



## بررسی اثر آلایدگی اتم تیتانیوم بر تک لایه $C_3N$

عرفان چولکی<sup>ID</sup>، برهان ارغوانی‌نیا<sup>ID\*</sup>، سحر رضایی<sup>ID</sup>، سجاد پارسامهر<sup>ID</sup>

گروه فیزیک، واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه - ایران

\*Email: b.arghavani@gmail.com

### مقاله پژوهشی

تاریخ دریافت مقاله: ۱۴۰۳/۰۲/۰۱ تاریخ بازنگری مقاله: ۱۴۰۳/۰۵/۱۴ تاریخ پذیرش مقاله: ۱۴۰۳/۰۵/۳۱

### چکیده

در این مقاله با استفاده از محاسبات اصول اولیه در چارچوب نظریه تابعی چگالی به بررسی خواص ساختاری، الکترونی، اپتیکی و ترموالکتریکی اتم تیتانیوم آلایده شده به تک‌لایه  $C_3N$  با استفاده از کد محاسباتی Wien2K پرداخته شده است. مطالعه خواص الکترونی رفتار فلزی را برای این ساختار دوبعدی نشان می‌دهد. خواص اپتیکی نیز نشان‌دهنده ناهمسانگردی اپتیکی این ترکیب برای دو راستای  $x$  و  $z$  است. بررسی خواص ترموالکتریکی تک‌لایه  $C_3N@Ti$  با استفاده از نظریه نیمه‌کلاسیکی بولتزمن نشان می‌دهد که این تک‌لایه نه تنها دارای ضریب سیبک پایین بلکه دارای بازده ترموالکتریکی بسیار کوچکی می‌باشد که دارای کاربرد ترموالکتریکی محدودی می‌باشد.

**کلیدواژه‌ها:** تک‌لایه  $C_3N$ ، ناهمسانگردی، ضریب سیبک، خواص اپتیکی

## Investigating the effect of titanium atom doping on $C_3N$ monolayer

E. Cholaki, B. Arghavani Nia\*, S. Rezaee, S. Parsamehr

Department of Physics, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah - Iran

### Research Article

Received: 20.04.2024,

Revised: 04.08.2024,

Accepted: 21.08.2024

### Abstract

This article investigates the structural, electronic, optical, and thermoelectric properties of a titanium atom doped into a  $C_3N$  monolayer using the Wien2K computational code and first principles calculations within the density functional theory framework. The study of electronic properties reveals metallic behavior in this two-dimensional structure. Optical properties demonstrate optical anisotropy in both the  $x$  and  $z$  directions. Analysis of the thermoelectric properties of the  $C_3N@Ti$  single layer using the semi-classical Boltzmann theory indicates that this layer not only possesses a low Seebeck coefficient but also exhibits very small thermoelectric efficiency, limiting its thermoelectric application.

**Keywords:**  $C_3N$  monolayer, Anisotropy, Sibeck coefficient, Optical properties



## ۱. مقدمه

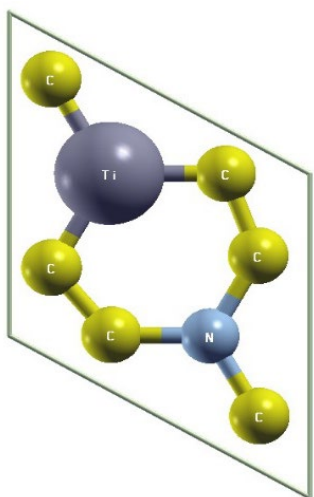
مطالعات گسترده‌ای روی خانواده مواد دوبعدی g-C<sub>x</sub>N<sub>y</sub> انجام دادند آن‌ها دریافتند که ساختار g-C<sub>۲</sub>N تک‌لایه نیمه‌رسانا بوده و دارای انرژی جذب بالاتری از گرافن است. آن‌ها همچنین نشان دادند که تک‌لایه g-C<sub>۲</sub>N برای تشخیص مولکول‌های قند بسیار مفید است [۲۱-۲۳]. فتوکاتالیستی یک استراتژی امیدوارکننده برای به دست آوردن انرژی پاک است به همین علت ساختارهای ساخته شده از کربن و نیتروژن در این زمینه مورد توجه قرار گرفته شده است [۲۴]. ژئوفنگ و همکاران [۲۵] برای اولین بار فتوکاتالیست‌های چند پیوندی بدون فلز که از پلیمرهای مزوج (تحت فشار) و کربن نیتريد پلیمری (CN) تشکیل شده است را به عنوان یک رویکرد امیدوارکننده برای کاهش آلودگی‌های هسته‌ای اعلام داشتند. اتم تیتانیوم یک کاندید عالی برای آرایش نانولوله‌ها، گرافن و ساختارهای کربن نیتريد به‌شمار می‌آید. آلیاژهای تیتانیوم و کامپوزیت‌های آن‌ها که نشان‌دهنده مواد معمولی با کارایی بالا هستند، به طور گسترده در صنعت و هوافضا استفاده می‌شوند [۲۶]. تاینکلی و همکاران [۲۷] با آرایش اتم تیتانیوم بر ساختار g-C<sub>۲</sub>N<sub>۴</sub> نشان دادند که آزمایش‌های فعالیت فتوکاتالیستی نمونه Ti-C<sub>۲</sub>N<sub>۴</sub>-۱۰۰ بهترین عملکرد کاتالیزوری را دارد. در این مقاله ما با انجام آلایندگی اتم تیتانیوم بر تک‌لایه C<sub>۲</sub>N، خواص ساختاری، الکترونیکی، اپتیکی و ترموالکتریکی مورد بررسی قرار گرفته شد، نتایج یک استراتژی متفاوت برای تحقق آرایش تک‌اتمی ارائه می‌دهد و بینش جدیدی را در ارتباط با ساختار ویژگی اتم تیتانیوم نشان می‌دهد.

## ۲. روش محاسبات

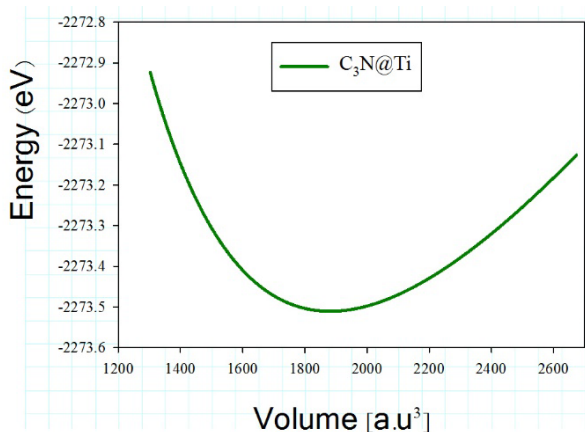
محاسبات با استفاده از کد Wien۲K بر پایه نظریه تابعی چگالی انجام شده است [۲۸]. این روش با انتخاب کره‌های مافین تین اطراف هر یک از اتم‌ها، فضای درون هر یاخته را به دو ناحیه تقسیم می‌کند. تابعی چگالی، پتانسیل و توابع موج الکترون‌های ظرفیت در درون کره‌ها برحسب هماهنگ‌های شبکه و در خارج از آن‌ها برحسب امواج تختی که بردار موج آن‌ها از تقارن‌های گروه فضایی پیروی می‌کنند، بسط داده می‌شوند. برای انجام محاسبات، بهینه کردن و تعیین پارامترهای اولیه ضروری است. توابع پایه در ناحیه بین جایگاهی با مقدار  $R_{MT}K_{max}=8$  شعاع کوچک‌ترین کره مافین تین و  $K_{max}$  بردار موج قطع برای بسط تابع موج برحسب امواج تختی و برای بسط پتانسیل از پارامتر بهینه  $G_{max}=12$  استفاده شده است. چگالی‌های الکترونی و پتانسیل داخل کره‌های مافین تین برحسب توابع هارمونیک با شعاع قطع  $l_{max}=10$  و در ناحیه بین

