بررسی خواص الکترونی، فونونی وگرمایی سیلیکن و ژرمانن با محاسبات اصول اولیه

جمعه پورزاوه، سمانه، رضایی رکن آبادی، محمود، مدرسی سریزدی، سید محسن، مرشدلو، تکتم

گروه فیزیک دانشکده علوم پایه، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

چکیده

دراین مقاله، خواص الکترونی، فونونی و گرمایی سیلیکن و ژرمانن بر مبنای نظریه ی تابعی چگالی و تقریب شبه هماهنگ مورد بررسی قرار گرفته است. نمودارهای ساختار نواری الکترونی، چگالی حالت‌های جزئی و کلی و پاشندگی فونونی برای هر دو ساختار در راستای بیشترین تقارن در منطقه‌ی بریلوین رسم و آنالیز شده است. نتایج بدست آمده در توافق خوبی با نتایج سایرین می باشد. گرمای ویژه در حجم ثابت برای هر دو ساختار با استفاده از نتایج فونونی و با کاربرد تقریب شبه هماهنگ محاسبه گردید. بر طبق نتایج بدست آمده سیلیکن و ژرمانن هر دو دارای خاصیت شبه فلزی با گاف انرژی صفر می باشند. در طیف پراکندگی فونونی، فرکانس فونونی منفی که نشان دهنده‌ی ناپایداری این سیستم ها باشد مشاهده نشد. در نمودار پراکندگی فونونی ژرمانن و سیلیکن گاف فرکانسی برابر با 51 و 37 مشاهده می شود. در نهایت گرمای ویژه در حجم ثابت سیلیکن کمتر از ژرمانن بدست آمد.

Investigating electron, phonon and thermal properties of Silicene and Germanene by first-principles calculations

Jomehpour Zaveh, Samaneh ; Rezaei Roknabadi, Mahmood ; Modaresi Saryazdi, S. Mohsen ; Morshedloo, Toktam

[1] *Department of Physics, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran*

Abstract

In this paper, electron, phonon and thermal properties of Silicene and Germanene have been investigated based on density functional theory (DFT) and quasi harmonic approximation (QHA). The curves of electronic band structure, total and partial density of states (PDOS and DOS) and phonon dispersion are plotted and analyzed along high symmetry directions in the Brillouin zone for two structures. The obtained results are in a good agreement with other's results. constant-volume specific heats of two structures were calculated by using phonon results and applying QHA. Based on calculated results, Silicene and Germanene are semi-metals with zero energy band gaps. Any negative phonon frequencies, which indicate systems are not stable, were not appeared in phonon dispersions. Phonon frequency gap can be seen in the phonon dispersions Curve of Silicene and Germanene, equal to 51 and 37. Finally, constant-volume specific heat of Silicene got less than Germanene.

PACS No. 65

مقدمه

لایه های دو بعدی ژرمانیوم و سیلیسیوم در شباهت با گرافن به صورت ژرمانن وسیلیکن نام گذاری شده اند. ژرمانن وسیلیکن دارای شبکه های هگزاگونال دو بعدی هستند[9]. با استفاده از روش های اصول اولیه و به روش مینمم کردن انرژی پیش بینی شده است، که این مواد به صورت شبکه های لانه زنبوری خمیده تشکیل شوند,[14]. اگرچه بر اساس محاسبات اصول اولیه از جمله بهینه سازی ساختاری، طیف پاشندگی فونونی و محاسبات دینامیک مولکولی در دمای محدود، ساختار های مسطح و یا بسیار خمیده‌ی این مواد پایدار نیستند، اما ساختار هایی با خمیدگی کم در حدود 0/4 تا 0/7 آنگستروم می توانند پایدار بمانند ,[11] ,[13]این گونه از مواد عایق های توپولوژیکی می باشند، که اثر کوانتوم اسپینی هال در آن ها میتواند بوجود آید[15].

