



## جذب سطحی اتمهای سلیسیم بر روی ساختار شبه گرافنی بورفسفاید

مهناز جورابلو، حمیدرضا علایی\*

گروه فیزیک حالت جامد، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی ورامین، ایران

تاریخ ثبت اولیه: ۱۴۰۱/۱۱/۰۵، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۴۰۲/۰۲/۲۵، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۴۰۲/۰۳/۰۲

### چکیده

در این پژوهش بر پایه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی، پس از بررسی ساختار سه بعدی بورفسفاید، ساختار شبه گرافنی آن مطالعه گردید. سپس با جذب سطحی اتم‌های سلیسیم، برخی ویژگی‌های الکتریکی و اپتیکی آن محاسبه شدند. این محاسبات برای بورفسفاید سه بعدی، یک گاف نواری غیر مستقیم (بسیار نزدیک به گزارشهای ثبت شده) بدست آوردند اما برای ساختار شبه گرافنی اش که یک ساختار دوبعدی لانه زنبوری است یک گاف نواری مستقیم  $0.9024$  الکترون ولتی را پیش بینی می نماید که در برابر نور مرئی با قطبش عمودی بسیار شفاف و در برابر قطبش موازی بطور گزینشی توانائی عبور، جذب و بازتاب دارد. این ویژگیها می توانند آنرا به عنوان یک گزینه ی خوب برای قطعات میکرو و نانوالکترونیکی معرفی نمایند. بعنوان یک کار نو، با اضافه کردن سلیسیوم بر روی ساختار شبه گرافنی بورفسفاید، تاثیرات برجسته اش بر گاف نواری و چگالی حالات بررسی شد که صفر شدن گاف نواری (شبه فلز شدن ماده) یکی از پیامدهایش بود. با صفر شدن گاف نواری انتظار می رود این ساختار همچون گرافن ویژگیهای برجسته نشان دهد. برای جذب سطحی سلیسیم در این ساختار چهار جایگاه ویژه وجود دارد که پایدارترین حالت هنگامی رخ می دهد که سلیسیم بر روی بور قرار گیرد.

واژه های کلیدی: بور فسفاید، شبه گرافنی، نظریه‌ی تابعی چگالی، سلیسیم، جذب سطحی، ساختار نواری

### ۱. مقدمه

کاربردهای پر شمار نیم رساناهای III-V، از جمله بورفسفاید زمینه ساز پژوهشهای بسیاری برای افزایش بهره وری و گسترش کارایی آنها شده است [۱-۳]. در یکی از نوین ترین زمینه های این پژوهشها، پژوهشگران با الگوبرداری از ساختار بلوری بی همتای

\*عهده دار مکاتبات: حمیدرضا علایی

نشانی: گروه فیزیک، واحد ورامین، دانشگاه آزاد اسلامی، ورامین، ایران

پست الکترونیک: hr\_alai@yahoo.com: E-mail:

تلفن: ۰۹۱۲۷۱۶۴۷۱۰۰

گرافن، در پی شبیه‌سازی و همانندسازی ساختارهای نیم‌رسانای دیگر هستند که آنها را شبه گرافنی می‌نامند [۴ و ۵]. گرافن با ویژگی‌های شگفت‌انگیز و یکتایش در سال ۲۰۰۴ سنتز گردید که جایزه نوبل فیزیک را برای پدیدآورندگان به ارمغان آورد [۶]. این ویژگی‌های بی‌همتای گرافن آنرا الگویی برای ساختارهای شبه گرافنی نموده که برای سنتز آنها تلاش و کوشش‌های بسیاری صورت می‌گیرد. اگر چه روش‌های مدرن رشد بلور، توانایی ساخت لایه‌های بسیار نازک و با راندمان بالا را برای نیم‌رساناها بوجود آورده اند اما با همه‌ی تلاش‌هایی که برای تولید ساختارهای شبه گرافنی صورت گرفته، تاکنون تنها چند نمونه‌ی نادر از این گونه‌ها سنتز شده‌اند.

در این راستا، نظریه‌پردازی‌ها و شبیه‌سازی‌های تئوری با ارائه‌ی درکی ژرفتر از ویژگی‌های فیزیکی این ساختارها، می‌توانند به پژوهشگران کمک کنند تا در فرآیند سنتز و فناوری قطعات الکتریکی-اپتیکی مبتنی بر این نیم‌رساناها راه کوانتومی‌تری بیابند [۷-۹].

## ۲. روش‌های محاسباتی

این محاسبات بر پایه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی انجام شده که در کد تمام پتانسیلی Wien2K گنجانده شده است [۱۰]. در این محاسبات پس از بررسی ساختار سه بعدی هگزگونال بور فسفاید، ساختار شبه گرافنی اش را که دو بعدی لانه زنبوری است شبیه‌سازی و برخی از مهمترین ویژگی‌های اش از جمله ساختار نواری و چگالی حالات آنرا بدست آوردیم. سپس با اضافه کردن یک ناخالصی (سیلیسیم) بر روی هر کدام از لانه زنبورهای این ساختار شبه گرافنی، تأثیراتش را بر گراف نواری و چگالی حالات (بویژه در سهم اوربیتال‌های غالب) در نوارهای انرژی بررسی نمودیم. ما از روش MBJ نیز بهره بردیم که با معرفی یک پتانسیل تبدیلی جدید تلاش می‌کند نتایج حاصل از تقریب چگالی موضعی و تقریب شیب تعمیم یافته را در محاسبات ساختار نواری بهبود بخشد [۱۱ و ۱۲].

