

مقایسه ویژگی های ساختاری، الکترونی و اپتیکی گرافین و سیلیسین با استفاده از نظریه تابعی چگالی

سپیده کامیاب مهر^۱، سوزان ذوالریاستین^{۲*}، لاله فرهنگ متین^۳

تاریخ ارسال: ۱۳۹۹/۹/۱ پذیرش: ۱۴۰۰/۵/۱۵

چکیده: در سال های گذشته ساختارهای دو بعدی از جمله گرافین و سیلیسین، به دلیل خواص فیزیکی ویژه، به طور گسترده ای مورد بررسی قرار گرفته اند. همچنین، کاربرد گرافین و ساختارهای شبه گرافینی مانند سیلیسین در دستگاه های میکروالکترونیکی بسیار جالب توجه است و امکان طراحی انواع قطعات الکترونیکی با ویژگی های جذاب و نوین را در اختیار ما قرار می دهد. در این پژوهش، ویژگی های ساختاری، الکترونی و اپتیکی نانو ورقه های گرافین و سیلیسین با استفاده از نظریه تابعی چگالی با کد محاسباتی WIEN2k بررسی شده است. با توجه به نمودار ساختار نواری این ساختارها گاف نواری صفر دارند. همچنین ویژگی های اپتیکی از قبیل قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک و اتلاف انرژی در دو راستای پلاریزاسیون موازی و عمودی در دو ساختار مقایسه شده است. در منحنی ϵ_2 برای پلاریزاسیون ZZ، هر دو ساختار در طیف مرئی تقریباً شفاف هستند، در حالی که امواج الکترومغناطیسی را در ناحیه ی فرا بنفش (UV) جذب می کنند.

واژه های کلیدی: گرافین، سیلیسین، نظریه ی تابعی چگالی، ویژگی های اپتیکی

۱. مقدمه

پس از ساخت گرافین (Graphene) در سال ۲۰۰۴ [۱]، گرافین و ساختارهای شبه گرافینی مانند سیلیسین (Silicene)، به دلیل ویژگی های خارق العاده خود بسیار مورد توجه قرار گرفته اند [۲]. گرافین و سیلیسین، به ترتیب ساختارهای دو بعدی هگزاگونال از اتم های کربن و سیلیسیم هستند [۳، ۴]. گزارش تولید سیلیسین بر روی زیرلایه های [۵، ۶] Ag (110) و [۵، ۷، ۸] Ag (111)

اولین بار در سال ۲۰۱۰ ارائه شد. هم چنین به منظور ساخت سیلیسین، از سایر زیرلایه ها مانند [۹] ZrB₂ (0001)، [۱۰، ۱۱] Au (110) و [۱۲] Ir (111) نیز استفاده شده است. از آنجا که کربن (C) و سیلیسیم (Si) در گروه IV جدول تناوبی قرار دارند، گرافین و سیلیسین دارای خواص مشابه بسیاری هستند [۱۳]. گرافین و سیلیسین سرعت فرمی فوق العاده بالایی به ترتیب در حدود $10^6 (m/s)$ و $10^5 (m/s)$ دارند [۳، ۱۴، ۱۵]. سیلیسین دارای ساختار الکترونی مشابه با گاف نواری صفر در نقطه K مانند گرافین است [۳]. اما بر خلاف گرافین که مسطح است؛ سیلیسین ساختاری هگزاگونال دو بعدی دارای خمیدگی است [۱۶]. این امر نشان می دهد که سیلیسین تا حدودی تمایل به تشکیل هیبریداسیون sp^3

۱. دانشجوی دکتری، گروه فیزیک، واحد تهران شمال، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران. s.kamyabmehr@gmail.com
 ۲. استادیار، گروه فیزیک، واحد تهران شمال، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران. s_zoriasatain@iautn.ac.ir
 ۳. دانشیار، گروه فیزیک، واحد تهران شمال، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران. laleh.matin@gmail.com

در روش Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA-PBE) [۳۰] برای جمله تبدالی-همبستگی استفاده شده است. در کل منطقه‌ی اول بریلوین برای محاسبه‌ی ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی به ترتیب تعداد نقاط k ($5 \times 24 \times 24$) و 3000 ($7 \times 33 \times 33$) در نظر گرفته شد. همچنین، پارامترهای محاسباتی $R_{MTKmax} = 7$ ، $G_{max} = 14 Ry^{1/2}$ ، $l_{max} = 10$ هستند و همگرایی بار مقدار $10^{-4} e$ انتخاب شد.

تابع دی الکترونیک مختلط یکی از مهمترین پارامترها در درک رفتار اپتیکی مواد مختلف است.