در سال‌های اخیر توسعه فناوری نانو و علم نانو تحول شگرفی را در ساخت انواع نانو مواد دوبعدی ایجاد کرد که مورد توجه و علاقه‌مندی بسیاری از محققین قرار گرفته است که این علاقه‌مندی به خلق موفقیت‌آمیز گرافن و شبکه لانه زنبوری اتم‌های کربن انجامید و ساخت این مواد برای انواع برنامه‌های کاربردی منجر به انقلابی در طراحی دستگاه‌های الکترونوری گردید [۱]. نتایج علمی یک گروه تحقیقاتی در سال ۲۰۱۵ نشان داد که یک نانو ساختار دوبعدی کربن به شکل پنج ضلعی وجود دارد که از لحاظ خواص ساختاری پایدار می‌باشد [۲]. از جمله آن مواد دوبعدی می‌توان به بور نیتريد شش ضلعی (h-BN) سیلیکون، فسفرن، و بوروفن اشاره کرد [۳-۴]. به تازگی پلی‌آنیلین دوبعدی (C<sub>۲</sub>N) که دارای خواص شگفت‌انگیز حرارتی، مکانیکی، الکترونیکی و مغناطیسی می‌باشد ساخته شده است [۵-۶]. C<sub>۲</sub>N را می‌توان به عنوان یک مورد خاص از N آلاییده شده به گرافن مشاهده کرد موادی که ابتدا با حالت جامد تک‌بلورهای هگزامین بنزن تری هیدروکلرید در اثر حرارت ایجاد می‌شود [۷]. اگرچه شباهت زیادی بین صفحات C<sub>۲</sub>N و گرافن وجود دارد، اما وجود اتم‌های نیتروژن باعث بروز تفاوت‌های برجسته در خواص الکترونیکی آن می‌شود، این ساختار به دلیل ویژگی‌های خاص خود کاربرد زیادی در صنایع مختلف پیدا کرده است [۸]. مطالعات گسترده‌ای در خصوص خواص ساختاری مواد دوبعدی دوپ شده با اتم‌های مختلف آن‌ها گزارش شده است [۹-۱۰] که گرافن آلاییده شده به نیتروژن مانند تک‌لایه نیتريد‌های کربن g-C<sub>۲</sub>N<sub>۴</sub> [۱۱] و C<sub>۲</sub>N [۱۲] و C<sub>۲</sub>N [۱۳] به دلیل ویژگی‌های فیزیکی جذاب توجه محققان را به خود جلب کرده است [۱۴]. تحقیقات زیادی در مورد تک‌لایه C<sub>۲</sub>N وجود دارد [۱۵-۱۶] که رفتار ساختاری، مکانیکی، نوری و کاتالیزوری را با استفاده از روش‌های مختلف مانند ورود ناخالصی‌های مختلف بررسی می‌کند. علاوه بر این، مولایی و همکاران [۱۷] خواص مکانیکی تک‌لایه BC<sub>۲</sub> دوپ شده با B و نانو صفحات C<sub>۲</sub>N دوپ شده با N را مورد مطالعه قرار دادند، و چن و همکاران [۱۸] خواص الکترونیکی و مکانیکی تک‌لایه C<sub>۲</sub>N را بررسی کردند. همچنین، بافکری و همکاران [۱۹] خواص الکترونیکی و نوری تک‌لایه C<sub>۲</sub>N دوپ شده با B را بررسی کردند که منجر به خواص الکترونیکی و نوری قابل کنترل می‌شود. با در نظر گرفتن اکسیداسیون CO برای تک‌لایه Fe-C<sub>۲</sub>N توسط رائو و همکاران [۲۰]، رفتار کاتالیزوری این ساختار ارزیابی شد. حسین و همکاران نیز

که در آن، انرژی کل محاسبه شده برای ساختار  $C_7N@Ti$  و  $E_C$  و  $E_N$  به ترتیب انرژی اتم کربن و نیتروژن می‌باشد،  $N_C$  و  $N_N$  تعداد اتم‌های کربن و نیتروژن را نشان می‌دهد. نتایج این محاسبه در جدول ۱ لیست شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود مقدار منفی به دست آمده دلیلی بر پایداری ترمودینامیکی این ساختار می‌باشد. محاسبات فونونی این ساختار قبلاً محاسبه شده که نشان می‌دهد این ساختار در حالت خالص هیچ‌گونه شاخه منفی ندارد و کاملاً پایدار می‌باشد [۳۳].



شکل ۱. سلول واحد اولیه  $C_7N@Ti$  [۱۶].



شکل ۲. نمودار تغییرات انرژی بر حسب حجم.

اتم‌ها با استفاده از بسط فوریه محاسبه می‌گردند. انرژی جداسازی حالت‌های مغزه از ظرفیت برابر با ۶ Ry - انتخاب شده است. ساختار شش ضلعی تک‌لایه  $C_7N@pure$  نیمه‌رسانای غیرمغناطیسی با گاف کوچک ۰/۵ الکترون ولت است که با کارهای قبلی مطابقت خوبی دارد [۲۹-۳۱]. ابرسلولی با ابعاد  $2 \times 2 \times 2$  ایجاد کرده‌ایم که شامل ۶۴ اتم می‌باشد، از آن تعداد، ۴۸ اتم کربن و ۱۶ اتم نیتروژن است. برای آرایش یک اتم نیتروژن را حذف نموده و یک اتم تیتانیوم (فلز واسطه) جایگزین کرده‌ایم که غلظت آلاینده معادل ۶٪ می‌باشد.

### ۳. نتایج

#### ۱.۳. خواص ساختاری

سلول واحد  $C_7N$  خالص یک ساختار هگزاگونالی با تعداد ۶ اتم کربن و ۲ اتم نیتروژن که در گروه فضایی  $191-PGnmm$  متبلور می‌شود. همان‌طور که در شکل ۱ نشان داده شده است مشاهده می‌شود ساختار اتمی تک‌لایه  $Ti$  آلاینده شده که یک شبکه شش ضلعی مسطح است در شکل ۱ نشان داده شده است. ثابت شبکه  $C_7N@Ti$  و طول پیوند  $Ti-C$  و  $C-C$  در جدول ۱ لیست شده است.

با دوپینگ اتم  $Ti$  به جای اتم  $N$  به این ساختار همان‌طور که در جدول ۱ مشاهده شد طول پیوندها دچار تغییرات می‌شود هر چقدر شعاع اتمی دوپ شده نسبت به نیتروژن بیشتر باشد طول پیوند اتم دوپ شده با اتم‌های همسایه دوم بیشتر می‌شود که این تغییر در ساختار باعث تغییرات در خواص فیزیکی این ماده می‌شود. به منظور بررسی ویژگی‌های این ساختار، محاسبات ساختار الکترونی آن را بهینه کردیم، همان‌طور که در شکل ۲ نشان داده شده است.