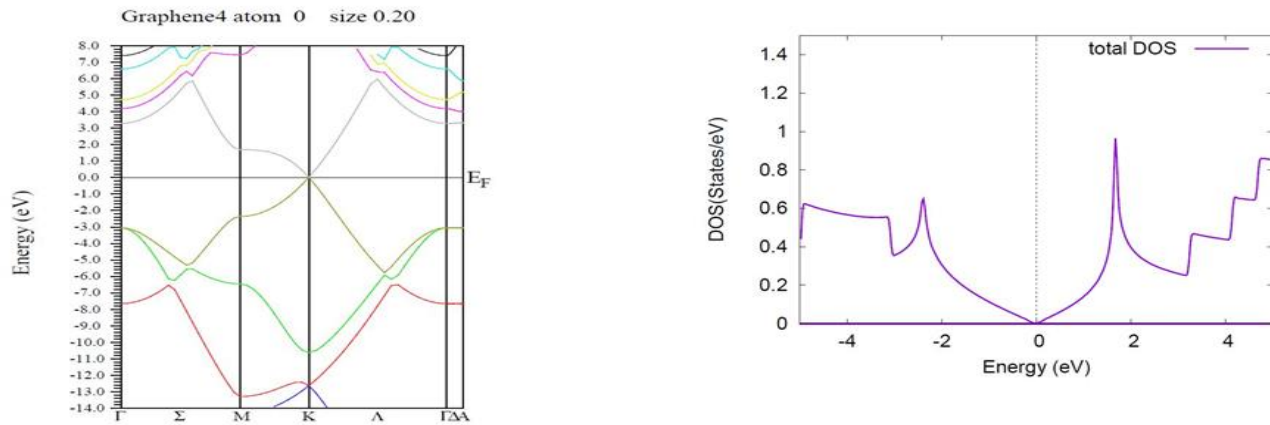
نظریه‌ی تابعی چگالی که بر پایه‌ی قضیای هوهنبرگ و کوهن استوار شده برای بیان ساختار الکترونی مواد و محاسبه‌ی نوارهای انرژی از فرمول‌بندی کوهن-شم که توابع پایه اش امواج تخت بهبود یافته‌ی خطی اند بهره می‌برد. در این فرمول بندی برای معرفی تابع موج کلی یک سیستم بلوری در نزدیکی نقاط شبکه و درون کراتی فرضی بنام کرات موفین تین (که محل استقرار یونهاست و تابع موج تحت تاثیر یک پتانسیل قوی کروی قرار دارد) از هارمونیک‌های کروی و در بیرونش از امواج تخت بهره می‌برد [۱۳].

## ۳. نتایج و بحث

### ۳-۱. شبیه سازی گرافن

در آغاز کار، پیش از شبیه سازی ساختار بورفسفاید شبه گرافنی، برای آزمون روش و کارکرد محاسبات خود، این محاسبات را برای گرافن انجام دادیم که الگوی ساختارهای شبه گرافنی است. چگالی حالات و ساختار نواری آنرا محاسبه نمودیم و دیدیم که

ساختار بدست آمده (شکل ۱) با گاف نواری صفر و مخروط‌های دیراک کج که قله هایشان بر راستای K جای گرفته همخوانی بسیار خوبی با نتایج ثبت شده برای گرافن دارد [۱۴ و ۱۵].

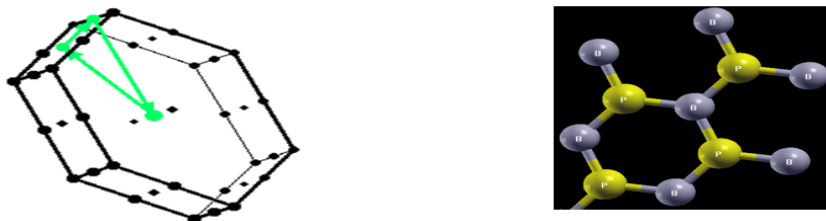


شکل ۱. چگالی حالات و ساختار نواری گرافن

پس از اطمینان از کارکرد این بسته ی محاسباتی، نخست آنرا برای حالت کپه ای بورفسفاید بکار بردیم و ساختار نواری آنرا بدست آوردیم تا در مرحله بعد (پس از شبیه سازی ساختار شبه گرافنی اش) بتوانیم این دو حالت را با یکدیگر مقایسه نماییم.

### ۳-۲. شبیه سازی حالت سه بعدی (کپه ای) و شبه گرافنی بورفسفاید

بورفسفاید بطور طبیعی در فاز بلندروی متبلور می شود که پایدارتر از فاز ورتسایت آن است. اما در اینجا برای آنکه با ساختار شبه گرافنی لانه زنبوری اش (شکل ۲) همریختی بسیار نزدیکتری یابد آنرا با تبلور ورتسایت از گروه تقارنی P63mc-186 در نظر گرفتیم.



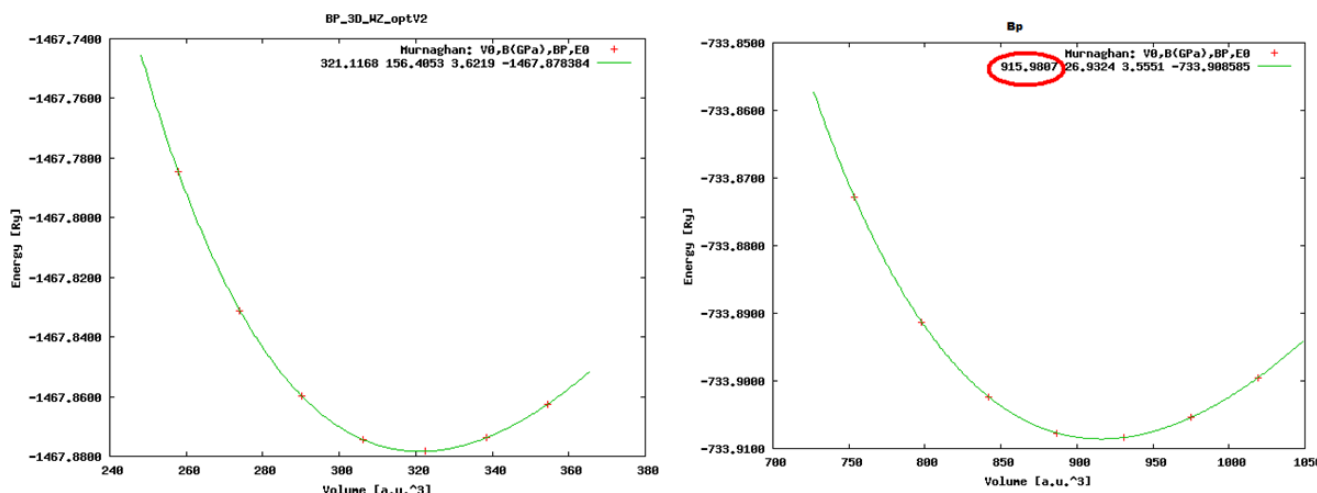
شکل ۲. نمایش ساختار شبه گرافنی بور فسفاید و منطقه اول بریلوئن آن

در این محاسبات، برای رسیدن به بهینه ساختار بلوری ماده، نخستین پارامترهایی که باید بهینه گردند ثوابت شبکه اند. بدین منظور در آغاز کار، ثوابت تجربی گزارش شده برای ساختار کپه ای بورفسفاید را بعنوان داده های اولیه وارد محاسبات نمودیم. البته در فرایند محاسبات، بویژه با تغییر ساختار (از سه بعدی به دوبعدی) این ثوابت نیز تغییر نمودند و در پایان چرخه ی خودسازگار به مقادیر جدول زیر (با یکای آنگستروم) رسیدند که به مقادیر تجربی اش نزدیک اند.