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (1)$$

در اینجا، $\varepsilon_1(\omega)$ و $\varepsilon_2(\omega)$ ، به ترتیب قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی الکترونیک هستند. $\varepsilon_2(\omega)$ را می‌توان به صورت زیر محاسبه کرد [۳۱]:

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{ij} \int \langle i, M, j \rangle^2 f_i(1 - f_j) \delta(E_f - E_i - \omega) d^3k \quad (2)$$

که M ماتریس دو قطبی است، i و j به ترتیب حالت‌های اولیه و نهایی هستند و f_i تابع توزیع فرمی است. با استفاده از روابط کرامرز-کرونینگ^۶، طبق معادله زیر [۳۲] می‌توان قسمت حقیقی تابع دی الکترونیک را از قسمت موهومی بدست آورد:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} p \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega') d(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (3)$$

تابع اتلاف انرژی نیز از طریق تابع دی الکترونیک طبق فرمول زیر محاسبه می‌شود [۳۳]:

$$L(\omega) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} \quad (4)$$

دارد [۱۷]. به بیان دقیق‌تر، هیبریداسیون آن آمیخته‌ای از sp^2 و sp^3 است. از آنجایی که وارد کردن گرافین در صنعت الکترونیک پایه‌ی سیلیکون امروز دشوار است، در مطالعات نظری توجه بیشتری به دیگر عناصر گروه چهارم مثل سیلیکون جذب شده است [۳، ۱۸]. بررسی‌های تجربی و نظری زیادی روی ساختارهای هگزاگونال شبه گرافینی انجام شده است. مطالعات نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) نشان داده است که صفحه‌ی سیلیسین هگزاگونال خمیده، از آرایش مسطح آن پایدارتر است [۱۹]؛ این نکته مشخص می‌کند که به جز کربن دیگر عناصر گروه چهارم از تشکیل هیبریداسیون sp^2 به تنهایی خودداری می‌کنند [۲۰].

نانو نوارهای گرافین^۱ (GNRs) به دلیل ویژگی‌های بسیار جذاب و کاربردهای جالب توجه در نانو الکترونیک، توجه زیادی را به خود جلب کرده اند [۲۱، ۲۲]. برای نانو نوارهای گرافین حتی جذاب‌تر این است که ویژگی‌های الکترونی و مغناطیسی به اندازه و شکل لبه آن‌ها بستگی دارد [۲۳-۲۵]. همچنین در سال‌های اخیر نانو نوارهای سیلیسین^۲ (SiNRs) (شبه گرافین Si) به صورت نظری و تجربی مورد مطالعه قرار گرفته اند [۲۶-۲۸]. مشابه با نانو نوارهای گرافین (GNRs)، ویژگی‌های الکترونی نانو نوارهای سیلیسین به اندازه هندسی ساختار حساسند [۲۵]. ادغام سیلیسین در دستگاه‌های میکرو الکترونیک بسیار جالب توجه است چرا که می‌تواند با تکنولوژی نیمه رسانای بر پایه‌ی سیلیکون، کاملاً سازگار باشد [۱۲، ۲۹].

۲. جزئیات محاسبات

در این پژوهش، محاسبات اصول اولیه به منظور مطالعه‌ی ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی گرافین و سیلیسین با استفاده از روش موج تخت بهبود یافته‌ی خطی با پتانسیل کامل^۳ (FP-LAPW) انجام شده است. این محاسبات در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی^۴ (DFT) با استفاده از کد WIEN2k انجام گرفته است. تقریب شیب تعمیم یافته^۵

¹ Graphene Nano Ribbons

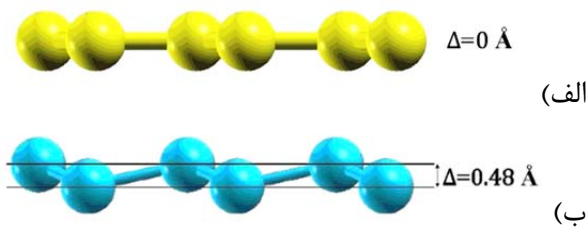
² Silicene Nano Ribbons

³ Full Potential Linearized Augmented Plane Wave

⁴ Density Functional Theory

⁵ Generalized Gradient Approximation

⁶ Kramers-Kronig relations



شکل ۲. ساختار هندسی

الف) گرافین و ب) سیلیسین از نمای جانبی

همانطور که در شکل (۲) مشاهده می‌شود، ساختار گرافین کاملاً تخت است، در حالی که ساختار سیلیسین کمی خمیدگی دارد. دلیل خمیدگی سیلیسین آن است که در ساختار خود ترکیبی از هیبریداسیون sp^2 و sp^3 دارد، در حالی که در گرافین فقط هیبریداسیون sp^2 موجود است. در جدول (۱) طول پیوند و زاویه پیوند هر یک از این ساختارها و مقدار خمیدگی سیلیسین (حاصل از این پژوهش) ارائه شده است. همان طور که مشاهده می‌شود با افزایش عدد اتمی، طول پیوند بیشتر می‌شود. در جداول (۲) و (۳) داده‌های به دست آمده در این پژوهش با کارهای دیگران مقایسه شده اند. این نتایج سازگاری خوبی با یکدیگر دارند.