انرژی چسبندگی مقدار انرژی مورد نیاز برای شکستن اتم‌های یک جامد به شکل اتمی منفرد آن است. که یکی از کمیت‌های فیزیکی مهم برای بیان پایداری گرمایی می‌باشد، موادی مانند دمای ذوب، دمای جوش، و غیره [۳۲] برای بررسی پایداری شیمیایی این ساختار به محاسبه انرژی چسبندگی آن می‌پردازیم که از رابطه ۱ به دست می‌آید.

$$E_{(c)} = - \frac{E_{tot}^{C_7N@Ti} - [N_C E_C^{single} + N_N E_N^{single}]}{N_C + N_N} \quad (1)$$

جدول ۱. ثابت‌های شبکه (a, b)، انرژی کل (E)، حجم تعادلی (V)، مدول حجمی (B)، مشتق مدول حجمی (B')، گشتاور مغناطیسی کل ( $M_{tot}$ )، انرژی چسبندگی، طول پیوند

| ساختار    | a (bohr)              | E (Ry) | V (Bohr <sup>3</sup> ) | B (Gpa) | B'   | $M_{tot}$ (μB) | Ec (Kj/mol) | طول پیوند Å             |
|-----------|-----------------------|--------|------------------------|---------|------|----------------|-------------|-------------------------|
| $C_7N@Ti$ | a = ۹/۲۹<br>b = ۱۸/۸۹ | ۲۲۷۳/۵ | ۶۲۲/۱۸                 | ۱۰۰/۲۲  | ۲/۷۵ | ۰              | -۲۴/۱۲      | Ti-C ۱/۶۵۰<br>C-C ۱/۳۲۸ |

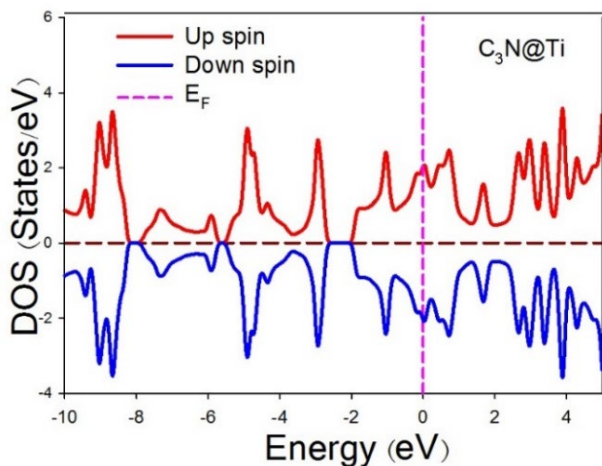


### ۲.۳ خواص الکترونی

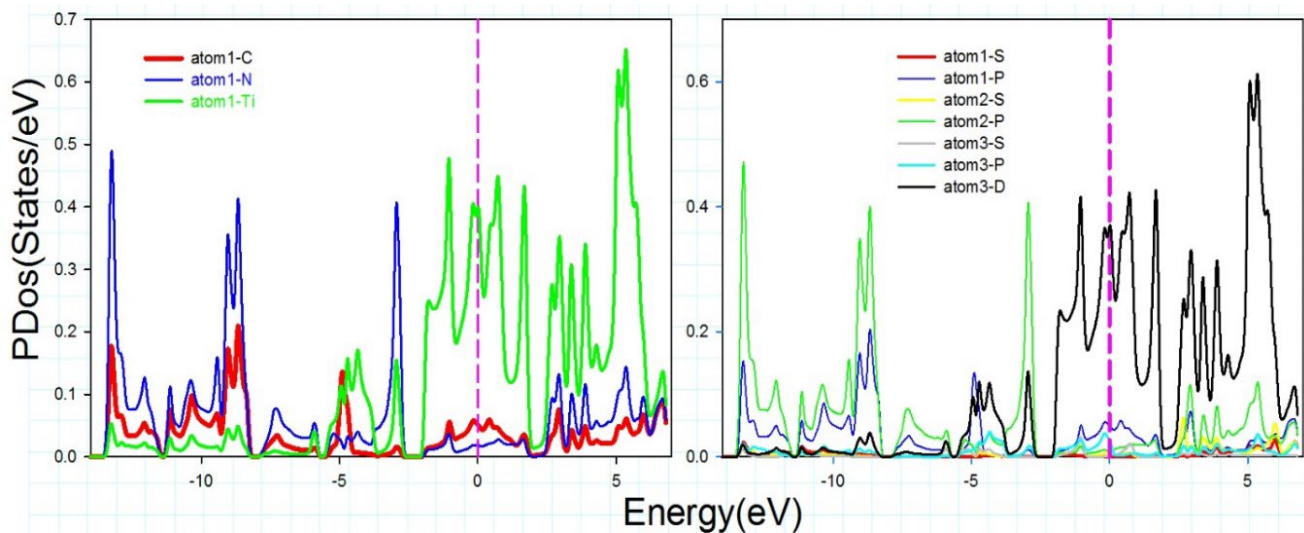
توزیع انرژی الکترون‌های نوار رسانش و ظرفیت از عوامل اساسی در تعیین خواص الکترونی جامدات است. از آن‌جا که تعداد حالت‌های الکترونی در یک نوار الکترونی (رسانش یا ظرفیت) بسیار زیاد است، برای بیان تعداد این حالت‌ها از مفهوم چگالی حالت‌ها استفاده می‌شود [۳۴]. همچنین ساختار نواری می‌تواند اطلاعاتی در مورد ماهیت بلور، فلز یا غیرفلز بودن، عدم یا وجود گاف انرژی، اندازه و نوع گاف انرژی، ارائه دهد.

چگالی حالات ساختار آلاینده شده در شکل ۳ نشان داده شده است. نمودار حالات الکترونی در حالت اسپین بالا و پایین سطح فرمی را قطع کرده و یک فلز در اثر آلاینش ساختار C<sub>3</sub>N با اتم تیتانیوم حاصل می‌شود، همچنین این نمودار نشان می‌دهد که این ساختار غیرمغناطیسی می‌باشد و با توجه به این‌که در انرژی‌های بالا تعداد حالات و احتمال حضور الکترون نسبت به ناحیه فرمی و والانس افزایش یافته ماده خاصیت فلزی قوی پیدا می‌کند.

جهت بررسی خواص الکترونی و نوع پیوندها و همچنین تأثیر اتم‌های مهمان مخصوصاً در سطح فرمی نمودار چگالی حالت‌های جزئی اتم‌های تشکیل‌دهنده را برای این ساختار در شکل ۴ می‌توان مشاهده کرد. برای ساختار C<sub>3</sub>N@Ti سهم اتم مهمان بیشتر از دو اتم دیگر می‌باشد و در اتم مهمان سهم

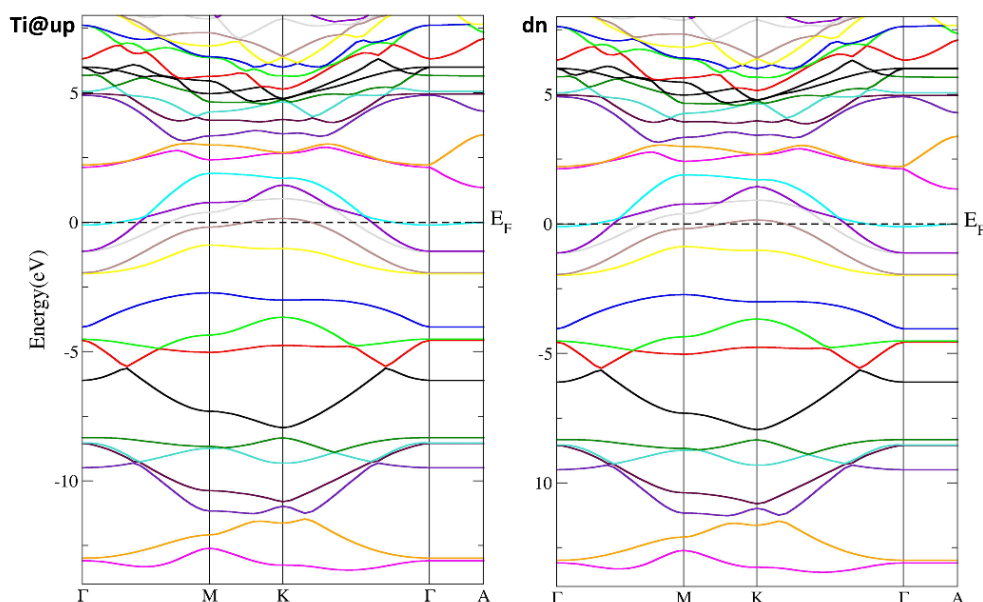


شکل ۳. نمودار چگالی حالت‌های اتم C<sub>3</sub>N@Ti برای اسپین بالا و پایین.



