

بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران، دانشگاه شهید چمران اهواز، خوزستان، ایران. ۱۴۰۰ بهمن ۱۴۰۰



مطالعهٔ ابتدا به ساکن ویژگیهای اپتیکی نانو مکسین ایتریوم کاربید (Y،C)

امیر علیاکبری، پیمان امیری، حمداله <mark>صالحی</mark> [[T1] Commented: ادرس داشگاه نوشته شود گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران Amiraliakbari 1774@gmail.com, amiri_physics@yahoo.com, salehi_h@scu.ac.ir Commented [ft]: خط زير كلمات حذف شود چکیده - <mark>محا سبات</mark> بهطور عمده با ا ستفاده از ب ستهٔ محا سباتی کوانتوم⊣ سپر سو و روش شبهپتان سیل در چارچوب نظریهٔ تابعی Commented [ft۳]: کنار چکیده بیاید چگالی و تقریب چگالی موضعی انجام شــده اسـت . از نمودار سـهم موهومی تابع دیالکتریک چنین نتیجه میشـود؛ که جذب از انرژیهای بسیار کوچک شروع شده است که این امر بیانگر این واقعیت است که نانو مکسین ۲۰C گاف انرژی ندارد و ماهیت فلزی را نشان میدهد. طیف اتلاف انرژی نشان میدهد که قلههای تیز انرژی پلا سمونیک برای نانو مکسین ۲۰۲ در را ستاهای x، و و به تر تیب ۶٫۵۵ ، ۶٫۷۳ و ۶٫۷۵ الکترونولت بدسـت آمده اسـت. بنابراین در انرژیهای مذکور بیشــترین اتلاف انرژی وجود دارد و در انرژیهای بالاتر تابع اتلاف انرژی به سمت مقادیر صفر میل میکند. کلید واژه: تابع اتلاف انرژی، ماهیت فلزی، نانو مکسین، نظریهٔ تابعی چگالی، ویژگیهای اپتیکی. **Commented [ftž]:** به ترتيب الفبا شود. وسطچين Ab-initio study of the optical properties nano-MXene of Yttrium Carbide (Y₂C) Commented [fto]: اول كلمات عنوان با حروف بزرگ بيايد Amir Aliakbari, Peiman Amiri, Hamdollah Salehi Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran Amiraliakbari 1979@gmail.com, amiri_physics@yahoo.com, salehi_h@scu.ac.ir Commented [ft]: خط زیر کلمات حذف شود

Abstract- The calculations are mainly performed using the quantum-espresso calculation package and quasipotential method in density functional theory and local density approximation. The imaginary contribution diagram of the dielectric function follows; The absorption starts from tiny energies, which indicates that $Y_{\tau}C$ nano-MXene has no energy bandgap and shows the metallic nature. The energy loss spectrum shows that the sharp plasmonic energy peaks for $Y_{\tau}C$ nano-MXene in the x, y, and z directions are $\gamma, \circ, \gamma, \forall \tau$, and $\gamma, \forall \circ eV$, respectively. Therefore, there is the most energy loss in the mentioned energies, and in higher energies, the energy loss function tends to zero values.

۱

Keywords: Energy loss function, Metallic nature, Nano-MXene, Density functional theory, Optical properties.

بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران، دانشگاه شهید چمران اهواز، خوزستان، ایران، ۱۲- ۱۴ بهمن ۱۴۰۰

که تک لایه YrC دارای خاصیت فلزی است و <mark>میتواند</mark> به

مقدمه

عنوان یک مادهٔ الکتریدی و یک آند فعال برای باتریهای یونی بر پایهٔ سدیم باشد [۴].

روش محاسبه

محاسبات بهطور عمده با استفاده از بستهٔ محاسباتی کوانتوم-اسپرسو و روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی (DFT)^۶ انجام شده است [۵]. در این محاسبات از شبهپتانسیلهای بار پایسته (NC) محاسبات از ش چگالی موضعی (LDA)^ استفاده شده است [۶]. بهمنظور بهینه سازی تعداد نقاط شبکه با تعیین مبنای همگرایی ۰٬۰۱ الکترونولت به انجام محاسبات خودسازگار پرداخته شده است. پس از انجام بهینهسازیهای لازم تعداد نقاط بهینه شبکه برای نانو مکسین ۲۰C برابر ۱×۱۵×۱۵، انرژی قطع ۷۰ ریدبرگ و برای جلوگیری از برهم کنش با ساختار مجاور یک لایه خلاً به اندازهٔ ۱۸ آنگستروم برای هر دو سامانه مورد استفاده قرار گرفت. ثابت شبکه بهینه شده برای ترکیب مذکور *بهترتیب* برابر با a=۳٬۴۲ و c=۱۷٬۵۶ بوهر برای ساختار هگزاگونال تعیین شده است. شکل ۱ ساختار بهینه را برای نانو مکسین ۲۰۲ نشان میدهد. در محاسبات اپتیکی از تقریب فاز تصادفی استفاده شده است.



