

بررسی کماتش فشاری بر خواص الکترونوری نانوصفحه تتراهگزاگونال - کربن حمیدرضا البرزیا* و مهدی نظیرزاده

گروه فیزیک، مرکز علوم پایه، دانشگاه پدافند هوایی خاتم الانبیاء (ص)، تهران، ایران

چکیده

در این پژوهش، جنبه های الکترونوری آلترپ تتراهگزاگونال - کربن به عنوان یک نانو ساختار دو بعدی تحت تغییرات پارامتر کماتش فشاری بر مبنای نظریه تابعی چگالی (DFT) و روش تقریب پتانسیل کامل PBE-GGA با استفاده از نرم افزار شبیه سازی و کد های محاسباتی بر پایه اصول محاسبات اولیه بررسی شده است. تجزیه و تحلیل نتایج حاصل از محاسبات خواص الکترونی این نانو ساختار، مانند گاف نواری و چگالی حالت ها (DOS) تحت تغییر کماتش، بیانگر این موضوع است که گاف نوار انرژی این نانوصفحه با مقدار $6.1/1$ الکترون ولت به عنوان یک نیم رسانا شکاف باند مستقیم، ابتدا تحت تاثیر فاکتور کماتش فشاری کمی افزایش می یابد و سپس، با اعمال ضرایب کماتش فشاری بالاتر، تا $11/1$ الکترون ولت کاهش می یابد. خواص نوری این نانوصفحه، در قطبش خارج از صفحه، با اعمال شرایط کماتش فشاری در طیف نور مرئی، تغییرات آرام و منظمی دارد. همچنین، با توجه به نتایج حاصله تطابق قابل قبولی بین خواص الکترونی و نوری این نانساختار دوبعدی مشاهده می شود که بیانگر مطابقت رفتارهای الکترونی و نوری است که می توان این نانوصفحه کربنی را به عنوان یک ماده مناسب برای طراحی دستگاه های الکترواپتیکی پیشنهاد کرد.

واژه های کلیدی: نقاط کوانتومی، عوامل موثر، سنتز، محیط های آبی

ایمیل نویسنده مسئول: hamidrezaalborznia@gmail.com

1- مقدمه

فرآوری گرافن منجر به مطالعات نظری و تجربی متعددی در خصوص جنبه های فیزیکی این تک لایه شد [۱-۸]. پیامدهای مطالعاتی روی این تک لایه منجر به تحقیقات گسترده در جهت پیش یابی و فرآوری نانساختارهای جدید برای استفاده در دستگاه های الکترونوری شد [۹-۲۷]. به تازگی نانوصفحه تتراهگزاگونال کربن به عنوان آلترپ جدید کربن پیش یابی شده است [۲۸]. این تک لایه ویژگی های جذابی مانند جنبه های الکترونی قابل توجه، از جمله نوار انرژی با گاف مستقیم و تحرک الکترونی بالا را نشان می دهد که این نانساختار دوبعدی را برای کاربرد در دستگاه های الکترونوری مناسب جلوه می دهد [۲۹]. نیروهای عمودی داخلی یا خارجی می توانند اثر کماتشی ایجاد کنند. یعنی زمانی که یک تک لایه تحت تنش و کرنش فشاری عمودی قرار می گیرد، ممکن است اثرات کماتش رخ دهد [۳۰، ۳۱]. در این مقاله، تأثیر کماتش بر روی خواص نوری و الکترونی تک لایه تتراهگزاگونال کربن در امتداد خارج از صفحه بررسی شده است. برای رسیدن به این هدف، با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT)، ابتدا ویژگی های الکترونی و سپس جنبه های نوری نانوصفحه تتراهگزاگونال - کربن با پارامتر تغییر کماتش برابر با صفر محاسبه می شود. در ادامه به عنوان یک بررسی نوین جنبه های الکترونوری این نانساختار دو بعدی تحت شرایط کماتش مختلف

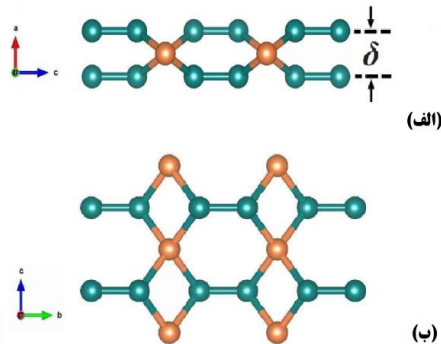
که توسط کرنش های عمودی فشاری ایجاد می شود در امتداد خارج از صفحه تک لایه بررسی می شود.