شکل ۴. نمودار چگالی حالت‌های جزئی ساختار C<sub>3</sub>N@Ti.





شکل ۵. ساختار نواری برای حالت اسپین بالا و برای حالت اسپین پایین.

### ۳.۳ خواص اپتیکی

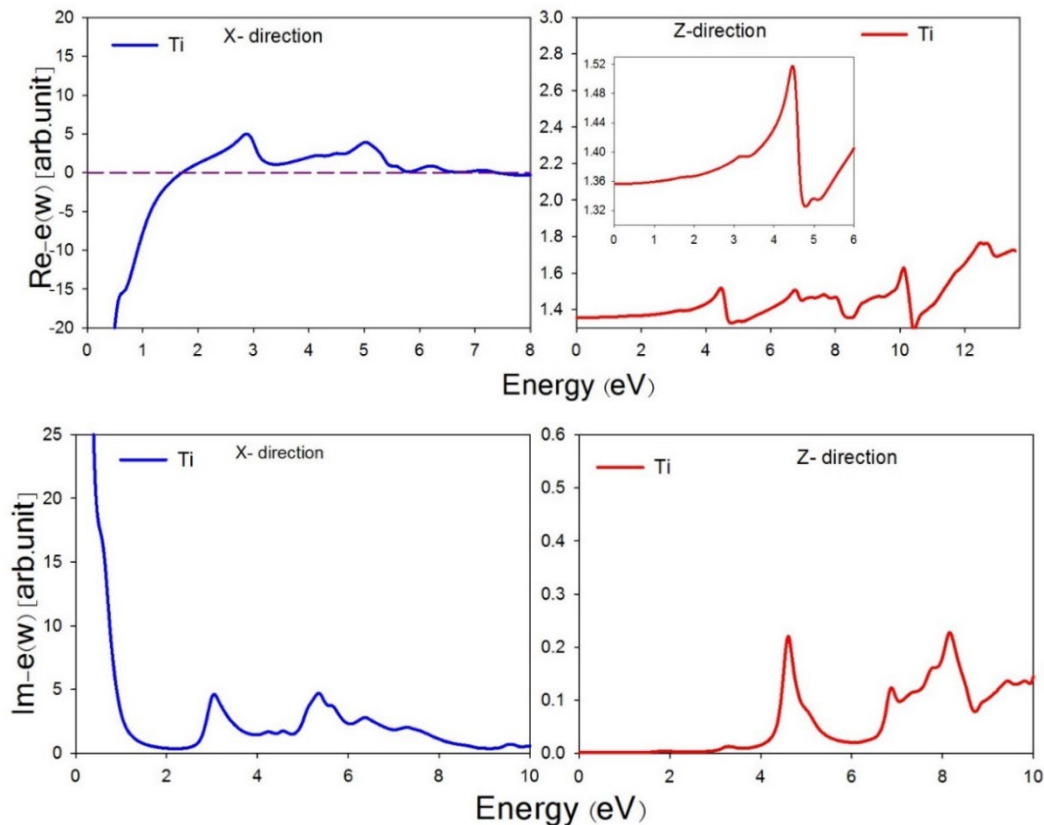
تابع دی الکتریک مختلط مهم‌ترین پارامتر برای بیان ویژگی‌های اپتیکی یک ماده است که در واقع پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیس با بسامد  $(\omega)$  را نشان می‌دهد، که با معادله  $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$  بیان می‌شود [۳۵]. که در آن  $i\epsilon(\omega)$  بخش موهومی و  $\epsilon(\omega)$  بخش حقیقی تابع دی الکتریک است. این تابع دارای سهم‌گذارهای درون نواری و گذار بین نواری می‌باشد که گذار درون نواری اهمیت ویژه‌ای در ساختارهای فلزی به شمار می‌آید. قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک در شکل ۶ آورده شده است. با توجه به تقارن کریستالی این ترکیب پاسخ‌دهی اپتیکی آن در دو راستای X و Y کاملاً متقارن است و برای بیان نمودارهای تنها راستای X را مدنظر قرار می‌دهیم. اما رفتار اپتیکی در راستای Z با دو راستا دیگر متفاوت می‌باشد، همان‌طور که از شکل مشخص شده است تفاوت در نمودارها راستای X و Z ناهمسانگردی بلور را نشان می‌دهد یعنی رفتار بلور برای فوتون‌های ورودی در این جهت‌ها نسبت به یکدیگر متمایز خواهد بود. در نواحی که قسمت حقیقی تابع دی الکتریک دارای قله است ساختار بیشترین شفافیت، کمترین جذب و رسانندگی را نشان می‌دهد.

هنگامی که اتم Ti در ساختار C<sub>4</sub>N آرایش می‌شود به علت تفاوت در سطح انرژی اوربیتال‌ها و بزرگ بودن اتم Ti نسبت به اتم کربن و نیتروژن در ساختار C<sub>4</sub>N این اتم به عنوان یک عامل اختلالی عمل کرده و سبب کاهش تبه‌گنی ترازها انرژی می‌شود به همین دلیل دیگر خبری از قله‌های تیز مربوط به گذار

تب‌ه‌گنی در این ساختار نیست. مقدار استاتیکی قسمت حقیقی در راستای X به سمت منفی بی‌نهایت میل می‌کند و در راستای Z این مقدار ۱/۳۶ می‌باشد که نشان می‌دهد با تغییر جهت زاویه نور تابیده شده در راستای Z رفتاری تقریباً نیم‌رسانا دارد و در راستای X رفتاری به شدت فلزی را از ماده انتظار داریم. با افزایش انرژی فوتون بیشینه مقدار در راستای Z در انرژی ۱۲ الکترون‌ولت برابر با مقدار ۱/۸ می‌باشد. در راستای X به علت رفتار فلزی تا محدوده ۲ الکترون‌ولت قسمت حقیقی منفی است و پس از آن نوساناتی اندک دارد که بیشینه آن در انرژی ۲/۸ الکترون‌ولت مقدار ۵ می‌باشد. قسمت موهومی تابع دی الکتریک در شکل ۶ نشان داده شده است. در راستای Z در انرژی صفر مقدار صفر دارد و در راستای X به سمت مثبت بی‌نهایت میل می‌کند که نشان دهند رفتار فلزی این ساختار می‌باشد. در راستای Z تا محدوده انرژی ۳ الکترون مقدار موهومی تابع دی الکتریک صفر است که نشان‌دهنده گاف انرژی در این محدوده می‌باشد، با افزایش مقدار انرژی این مقدار افزایش می‌یابد که در انرژی ۴/۸۶ به بیشینه مقدار خود ۰/۲ می‌رسد که نشان‌دهنده رفتار نیم‌رسانایی از دید اپتیکی می‌باشد. در هر دو راستا در محدوده انرژی ۳ تا ۸ الکترون‌ولت شاهد چندین پیک هستیم که معرف گذار بین نواری هستند و از ۸ الکترون‌ولت به بعد شاهد کاهش گذار می‌باشیم، می‌توان از خواص فلزی و نیم‌رسانایی از دید اپتیکی در این دو راستا بهره برد [۳۶].







شکل ۶. تصویر بالا قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در راستای X و Z و تصویر پایین قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک در راستای X و Z برای ساختار C<sub>2</sub>N.