جدول ۱. مقایسه‌ی پارامترهای ساختاری گرافین و سیلیسین

مقدار خمیدگی (Å)	زاویه پیوند (درجه)	طول پیوند (Å)	
0	120	1.42	گرافین
0.48	115.7	2.28	سیلیسین

جدول ۲. مقایسه‌ی طول پیوند ساختارها بر حسب (Å) در

این پژوهش با کارهای دیگران

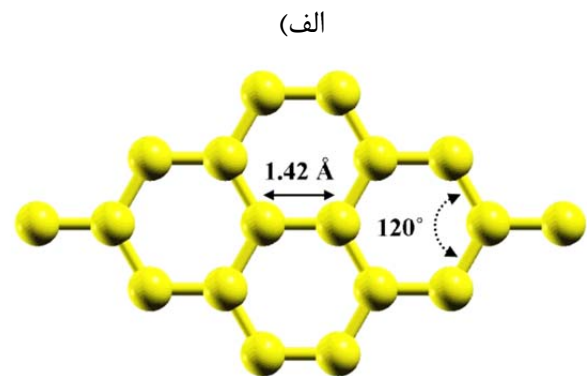
کارهای دیگران	این پژوهش	
1.425 [34] 1.42 [3]	1.42	گرافین
2.27 [35]	2.28	سیلیسین
2.29 [36] 2.287 [3]		

۳. نتایج

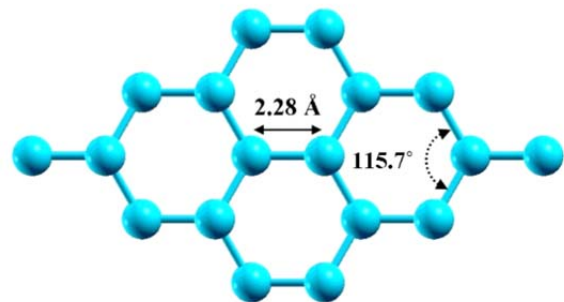
اخیراً، بررسی خصوصیات الکترونی و اپتیکی گرافین و تک لایه‌های شبه گرافینی مانند سیلیسین در کانون توجه مطالعات ساختارهای دوبعدی نانو قرار گرفته است که دلیل آن کاربردهای اپتوالکترونیک این ساختارهای نانومتری است. هر یک از این مواد، رفتار الکترونی و اپتیکی خاص خود را دارند. بنابراین برای استفاده بهینه از آن‌ها، شناخت ویژگی های ساختاری، الکترونی و اپتیکی آن‌ها مهم است. این قسمت بر مطالعه‌ی ساختار هندسی، ساختار نواری و برخی از خصوصیات مهم اپتیکی (از جمله قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک مختلط و طیف تابع اتلاف انرژی) گرافین و سیلیسین تمرکز دارد.

۳-۱. ویژگی‌های ساختاری

گرافین و سیلیسین ساختار هگزاگونال دوبعدی دارند. شکل‌های (۱) و (۲) ساختار هندسی گرافین و سیلیسین را به ترتیب از نمای بالا و نمای جانبی نشان می‌دهند.

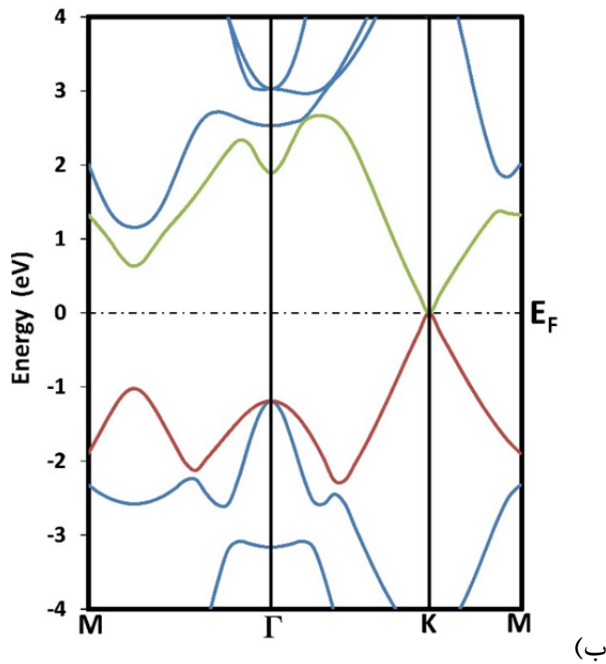


ب)