جدول ۱. مقادیر اولیه ی ثابتهای شبکه و حجم تعادلی بور فسفاید

BP	a	b	c
2d	۳/۱۸۰۰۳۳۱	۳/۱۸۰۰	*۱۵/۱۶۴۵
3d	۳/۵۶۲۰۰	۳/۵۶۲۰۰	۵/۹۰۰

در اینجا برای شبیه سازی ساختار دو بعدی این ماده، ثابت شبکه ی C (در سومین ستون جدول ۱) را که عمود بر راستای صفحه ی دو بعدی است ۱۵/۱۶۴۵ آنگستروم (که سه برابر مقدار حالت سه بعدی اش می باشد) در نظر گرفتیم تا بدینوسیله برهمکنش لایه های همسایه را ناچیز نموده، به ساختار دوبعدی بسیار نزدیک شویم. برای بهینه سازی ثوابت شبکه در نخستین گام، سه پارامتر kpoint، RKmax و Gmax بهینه شدند که پیش نیاز بهینه سازی حجم و ثابت های شبکه ی تعادلی است. در پایان این مرحله از محاسبات، بهینه مقادیر این سه پارمترها در ساختار دو بعدی شبه گرافنی بور فسفاید به ترتیب برابر با ۲۰۰، ۸ و ۱۴ بدست آمدند. سپس در تقریب ۱۳، GGA، انرژی جداسازی هسته و الکترون های ظرفیت را ۸ ریدبرگ در نظر گرفتیم و با کاهش ۱۵ درصدی شعاع موفین تین، آماده سازی را انجام دادیم. در پایان این مرحله، بر پایه ی معادله ی مورناگان، نمودار برازش یافته ی انرژی کل بر حسب حجم بصورت سهمی گونهای زیر ظاهر شدند که نقطه ی کمینه ی این سهمی ها بیانگر حجم بهینه ای است که به ازای آن انرژی کل ساختار نیز کمینه می شود. با پیدایش حجم بهینه، ثابت های شبکه ی تعادلی نیز بدست می آیند که برای ساختار دوبعدی شبه گرافنی در جدول ۲ وارد شده اند.



شکل ۳. برازشهای مورناگان انرژی - حجم برای: بور فسفاید دو بعدی شبه گرافنی (BP) و بور فسفاید سه بعدی با تبلور ورتسایت (BP-3D-WZ)

جدول ۲. بهینه مقادیر ثابتهای شبکه و حجم تعادلی بور فسفاید شبه گرافنی

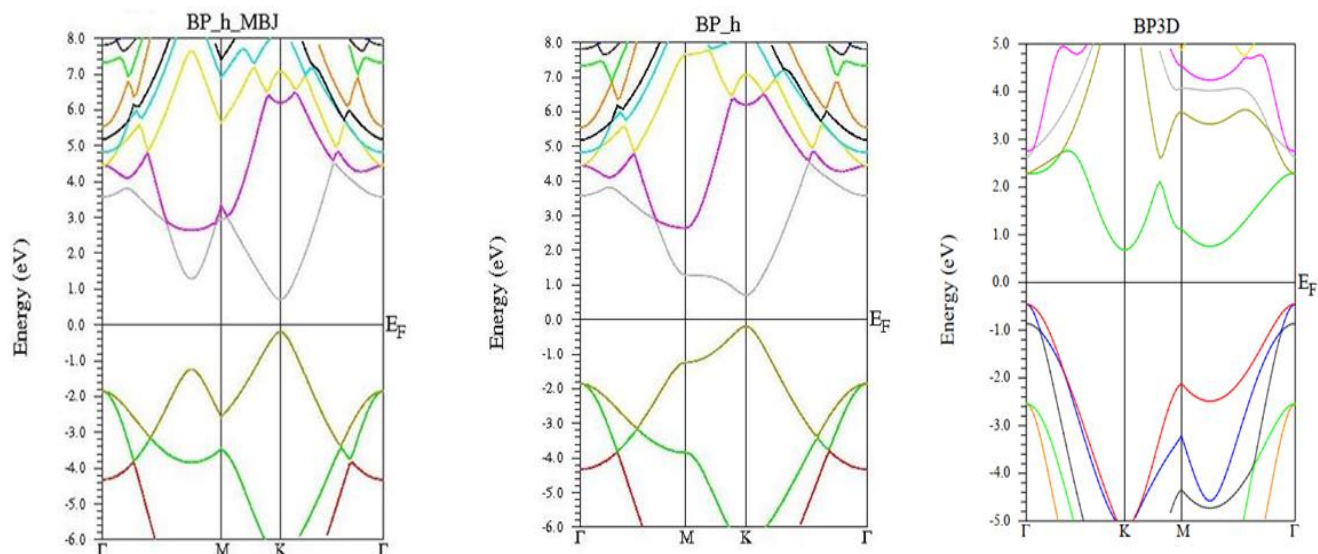
$BP\_h$	تجربی	تئوری	اختلاف
$a$	۳/۱۷۹۹۹	۳/۲۱۴۸۸	۰/۰۳۴
$b$	۳/۱۷۹۹۹	۳/۲۱۴۸۸	۰/۰۳۴
$c$	۱۴/۹۹۹۹۹	۱۵/۱۶۴۵۳	۰/۱۶۴
$V$	۸۸۶/۴۸۸۷	۹۱۵/۹۸۰۷	۲۹/۴۹۲
$c/a$	۴/۷۱۶۹۹۲۸۲۱	۴/۷۱۶۹۸۱۶۶	۰/۰۰۰۰۱۱۱۶۱

## ۳-۳. ساختار نواری (Band Structure)

برای محاسبه‌ی ساختار نواری بلور به مجموعه‌ای از نقاط  $k$  در فضای وارون، بویژه در مسیر نقاط پرتقارن در منطقه اول بریلوئن نیاز داریم تا ویژگی مقادیر انرژی را در این نقاط برای نوارهای گوناگونش محاسبه کنیم. بدین منظور در نرم‌افزار xcrystden مسیری را در منطقه اول بریلوئن برمی‌گزینیم که در بردارنده‌ی تعدادی از این نقاط (مثلاً  $\Gamma$ -M-K- $\Gamma$ ) باشد. نتایج این محاسبات برای ساختار نواری بور فسفاید در سه حالت: (الف) سه بعدی، (ب) دو بعدی شبه گرافنی و (ج) دو بعدی شبه گرافنی با روش MBJ در شکل ۴ نشان داده شده اند.