۱ تا ۳ الکترون ولت بیشترین اتلاف انرژی وجود دارد و شدت انتقال بین نواری صفر است. با تغییر شیب ناگهانی که در قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در راستای Z رخ داده باعث به وجود آمدن قله‌های در قسمت تابع اتلاف می‌شود. در نمودار بخش موهومی راستای Z در محدوده نور مرئی گاف وجود دارد که این امر رفتار نمودار اتلاف در راستای Z را تأیید می‌کند. قله‌های پهنی که در انرژی‌های بالاتر در گستره انرژی ۵ تا ۱۰ الکترون‌ولت در راستای X و ۶/۵ تا ۱۰ الکترون‌ولت در راستای Z دیده می‌شود مربوط به قله‌های پلاسمونی الکترون  $\pi+\sigma$  است که اثرات برهم‌کنش درون تیوبی هم نقش مهمی در تابع اتلاف انرژی در حضور ناخالصی دارد. در راستای Z مواد در فرکانس‌های پایین‌تر از فرکانس پلاسما به عنوان نیم‌رسانا و در فرکانس بالاتر از آن به عنوان فلز رفتار می‌کنند. شاخص‌ترین قله در تابع اتلاف به عنوان پیک پلاسمونی شناخته می‌شود که بیانگر برانگیختگی جمعی چگالی بار الکترونی در بلور است که در راستای X قله‌های در محدوده انرژی ۲ الکترون‌ولت و در راستای Z در محدود انرژی ۱۰ الکترون‌ولت قله‌های شاخص مشاهده می‌شوند. بهترین پاسخ اپتیکی در هر دو راستا در ناحیه IR می‌باشد. همان‌طور که انتظار داریم جذب از یک انرژی آستانه که لبه جذب نامیده می‌شود آغاز و با افزایش انرژی فوتون فرودی افزایش می‌یابد. بنابراین قله‌های اصلی در نودار

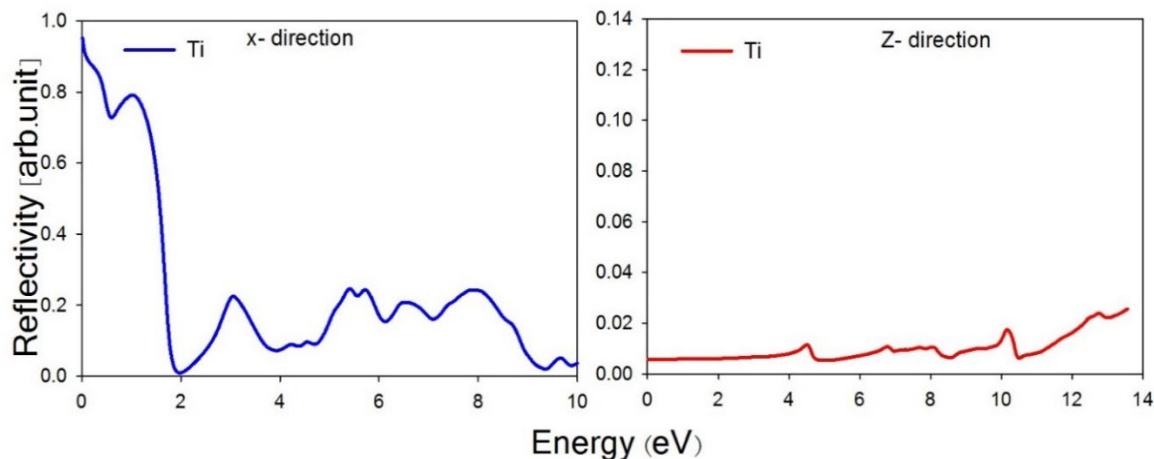
شکل ۷ نمودار بازتابندگی برحسب انرژی را نشان می‌دهد در ناحیه‌های که انرژی که قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک منفی می‌باشد بازتابندگی بیشترین مقدار را نشان می‌دهد و مشاهده می‌کنیم در راستای X و Z ضریب انعکاسی تغییر می‌کند و این به علت ناهمسانگردی بلور می‌باشد و همچنین با توجه به شکل ۸ در این ناحیه ضریب شکست کمترین مقدار را نشان می‌دهد. از طرفی نواحی که در قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در راستای X و Z بیشینه است، ضریب شکست نیز بیشترین مقدار خود را دارد به طور کلی رفتار ضریب شکست و تابع دی‌الکتریک مشابه‌اند. تابع دی‌الکتریک استاتیک برای راستای X، ۲۵- برای همچنین برای راستای Z این مقدار ثابت و برابر ۱/۳۵ می‌باشد. برای این ساختار ریشه در راستای X در دامنه ۱/۸۰، ۵/۷۶، ۷ و ریشه در راستای Z، ۱۰/۶۳ الکترون‌ولت جایی که ترکیب به نور فرودی پاسخ نمی‌دهد.

تغییرات تابع اتلاف انرژی الکترون برحسب انرژی فوتون ورودی برای راستای X و Z در شکل ۹ ارائه شده است. طیف اتلاف انرژی الکترون برای دو راستای X و Z در انرژی‌های صفر الکترون‌ولت شروع می‌شود. در راستای X در انرژی‌های پایین یک قله بزرگ رؤیت شده که این قله به انتقال‌های اپتیکی مربوط می‌شود در انرژی‌های که تابع اتلاف بیشینه است شدت انتقال بین نواری کمینه است و بالعکس یعنی در محدود انرژی

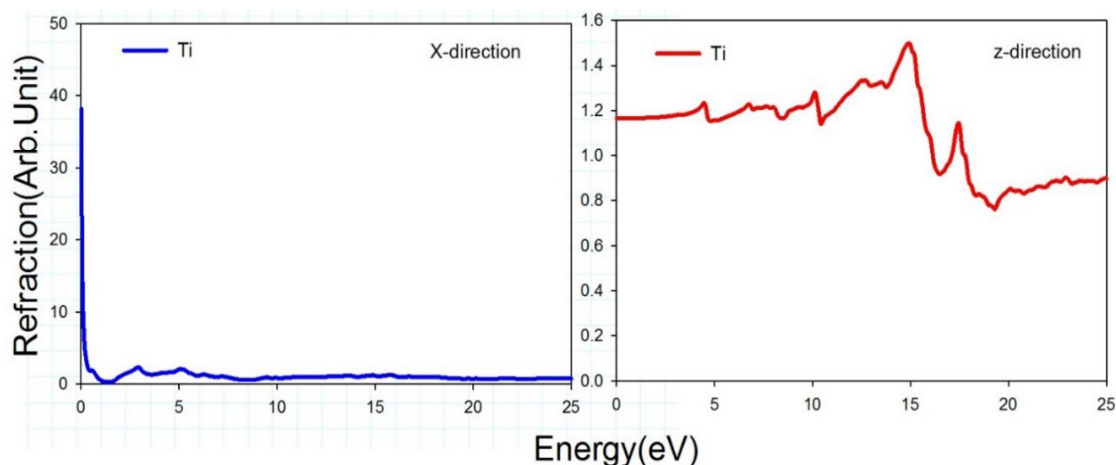


جذب در راستای X و Z به ترتیب در انرژی ۰/۵ و ۴ الکترون‌ولت رخ داده‌اند. ناهمسانگردی اپتیکی در بررسی رفتار طیف جذب مشهود می‌باشد. در راستای X قله‌های در محدوده ناحیه نور مرئی در انرژی‌های ۱ و ۳ الکترون‌ولت مشهود است درحالی‌که در راستای Z در ناحیه نور مرئی قله‌ای مشاهده نمی‌شود.