شکل ۱. ساختار هندسی

الف) گرافین و ب) سیلیسین از نمای بالا



شکل ۳. ساختار نواری الف) گرافین و ب) سیلیسین

۳-۳. ویژگی‌های اپتیکی

اهمیت کاربردهای اپتوالکترونیکی نانو لایه‌ها، از جمله ساختارهای گرافین و سیلیسین، انگیزه‌ی مهمی برای مطالعه‌ی برخی ویژگی‌های اصلی اپتیکی (مانند قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک و طیف تابع اتلاف انرژی) آن‌ها است. نمودار این کمیات بر حسب انرژی موج الکترومغناطیسی برای دو نوع پلاریزاسیون موازی (xx) و عمودی (zz) رسم شده‌اند.

همان‌طور که در ادامه مشاهده می‌شود، ویژگی مهم همه این نمودارها ناهمسانگردی پاسخ اپتیکی گرافین و سیلیسین است که منشا آن، ناهمسانگرد بودن ساختار هگزاگونال دو بعدی این نانو لایه‌ها است.

شکل (۴) قسمت حقیقی تابع دی الکتریک بر حسب انرژی موج الکترومغناطیسی^۸ را برای گرافین و سیلیسین در پلاریزاسیون‌های موازی (xx) و عمودی (zz) نشان می‌دهد.

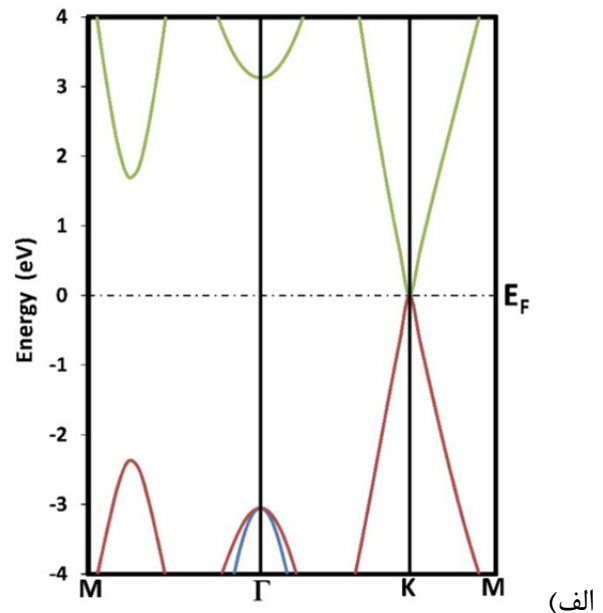
جدول ۳. مقایسه‌ی خمیدگی سیلیسین بر حسب (Å) در این پژوهش با کارهای دیگران

کارهای دیگران	این پژوهش	سیلیسین
0.45 [34]	0.48	
0.46 [36]		

۲-۳. ویژگی‌های الکترونی

در حال حاضر، کاربردهای اپتوالکترونیکی نانو لایه‌ها، خصوصیات مختلف آن‌ها را مورد توجه قرار داده است. بدیهی است که ساختار نواری یک نانو لایه تأثیر زیادی در خصوصیات فیزیکی آن دارد.

همان‌طور که در شکل (۳) دیده می‌شود، ساختار نواری^۷ گرافین به نوعی با سیلیسین متفاوت است. این امر منجر به تمایز رفتار فیزیکی این دو ساختار می‌شود. با این حال، ویژگی مشترک هر دو، ظاهر شدن یک گاف نواری صفر و یک مخروط دیراک در نقطه K است.



الف)