روش محاسباتی

محاسبات اصول اولیه در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی، با استفاده از کد محاسباتی اسپرسو انجام شده است[4]. جهت بدست آوردن نتایج دقیق، همگرایی انرژی سیستم بر مبنای پارامترهای موثر در محاسبات خودسازگار، از جمله انرژی قطع امواج-تخت و تعداد نقاطK در نظرگرفته شد. انرژی قطع بهینه برای ژرمانن و سیلیکن 55 ریدبرگ و همچنین تعداد نقاط Kی بهینه برای ژرمانن 25x25x1 ، و برای سیلیکن 21x21x1 ، محاسبه شد.در روند محاسبات، از شبه پتانسیل های فوق نرم با تقریب شیب تعمیم

یافته برای تابعی همبستگی-تبادلی، استفاده شده است. در شبیه سازی دو بعدی ژرمانن و استانن، به منظور جلوگیری از برهمکنش لایه ها با یکدیگر، فاصله‌ی بین لایه ای در ژرمانن 20 آنگستروم و در سیلیکن 19 آنگستروم در نظر گرفته شده است. پارامتر شبکه با کمینه کردن نیروها و فشارها تا مرتبه‌ی 10^{-6} بهینه سازی و به ترتیب، برای ژرمانن و استانن 4/06 آنگستروم و 3/87 آنگستروم محاسبه گردید که با نتایج دیگران در توافق خوبی می باشند [12,13,9,14]. میزان خمیدگی این ساختار ها نیز با کمینه کردن نیرو و تنش های سیستم تا مرتبه‌ی 10^{-6} به ترتیب برای ژرمانن و سیلیکن، 0.67 و 0.44 آنگستروم محاسبه گردید.

به منظور محاسبه‌ی طیف پاشندگی فونون برای این مواد از شبکه‌ی بردار موج فونونی 1×5×5 استفاده شده است. علاوه بر این برای محاسبه‌ی خواص گرمایی از کد محاسباتی QHA بر مبنای تقریب شبه هماهنگ استفاده شده است[2] . و گرمای ویژه در حجم ثابت و هر دو ساختار محاسبه شد.

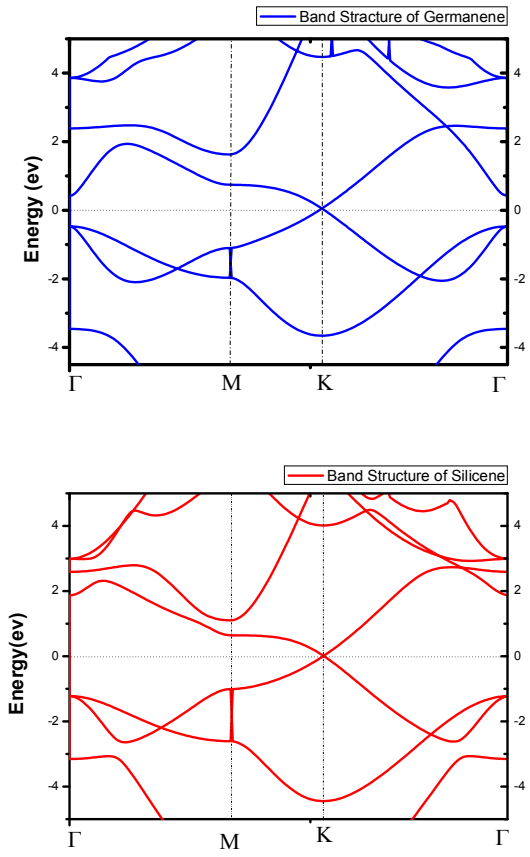
$$C_v = k_B \int_0^{\omega_M} \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1\right)^2} g(\omega)\, d\omega \qquad (1)$$

در این رابطه، k_B ثابت بـولتزمن و $g(\omega)$ چگـالی حالـت هـای فونونی و ω_M بیشترین فرکانس مربوط به فونون ها می باشد. برای [10],[11].

نتایج و بحث

خواص الکترونی

با محاسبه‌ی ساختار نواری و نمودار چگالی حالت های این دو ماده، به بررسی خواص الکترونی آنها می پردازیم. بر طبق شکل ۱ و ۲ که به ترتیب ساختار نواری و نمودار چگالی حالت های ژرمانن و سیلیکن را نشان می دهند، تک لایه‌های ژرمانن وسیلیکن به صورت شبه فلز یا نیمرسانای با گاف انرژی صفر بوده، و در نقاط K که محل تلاقی نوار رسانش و ظرفیت می باشند، و در گوشه های شش ضلعی منطقه‌ی اول بریلوئن واقع شده اند، درست مانند گرافن، گاف انرژی صفر بوده و مخروط دیراک تشکیل می شود. همین پدیده ژرمانن و سیلیکن را به عنوان دستگاهی دو بعدی از فرمیون های دیراک بدون جرم، معرفی می کند و در فهم خصوصیات غیر عادی آن ها مانند اثر کوانتوم اسپینی هال، بسیار مهم می باشد[8,9].