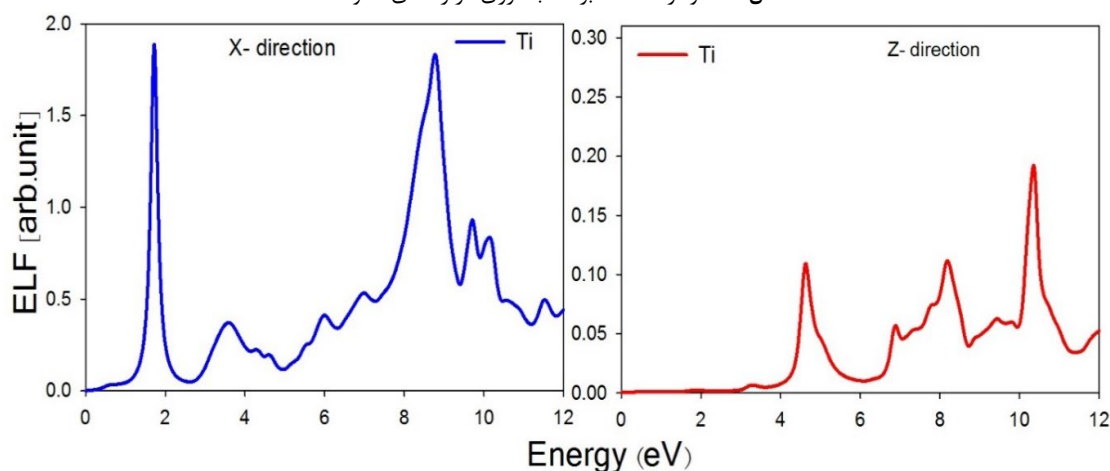
جذب در انرژی‌های مشابه با قله‌های اصلی در نمودار بخش موهومی تابع دی‌الکتریک واقع می‌شوند، به منظور استفاده در کاربردهای اپتیکی قله‌های که در ناحیه نور مرئی (حدود ۱/۷ تا ۳ الکترون‌ولت) واقع می‌شوند مورد توجه قرار می‌گیرند. نمودار مربوط به ضریب جذب در شکل ۱۰ نشان داده شده است. لبه



شکل ۷. نمودار بازتابندگی برحسب انرژی در راستای X و Z.

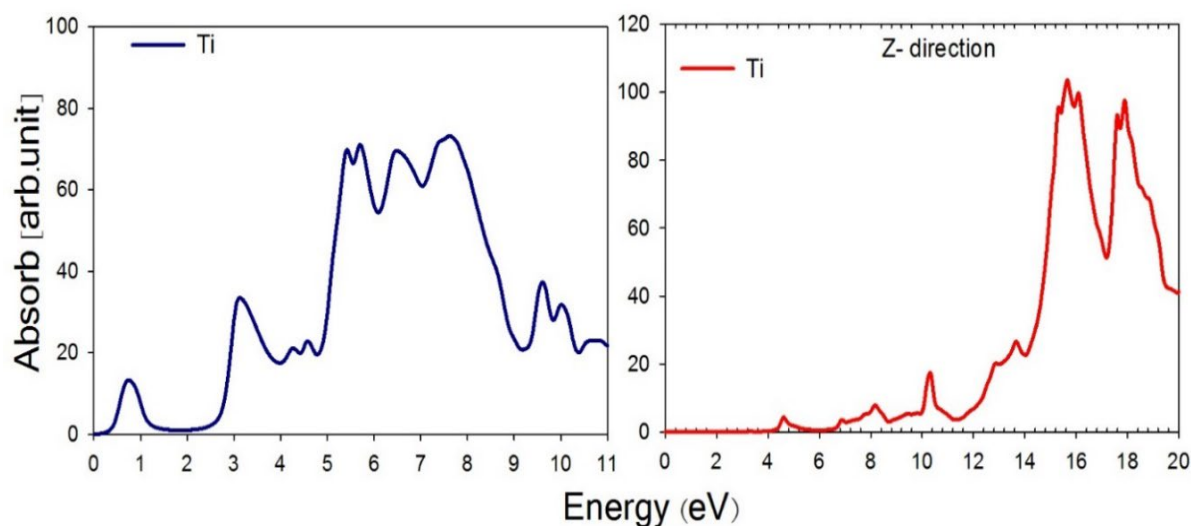


شکل ۸. نمودار شکست برحسب انرژی در راستای X و Z.



شکل ۹. نمودار اتلاف برحسب انرژی در راستای X و Z.





شکل ۱۰. نمودار جذب برحسب انرژی در راستای X و Z.

ضریب سیبک تک‌لایه C<sub>۳</sub>N@Ti را برحسب تابعی از دما (۸۰ تا ۸۰۰ کلوین) نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش دما به ۲۰۰ کلوین ضریب سیبک روندی کاهشی دارد و از ۳۰  $\mu\text{V/K}$  به ۲۰  $\mu\text{V/K}$  می‌رسد، سپس روندی افزایشی داشته و به ازای دما ۴۰۰ کلوین به ۲۶  $\mu\text{V/K}$  می‌رسد. در ادامه با افزایش دما، شاهد کاهش ضریب سیبک هستیم. قابل ذکر است که ضریب سیبک تک‌لایه C<sub>۳</sub>N@Ti همانند اکثر فلزات دارای مقدار کمتر از ۱۰۰  $\mu\text{V/K}$  می‌باشد، در نتیجه توانایی کمتری برای تبدیل اختلاف دما کوچک به اختلاف پتانسیل بزرگ دارد. رسانندگی الکتریکی و رسانندگی گرمایی الکتریکی برحسب تابعی از دما به ترتیب در شکل ۱۲ (ب و ث) به نمایش گذاشته شده است. اگرچه با افزایش دما شاهد کاهش رسانندگی الکتریکی هستیم، رسانندگی گرمایی الکتریکی تا دمای ۳۰۰ کلوین افزایش و سپس روندی نزولی نشان می‌دهد. بر طبق شکل ۱۲-د که ضریب ارزشی تک‌لایه C<sub>۳</sub>N@Ti را نشان می‌دهد، بیشینه ZT در دمای ۶۰۰ کلوین به مقدار ناچیز ۰٫۸۰ می‌رسد. خاصیت فلزی تک‌لایه C<sub>۳</sub>N@Ti، پیش‌بینی سهم الکترون‌ها در رسانندگی گرمایی و الکتریکی با استفاده از قانون تجربی ویدمان-فرانتس برای فلزات و مقدار ناچیز ZT محاسبه شده، بیانگر محدود بودن کاربرد این تک‌لایه در حوزه ترموالکتریک می‌باشد.

در شکل ۱۱ ضریب خاموشی نیز رسم شده است. در نمودار ضریب خاموشی قله‌ها نشانگر میزان پاشندگی فوتون در انرژی موردنظر می‌باشد. اگر موج الکترومغناطیسی به سادگی در ماده نفوذ کند ضریب خاموشی کوچک و اگر به سختی عبور کند ضریب خاموشی بزرگ خواهد بود. نخستین قله ضریب خاموشی نزدیک به ناحیه نور مرئی در راستای X در انرژی ۱٫۷ ظاهر می‌شود که می‌تواند ناشی از گذار بین نواری از حالت اشغال شده زیر تراز فرمی به حالت اشغال نشده در نوار رسانش باشد. در برخورد موج الکترومغناطیسی با ماده بخشی از فوتون‌ها فرودی جذب و بخشی بازتابش می‌شوند. میزان بازتابندگی به ضرایب شکست و خاموشی بستگی دارد.