در بخش بعدی روش های محاسباتی تحقیق توضیح داده شده است. خواص ساختاری نانوصفحه تتراهگزاگونال - کربن در بخش ۳ مورد بحث قرار گرفته است. جنبه های الکترونی و نوری اثرات کماتش به ترتیب در بخش های ۴ و ۵ و نتایج در بخش آخر مقاله ارائه شده است.

۲- روش محاسباتی

در این تحقیق، روش محاسباتی مبتنی بر اصول محاسبات اولیه می باشد که بر پایه نظریه تابعی چگالی، ویژگی های الکترونوری نانوصفحه تتراهگزاگونال - کربن تحت شرایط تغییر پارامتر کماتش تا $6.1/1$ ، با استفاده از کد محاسباتی شبیه سازی Wien2k مورد تجزیه و تحلیل قرار می گیرد [۳۲].

روش بسط تابع موج کوهن - شم با استفاده از امواج تخت تقویت شده خطی با تقریب پتانسیل کامل با رویکرد اوربیتال محلی (FP-LAPW+LO) است. برای به دست آوردن همبستگی تبادل از روش تقریب گرادیان تعمیم یافته GGA-PBE استفاده شده است [۳۳]. برای اندازه گیری های الکترونی و نوری از روش تقریبی Monkhorst-Pack به ترتیب با مش بندی $10 \times 10 \times 1$ و



شکل ۲. (الف) نمای جانبی (ب) نمای بالای تتراهگزاگونال-کربن

برای بررسی، جنبه های الکترونی نانوصفحه کربنی تتراهگزاگونال تحت شرایط فشاری کمانشی در امتداد خارج از صفحه، پارامتری به عنوان ضریب تغییر کمانش (μ) که با توجه با معادله (۱) وابسته به فاصله کمانش حالت پایه (δ) تعریف می‌شود:

$$\delta_{\mu} = \left(1 - \frac{\mu}{100}\right) \delta_{\delta q} \quad (1)$$

که $\delta_{\delta q}$ فاصله کمانش تعادلی می باشد که بیانگر فاصله کمانشی سازه بدون اعمال فشار کرنشی است μ ضریب کرنش عمودی است که در این مطالعه مقادیر آن برابر $\mu = 2, 4, 6$ در نظر گرفته شده است.

۴- خواص الکترونی

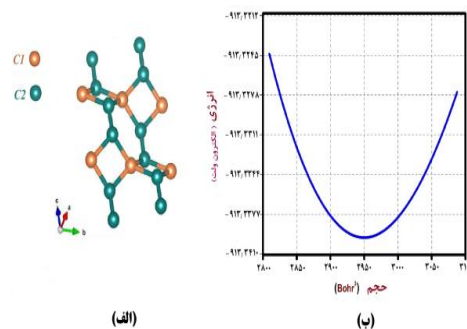
پیش از بررسی جنبه های الکترونی، تغییرات گاف نوار انرژی و انرژی کل تحت تاثیر کمانش فشاری را برای نانوصفحه کربنی تتراهگزاگونال با روش تقریب PBE با استفاده از کد محاسباتی شبیه سازی Wien2k محاسبه و در شکل ۲ با نتایج نانوصفحه پنتا-گرافن تحت شرایط مشابه مقایسه شده است [۳۰]. همانطور که در شکل ۲ نشان داده شده است، با اعمال ضریب تغییر کمانش تا $\mu = 2$ ، فاصله گاف انرژی تتراهگزاگونال-کربن به عنوان یک نانوصفحه دوبعدی نیم رسانا با گاف انرژی ۱٫۶۱ الکترون ولت کمی افزایش می یابد و به ۱٫۷۱ الکترون ولت می رسد و سپس، در مقادیر بالاتر، به ازای ضرایب کمانش ۴ و ۶ به ترتیب به ۱٫۵۲ و ۱٫۱۱ الکترون ولت کاهش می‌یابد. نتایج محاسباتی این نانوصفحه در شرایط یکسان با تک لایه پنتا-گرافن مقایسه و در نمودار شکل ۲ نشان داده شده است. مطابق نمودار تحت این شرایط تغییرات رفتاری تتراهگزاگونال-کربن مطابقت قابل قبولی با پنتا-گرافن دارد.