^aJianhua Hou ⁷Density Function Theory (DFT) ⁹Norm Conserving ⁶Local Density Approximation

در سالهای اخیر علاقهمندی به ساختارهای دوبعدی حوزهٔ تحقیقاتی جدیدی را ایجاد کرده است [1]. در میان مواد دوبعدی، مکسینها خانوادهٔ جدیدی از اینگونه مواد هستند که برخلاف گرافین که فقط از عنصر کربن بهرهمند است، از عناصر متعددی تشکیل شده است. مکسینها در حوزههای مختلف نظیر استفاده در باتریهای نسل جدید، ابرخازنها، عايقهاى الكترومغناطيسى، سامانههاى ذخيرة انرژی، تصفیه آب، حسگرهای گازی و دستگاههای الكترونيكي كاربرد دارند [۲]. فازهاى مكس خانوادهٔ بزرگى (با بیش از ۷۰ عضو) با ساختار شش گوشی سه گانه هستند که در آن M نشان دهندهٔ یک فلز $M_{n+1}AX_n$ و A نمایانگر M = Sc, Ti, V, Y, Zr, ... و اسطه مانند عناصر گروه ۱۳ و ۱۴ (IIIA-IVA) جدول تناوبی نظیر Al، si و ... است و X نیز نشان گر کربن یا نیتروژن و ۲،۲،۳ ا است. این مواد دوبعدی بهاین خاطر مکسین نامیده می شوند که آنها را با کندهکاری^۲ از فازهای مکس تولید میکنند که بهعنوان مثال فرمول شیمیایی این کندهکاری مطابق بود TirAlCr + $^{\circ}$ HF = AlFr + $^{\circ}$ / $^{\circ}$ Hr + TirCr [۳]. تاریخچهٔ مکسینها به سال ۲۰۱۱ باز می گردد که توسط یوری گوگوتسی^۳ و میشل بارسوم^۴ استادان علوم در دانشگاه "در کسل" کشف شد. تاکنون بیش از ۲۰ مکسین به طور تجربی سنتز شده اند که در سال ۲۰۱۱، TirAlCr بهعنوان اولین مکسین سنتز شد [۳]. در سال ۲۰۱۶ جیان هوا هو ^۵ ویژگیهای فیزیکی و الکترونی ساختار دو بعدی لایهای ترکیب ایتریوم کاربید (YrC) را در ساختار هگزاگونال با استفاده از اصول اولیه محاسبات در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی مورد بررسی قرار دادند، آنها نشان دادند

^vMXenes ^vetching ^vYury Gogotsi ^tMichel W. Barsoum

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-27

Commented [TV]: خط پاورقی برای هر ستون چپ چین شود

بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران، دانشگاه شهید چمران اهواز، خوزستان، ایران، ۱۲- ۱۴ بهمن ۱۴۰۰

> شکل ۱: نمای جانبی ساختار بهینهٔ نانو مکسین ۲۰۱C در صفحهٔ Xz. کرههای خاکستری اتمهای ایتریوم و کرههای زرد اتمهای کربن را نشان میدهند.

بحث و نتايج

برای بررسی خواص اپتیکی مواد، تابع دیالکتریک که پاسخ ماده به امواج الکترومغناطیس است، مورد بررسی قرار می گیرد. تابع دی الکتریک یک تابع مختلط است که به صورت زیر تعریف می شود:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \tag{1}$$

که (۵) ۵٫ قسمت حقیقی تابع دیالکتریک است. در ناحیهای که منفی است، امواج منتشر نمی شود و فرایندهای جذب و اتلاف غالب هستند. (۵) ۶٫ قسمت موهومی تابع دیالکتریک مستقیماً ناشی از گذارهای بین نواری است. روابط کرامرز-کرونیگ قسمتهای حقیقی و موهومی تابع دیالکتریک را به هم مرتبط می کند و تمام ثابتهای اپتیکی را می توان از این دادهها به دست آورد[۱۰].

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{{\omega'}^2 - \omega^2} d\omega' \tag{Y}$$

که در آن قسمت موهومی تابع دیالکتریک بهصورت زیر داده میشود:

$$\varepsilon_{2}(\omega) = -\frac{2}{\omega\pi} P_{0}^{\infty} \frac{{\omega'}^{2} [\varepsilon_{1}(\omega') - 1]}{{\omega'}^{2} - {\omega}^{2}} d\omega' \tag{(7)}$$

قسمت حقیقی و موهومی تابع دیالکتریک نانو مکسین YrC بر حسب انرژی فوتون- فرودی در راستاهای x، y و z درشکل ۲ نشان داده شده است. مشاهده می گردد که برای نانو مکسین YrC ریشه های تابع دی الکتریک در انرژیهای پایین اتفاق میافتد. از نمودار سهم موهومی تابع دیالکتریک چنین نتیجه می شود؛ که جذب از انرژیهای بسیار کوچک شروع شده است که این امر بیانگر این واقعیت است که ماده در ساختار مربوطه گاف انرژی ندارد و ماهیت فلزی ترکیب مذکور را تایید میکند. این نتایج گاف

صفر بهدست آمده از ساختار نوارالکترونی و چگالی حالت-های نانو مکسین ۲۰۲ (شکل ۳) را تأیید میکند. بزرگترین قله متعلق به راستای y است که معرف برهمکنش بیشتر الکترون با فوتون در این راستا است.