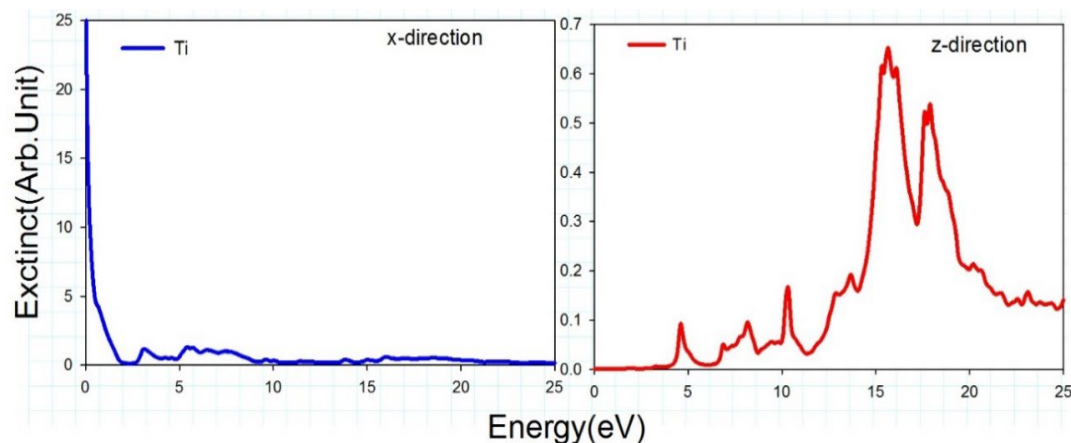
#### ۴.۳ خواص ترموالکتریکی

در اینجا با استفاده از نظریه تراپردی بولتزمن، تقریب زمان واهلش ثابت و اطلاعات به دست آمده از ساختار نواری به بررسی خواص ترموالکتریکی تک‌لایه دوبعدی C<sub>۳</sub>N@Ti پرداخته می‌شود که در شکل ۱۲ نشان داده شده است. بازده مواد ترموالکتریک توسط رابطه ۲ بیان می‌گردد:

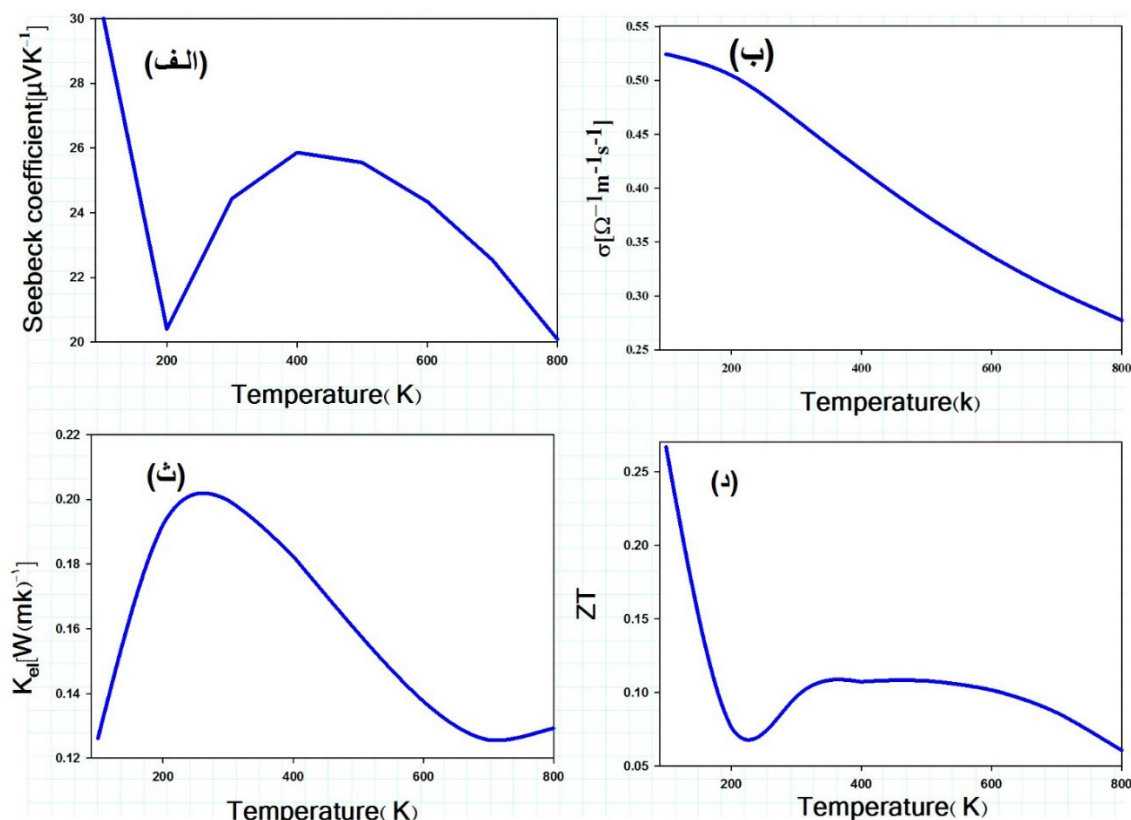
$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{K} \quad (2)$$

که،  $S$ ،  $\sigma$ ،  $K$  و  $T$  به ترتیب بیانگر توان گرمایی، رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی و دما می‌باشند. شکل ۱۲-الف





شکل ۱۱. نمودار ضریب خاموشی بر حسب انرژی در راستای X و Z.



شکل ۱۲. نمودار ضریب سبیک (الف)، رسانندگی الکتریکی (ب)، رسانندگی گرمایی (ث) و دما (د).

#### ۴. نتیجه‌گیری

بلور برای فوتون‌های ورودی در این جهت‌ها نسبت به یکدیگر متمایز خواهد بود که منجر به بروز خاصیت دوشکستگی در این ترکیبات می‌شود. بهترین پاسخ اپتیکی در هر دو راستا در ناحیه IR می‌باشد. ماده ترموالکتریک با بازده بالا علاوه بر ضریب سبیک بالا باید دارای رسانندگی الکتریکی بالایی نیز باشد، بررسی پارامترهای ترموالکتریکی تک‌لایه  $C_7N@Ti$  بر حسب تابعی از دما نشان داد که نه تنها این تک‌لایه دارای ضریب سبیک کمتر از  $100 \mu V/K$  می‌باشد بلکه رسانندگی الکتریکی آن نیز با افزایش دما روندی کاهشی دارد که این عوامل منجر به ضریب ارزشی (ZT) کمتر از ۰/۱ برای این تک‌لایه گردید.

در این کار براساس روش تابعی چگالی ساختار  $C_7N$  آلاینده شده با اتم Ti مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج حاصل از محاسبات نشان می‌دهند با دوپینگ اتم Ti به جای اتم N به این ساختار همان‌طور که در جدول ۱ مشاهده شد طول پیوندها دچار تغییرات می‌شود هر چقدر شعاع اتمی دوپ شده نسبت به نیتروژن بیشتر باشد طول پیوند اتم دوپ شده با اتم‌های همسایه دوم بیشتر می‌شود که این تغییر در ساختار باعث تغییرات در خواص فیزیکی این ماده می‌شود. تفاوت در نمودارها راستای X و Z ناهمسانگردی بلور را نشان می‌دهد یعنی رفتار