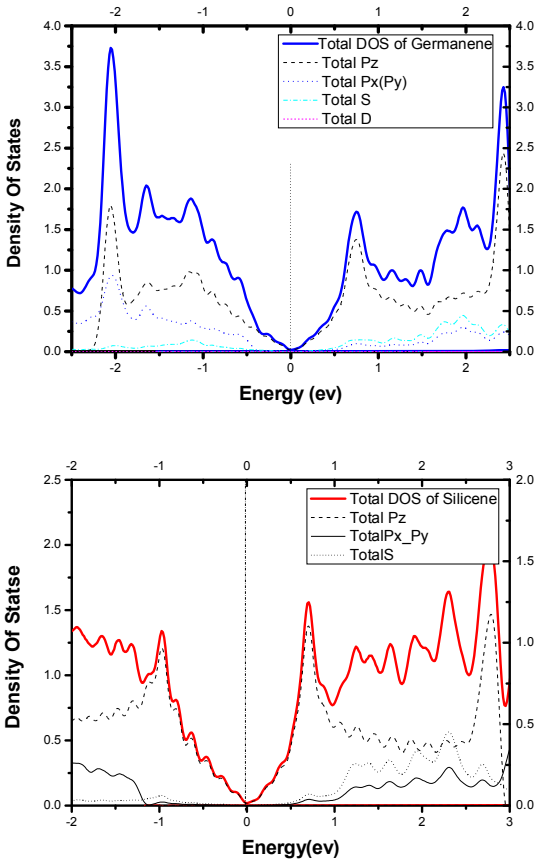


شکل۱: نمودار ساختار نواری ژرمانن و سیلیکن

خواص فونونی

نمودار پراکندکی فونونی برای هر دو ساختار در راستای بیشترین تقارن در شکل ۳ نشان داده شده است. فونون ها در حالت کلی به دو دسته‌ی اکوستیکی و اپتیکی تقسیم می شوند. در نقطه‌ی گاما (Γ) فرکانس شاخه های اکوستیکی صفر می باشد[3]. در نمودار پراکندگی فونونی هر دو ساختار، به علت وجود دو اتم در سلول واحد تعداد 6 شاخه ی ارتعاشی مشاهده می شودکه 3 شاخه اکوستیکی و 3 شاخه نیز اپتیکی می باشد در بین فرکانس های بدست آمده برای هر دو ساختار هیچ فرکانس منفی که نشان دهنده‌ی ناپایداری سیستم ها باشد، مشاهده نمی‌شود. بیشترین

فرکانس های فونونی در ژرمانن تقریبا برابر با $286(cm^{-1})$ و در سیلیکن برابر با $550(cm^{-1})$ است.