این محاسبات برای ساختار سه بعدی یک گاف نواری غیرمستقیم  $1/28$  الکترون ولتی را بدست آوردند که در بازه‌ی گزارشهای ثبت شده است [۱۶ و ۱۷]. آنگاه با اطمینان بیشتر، همین محاسبات را برای بورفسفاید شبه گرافنی انجام دادیم. محاسبات ساختار نواری اش (شکل ۴ ب) نشان دادند که تراز فرمی بین لبه‌ی بالایی نوار ظرفیت و لبه‌ی پایینی نوار رسانش قرار گرفته و یک گاف نواری مستقیم به بزرگی  $0.9024$  الکترون ولت در راستای  $K$  بین آنها پدیدار شده که در بازه‌ی نتایج ثبت شده است [۱۸]. همچنانکه می‌بینیم در این ساختار، وارونگی نوارهای انرژی رخ نداده ولی نوارهای ظرفیت در نقطه‌ی  $\Gamma$  به یک تبهگنی رسیدند. ما از روش MBJ که معمولاً نتایج محاسبات ساختار نواری نیمرساناها را بهبود می‌بخشد نیز بهره بردیم اما در اینجا بکارگیری این روش، تغییرات بسیار اندکی برای ساختار نواری در پی داشت از جمله گاف نواری که با کاهش بسیار ناچیزی به  $0.90238$  الکترون رسید و چشمگیرترین این تغییرات پیدایش دو قله تیزتر برای نوارهای رسانش و ظرفیت بود.

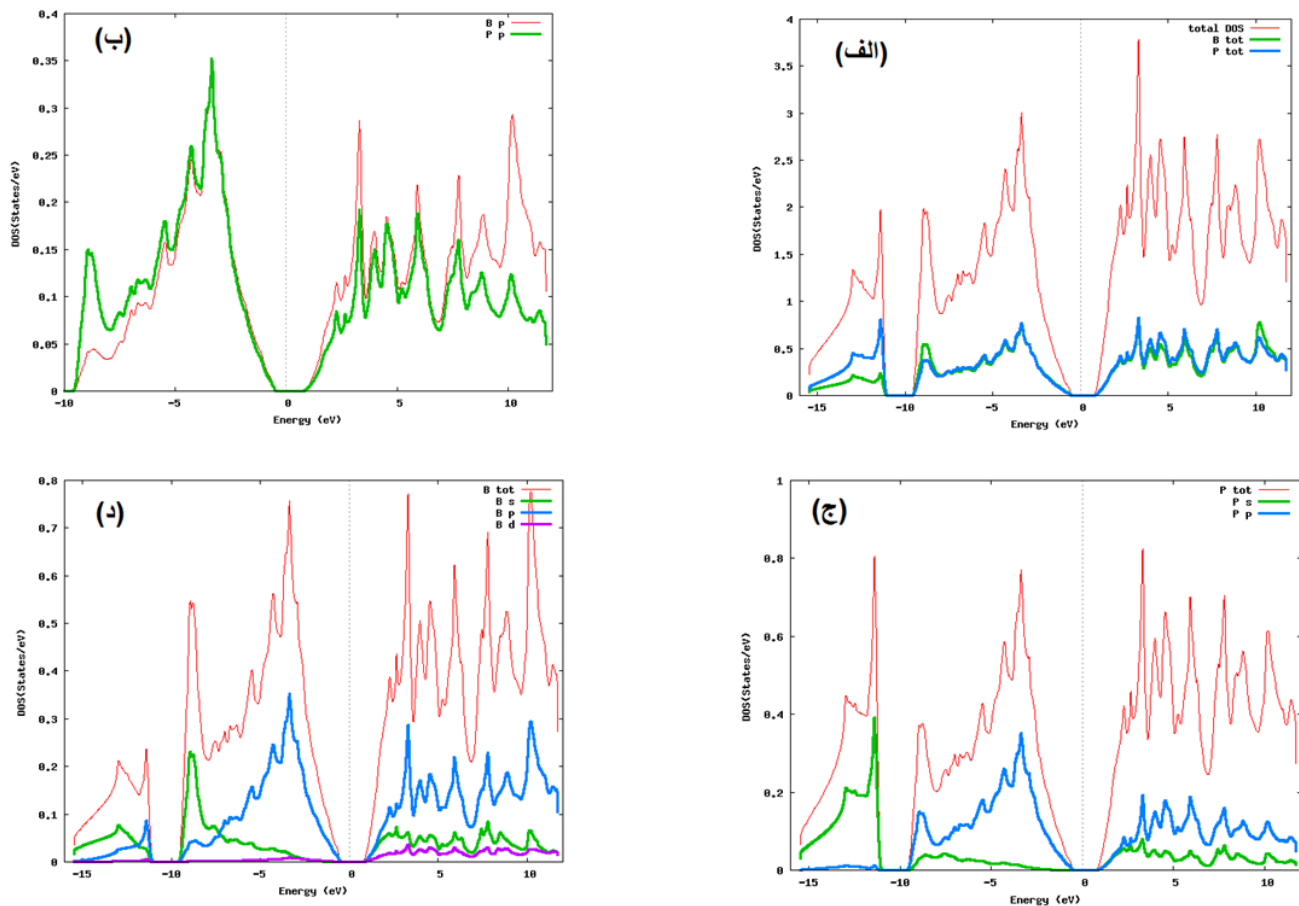
از آنجا که تاکنون ساختار شبه گرافنی بورفسفاید سنتز نشده و مقادیری تجربی برای مقایسه با نتایج نظری بدست آمده وجود ندارند بنابراین اظهار نظر در باره‌ی میزان درستی و کاربردپذیری این نتایج سخت است. ازاینرو تنها می‌توانیم همخوانی نمودارهای ساختار نواری با چگالی حالات (شکل‌های ۵) را گواهی بر درستی این محاسبات بپذیریم.