اولیه $RMTK_{max} = 7$ ، $G_{max} = 14 \text{ Ry}^{1/2}$ ، $I_{max} = 10$ در نظر گرفته شده اند و مقدار انرژی جدای هسته از الکترون های والانس برابر ۸ ریدبرگ در نظر گرفته می شود. در محاسبات جنبه های نوری این نانو ساختار دوبعدی برای به دست آوردن تابع دی الکتریک مختلط

از انتقال بین نواری از روش تقریب فاز تصادفی (RPA) و روابط کرامرز-کرونیگ استفاده شده است [۳۵].

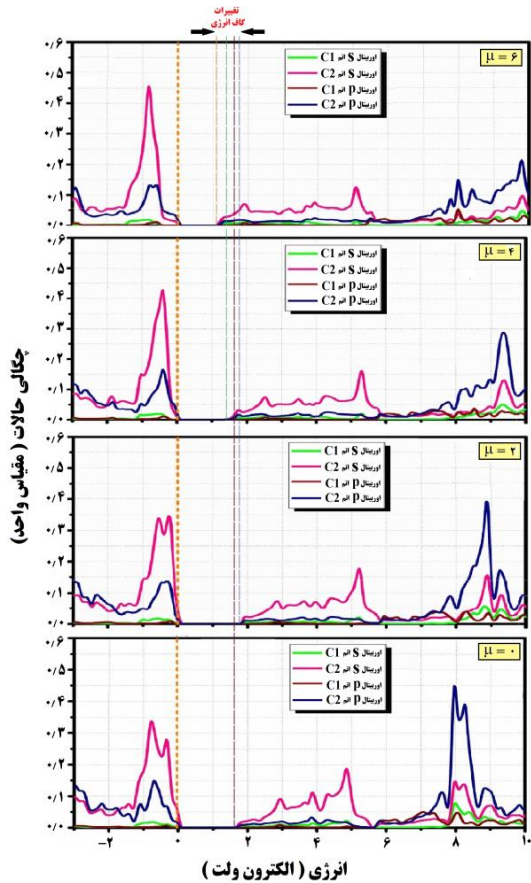
۳- خواص ساختاری

پیکربندی اتمی سلول واحد تک لایه بهینه تتراهگزاگونال-کربن به عنوان یک نانوصفحه کریستالی دو بعدی که از پنتاگرافن مشتق شده است در شکل ۱ نمایش داده شده است. همانطور که در شکل ۱ (الف) نشان داده شده است، سلول واحد این آلتروپ کربنی از دو نوع اتم کربن با هیبریداسیون مختلف تشکیل شده است [۲۸]. اتم های کربن C1 با اوربیتال های هیبریدی ترکیبی sp_2 و اتم های C2 با هیبریداسیون sp_3 هستند. شکل ۱ (ب) نمودار انرژی - حجم برای سلول واحد تتراهگزاگونال-کربن در حالت بهینه را نشان می دهد که با استفاده از معادله ترمودینامیکی بیرچ-مورناگان بهینه شده است [۳۶]. نقطه مینیمم این منحنی حجم بهینه شده با کمترین انرژی را تعیین می‌کند. ثابت های بهینه شبکه از حجم تعادلی برای سلول واحد تتراهگزاگونال-کربن برابر $a = A^{\circ}$ ، $b = 6.10 A^{\circ}$ است.



شکل ۱. (الف) سلول واحد (ب) نمودار انرژی-حجم بهینه نانوصفحه تتراهگزاگونال-کربن

نمای جانبی نانوصفحه تتراهگزاگونال-کربن در شکل ۲ (الف)، نشان داده شده است که δ پارامتر فاصله کمانش است، که بیانگر فاصله عمودی لایه پایینی و بالایی اتم های نوع C2 است. δ معادل ضخامت نانوصفحه تتراهگزاگونال-کربن است و مقدار آن در حجم تعادلی برابر $\delta = 1.8 A^{\circ}$ است. شکل ۲ (ب)، نمای بالای نانوصفحه تتراهگزاگونال-کربن را نمایش می دهد.

