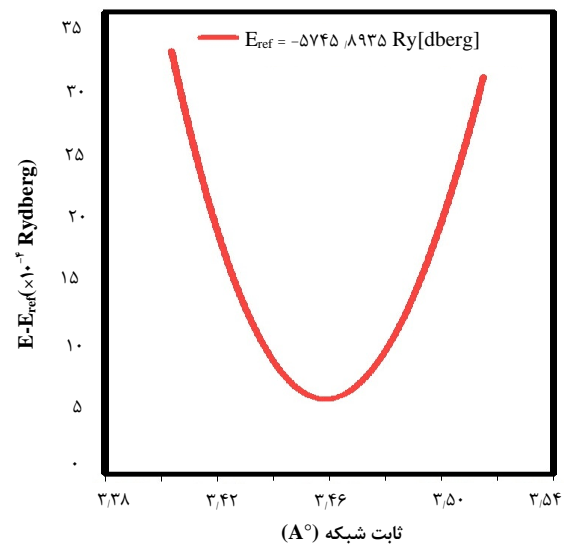
اگرچه محاسبه‌ی انرژی همدوسی به تنهایی برای اثبات پایداری یک ساختار کافی نیست، اما مقدار محاسبه شده برای انرژی همدوسی اتم‌های تک لایه‌ی ژرمانیم دی سولفید نشان می‌دهد که این اتم‌ها کاملاً مقید هستند.

برای بررسی پایداری دینامیکی تک لایه‌ی ژرمانیم دی سولفید نمودار پاشندگی فونونی این ساختار با استفاده از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو ترسیم شد [۱۰، ۱۱]. نمودار پاشندگی فونونی تک لایه‌ی مورد بررسی در شکل ۳ نشان داده شده است. در نمودار شکل ۳ هیچ‌گونه مد منفی (موهومی) دیده نمی‌شود که این موضوع نشان‌گر پایداری دینامیکی این ساختار است. همچنین نمودار پاشندگی فونونی این ساختار به مقدار بسامد بیشینه‌ی حدود 400 cm^{-1} می‌رسد که در مقایسه با نانو-ساختارهای دو بعدی مشابه پایداری خوبی دارد [۱۲].

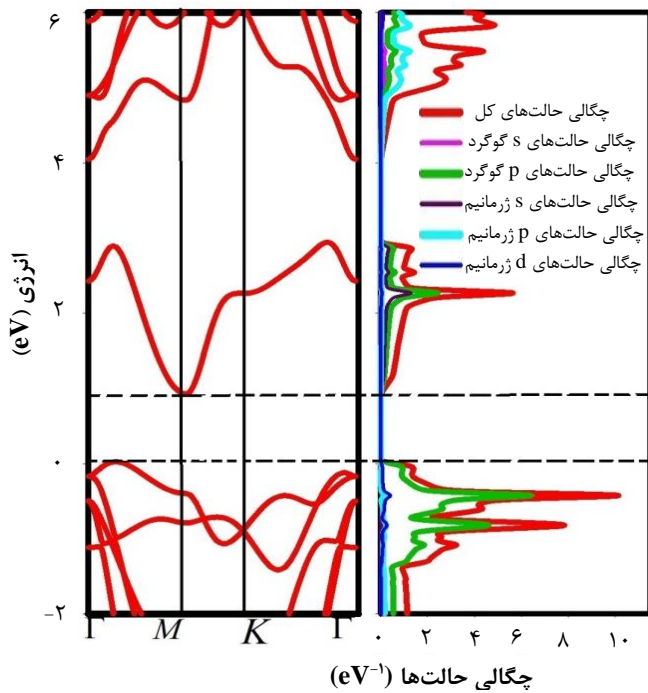
سلول واحد تک لایه‌ی ژرمانیم سولفید به دست می‌آید که نقطه‌ی کمینه‌ی آن بیان‌گر حجم تعادلی یا حجم سلول واحد بهینه شده است؛ با یک محاسبه‌ی ساده، ثابت شبکه‌ی بهینه شده به دست می‌آید. نتیجه‌ی محاسبه‌ها نشان می‌دهد که تک لایه‌ی ژرمانیم سولفید دارای ثابت شبکه‌ی 3.46 \AA است. نمودار انرژی برحسب ثابت شبکه برای سلول واحد ساختار دو بعدی ژرمانیم سولفید در شکل ۲ نشان داده شده است.