شکل ۴. ساختار نواری بورفسفاید: (الف) سه بعدی BP-3D، (ب) دو بعدی شبه گرافنی BP-h، (ج) دو بعدی شبه گرافنی با روش BP\_h\_MBJ

### ۳-۴. چگالی حالات در گستره‌ی انرژی (Density Of State)

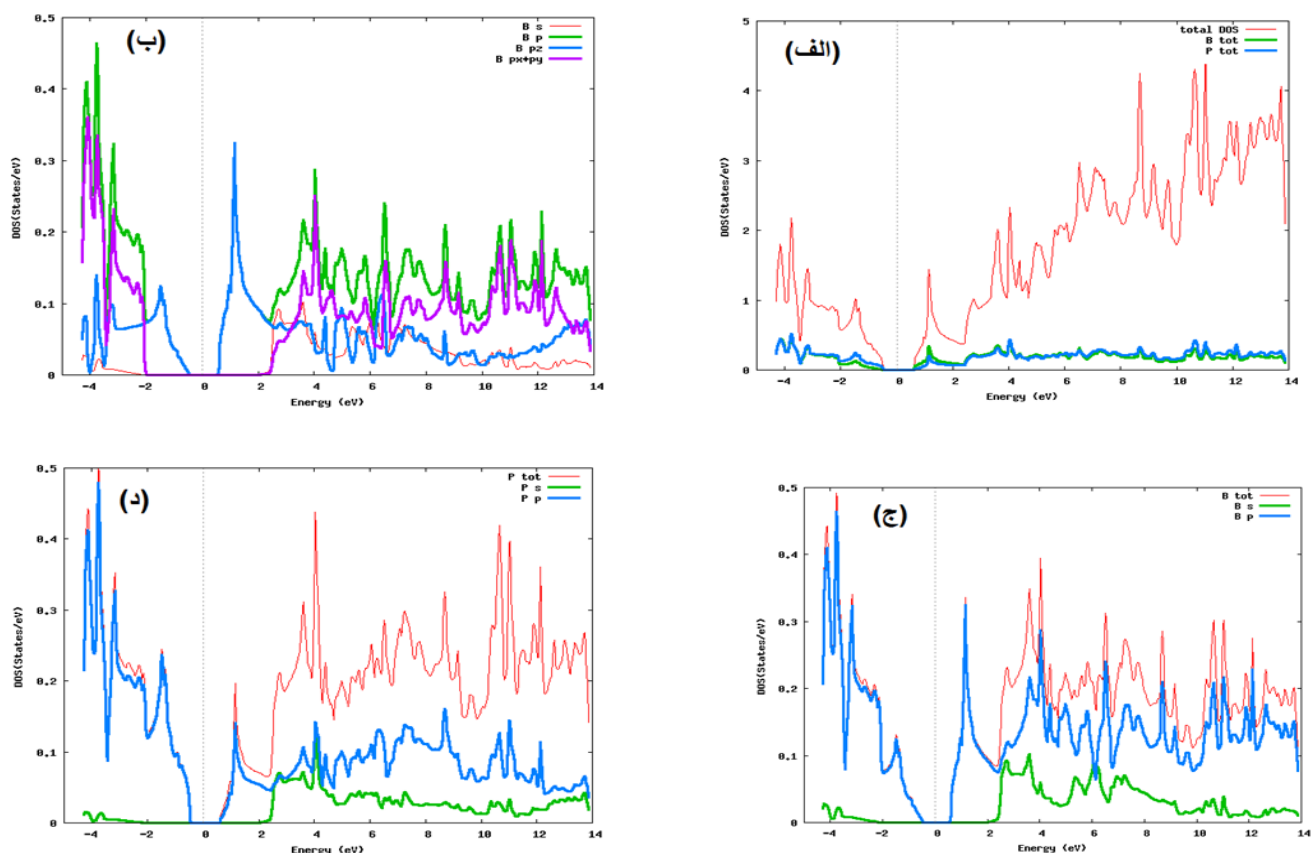
نمودارهای چگالی حالات، نحوه‌ی توزیع ابر الکترونی و چگونگی مشارکت اربیتال‌های مختلف در ترکیب را نشان می‌دهند. این نمودارها برای ساختار سه بعدی بورفسفاید در شکل ۵ به نمایش درآمده‌اند. این طیفها در بازه‌ی انرژی ۱۵ eV - تا ۱۰ eV که تراز فرمی در مبدأش قرار دارد رسم شده‌اند. در همه‌ی آنها گافی به بزرگی  $1/28$  الکترون ولت همانند گاف ساختار نواری پدیدار شده است. در یک نگرش کلی به سهم اربیتالهای گوناگون در چگالی حالات کلی (شکل ۴ ب) می‌بینیم که این حالات عمدتاً از ترکیب هم اندازه‌ی اربیتالهای P اتمهای بور و فسفر تشکیل شده‌اند در حالیکه اربیتالهای S و d آنها سهم اندکی در این چگالی حالات دارند. البته در ناحیه‌ی مغزه‌ی نوار رسانش، سهم اربیتالهای S دو اتم ناگهان بر سهم اربیتالهای دیگر فزونی می‌یابد و دارای قله‌های تیزی می‌شوند که با یک شبه گاف (که پیرامون انرژی ۱۰- الکترون ولت تشکیل شده) از هم جدا شده‌اند.



شکل ۵. نمودارهای چگالی حالات ساختار سه بعدی بور فسفاید

نمودارهای چگالی حالات برای ساختار دو بعدی لانه زنبوری بور فسفاید در شکل ۶ به نمایش درآمده اند. این طیفها در بازه ی انرژی  $4\text{ eV} -$  تا  $14\text{ eV}$  که انرژی فرمی در مبدأش قرار دارد رسم شده اند که قله هایش بیانگر بیشترین میزان مشارکت اوربیتال های گوناگون در ساختار نواری هستند. در بازه ی  $0.191\text{ eV} -$  تا  $0.71\text{ eV} -$  گافی همانند گاف ساختار نواری (شکل ۴-ج) بوجود آمده و این همانندی می تواند گواهی بر درستی محاسبات باشد. چگالی حالت کلی در طرفین گاف نواری (از لبه ی نوار ظرفیت تا انرژی های بیش از  $2\text{ eV} -$  و نیز از لبه ی نوار رسانش تا انرژی های کمتر از  $2\text{ eV}$ ) قله های نسبتا تیزی دارند که عمدتا از ترکیب اربیتالهای  $P_z$  اتمهای بور و فسفر تشکیل شده اند. در اینجا همچون حالت سه بعدی اربیتالهای  $S$  سهم ناچیزی در چگالی حالات دارند. در این نواحی چگالی حالات جزئی دو اتم قله های تیزی دارند که مقایسه ی این قله ها نشان می دهد، در سمت چپ گاف نواری (نزدیک لبه ی بالائی نوار ظرفیت) اربیتالهای  $P$  اتمهای فسفر با قله ای بلندتر از  $0.2$  حالت بر الکترون ولت، سهم نسبتا بیشتری در چگالی حالات دارند اما در سمت دیگر (نزدیک لبه ی پایینی نوار رسانش) اربیتالهای  $P_z$  اتمهای بور (با قله ای بلندتر از  $0.3$  حالت بر الکترون ولت) سهم نسبتا بیشتری در چگالی حالات این نوار دارند. بنابر این می توان گفت که در این نواحی از هیبریداسیون اربیتالهای  $P_z$  این دو اتم و تشکیل پیوندهای  $\pi$ ، نخستین نوارهای رسانش و ظرفیت تشکیل شده اند در حالیکه برای