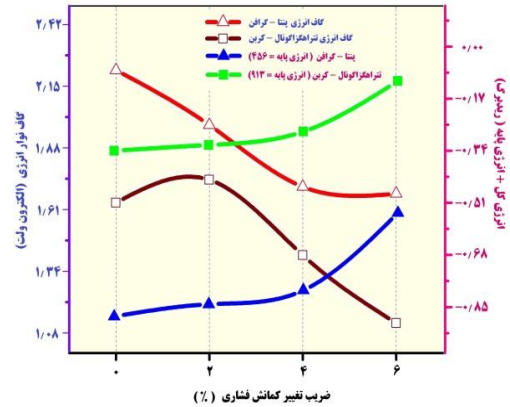


شکل ۴. نمودار چگالی حالت ها (DOS) تتراهگزاگونال کربن تحت کمناش

۵- خواص نوری

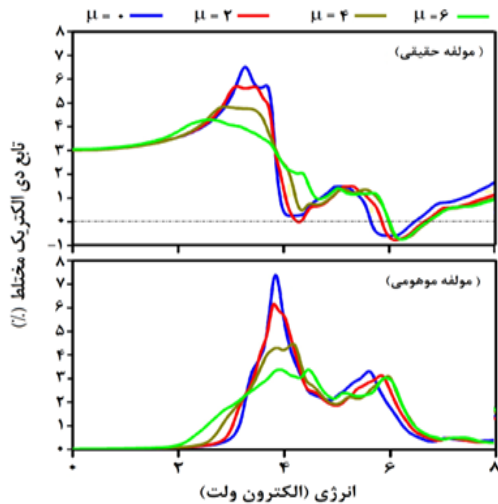
در این بخش، برخی از خواص نوری مهم نانوصفحه تتراهگزاگونال-کربن از قبیل چگالی حالت‌های مشترک نوری (DOS مشترک)، تابع دی‌الکتیک مختلط، جذب و بازتاب مطالعه می‌شوند. با توجه با اینکه این ماده به عنوان یک نانوساختار دوبعدی که در صفحه X-Y قرار گرفته است، بنابراین اثرات تغییر کمناش بر جنبه های نوری و پاسخ‌های نوری آن برای نورهای فرودی در امتداد جهت قطبش Z خارج از صفحه و عمود به سطح نانوصفحه بررسی می‌شود. نخستین ویژگی مورد مطالعه در این بخش، چگالی حالت‌های مشترک نوری QV است که نشان دهنده چگالی حالات یک فوتون با انرژی $h\nu$ است که با پایداری تکانه در یک نیمه هادی با گاف انرژی E_g مستقیم در تعامل است. این کمیت ترکیبی از چگالی حالات در هر دو باند ظرفیت و هدایت می باشد. چگالی حالت‌های مشترک نوری با معادله زیر بیان می شود [۳۷]:

$$g(v) = \frac{(2m_r)^{2/3}}{\pi\hbar} (h\nu - E_g)^{1/2}, \quad h\nu \geq E_g \quad (2)$$



شکل ۵. نمودار تغییرات انرژی کل و گاف انرژی پنتاگرافن و تتراهگزاکربن تحت تأثیر کمناش فشاری

در ادامه، چگالی حالت های انرژی (DOS) نانوصفحه تتراهگزاگونال-کربن تحت تغییرات کمناش فشاری با تقریب PBE-GGA مورد بررسی قرار گرفته است. شکل ۴ چگالی حالت‌های نانوصفحه تتراهگزاگونال-کربن را تحت تأثیر کمناش فشاری عمودی در خارج صفحه این نانوساختار دوبعدی تا ضریب $\mu=6$ را نشان می دهد. در محدوده بیشینه نوار ظرفیت (VBM) و کمینه نوار هدایت (CBM) در شرایط اثرات کمناش فشاری گاف انرژی این نیم‌رسانا گاف مستقیم ابتدا کمی افزایش و سپس، کاهش می‌یابد و چگالی حالت های لبه نوار هدایت به سمت انرژی های پایین تر حرکت می‌کند.