⁸ Electromagnetic (EM) wave

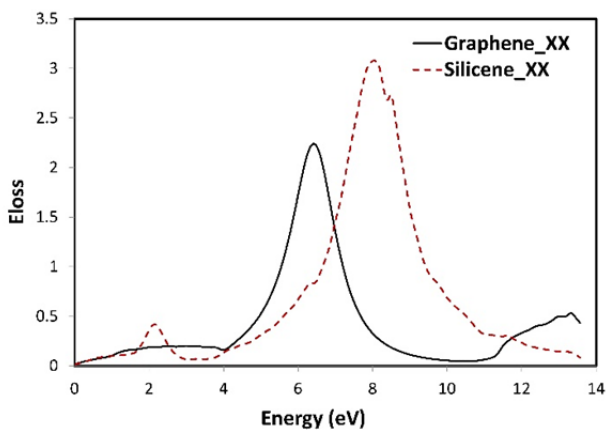
⁷ Band Structure

* با توجه به بازه انرژی بررسی شده در این تحقیق همچنین، مقادیر ریشه های ϵ_1 ، $\epsilon_1 = 0$ در شکل (۴) از اهمیت بسیاری برخوردار هستند و جنبه های اپتیکی ارزشمندی از ماده را نشان می دهند. در حقیقت، مقایسه موقعیت این ریشه ها با مقدار بیشینه ی تابع اتلاف انرژی^۹ منجر به تعیین انرژی پلاسما ($\hbar\omega_p$) ماده می شود. شکل (۵) طیف اتلاف انرژی گرافین و سیلیسین را برای پلاریزاسیون های XX و ZZ نشان می دهد. همان طور که قبلاً ذکر شد، با تمرکز بر روی شکل های (۴) و (۵) می توان فرکانس پلاسما این نانو ورقه ها را به دست آورد جدول (۵). مطابق شکل (۵)، مقدار اتلاف انرژی برای سیلیسین به ویژه در پلاریزاسیون ZZ بیشتر از گرافین است.

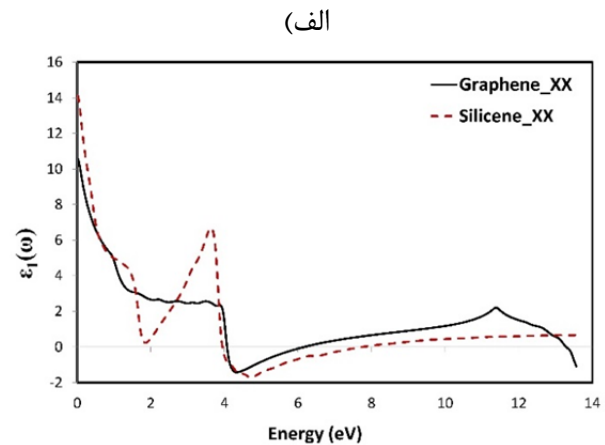
جدول ۵. فرکانس پلاسمایی برای گرافین و سیلیسین در پلاریزاسیون های موازی و عمودی

$\omega_p _{zz}$ (eV/h)	$\omega_p _{xx}$ (eV/h)	
*—	6.4	گرافین
10.5	8	سیلیسین

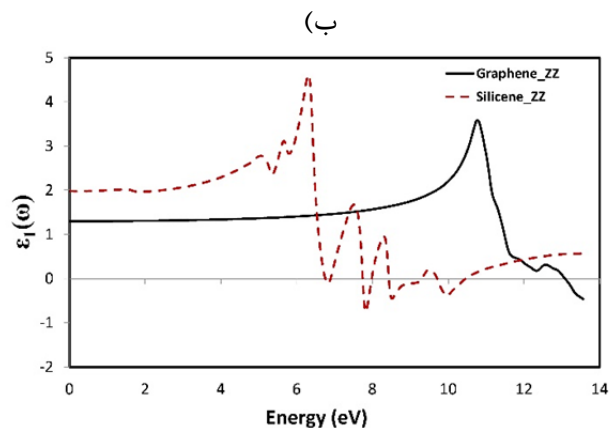
* خارج از بازه انرژی بررسی شده در این تحقیق



(الف)



(الف)



(ب)

شکل ۴. قسمت حقیقی تابع دی الکتریک برای گرافین و سیلیسین در پلاریزاسیون (الف) موازی و (ب) عمودی

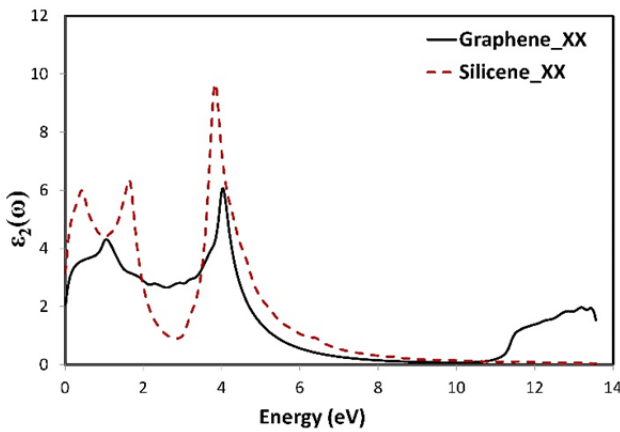
یکی از روش های اصلی برای شناسایی رفتار عبوری ماده، بررسی منحنی $\epsilon_1(\omega)$ است. نکته مهم در مورد منحنی $\epsilon_1(\omega)$ این است که عبور موج الکترومغناطیسی از ماده تنها در بازه های انرژی که ϵ_1 مثبت است انجام می شود، در حالی که در بازه های انرژی $\epsilon_1(\omega)$ منفی، هیچ عبوری مشاهده نمی شود. در جدول (۴) براساس شکل (۴)، بازه های انرژی متناظر با ϵ_1 منفی در گرافین و سیلیسین برای هر دو جهت پلاریزاسیون ارائه شده است.