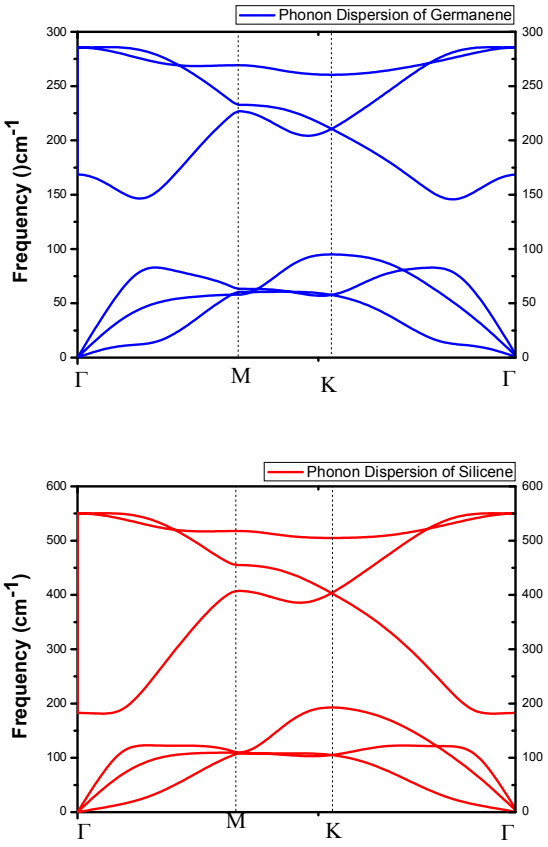


شکل۲ : نمودار چگالی حالت های ژرمانن و سیلیکن

بیشتر بودن فرکانس های فونونی سیلیکن نسبت به ژرمانن به علت کم تر بودن جرم اتمی Si نسبت به Ge می باشد. در این مواد گاف فرکانسی دیده می شود. محدوده‌ی گاف فرکانسی برای ژرمانن بین $95(cm^{-1})$ تا $146(cm^{-1})$ و برای سیلیکن بین $408(cm^{-1})$ تا $445(cm^{-1})$ می باشد. این بدان معنا است، که ارتعاش هایی در این محدوده‌ی فرکانسی در این مواد نمی توانند انتشار یابند. از این رو این مواد نسبت به این محدوده‌ی فرکانسی عایق گرمایی می باشند.

خواص ترمو دینامیکی

برای در نظر گرفتن آثار غیر هماهنگی و بر طرف نمودن نواقص مربوط به تقریب هماهنگ در محاسبه خواص گرمایی می بایست وابستگی فرکانس به پارامتر حجم را در محاسبات وارد نمود [2]. در شکل ۵ نمودار گرمای ویژه در حجم ثابت برای دو ساختار ژرمانن و سیلیکن آورده شده است که بر طبق انتظار، در حد دماهای بالا در تشابه با قانون دولون پتی به مقدار ثابت می رسد [1].

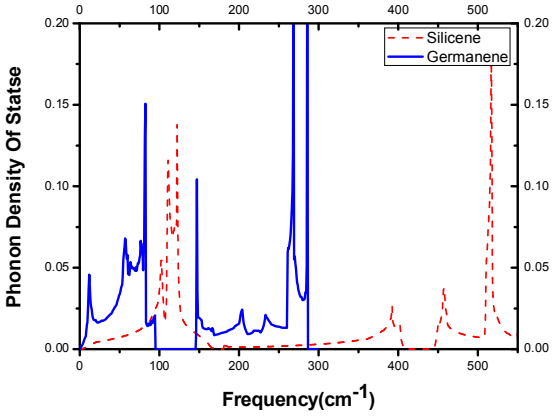


شکل ۳: نمودار پراکندگی فونونی ژرمانن و سیلیکن

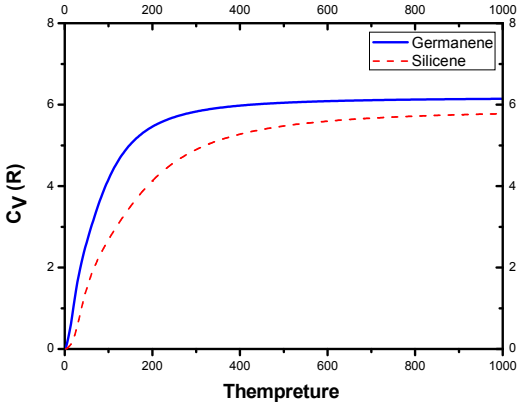
همچنین مشاهده می شود که دراین بازه‌ی دمایی، گرمای ویژه در سیلیکن کمتر از ژرمانن می باشد. با توجه به رابطه‌ی ۱ و همچنین شکل ٤ از آنجا که سطح زیر نمودار چگالی حالت های فونونی برای ژرمانن و سیلیکن به ترتیب برابر با 6.183 و5.883 می باشد، می توان تفاوت در نمودار تغییرات گرمای ویژه را توجیه نمود.

نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از بسته‌ی محاسباتی کوانتوم اسپرسو[4]، خواص الکترونی، فونونی و گرمایی هر دو ساختار سیلیکن و ژرمانن مورد بررسی قرار گرفت. نتایج محاسبات



شکل٤: نمودار چگالی حالت های فونونی ژرمانن و سیلیکن



شکل٥: نمودار تغییرات گرمای ویژه در حجم ثابت به ازای واحد جرم اتمی، بر حسب دما برای ژرمانن و سیلیکن