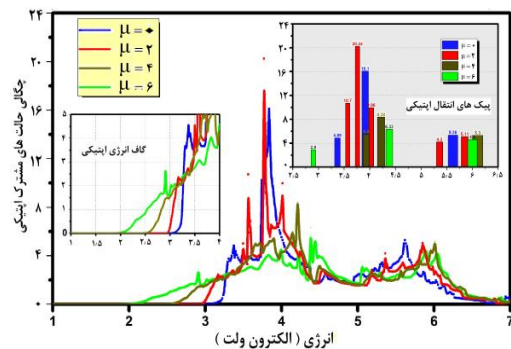


شکل ۶. مؤلفه حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک تراهاگزاکربن در جهت قطبش Z تحت کمانش فشاری

مطابق شکل ۶، پیک اصلی نمودار مؤلفه حقیقی تابع دی الکتریک مختلط نانوصفحه تراهاگزاگونال-کربن در جهت قطبش Z در بازه انرژی نور مرئی در محدوده ۳ الی ۳٫۵ الکترون ولت و پیک اصلی نمودار مؤلفه موهومی در محدوده انرژی ۳٫۸ و ۴ الکترون ولت رخ می دهد. با اعمال کمانش فشاری تا ضریب $\mu=6$ پیک های مؤلفه حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک این نانوساختار دوبعدی کاهش می یابند.

در بخش آخر خواص جذب و بازتاب این نانوساختار به عنوان دو ویژگی نوری اصلی از مؤلفه های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مختلط استخراج شده و نمودار این جنبه های نوری تحت تغییرات کمانش در جهت قطبش Z بررسی و در شکل ۷ در محدوده انرژی ۰ الی ۸ الکترون ولت ارائه شده است. مطابق نمودارهای طیف جذب و بازتاب در اثر اعمال کمانش فشاری تا ضریب $\mu=6$ ، در محدوده انرژی نور مرئی (۱٫۵ الی ۳ الکترون ولت) تغییرات نسبتاً اندک و منظمی مشاهده می شود.

در محدوده انرژی ۳ الی ۴٫۵ الکترون ولت اندازه پیک های جذب و بازتاب با اعمال پارامتر کمانش فشاری کاهش می یابند. در انرژی های بالاتر از ۴٫۵ الکترون ولت تغییرات آرامی در نمودارهای طیف جذب و بازتاب مشاهده می شود.



شکل ۵. چگالی حالت های مشترک نوری نانوصفحه تراهاگزاکربن در جهت قطبش Z تحت کمانش فشاری

تابع دی الکتریک مختلط یک مفهوم فیزیکی برای استخراج ویژگی های نوری مهم از قبیل خواص جذب و بازتاب است. و تابعی وابسته به فرکانس است که شامل دو مؤلفه حقیقی و موهومی به صورت معادله زیر است [۳۸]:

$$\epsilon_{complex} = \epsilon_1(\omega) + i \epsilon_2(\omega) \quad (3)$$

$\epsilon_1(\omega)$ بیانگر بخش حقیقی تابع دی الکتریک است که بر مبنای روابط کرامر-کرونینگ با رابطه زیر بدست می آید:

$$\epsilon_1^{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} Pr. \int_0^{\infty} \frac{\Im \epsilon^{\alpha\beta}(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} \omega' d\omega' \quad (4)$$

که Pr تابع کوشی را بر انتگرال معادله اعمال می کند. $\epsilon_2(\omega)$ مؤلفه موهومی تابع دی الکتریک به عنوان عامل مؤثر در انتقال باند نوری بین حالت های الکترونی اشغال شده (ik) و اشغال نشده (fk) در نظر گرفته می شود و از معادله ذیل تبعیت می کند:

$$\epsilon_2^{\alpha\beta}(\omega) = \frac{4\pi e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{i,j} \int \frac{2d^3k}{(2\pi)^3} |ik| P_{\alpha} |fk|)^2 f_i^k (1 - f_f^k) \delta(E_f^k - E_i^k - \hbar\omega) \quad (5)$$

نمودارهای مؤلفه حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک نانوصفحه تراهاگزاگونال-کربن تحت تغییرات پارامتر کمانش فشاری تا ضریب $\mu=6$ در امتداد خارج صفحه، در جهت قطبش Z در شکل ۶ رسم شده است.