جدول ۴. بازه های انرژی متناظر با ϵ_1 منفی برای گرافین و سیلیسین در پلاریزاسیون های موازی و عمودی

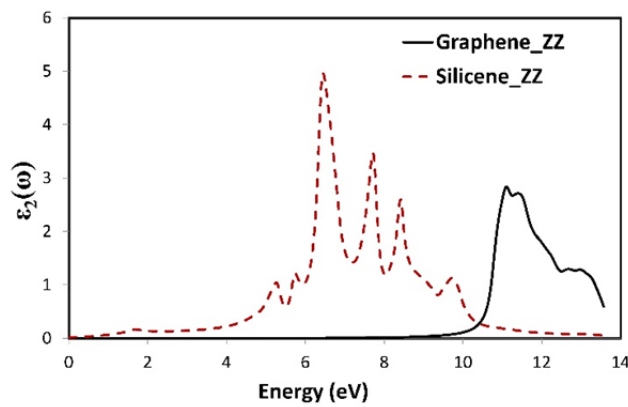
$\epsilon_1 _{zz} < 0$	$\epsilon_1 _{xx} < 0$	
* > 13.1 eV	[4.1 eV, 6.1 eV]	گرافین
[7.7 eV, 8.0 eV] [8.4 eV, 9.3 eV] [9.7 eV, 10.4 eV]	[3.9 eV, 7.7 eV]	سیلیسین

⁹ Energy loss function (Eloss)

(الف)



(ب)

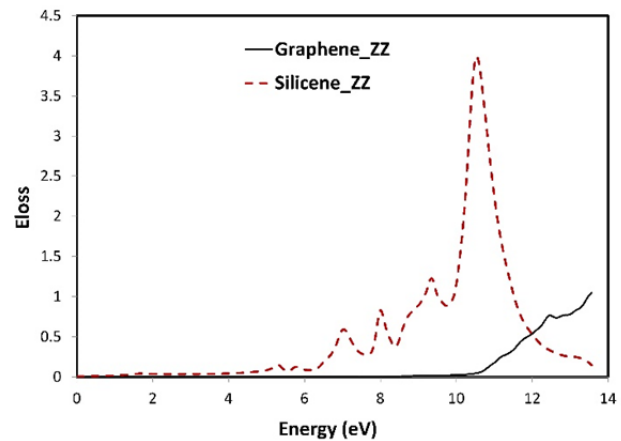


شکل ۶. قسمت موهومی تابع دی الکتریک برای گرافین و سیلیسین در پلاریزاسیون الف (موازی و ب) عمودی

۴. نتیجه گیری

در این پژوهش ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و اپتیکی گرافین و سیلیسین مورد بررسی و مقایسه قرار گرفته است. تمامی محاسبات در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی با استفاده از کد محاسباتی WIEN2k انجام شده است. گرافین و سیلیسین ساختارهای دو بعدی هگزاگونال، به ترتیب ساخته شده از اتم‌های کربن و سیلیسیم هستند و برخلاف گرافین، سیلیسین کمی خمیده است. بر اساس ویژگی ساختاری این نانورقه‌ها که در این تحقیق به دست آمده است، مقادیر طول بهینه‌ی پیوند و خمیدگی، سازگاری خوبی با کارهای نظری دیگران دارند. به منظور بررسی ویژگی الکترونی، از نمودارهای ساختار نواری استفاده کردیم. مشاهده شد که گرافین و سیلیسین گاف نواری صفر دارند. برای بررسی ویژگی‌های اپتیکی،

(ب)