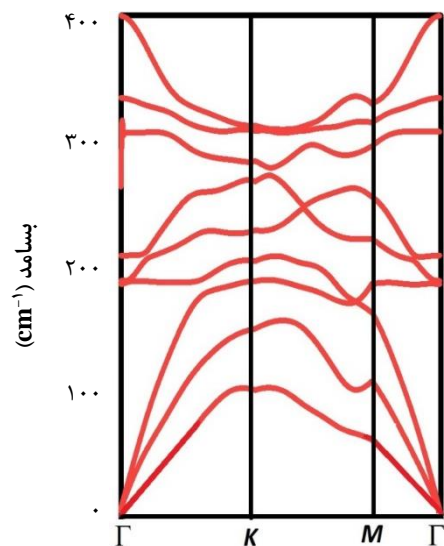
شکل ۱. یک ابربافته‌ی 3×3 تک لایه‌ی ژرمانیم دی سولفید از نمای (الف) روبه‌رو، (ب) جانبی.



شکل ۲. رابطه‌ی بین انرژی و ثابت شبکه‌ی سلول واحد ترکیب ژرمانیم دی سولفید.



شکل ۴. نمودار ساختار نواری و چگالی حالت‌های نانوساختار ژرمانیم دی سولفید.

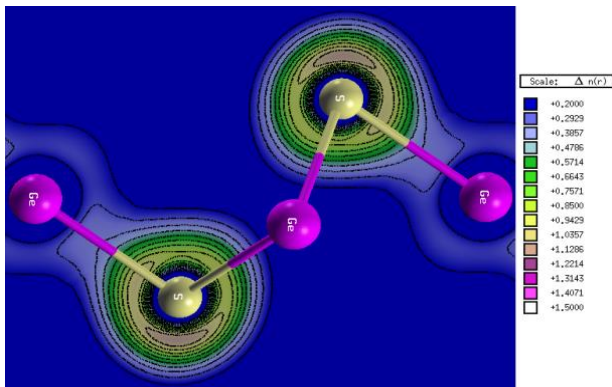


شکل ۵. نمودار پاشندگی فونونی تک لایه‌ی ژرمانیم دی سولفید.

۴. خواص الکتریکی

برای بررسی خواص الکتریکی با استفاده از کد محاسباتی وین ۲ کی [۱۳]، در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته با تابع پر دو- بورک (GGA-PBE) نمودار ساختار نواری سیستم ترسیم شد [۱۴]. شکل ۴ نمودار ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی و جزئی ترکیب GeS_2 را نشان می‌دهد. محاسبه‌ها نشان می‌دهد که ترکیب موردنظر، نیم‌رسانایی با گاف انرژی غیرمستقیم 0.92 eV است. نقطه‌ی بیشینه‌ی ترازهای ظرفیت این ساختار در نقطه‌ای بین نقاط M و Γ قرار دارد. این در حالی است که کمینه‌ی ترازهای رسانش این ترکیب در نقطه‌ی M قرار گرفته است.

با دقت در نمودار چگالی حالت‌ها (نمودار سمت راست در شکل ۴) دیده می‌شود که در نزدیکی تراز فرمی، اروبییتال‌های p اتم گوگرد نقش بیش‌تری در پرشدن ترازها دارند. لازم به‌ذکر است که همان‌گونه که از نمودار چگالی حالت‌ها مشخص است اروبییتال‌های d اتم ژرمانیم نیز نقش مؤثری در پرشدگی ترازهای ظرفیت پیرامون تراز فرمی دارند. این موضوع به‌وضوح در شکل ۵ که بیان‌گر چگالی الکترونی اتم‌های گوگرد و ژرمانیم در صفحه‌ی پیوند ژرمانیم- گوگرد است، دیده می‌شود. با توجه به این که در شکل ۵ الکترون‌های پیوندی تمرکز بسیار بیش‌تری در اطراف اتم گوگرد دارند، انتقال الکترون از اتم ژرمانیم به اتم گوگرد سبب ایجاد نوعی پیوند قطبی بین این دو اتم شده است.



شکل ۶. چگالی الکترون اتم‌های گوگرد و ژرمانیم در صفحه‌ی پیوند S-Ge .