[2] Okada S, Energetics of nanoscale graphene ribbons: Edge geometries and electronic structures. *Physical Review B*. 2008; 77(4): 041408- 041411.

DOI:10.1103/PhysRevB.77.041408

[3] Novoselov KS, et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature*. 2005; 438: 197-200.

DOI:10.1038/nature04233

[4] Mukhopadhyay G, Behera H. Graphene and some of its structural analogues: full-potential density functional theory calculations. *World Journal of Engineering*. 2013; 10 (1): 39-48.

DOI:10.1260/1708-5284.10.1.39

[5] Su C, Jiang H, Feng J. Two-dimensional carbon allotrope with strong electronic anisotropy. *Physical Review B*. 2013; 87 (7): 075453- 075457.

DOI:10.1103/PhysRevB.87.075453

[6] Zhu J, et al. Graphene and Graphene-Based Materials for Energy Storage Applications. *Small*. 2014; 10 (17): 3480-3498.

DOI:10.1002/smll.201303202

[7] Rao CNR, Ramakrishna Matte HSS, Maitra U. Graphene Analogues of Inorganic Layered Materials. *Angewandte Chemie International Edition*, 2013; 52 (50):13162-13185.

DOI:10.1002/anie.201301548

[8] Malko D, et al. Competition for Graphene: Graphynes with Direction-Dependent Dirac Cones. *Physical Review Letters*. 2012; 108 (8): 086804-086807.

DOI:10.1103/PhysRevLett.108.086804

[9] Liu CC, Feng W, Yao Y. Quantum Spin Hall Effect in Silicene and Two-Dimensional Germanium. *Physical Review Letters*. 2011; 107 (7):076802-076805.

DOI:10.1103/PhysRevLett.107.076802

[10] Vogt P, et al. Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon. *Physical Review Letters*. 2012; 108 (15):155501-155505.

DOI:10.1103/PhysRevLett.108.155501

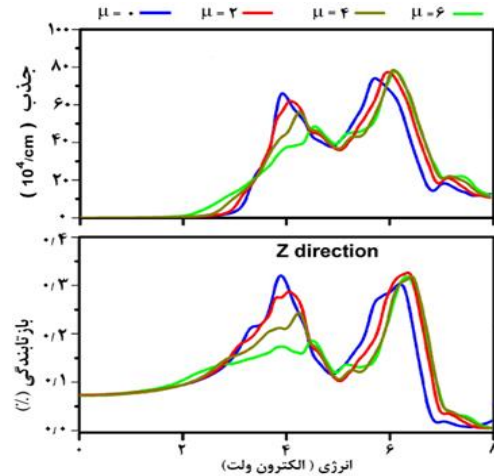
[11] Giovannetti G, et al. Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: Ab initio density functional calculations. *Physical Review B*. 2007; 76 (7):073103-073106. DOI:10.1103/PhysRevB.76.073103

[12] Zhang S, et al. Atomically Thin Arsenene and Antimonene: Semimetal-Semiconductor and Indirect-Direct Band-Gap Transitions. *Angewandte Chemie*. 2015;54(10):3112-3115. DOI:10.1002/anie.201411246

[13] Balendhran S, et al. Elemental Analogues of Graphene: Silicene, Germanene, Stanene, and Phosphorene. *Small*. 2015;11(6):640-652. DOI:10.1002/smll.201402041

[14] Zhang S, et al. Antimonene Oxides: Emerging Tunable Direct Bandgap Semiconductor and Novel Topological Insulator. *Nano Letters*. 2017; 17 (6):3434-3440.

DOI:10.1021/acs.nanolett.7b00297



شکل ۷. نمودار جذب و بازتاب نانوصفحه تتراهگزاگونال-کربن در جهت قطبش Z تحت کمناش فشاری

۶- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، ویژگی‌های الکترونی آلترپ جدید کربنی به نام تتراهگزاگونال-کربن به عنوان یک نانوساختار دو بعدی تحت شرایط تغییر کمناش بر پایه اصول محاسبات اولیه در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT)، با بکارگیری از نرم افزار شبیه سازی و کد های محاسباتی مورد بررسی قرار گرفته است.