شکل ۵. اتلاف انرژی برای گرافین و سیلیسین در پلاریزاسیون الف (موازی و ب) عمودی

شکل (۶) قسمت موهومی تابع دی الکتریک گرافین و سیلیسین را برای پلاریزاسیون‌های موازی و عمودی نشان می‌دهد. در واقع، قله‌ی ϵ_2 مربوط به جذب زیاد موج الکترومغناطیسی و گذار از نوار ظرفیت به نوار رسانش است. مطابق شکل (۶)، برای هر دو جهت پلاریزاسیون مقدار قله‌ی اصلی ϵ_2 در سیلیسین، بیشتر از گرافین است. هم چنین، از این شکل مشخص است که برای پلاریزاسیون ZZ، هر دو ساختار در طیف مرئی تقریباً شفاف هستند، اما امواج الکترومغناطیسی را در ناحیه‌ی فرا بنفش (UV) جذب می‌کنند. هم چنین به نظر می‌رسد در مقایسه با سیلیسین، نمودار ϵ_2 گرافین (برای پلاریزاسیون ZZ) به سمت انرژی‌های بالاتر منتقل شده و تعداد قله‌ها و نوسانات کمتری دارد. این امر را می‌توان به دلیل کمتر بودن تعداد سطوح انرژی در نوار ظرفیت و رسانش (مناسب برای گذار نواری) در گرافین بیان کرد.

- [4] Ezawa, M., *Photo-Induced Topological Superconductor in Silicene, Germanene, and Stanene*. Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 2015. **28**(4): p. 1249-1253.
- [5] Oughaddou, H., et al., *Silicene, a promising new 2D material*. Progress in Surface Science, 2015. **90**(1): p. 46-83.
- [6] Aufray, B., et al., *Graphene-like silicon nanoribbons on Ag(110): A possible formation of silicene*. Applied Physics Letters, 2010. **96**(18): p. 183102.
- [7] Feng, B., et al., *Evidence of Silicene in Honeycomb Structures of Silicon on Ag(111)*. Nano Letters, 2012. **12**(7): p. 3507-3511.
- [8] Vogt, P., et al., *Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon*. Physical Review Letters, 2012. **108**(15): p. 155501.
- [9] Fleurence, A., et al., *Experimental Evidence for Epitaxial Silicene on Diboride Thin Films*. Physical Review Letters, 2012. **108**(24): p. 245501.
- [10] Li, S., et al., *Defects in Silicene: Vacancy Clusters, Extended Line Defects and Diadatoms*. Scientific Reports, 2015. **5** (1): p. 7881.
- [11] Rachid Tchalala, M., et al., *Formation of one-dimensional self-assembled silicon nanoribbons on Au(110)-(2 × 1)*. Applied Physics Letters, 2013. **102**(8): p. 083107.
- [12] Meng, L., et al., *Buckled Silicene Formation on Ir(111)*. Nano Letters, 2013. **13**(2): p. 685-690.
- [13] Majumdar, A., et al., *Defect induced magnetism in planar silicene: a first principles study*. RSC Advances, 2014. **4**(61): p. 32221-32227.
- [14] Kamyabmehr, S., S. Zoriatian, and L. Farhang Matin, *Effects of Stone-Wales defects on optical properties of silicene: DFT study*. Optik, 2021. **241**: p. 166952.
- [15] Manjanath, A. and A.K. Singh, *Low formation energy and kinetic barrier of Stone-Wales defect in infinite and finite silicene*. Chemical Physics Letters, 2014. **592**: p. 52-55.
- [16] Yao, Q., et al., *Bandgap opening in hydrogenated germanene*. Applied Physics Letters, 2018. **112**(17): p. 171607.
- [17] Khan, K., et al., *Sensing Applications of Atomically Thin Group IV Carbon Siblings Xenon: Progress, Challenges, and Prospects*.

نمودارهای قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک و اتلاف انرژی در ساختارهای گرافین و سیلیسین مطالعه شد. ساختار هندسی ناهمسانگرد در این مواد دویعدی، منجر به ویژگی های اپتیکی ناهمسانگرد می شود. بازه های انرژی مربوط به ϵ_1 مثبت و منفی به منظور تعیین رفتار عبوری در مواد از اهمیت بالایی برخوردارند. با مقایسه منحنی قسمت حقیقی تابع دی الکتریک و نمودار اتلاف، فرکانس های پلاسما را به دست آوردیم. در این تحقیق معلوم شد برای هر دو جهت پلاریزاسیون مقدار قله ای اصلی منحنی ϵ_2 ، در سیلیسین بیشتر از گرافین است. همچنین در پلاریزاسیون zz، هر دو ساختار در طیف مرئی تقریباً شفاف بوده، اما امواج الکترومغناطیسی را در ناحیه ی فرا بنفش (UV) جذب می کنند. علاوه بر این، در مقایسه با سیلیسین، نمودار ϵ_2 گرافین (برای پلاریزاسیون zz) به سمت انرژی های بالاتر منتقل شده و تعداد قله ها و نوسانات کمتری دارد، که می تواند به دلیل تعداد کمتر سطوح انرژی در نوار ظرفیت و رسانش مناسب برای گذار نواری باشد.