با توجه به ساختار بلوری مشابه در دو ترکیب بریلیم کاربید و ژرمانیم دی سولفید، خواص الکتریکی و نوری آن‌ها در جدول ۱ مقایسه شده است. اگرچه مطابق داده‌های ارائه شده در جدول ۱، تک لایه‌ی بریلیم کاربید از پایداری نسبتاً بالاتری برخوردار است اما گاف الکتریکی نسبتاً پایین و پایداری قابل قبول نانوساختار دو بعدی ژرمانیم دی سولفید، کاربردهای بیش‌تر این ترکیب را در ابزارهای الکتریکی- نوری بیان می‌کند.

جدول ۱. مقایسه‌ی خواص الکتریکی و نوری شبه‌گرافن‌های بریلیم کاربید و ژرمانیم دی‌سولفید [۱۵]

بیشینه بسامد فوتونی (cm^{-1})	ثابت شبکه A°	انرژی همدوسی (eV)	گاف انرژی (eV)	
۴۰۰	۳٫۴۶	-۴٫۰۲	۰٫۹	ژرمانیم دی‌سولفید (GeS_2)
۱۰۲۰	۲٫۹۹	-۴٫۸۴	۱٫۶۵	بریلیم کاربید (Be_2C)

۵. خواص نوری

همان‌طور که در بررسی خواص الکتریکی بیان شد، ژرمانیم دی‌سولفید یک نیم‌رسانا با گاف انرژی ۰٫۹ eV است. برای مطالعه‌ی خواص نوری و بررسی امکان کاربری این نانوساختار در ساخت ابزارهای الکتریکی-نوری، پاسخ خطی این ماده به تابش نور فرودی مورد بررسی قرار گرفت. مهم‌ترین مشخصه‌ی ماده که رفتار آن را در مقابل تابش توضیح می‌دهد تابع دی‌الکتریک مختلط است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\varepsilon(\omega) = R_\varepsilon + iI_\varepsilon \quad (۳)$$

که در آن R_ε و I_ε قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط را نشان می‌دهند. قسمت موهومی این تابع چنین تعریف می‌شود.

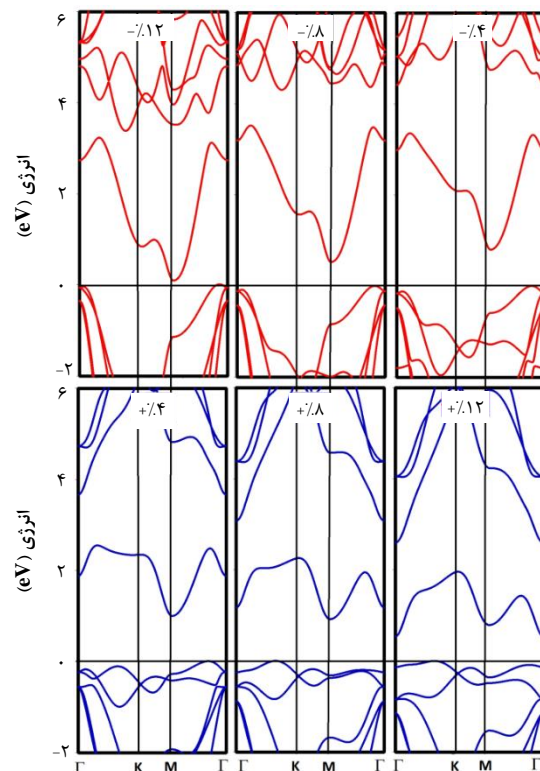
$$I_\varepsilon = \frac{h^2 e^2}{\pi^2 m^2 \omega} \sum_n \int d_k \langle \psi^{c_n}_k | P^\alpha | \psi^{v_n}_k \rangle \times \langle \psi^{v_n}_k | P^\beta | \psi^{c_n}_k \rangle \delta(E^{c_n}_k - E^{v_n}_k - \omega) \quad (۴)$$

در این جا عبارت P ماتریس دو قطبی و V_n و C_n حالت‌های اولیه و نهایی هستند. با استفاده از رابطه‌ی کرامرز-کرونینگ قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک را می‌توان برحسب قسمت موهومی آن به شکل زیر نوشت [۱۶]:

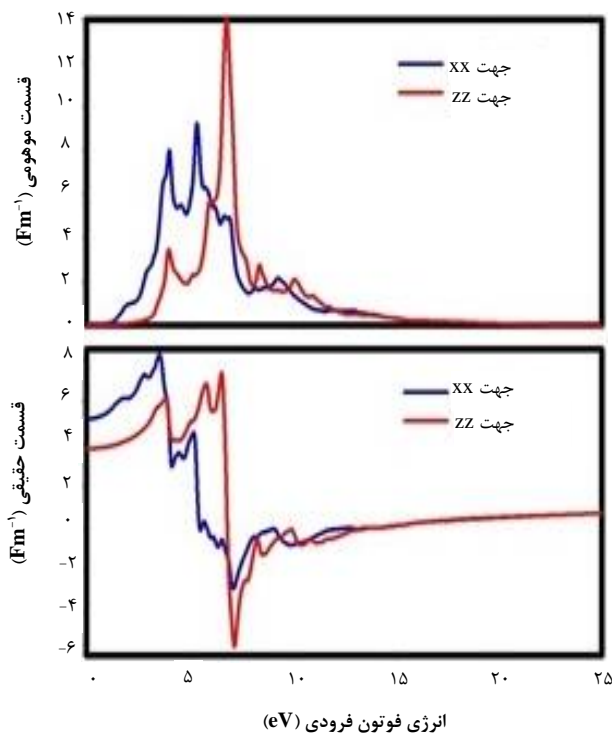
$$R_\varepsilon(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} P_r \int_0^\infty \frac{\omega' I_\varepsilon(\omega')}{\omega^2 - \omega'^2} \omega' d\omega' \quad (۵)$$

در این جا عبارت P_r مقدار کوشی است. با داشتن قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط ضریب شکست $n(\omega)$ ضریب خاموشی $K(\omega)$ ، ضریب انعکاس $R(\omega)$ ، ضریب جذب ماده، به سادگی به دست می‌آید [۱۷]. شکل ۷ قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط را در دو راستای قطبش X و Y نشان می‌دهند. با توجه به نمودار شکل ۷ مؤلفه‌ی

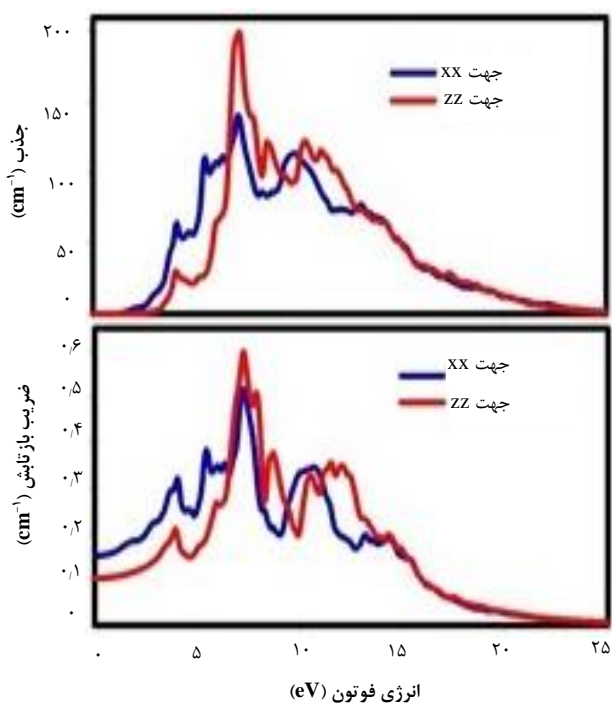
برای بررسی بیش‌تر خواص ساختاری و الکتریکی نانوساختار دو بعدی ژرمانیم دی‌سولفید، رفتار آن، در برابر اعمال تنش و کرنش دو بعدی مورد مطالعه قرار گرفت. شکل ۶ چگونگی تغییر ترازهای انرژی نانوساختار دو بعدی پیشنهادی را در شرایط اعمال کشش و کرنش دو بعدی نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که با اعمال کرنش دو بعدی، مقدار گاف انرژی نیم‌رسانای ژرمانیم دی‌سولفید کاهش پیدا می‌کند و با اعمال کرنش دو بعدی، بیش‌تر از ۱۲٪ این ماده به حالت فلزی تغییر فاز می‌دهد. این در حالی است که با اعمال کشش دو بعدی، گاف انرژی در ابتدا اندکی بزرگ‌تر و سپس با آهنگ مشخصی کوچک‌تر می‌شود. محاسبه‌ها نشان می‌دهند که گاف انرژی این ساختار با اعمال کشش و کرنش دو بعدی قابل تنظیم است که از این موضوع می‌توان در طراحی و ساخت حسگرهای مکانیکی استفاده کرد.