تشکیل دومین نوار رسانش و دومین نوار ظرفیت، اربیتالهای  $P_{x+y}$  این دو اتم مشارکت بیشتری دارند. در اینجا اربیتالهای  $S$  این دو اتم، تنها در ته نوار ظرفیت آنهم بمیزان ناچیزی مشارکت دارند که با نزدیک شدن به گاف نواری، این مشارکت به صفر می‌گراید. مشارکت این اربیتالها در نوار رسانش (تا انرژی ۲ الکترون ولت) نیز در حد صفر است اما کمی بالاتر از آن ناگهان این مشارکت بزرگ می‌شود و به بیش از ۱ حالت بر الکترون ولت می‌رسد. اگرچه برای هر دو اتم، سهم اربیتالهای  $S$  در نوار رسانش همواره کمتر از اربیتالهای  $P$  است با اینحال بازهم می‌توان انتظار داشت که در این نواحی از هیبریداسیون ضعیف اربیتالهای  $P_{x+y}$  و  $S$  پیوندهای  $\sigma$  تشکیل شده باشد.



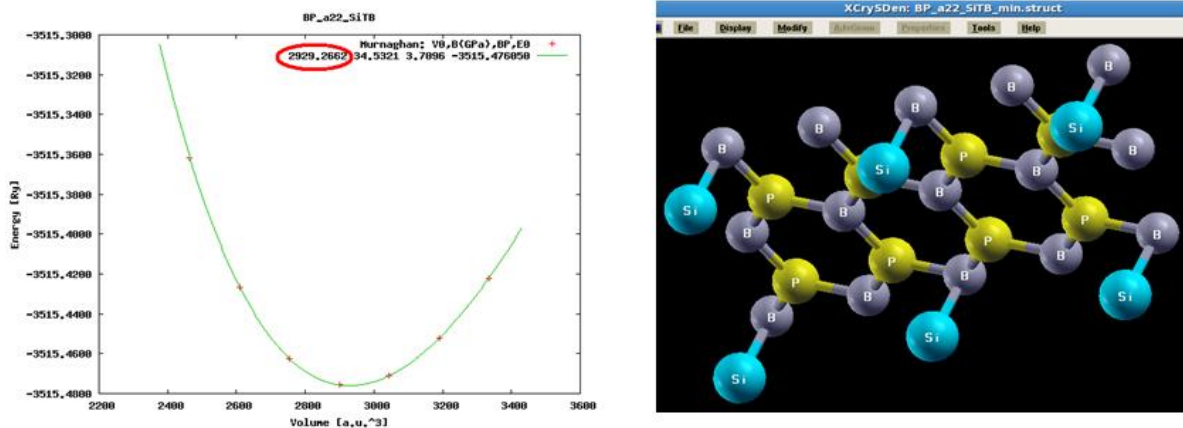
شکل ۶. نمودارهای چگالی حالات برای بور فسفاید دو بعدی لانه زنبوری

### ۳-۵. جذب سطحی سیلیسیم بر ساختار شبه گرافنی بور فسفاید:

در بسته‌های محاسباتی با ساخت سوپرسل می‌توان ناخالصی‌ها را به نیم‌رساناهای بلورین افزود. در اینجا از سیلیسیم که در زمره ی نخستین نیم‌رساناهای صنعتی می‌باشد به عنوان عنصر افزودنی بر ساختار شبه گرافنی بور فسفاید بهره می‌گیریم که همچون دیگر عناصر گروه چهارم جدول تناوبی، بخاطر ویژگیهای فیزیکی برجسته اش کاربردهای گسترده‌ای در صنعت نیم‌رساناها دارد. این عناصر از طریق آلاینش یا جذب سطحی، مشارکت بسیار موثری در تغییر ویژگیهای الکتریکی، اپتیکی، مغناطیسی و مکانیکی مواد نیم‌رسانا از جمله نیم‌رساناهای دو بعدی و شبه گرافنی دارند [۱۹].



در اینجا برای بررسی تأثیرات سیلیسیم بر ساختار الکترونی، ساختار نواری و چگالی حالات بورفسفاید شبه گرافنی، نخست یک سوپرسل به ابعاد  $2 \times 2 \times 1$  می‌سازیم که از افزودن یک اتم سیلیسیم بر روی شبکه ی لانه زنبوری (شکل زیر) بدست آمده است. برای افزودن سیلیسیم بر روی این ساختار لانه زنبوری، چهار جایگاه ویژه وجود دارد که عبارتند از: بالای اتم بور، بالای اتم فسفر، بالای پل بین آنها و بالای مرکز لانه زنبورها. ما هر چهار حالت را بررسی کردیم و دیدیم که پایدارترین حالت (کمترین انرژی) هنگامی رخ می‌دهد که سیلیسیم بر روی بور قرار گیرد. ما این حالت پایدار را برگزیدیم و چرخه ی محاسبات پیشین را (که برای گرافن و بورفسفاید سه بعدی بکار برده بودیم) برای این ساختار نیز تکرار نمودیم. از برازش مورناگان انرژی - حجم اش (شکل زیر) می‌توان بهینه حجمی که در نقطه ی کمینه این منحنی جای گرفته را بدست آورد. در جدول ۳، این مقادیر به همراه مقادیر تجربی شان وارد شده اند.



شکل ۷. نمایش سوپرسل بور فسفاید شبه گرافنی پس از جذب سطحی اتمهای سیلیسیم (سمت راست) و برازش مورناگان (سمت چپ).