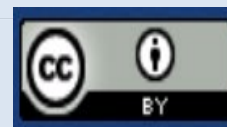
## مراجع

1. Fiori G, Bonaccorso F, Iannaccone G, Palacios T, Neumaier D, Seabaugh A, Banerjee S.K, Colombo L. Electronics based on two dimensional materials. *Nature nanotechnology*. 2014;9.
2. Zhang S, Zhou J, Wang Q, Chen X, Kawazoe Y, Jena P. Penta-graphene: A new carbon allotrope. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2015;112.
3. Miró P, Marth A, Thomas H. An atlas of two-dimensional materials. *Chemical Society Reviews*. 2014;43.
4. Behzad S. Calculation of band structure, dielectric function and electron energy loss spectrum of bilayer h-BN under biaxial strain. *Journal of Research on Many-body Systems*. 2019;9.
5. Geim A.K, Grigorieva I.V. Van der Waals heterostructures. *Nature*. 2013;499.
6. Deng D, Novoselov K.S, Fu Q, Zheng N, Tian Z, Bao X. Catalysis with two-dimensional materials and their heterostructures. *Nature Nanotech*. 2016;11.
7. Che W, Cheng W, Yao T, Tang F, Liu W, Su H, Huang Y, Liu Q, Liu J, Hu F, Pan Z, Sun Z, Wei Sh. Fast Photoelectron Transfer in (Cring)- $C_3N_4$  Plane Heterostructural Nanosheets for Overall Water Splitting. *J. Am. Soc.* 2017;139.
8. Novoselov K.S, Geim A.K, Morozov S.V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S.V, Grigorieva I.V, Firsov A.A. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*. 2004;306.
9. Eshkalak K.E, Sadeghzadeh S, Molaei F. Interfacial Thermal Resistance Mechanism for the Polyaniline( $C_3N$ )-Graphene Heterostructure. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2020;124.
10. Cholaki E, Nia B.A, Rezaee S, Parsamehr S. Calculation of structural, electronic, magnetic and optical properties of  $C_3N$  monolayer substituted with magnesium. *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* 2024;99.
11. Vilé G, Albani D, Nachtegaal M, Chen Z, Dontsova D, Antonietti M, López N, Pérez-Ramírez J. A Stable Single-Site Palladium Catalyst for Hydrogenations. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2015;54.
12. He B.L, Shen J.S, Tian Z.X. Iron-embedded  $C_2N$  monolayer: a promising low-cost and high-activity single-atom catalyst for CO oxidation. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016;18.
13. Zhou X, Feng W, Guan S, Fu B, Su W, Yao Y. Computational characterization of monolayer  $C_3N$ : a two-dimensional nitrogen-graphene crystal. *J. Mater.* 2017;32.
14. Mahmood J, Lee E.K, Jung M, Shin D, Jeon I.Y, Jung S.M, Choi H.J, Seo J.M, Bae S.Y, Sohn S.D, Park N, Oh J.H, Shin H.J, Baek J.B. Nitrogenated holey two-dimensional structures. *Nature communications*. 2015;6.
15. Zhu G, Lü K, Sun Q, Kawazoe Y, Jena P. Lithium-doped triazine-based graphitic  $C_3N_4$  sheet for hydrogen storage at ambient temperature. *Computational materials science*. 2014;81.
16. Cholaki E, Arghavani Nia B, Sahafi M.H. Investigation of Thermoelectric, Dynamical, Electron and Optical Properties of  $C_3N$  Monolayer Using First Principles Calculations. *Iranian Journal of Applied Physics*. 2024;14.
17. Molaei F, Eshkalak K.E, Sadeghzadeh S, Siavoshi H. Assessing mechanical properties of single-layer B-doped  $C_3N$  and N-doped  $BC_3$  nanosheets and their hybrid. *Computational Materials Science*. 2021;192.
18. Chen Z, Wang H, Li Z.J. First-principles study of two dimensional  $C_3N$  and its derivatives. *RSC advances*. 2020;10.
19. Bafekry A, Nguyen C, Obeid M, Ghergherehchi M. Modulating the electro-optical properties of doped  $C_3N$  monolayers and graphene bilayers via mechanical strain and pressure. *New J. Chem.* 2020;44.
20. Rao X, Si Q, Shi T, Han X, Ma S. Fe-doped  $C_3N$  monolayer as a promising SAC for CO oxidation with low temperature and high reactivity. *Computational and Theoretical Chemistry*. 2021;1194.
21. Deshpande S, Deshpande M, Hussain T, Ahuja R. Binding and optical characteristics of polycyclic aromatic hydrocarbons and their nitroderivatives adsorbed on the  $C_3N$  monolayer. *New Journal of Chemistry*. 2022;46.
22. Panigrahi P, Sajjad M, Singh D, Hussain T, Larsson J.A, Ahuja R, Singh N. Two-dimensional Nitrogenated Holey Graphene ( $C_2N$ ) monolayer based glucose sensor for diabetes Mellitus. *Applied Surface Science*. 2022;573.
23. Kim J, Kim H, Kim J, Bae H, Singh A, Hussain T, Lee H. Calcium-Decorated Polygon-Graphenes for Hydrogen Storage. *ACS Applied Energy Materials*. 2023;6.
24. Niu X, Zhang X, Shi A, Sun D, Guan R, Shan W, Chi F, Li Sh, Wang B, Zhang X. The regulating effect of twisted angle on the photocatalytic overall water splitting for  $C_3N/C_3B$  heterojunction. *Applied Physics Letters*. 2023;122.
25. Yu F, Yu Z, Xu Z, Xiong J, Fan Q, Feng X, Tao Y, Hua J, Luo F. Heteroatom engineering of polymeric carbon nitride heterojunctions for boosting photocatalytic reduction of hexavalent uranium. *Molecular Systems Design & Engineering*. 2020;4.
26. Huang L, Zhou D, Yuan J, Li C, Hong D. Influences of different temperatures on the mechanical properties and wear resistance against  $Ti_6Al_4V$  of Ti doped diamond-like carbon deposited on cemented carbide. *Vacuum*. 2021;189.
27. Wang T, Xin J, Li Z, Fan Y, Wang Y. Application of single-atom Ti-doped  $gC_3N_4$  in photocatalytic  $H_2O_2$  production. *Materials Advances*. 2023;22.
28. Schwarz K, Blaha P, Madsen G.K.H. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material sciences. *Computer physics communications*. 2002;147.

29. Agrawal S, Kaushal G, Srivastava A. Electron transport in  $C_3N$  monolayer: DFT analysis of volatile organic compound sensing. *Chemical Physics Letters*. 2021;762.
30. Wang X, Li Q, Wang H, Gao Y, Hou J, Shao J. Anisotropic carrier mobility in single-and bi-layer  $C_3N$  sheets. *Physica B: Condensed Matter*. 2018;537.
31. Babar V, Sharma S, Schwingenschlöggl U. Highly sensitive sensing of NO and  $NO_2$  gases by monolayer  $C_3N$ . *Advanced Theory and Simulations*. 2018;1.
32. Vanithakumari S.C, Nanda K.K. A universal relation for the cohesive energy of nanoparticles. *Physics Letters A*. 2008;372.
33. Gao Y, Wang H, Sun M, Ding Y, Zhang L, Li Q, Zhang J. First-principles study of phononic thermal transport in monolayer  $C_3N$ : a comparison with graphene. *arXiv: Materials Science*. 2017;107.
34. Diakite Y.I, Traore S.D, Malozovsky Y, Khamala B, Franklin L, Bagayoko D. Accurate Electronic, Transport, and Bulk Properties of Gallium Arsenide (GaAs). *arXiv preprint arXiv*. 2016;4.
35. Hazarika R, Kalita B. Site selective behaviour of B, C and N doping in MgO monolayers towards spintronic and optoelectronic applications. *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2023;162.
36. Anjami A, Boochani A, Elahi S.M, Akbari H. Ab-initio study of mechanical, half-metallic and optical properties of  $Mn_2ZrX$  ( $X= Ge, Si$ ) compounds. *Results in physics*. 2017;7.

**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**

چولکی، عرفان، ارغوانی‌نیا، برهان، رضایی، سحر، پارسامهر، سجاد. (۱۴۰۴)، بررسی اثر آلییدگی اتم تیتانیوم بر تک‌لایه  $C_3N$ . مجله علوم، مهندسی و فناوری هسته‌ای، ۱۱۲(۲)، ۱۱-۲۱.  
 Url: [https://jonsat.nstri.ir/article\\_1669.html](https://jonsat.nstri.ir/article_1669.html) .DOI: <https://doi.org/10.24200/nst.2024.1568.2018>