شکل ۶. تغییرات ساختار نواری نانوساختار ژرمانیم دی‌سولفید با اعمال کشش و کرنش دو بعدی.



شکل ۷. نمودار تغییرات مؤلفه‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک برحسب انرژی فوتون فرودی.



شکل ۸. نمودار تغییرات ضریب بازتابش و ضریب جذب در دو راستای قطبش برحسب انرژی فوتون فرودی.

حقیقی تابع دی‌الکتریک مختلط، رفتار ناهمسانگرد قابل ملاحظه‌ای در دو جهت قطبیدگی X و Y نشان می‌دهد. آستانه‌ی شروع جذب نوری از حدود ۱ eV آغاز می‌شود که این موضوع در توافق با گاف انرژی ترکیب نیم‌رسانا است. همچنین مقادیر ایستای مؤلفه‌ی حقیقی تابع دی‌الکتریک در دو راستای قطبیدگی X و Y به ترتیب حدود ۳/۸ و ۵/۳ هستند. ضمناً ملاحظه می‌شود که بیشینه‌های نسبی مختلفی، در نمودار قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک مختلط دیده می‌شود. به‌طور ویژه سه قله‌ی مشخص در نمودار مؤلفه‌ی حقیقی تابع دی‌الکتریک در نقطه‌های ۳/۵، ۵/۵ و ۶/۵ eV دیده می‌شود. این بیشینه‌ها که ناشی از انتقال‌های الکترونی بین ترازها هستند، به صورتی دیگر در مؤلفه‌ی موهومی تابع دی‌الکتریک خطی نیز دیده می‌شوند.

همان‌گونه که در شکل ۷ ملاحظه می‌شود، مؤلفه‌ی حقیقی تابع دی‌الکتریک خطی در انرژی حدود ۷ eV به کمینه‌ی خود (یک مقدار منفی) می‌رسد. مقدار منفی مؤلفه‌ی حقیقی تابع دی‌الکتریک مختلط بیان‌گر آن است که در بازه‌ی انرژی مورد نظر، فوتون فرودی تا حد زیادی توسط این ماده بازتابانده می‌شود. به عبارتی در این ناحیه ماده‌ی مورد مطالعه نوعی رفتار فلزگونه از خود نشان می‌دهد.

برای درک بیش‌تر رفتار نوری ترکیب GeS_2 ضریب بازتابش و ضریب جذب نانوساختار شبه گرافنی مورد مطالعه قرار گرفت. تغییرات ضریب بازتابش و ضریب جذب ماده در دو راستای قطبش، برحسب انرژی فوتون فرودی در شکل ۸ نشان داده شده است. با توجه به شکل ۸ نانوساختار تحت بررسی در ناحیه‌ی دیدگانی در جهت قطبش Z نه تنها جذب ناچیزی (تقریباً صفر) دارد بلکه بازتابش آن نیز بسیار کم و در حدود ۱۰٪ تا ۱۲٪ است. این موضوع پیشنهاد می‌کند که این نانوساختار می‌تواند به عنوان لایه‌ی شفاف ضد بازتابش در سطح سلول‌های خورشیدی مورد استفاده قرار گیرد. همچنین ملاحظه می‌شود که این ماده در ناحیه‌ی فرابنفش توامان ضریب جذب و ضریب بازتابش نسبتاً بالایی دارد. به عبارتی GeS_2 در ناحیه‌ی فرابنفش می‌تواند به‌عنوان حفاظ موج الکترومغناطیسی فرابنفش مورد استفاده قرار گیرد.