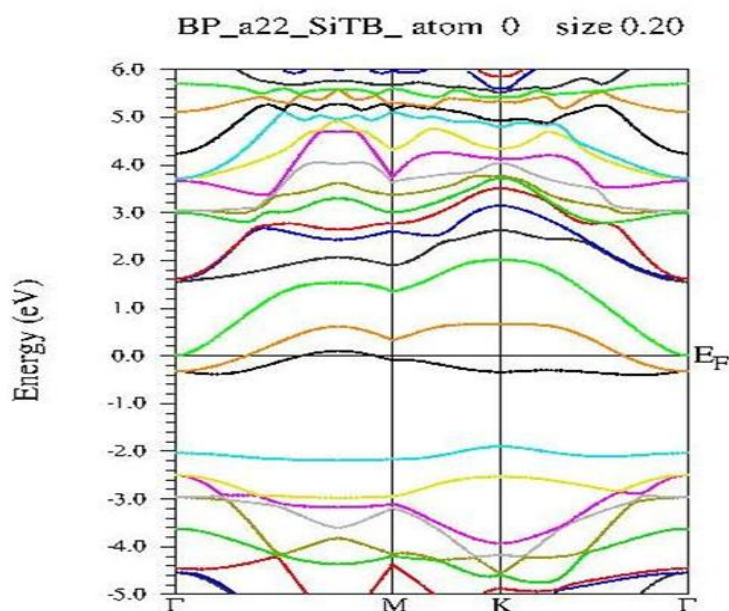
جدول ۳. مقایسه ی مقادیر تجربی و تئوری ثابت‌های شبکه ی سوپرسل بور فسفاید. (یکای ثابتهای شبکه آنگستروم اند).

<i>BP_a22_SiTB</i>	تجربی	تئوری	اختلاف
<i>a</i>	۶/۴۲۷۶	۶/۴۴۹۶	۰/۰۲۱۶
<i>b</i>	۶/۶۴۲۷	۶/۴۴۹۶	۰/۰۲۱۶
<i>c</i>	۱۱/۹۹۵۹	۱۲/۰۳۷۱	۰/۰۷۷۷۶
<i>c/a</i>	۱/۸۶۶۳۲۱۹۱	۱/۸۶۶۳۲۱۹۱۱۵۹۵۷	۰
<i>V</i>	۴۲۹/۲۰۵۵	۴۲۸/۷۳۶۷۲	۰/۴۲۳۲

### ۳-۶. ساختار نواری و چگالی حالات

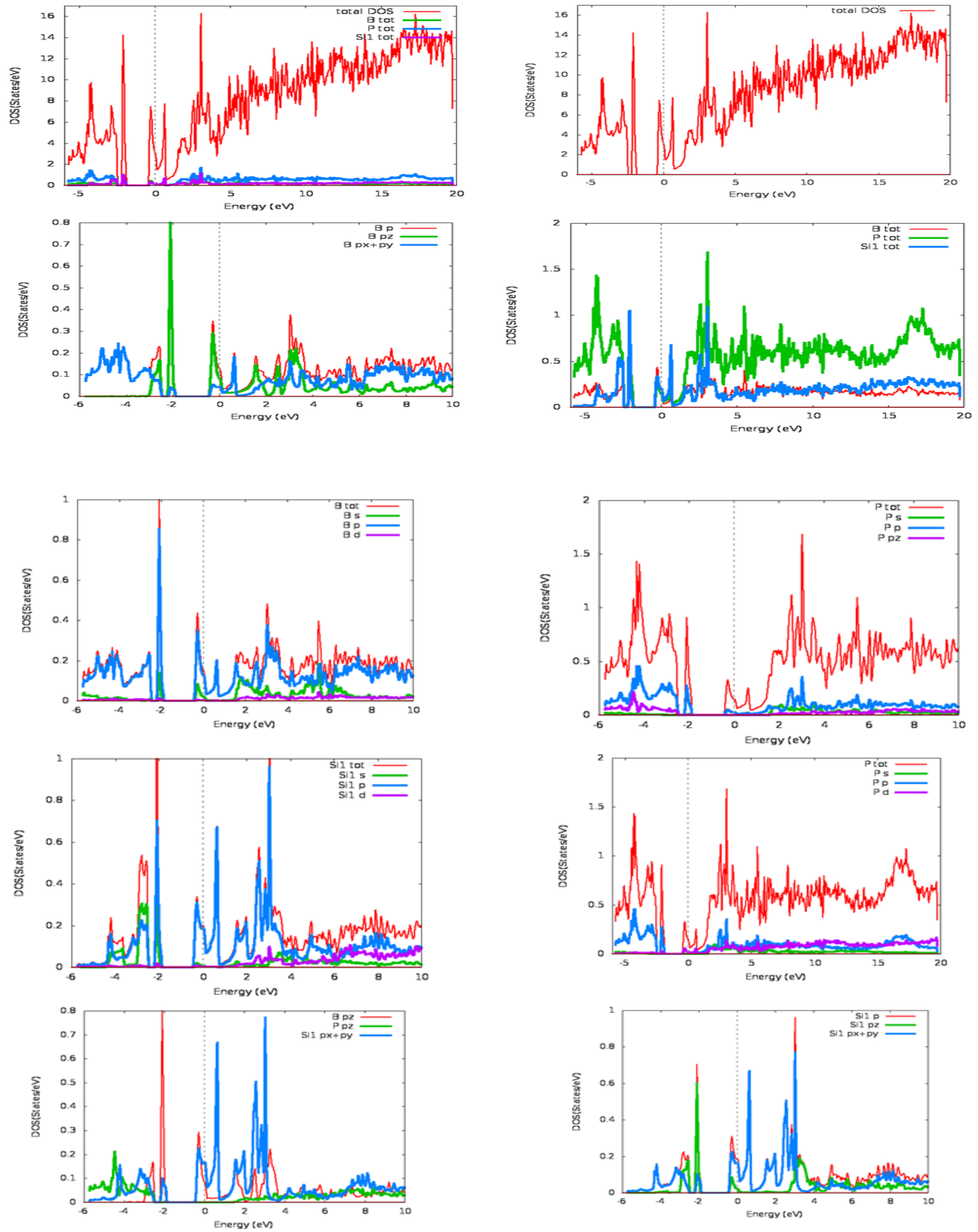
شکل زیر ساختار نواری بور فسفاید شبه گرافنی را پس از جذب سطحی سیلیسیم نشان می‌دهد. همچنانکه می‌بینیم با افزودن سیلیسیم، نوارهای رسانش و ظرفیت بر روی تراز فرمی یکدیگر را قطع می‌کنند، گاف نواری از بین می‌رود و ساختار از نیمرسانا به

یک شبه فلز تبدیل میشود. با صفر شدن گاف نواری، ساختار همانندی بیشتری با گرافن پیدا میکند و انتظار می رود ویژگیهای گرافن گونه ی بیشتری بروز دهد. از مقایسه ی این طیف با طیفهای ساختار بدون سیلیسم (شکلها ۴ ب و ۴ ج)، علاوه بر صفر شدن گاف نواری، کاهش قله ها و گرایش به تخت شدگی نوارها را نیز می بینیم که می تواند برگرفته از حالت های جایگزیده یا تشدید اریتالهای p سیلیسم و پیوندهای بسیار ضعیف سیلیسم - سیلیسم باشد.