شکل ۲: (الف) قسمت حقیقی تابع دیالکتریک و (ب) قسمت موهومی تابع دیالکتریک نانو مکسین ۲۰۲



شکل ۳: ساختار نوار الکترونی و چگالی حالتهای کل نانو مکسین Y۲C

٣

بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران، دانشگاه شهید چمران اهواز، خوزستان، ایران، ۱۲– ۱۴ بهمن ۱۴۰۰

نتيجهگيرى

در این مقاله محاسبات با استفاده از بستهٔ محاسباتی کوانتوم-اسپرسو و روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی و تقریب چگالی موضعی انجام شده است . از نمودار سهم موهومی تابع دی الکتریک نتیجه می شود؛ که جذب از انرژی های بسیار کوچک شروع شده است که این امر بیانگر این واقعیت است که نانو مکسین ۲۰۲ گاف انرژی ندارد و ماهیت فلزی را نشان می دهد. طیف اتلاف انرژی نشان می دهد که قلههای تیز انرژی پلاسمونیک برای نانو نشان می دهد که قلههای تیز انرژی پلاسمونیک برای نانو مکسین ۲۰۲ در راستاهای ۲۰ و z به ترتیب ۵٫۶، ۲۹٫۶ ۵٫۷۳ الکترون ولت بدست آمده است. بنابراین در انرژی های مذکور بیشترین اتلاف انرژی وجود دارد.

مرجعها

- [1] D. Akinwande, C. J. Brennan, J. S. Bunch, P. Egberts, J. R. Felts, H. Gao, R. Huang, J. S. Kim, T. Li, Y. Li, and K. M. Liechti, "A review on mechanics and mechanical properties of ^γD materials—Graphene and beyond", Extreme Mechanics Letters, Vol. 1^π, pp. ξ^γ-ΥΥ, ^γ-ΥΥ.
- [Y] S. J. Kim, H. J. Koh, C. E. Ren, O. Kwon, K. Maleski, S. Y. Cho, B. Anasori, C. K. Kim, Y. K. Choi, J. Kim, and Y. Gogotsi, "Metallic TirCvTx Mxene gas sensors with ultrahigh signal-to-noise ratio", ACS Nano, Vol. 19, pp. 9A1-997, Y-1A.
- [*] M. Naguib, M. Kurtoglu, V. Presser, J. Lu, J. Niu, M. Heon, L. Hultman, Y. Gogotsi, and M. W. Barsoum, "Two-dimensional nanocrystals produced by exfoliation of TirAlCr", Advanced Materials, Vol. Y*, pp. £Y£A-£Yo*, Y. YY.
- [4] J. Hou, K. Tu, and Z. Chen, "Two-dimensional Y_YC electride: a promising anode material for Na-Ion batteries", The Journal of Physical Chemistry C, Vol. Y*, pp. 1A£YY-1A£YA, Y-NJ.
- [•] P. Giannozzi, et al., "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open source software project for quantum simulations of materials," J.Phys. Condens Matter, Vol. 11, pp. 1-77, 7...9.
- [5] P. J. Perdew, and Y. Wang, "Pair- distribution function and its coupling constant average for the spin-polarized electron gas," Phys. Rev. B, Vol. 41, pp. 11964-11909, 1997.

۴

ضریب اتلاف متناسب با احتمال اتلاف انرژی در واحد طول برای الکترون در حال عبور از محیط است. وجود قله در نمودار ضریب اتلاف بهعنوان قلهی پلاسمونی شناخته میشود که بیان گر برانگیختگیهای حجمی چگالی بار الکترونهای عبوری است. در یک بلور امکان وجود چند قلهی پلاسمونی است. بلندترین قله متناظر با پلاسمون حجمی و بسامد متناظر با آن بسامد پلاسما نامگذاری میشود. تابع اتلاف انرژی به صورت زیر با تابع دیالکتریک رابطه دارد:

$$L(\omega) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}$$
(f)

این رابطه نشان می دهد که تابع اتلاف انرژی با تابع دی الکتریک رابطه معکوس دارد که بدین معناست که در بازههایی که تابع اتلاف دارای قله است قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مقادیر بسیار کوچکی دارند. مقدار قلههای تیز انرژی پلاسمون برای نانو مکسین ۲۰۲ در راستاهای x، y و z به ترتیب ۶٫۵ ۳٬۹۰ و ۶٫۷۵ الکترونولت بدست آمده است. بنابراین در انرژی های مذکور که بیشترین اتلاف انرژی وجود دارد، شدت انتقال بین نواری بسیار کم است و در انرژی های بالاتر از آن تابع اتلاف انرژی به سمت مقادیر صفر میل میکند.



شكل ۴: طيف اتلاف انرژى نانو مكسين YrC