۶. نتیجه‌گیری

در این مقاله خواص الکتریکی و نوری نانوساختار شبه گرافنی GeS_2 با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسباتی وین ۲کی مورد مطالعه قرار گرفت. با محاسبه‌ی انرژی همدوسی و محاسبه‌ی نمودار پاشندگی فونونی نشان داده شد که نانوساختار مورد مطالعه، پایداری قابل قبولی دارد. این موضوع امکان رشد این ساختار را به صورت تجربی پیش‌بینی می‌کند. هم‌چنین محاسبه‌های مربوط به خواص الکتریکی ماده، خاصیت نیم‌رسانایی با گاف انرژی غیرمستقیم حدود 0.9 eV را پیش‌بینی می‌کند که این گاف انرژی با اعمال اثرات مکانیکی قابل تنظیم است. نانوساختار GeS_2 قابلیت بالایی برای استفاده در ابزارهای الکترونیک نوری دارد. از طرف دیگر محاسبه‌ها و شبیه‌سازی‌های نوری این نانوساختار نشان داد که این ماده در ناحیه‌ی دیدگانی ضریب جذب و ضریب بازتابش ناچیزی دارد. بنابراین، این ساختار می‌تواند در فن‌آوری ساخت سلول‌های خورشیدی مورد استفاده قرار گیرد. هم‌چنین ضریب جذب و ضریب بازتابش بالای این نانوساختار در ناحیه‌ی فرابنفش، امکان استفاده از آن را در طراحی و ساخت لایه‌های محافظ امواج فرابنفش فراهم می‌کند.

مراجع

- J. Jalilian, M. Safari, *Tuning of the electronic and optical properties of single-layer boron nitride by strain and stress*, *Diamond. Relat. Mater.*, **66** (2016) 163-170.
- Xia Long, et al. *A strongly coupled graphene and FeNi double hydroxide hybrid as an excellent electrocatalyst for the oxygen evolution reaction*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** (2014) 1-6.
- M. Naseri, J. Jalilian, *Electronic and optical investigations of Be_2C monolayer: Under stress and strain conditions*, *Materials Research Bulletin*, **88** (2017) 49-55.
- J. Jalilian, *Electronic and optical properties of beryllium carbide monolayer: First principles calculations*, *Optik*, **127** (2016) 12063-12068.
- H.J. Monkhorst, J.D. Pack, *Special points for Brillouin-zone integrations*, *Phys. Rev. B* **13** (1995) 5188.
- F. Birch, J. Geophys, *Finite strain isotherm and velocities for single-crystal and polycrystalline NaCl at high pressures and 300°K* , *Res. B* **83** (1978) 1257-1268.
- Paolo Giannozzi, et. al, *Quantum Espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials*, *J. Phys. Condens. Matter.* **21** (2009) 395502.
- S. Zhang, et al. *Atomically Thin Arsenene and Antimonene: Semimetal-Semiconductor and Indirect-Direct Band-Gap Transitions*, *Angew. Chem. Int. Edit.*, **127**, (2015) 3155- 3158.
- Huake Liu, et al. *Disparate Strain Dependent Thermal Conductivity of Two-dimensional Penta-Structures*, *Nano Lett.* **16** (6), (2016) 3831-3842.
- F. Li, et al. *Flexible structural and electronic properties of a pentagonal B2C monolayer via external strain: A computational investigation*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **17**, (2015) 24151-24156.
- P. Blaha, *Ion-induced np inversion of conductivity in TiNiSn compound for thermoelectric applications*, *WIEN2k 17.1* (Release 07/03/2017).
- M. Naseri, et al. *A new stable polycrystalline Be_2C monolayer: A direct semiconductor with hexacoordinate carbons*, *Physics Letters A*, (2018) 2144-2148 (2018).
- J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Generalized gradient approximation made simple*, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865-3868.
- H. Ehrenreich, M.H. Cohen, *Self-Consistent Field Approach to the Many-Electron Problem*, *Phys. Rev.* **115** (1959) 786-79.
- K.S. Novoselov, et. al. *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*, *Firsov Science*, **306** (5696) (2004) 666-669.
- Hayk, H. Nersisyan, et al. *Polymer assisted approach to two-dimensional (2D) nanosheets of B_4C* , *Chem. Eng. J.* **281** (2015) 218- 226.
- Hyun Jeong, et al. *Semiconductor-Insulator-Semiconductor Diode Consisting of Monolayer MoS_2 , h-BN, and GaN Heterostructure*, *ACS Nano.* **9** (2015) 10032-10038.

COPYRIGHTS

©2021 The author(s). This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution (CC BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, as long as the original authors and source are cited. No permission is required from the authors or the publishers.



استناد به این مقاله

لاله فرهنگ‌متین، مصیب ناصری، حسین حسن‌بوذری (۱۳۹۸)، پیش‌یابی و بررسی خواص الکتریکی و نوری نانوساختار شبه گرافن ژرمانیم دی سولفید (GeS_2) به روش نظریه‌ی تابعی چگالی، ۸۹، ۳۹-۴۵

DOI: 10.24200/nst.2019.1024

Url: https://jonsat.nstri.ir/article_1024.html