بررسی جنبه های الکترونی این نانوصفحه، مانند گاف نواری و چگالی حالت ها (DOS) تحت تغییر کمناش با ضرایب $\mu = 0, 2, 4, 6$ بیانگر این موضوع است که گاف نوار انرژی این نانوصفحه به عنوان یک نیمه هادی شکاف باند مستقیم، ابتدا تحت تاثیر فاکتور کمناش فشاری تا $\mu = 2$ ، کمی افزایش می یابد و از $1/11$ الکترون ولت به $1/11$ می رسد. سپس، تحت ضرایب کمناش برابر ۴ و ۶ به ترتیب به $1/11$ و $1/52$ الکترون ولت کاهش می یابد. مطالعه جنبه های نوری از قبیل چگالی حالت های مشترک نوری، تابع دی الکتریک مختلط، جذب و بازتابندگی تحت اثرات کمناش فشاری در قطبش خارج از صفحه، در جهت Z، نشان دهنده تغییرات آرام و منظمی در طیف های نوری است. همچنین با توجه به نتایج حاصله تطابق قابل قبولی بین خواص الکترونی و نوری این نانوساختار دویعدی مشاهده می گردد که می توان این نانوصفحه را گزینه ای مناسب برای طراحی دستگاه های الکترونی پیشنهاد کرد.

۵- منابع

[1] Novoselov KS, et al. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*. 2004; 306(5696):666-669.

DOI: 10.1126/science.1102896



[27] Alborznia H, Amirian S, Nazirzadeh M. Buckling variation effects on optical and electronic properties of GeP₂S nanostructure: a first-principles calculation. *Opt. Quant. Electron.* 2022; 54:608.

DOI:10.1007/s11082-022-04055-2

[28] Ram B, Mizuseki H. Tetrahexcarbon: A two-dimensional allotrope of carbon. *Carbon*. 2018;137:266-273.

DOI:10.1016/j.carbon.2018.05.034

[29] Hoat DM, Amirian Sh, Alborznia H, et al. Strain effect on the electronic and optical properties of 2D Tetrahexcarbon: a DFT-based study. *Indian Journal of Physics*. 2021; 95: 2365-2373.

DOI:10.1007/s12648-020-01913-1

[30] Alborznia H, Naseri M, Fatahi N. Buckling strain effects on electronic and optical aspects of penta-graphene nanostructure. *Superlatt. and Microstruc.* 2019; 133: 106217.

DOI:10.1016/j.spmi.2019.106217

[31] Alborznia H. First-Principle Study Of The Buckling Compressive Strain Induced On Optoelectronic Aspects Of Two- Dimensional B₂C Nanostructure *Surf. Rev. Lett.* 2022; 29(6): 2250078.

DOI:10.1142/S0218625X22500780

[32] Blaha P, et al. WIEN2k: An APW+lo program for calculating the properties of solids. *J. Chem. Phys.* 2020;152(7): 074101.

DOI:10.1063/1.5143061

[33] Perdew JP, Burke K, Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*. 1996;77 (18):3865-3868.

DOI:10.1103/PhysRevLett.77.3865

[34] Monkhorst HJ, Pack JD. Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*. 1976; 13 (12) : 5188 – 5192. DOI:10.1103/PhysRevB.13.5188

[35] Ehrenreich H, Cohen MH. Self-Consistent Field Approach to the Many-Electron Problem. *Physical Review*. 1959; 115 (4): 786-790.

DOI:10.1103/PhysRev.115.786

[36] Birch F. Equation of state and thermodynamic parameters of NaCl to 300 kbar in the high-temperature domain. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 1986; 91(B5): 4949-4954.

DOI:10.1029/JB091iB05p04949

[37] Saleh BEA, Teich MC. Photons in Semiconductors. In *Fundamentals of Photonics*. Wiley, New York. 1991;15:542-591.

DOI:10.1002/0471213748

phosphorene-type GaTeCl. *Nanoscale*. 2018;10(8):3350-3355. DOI:10.1039/C7NR08252E

[17] Naseri M. First-principles prediction of a novel cadmium disulfide monolayer (penta-CdS₂): Indirect to direct band gap transition by strain engineering. *Chemical Physics Letters*. 2017; 685:310-315.