ساختار نواری الکترونی، نشان می دهد که سیلیکن و ژرمانن هر دو دارای خاصیت شبه فلزی با گاف انرژی صفر می باشند. به دلیل وجود مخروط های دیراک الکترون های رسانش، همانند ذرات بی جرم رفتار می کنند که به آنها اجازه می دهد تا با سرعتی نزدیک به سرعت نور حرکت کنند. این ویژگی بسیار مفیدی است. تا بتوانیم تکنولوژی ترانزیستور ها را ارتقا بخشیم. نمودار پراکندگی فونونی نشان می دهد که درژرمانن و سیلیکن گاف فرکانسی به اندازه‌ی 51 و 37 مشاهده می شود که با نتایج دیگران در توافق خوبی می باشد [1]. هموار بودن طیف فونونی در آلفا گرافاین نسبت به گرافن حاکی از پایین بودن سرعت انتقال گرما در آن می باشد. فرکانس منفی که نشان دهنده‌ی ناپایداری سیستم ها باشد مشاهده نمی شود. گرمای ویژه در حجم ثابت به ازای دماهای مختلف این مواد تحت تقریب شبه هماهنگ بررسی شد[2]. گرمای ویژه در حجم ثابت برای سیلیکن کمتر از ژرمانن می باشد که با توجه به بیشتر بودن چگالی حالت های فونونی ژرمانن قابل توجیه می باشد[7]. ما معتقدیم که نتایج محاسبات ما برای گزینش موارد کاربرد ژرمانن وسیلیکن در نانو الکترونیک، و مزایا و نواقص هرکدام از آن ها می تواند مفید باشد.

مرجع‌ها

[1] H. R. Soni and P. K. Jha; “Vibrational and elastic properties of 2D carbon allotropes: A first principles study”; *Solid State Communications* **189,** (2014) 58- 62

[2]S. Baroni, P. Giannozzi and E. Isaev; “Thermal Properties of Materials from Ab Initio Quasi-Harmonic Phonons”; *Mineralogy &Geochemistry* 71 (2009) 1-19

[3] C. Kittel; “Introduction to solid states physics”; *Wily and Sons* (1995)

[4] http://www.quantum-espresso.org.

[5] J. Drogar, M.R. Roknabadi, M. Behdani, M.Modarresi, A. Kari; “ Hydrogen adsorption on the α-Graphyne using ab initio calculations”; *Superlattices and Microstructures* **75,** (2014) 340- 346

[6] N. M. Peres; “Graphene: New physics in Two Dimentions”; *Euro physics News,* **40/3,** (2009) 17-20

[7] N. K. Perkgoz and C. Sevik; “Vibrational and thermodynamic properties of α-, β-, γ-, and 6, 6, 12-graphyne structures”; *Nanotecnology, 25***,** (2014) 185701 (8pp)

[8] N. M. Peres; “Graphene: New physics in Two Dimentions”; *Euro physics News,* **40/3,** (2009) 17-20

[9] S. Balendhran , S. Walia , H. Nili , S. Sriram , and M. Bhaskaran ; " Elemental Analogues of Graphene: Silicene, Germanene,

[10] S. Laref , A. Laref ; " Thermal properties of BeX (X = S, Se and Te) compounds from ab initio quasi-harmonic method "; *Computational Materials Science **51** (2012) 135–140*

[11] M. Lazzeri , and S. d. Gironcoli; " First-principles study of the thermal expansion of Be.101¯0." *; PHYSICAL REVIEW B, VOLUME* **65**, 245402

[12] E. Scalise, M. Houssa, G. Pourtois, B. van den Broek, V. Afanas’ev, and A. Stesmans ; ; “Vibrational properties of silicene and germanene ”; ***Nano Research*** 2013, 6(1): 19–28

[13] S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Aktu¨rk, H. S¸ahin, and S. Ciraci ; " Two- and One-Dimensional Honeycomb Structures of Silicon and Germanium" ; *PRL **102**, 236804 (2009)*

[14] B. van den Broek1, M. Houssa1, E. Scalise1, G. Pourtois2, V. V. Afanas , and A. Stesmans ;" Two-dimensional hexagonal tin: ab initio geometry,
stability, electronic structure and functionalization" *2D Materials **1** (2014) 021004*

[15] Y. Xu, B. Yan, H-J. Zhang , J. Wang, G. Xu, P. Tang , W. Duan , and Sh-C. Zhang ; " Large-gap quantum spin Hall insulators in tin films" ; *Phys. Rev. Lett. **111**, 136804 – Published 24 September 2013*