همانطور که قبلاً ذکر شد، نتایج به دست آمده در این پژوهش با یکدیگر و همچنین با سایر گزارش های مربوطه سازگاری دارند. ساختارهای گرافین و سیلیسین ویژگی های منحصر به فردی دارند که می توانند در کاربردهای اپتوالکترونیکی استفاده شوند.

مراجع

- [1] Novoselov, K.S., et al., *Electric field effect in atomically thin carbon films*. science, 2004. **306**(5696): p. 666-669.
- [2] Liu, B. and K. Zhou, *Recent progress on graphene-analogous 2D nanomaterials: Properties, modeling and applications*. Progress in Materials Science, 2019. **100**: p. 99-169.
- [3] Trivedi, S., A. Srivastava, and R. Kurchania, *Silicene and Germanene: A First Principle Study of Electronic Structure and Effect of Hydrogenation-Passivation*. Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, 2014. **11**(3): p. 781-788.

- Applied Surface Science, 2010. **256**(21): p. 6313-6317.
- [29] Kara, A., et al., *A review on silicene—new candidate for electronics*. Surface science reports, 2012. **67**(1): p. 1-18.
- [30] Perdew, J.P., K. Burke, and M. Ernzerhof, *Generalized Gradient Approximation Made Simple*. Physical Review Letters, 1996. **77**(18): p. 3865-3868.
- [31] Mohamedou, M.L., et al., *Comparative study of electronic and optical properties of graphene and germanene: DFT Study*. Optik - International Journal for Light and Electron Optics, 2018. **158**: p. 693. ۶۹۸-
- [32] Khenata, R., et al., *Elastic, electronic and optical properties of ZnS, ZnSe and ZnTe under pressure*. Computational Materials Science, 2006. **38**(1): p. 29-38.
- [33] Dorothy, A.A. and P. Panigrahi, *Tuning optical properties of TiO₂ by dimension reduction: from 3D bulk to 2D sheets along {001} and {101} plane*. Materials Research Express, 2020. **6**(12): p. 1250f1.
- [34] Balendhran, S., et al., *Elemental Analogues of Graphene: Silicene, Germanene, Stanene, and Phosphorene*. Small, 2015. **11**(6): p. 640-652.
- [35] John, R. and B. Merlin, *Theoretical Investigation of Structural, Electronic, and Mechanical Properties of Two Dimensional C, Si, Ge, Sn*. Crystal Structure Theory and Applications, 2016. **5**: p. 43-55.
- [36] Feng, J.-w., et al., *Gas adsorption on silicene :A theoretical study*. Computational Materials Science, 2014. **87**: p. 218-226.
- Advanced Functional Materials, 2020. **n/a**(n/a): p. 2005957.
- [18] Lebegue, S. and O. Eriksson, *Electronic structure of two-dimensional crystals from ab initio theory*. Physical Review B, 2009. **79**(11): p. 115409.
- [19] Takeda, K. and K. Shiraishi, *Theoretical possibility of stage corrugation in Si and Ge analogs of graphite*. Physical Review B, 1994. **50**(20): p. 14916.
- [20] De Padova, P., et al., *sp²-like hybridization of silicon valence orbitals in silicene nanoribbons*. Applied Physics Letters, 2011. **98**(8): p. 081909.
- [21] Park, J., et al., *Effects of nonmagnetic impurities on the spin transport property of a graphene nanoribbon device*. The Journal of chemical physics, 2009. **130**(21): p. 214103.
- [22] Veiga, R., R. Miwa, and G. Srivastava, *Quenching of local magnetic moment in oxygen adsorbed graphene nanoribbons*. The Journal of chemical physics, 2008. **128**(20): p. 201101.
- [23] Son, Y.-W., M.L. Cohen, and S.G. Louie, *Energy gaps in graphene nanoribbons*. Physical review letters, 2006. **97**(21): p. 216803.
- [24] Lee, H., et al., *Magnetic ordering at the edges of graphitic fragments: Magnetic tail interactions between the edge-localized states*. Physical Review B, 2005. **72**(17): p. 174431.
- [25] Song, Y.-L., et al., *First-principles study of the structural and electronic properties of armchair silicene nanoribbons with vacancies*. Journal of Molecular Structure, 2011. **990**(1): p. 75-78.
- [26] Ding, Y. and J. Ni, *Electronic structures of silicon nanoribbons*. Applied Physics Letters, 2009. **95**(8): p. 083115.
- [27] Cahangirov, S., et al., *Two-and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium*. Physical review letters, 2009. **102**(23): p. 236804.
- [28] Song, Y.-L., et al., *Effects of the edge shape and the width on the structural and electronic properties of silicene nanoribbons*.