DOI:10.1016/j.cplett.2017.07.077

[18] Alborznia H, Naseri M, Fatahi N. Pressure effects on the optical and electronic aspects of T-Carbon: A first principles calculation. *Optik* 2019; 180: 125-133.

DOI:10.1016/j.ijleo.2018.11.077

[19] Naseri M. SiP₂S monolayer: A two dimensional semiconductor with a moderate band gap. *Chemical Physics Letters*. 2019; 715:100-104.

DOI:10.1016/j.cplett.2018.11.023

[20] Alborznia HR, Mohammadi ST. Investigation of electronic and optical properties of novel graphene-like GeS₂ monolayer by density function theory. *Iranian Journal of Physics Research*. 2020; 20 (2): 259-265.

DOI:10.47176/ijpr.20.2.35991

[21] Naseri M. Penta-SiC₅ monolayer: A novel quasi-planar indirect semiconductor with a tunable wide band gap. *Physics Letters A*. 2018; 382(10):710-715.

DOI:10.1016/j.physleta.2018.01.010

[22] Alborznia H, Amirian S, Mohammadi ST. Prediction and study of structural and electro-optical properties of two-dimensional sulfur germanium diphosphide nanostructure by Density Functional Theory. *Journal of Research on Many-body*. 2021;11(4):1-12.

DOI:10.22055/jrmb.2021.17265

[23] Alborznia HR, Mohammadi ST. Electronic and optical aspects of GeP₂S 2D monolayer under biaxial stress and strain conditions. *Bull. Mater. Sci*. 2021;44:180.

DOI:10.1007/s12034-021-02478-3

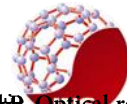
[24] Marjaoui A, et al. First-principles calculations to investigate structural, electronic and optical properties of Janus AsMC₃ (M: Sb, Bi) monolayers for optoelectronic applications. *Solid State Comm*. 2022; 343:114667.

DOI:10.1016/j.ssc.2022.114667

[25] Tayran C, Caglayan R, et al. Biaxial Strain-Induced Electronic Structure and Optical Properties of SiP₂S Monolayer, *J. Elec. Mater.* 2021; 50: 6253-6260.

DOI:10.1007/s11664-021-09137-7

[26] Alborznia H, Mohammadi ST. Biaxial stress and strain effects on optical and electronic aspects of B₂C



band structure calculations. *Physica B: Condensed Matter*.
1994;194-196 (2):1451-1452.
DOI: 10.1016/0921-4526(94)91225-4

[38] Abt, R, Ambrosch-Driaxle, R, et al. Optical response of
high temperature superconductors by full potential LAPW

Investigating compressive buckling on the electro-optical properties of Tetra-Hexagonal-Carbon nanosheet

Hamidreza Alborznia*, Mehdi Nazirzadeh

Department of Physics, Center of Basic Science, Khatam Ol-Anbia (PBU) University Tehran, Iran.

Abstract

In this research, the electro-optical aspects of Tetra-Hexagonal-Carbon allotrope as a two-dimensional nanostructure under compressive buckling parameter based on density functional theory (DFT) with PBE-GGA full potential approximation method using simulation software and computational codes based on first-principles calculations have been investigated. The analysis of the results obtained from the calculations of the electronic properties of this nanostructure, such as the band gap and density of states (DOS) under buckling change, indicates that the energy band gap of this nanosheet as a direct band gap semiconductor with 1.61 eV, increases slightly under the influence of the compressive buckling factor and then decreases down to 1.11 eV by applying higher compressive buckling factors. The optical properties of this nanosheet have smooth and regular changes in the out-of-plane polarization, by applying compressive buckling conditions in the visible light spectrum. Also, according to the obtained results, an acceptable match between the electronic and optical properties of this two-dimensional nanostructure is observed, which indicates the correspondence of electronic and optical behaviors, which can predict this carbon nanosheet is a suitable material for designing electro-optical devices.

Keyword: Density functional theory (DFT), Two-dimensional nanostructure, Compressive buckling, Electro-optical properties, First-principles calculations