شکل ۸. ساختار نواری بور فسفاید شبه گرافنی پس از افزودن سیلیسم بر روی بور

نمودارهای زیر، چگالی حالات کلی و جزئی و میزان مشارکت اتمها بویژه سیلیسم را در مراتب گوناگون انرژی برای این ساختار نشان می دهند. از مهمترین ویژگیهای این نمودارها مشارکت غالب اتم سیلیسم در حوالی تراز فرمی است که صفر شدن گاف نواری را در پی داشته است. از مقایسه ی این طیفها با طیفهای ساختار بدون سیلیسم (شکل ۶) بعنوان پدیده ای نو، هم صفر شدن گاف نواری و هم تغییر پیکربندی چگالی حالات را می بینیم. همچنین در حالیکه در ساختار بدون سیلیسم، سهم فسفر در نیمه ی پایینی نوار رسانش با اندکی تفاوت، بیشتر از بور است اما پس از افزودن سیلیسم بر روی بور این برتری از بین می رود و در سرتاسر نوارهای رسانش و ظرفیت، سهم اتم بور برتری چشمگیری می یابد. ما چنین پدیده ای را در ساختار شبه گرافنی اکسیدروی هنگامی که سیلیسم به آن افزوده شد نیز دیدیم [۲۰].



شکل ۱۰. چگالی حالات ساختار شبه گرافنی بورفسفاید پس از افزودن سیلیسیم بر روی بور

با مروری بر پیشینه ی کارهای انجام شده بر روی ساختار دوبعدی بورفسفاید، پژوهشی که دربردارنده ی پدیده ی جذب سطحی سیلیسم بر روی این ساختار باشد یافت نگردید. از اینرو همگونی ساختار نواری با منحنی چگالی حالات را می توانیم به عنوان گواهی بر درستی این محاسبات بپذیریم.

#### ۴. نتیجه گیری

محاسبات با بهره مندی از روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده و برپایه ی نظریه ی تابع چگالی انجام شدند. نتایج بدست آمده برای بورفسفاید سه بعدی و دوبعدی شبه گرافنی و نیز برای گرافن که الگوی اینگونه ساختارهاست با کارهای دیگران همگونی خوبی دارند. در حالی که برای ساختار سه بعدی بورفسفاید یک گاف نواری غیرمستقیم بدست آمد، برای ساختار شبه گرافنی اش یک گاف نواری مستقیم  $0.9024$  الکترون ولتی و برای همین ساختار پس از جذب سطحی اتم های سیلیسم گاف نواری صفر را در پی داشت. با ناپدید شدن گاف نواری، انتظار می رود این ساختار شبه گرافنی ویژگیهای شگفت انگیزی همچون گرافن از خود نشان دهد. در این ساختار لانه زنبوری، برای جذب سطحی سیلیسم، چهار جایگاه ویژه وجود دارد که پایدارترین حالت (با کمینه انرژی) هنگامی رخ می دهد که سیلیسم بر روی اتم بور قرار گیرد.

#### ۵. مراجع

- [1] Vu, T. V., Kartamyshev, A. I., Hieu, N. V., Dang, T. D. H., Nguyen, S.N., Poklonski, N. A., Nguyen, C. V., Phuch, H. V. and Nguyen N. H., (2021). Structural, elastic, and electronic properties of chemically functionalized boron phosphide Monolayer. *RSC Adv.* 11, pp. 8552.
- [2] Ullah, S., Denis, P. A. and Sato, F., (2018). Hydrogenation and Fluorination of Rsenide: A Density Functional Theory. *ACS OMEGA*, 3, pp. 16416–16423.
- [3] م. پشنگ پور، (۱۳۹۹). مقایسه ویژگیهای مکانیکی، نوری و انتقال الکترونی دو فاز همسانگرد و ناهمسانگرد بورو فسفین، مجله پژوهش فیزیک، جلد ۲۰ شماره ۴.
- [4] Nguyen, C., Hoang, V., Phuc, H. V., Sin, A. Y., and Nguyen, C. V. (2021). Two-Dimensional Boron Phosphide/MoGe<sub>2</sub>N<sub>4</sub> van der Waals Heterostructure: A Promising Tunable Optoelectronic Material. *J. Phys. Chem. Lett.*, 12, pp.5076–5084.
- [5] Vahabzadeh, N. and Alaei, H. R., (2019). Ab-initio study of electronic properties of Si(C) honeycomb structures. *Chinese Journal of Physic.* 57, pp. 479–489.
- [6] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., Firsov, A. A., (2004). Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, 306, pp.666.
- [7] Matthes, L., Pulci, O., Bechstedt, F., (2014). Optical properties of two-dimensional honeycomb crystals graphene, silicene, germanene, and tinene from first principles. *New J. Phy*, 16, pp.10500.
- [8] Huang, X., Cao, Q., Wan, M. and Song, H. Z., (2022). Electronic and Optical Properties of BP, InSe Monolayer and BP/InSe Heterojunction with Promising Photoelectronic Performance. *Materials*, 15, pp. 6214.
- [9] Electronic and photocatalytic properties of two-dimensional boron phosphide/SiC van der Waals heterostructure with direct type-II band alignment a first principles study, (2020). Do, T.N., Idrees, M., Amin, B., Hieu N. N., Phuc, H.V. Hieu, N. V., Hoa, L.T. and Nguyen, C.V., *RSC Adv.*, 10, pp. 32027.

- [10] Blaha, P., Schwarz, K., and Luitz, J. (1990). Computer code WIEN97 (Vienna University of Technology, Vienna, *Comput. Phys. Commun.* 59, pp. 399.
- [11] F. Tran, P. Blaha, (2009). Accurate band gaps of semiconductors and insulators with a semilocal exchange-correlation potential. *Phys. Rev. Lett.* 102, pp. 226401.
- [12] Hussain, F., Imran, M., Abo, S. G., Ahmad, S.A. and, Feng, Y. P., (2014). First-principles study of structural, electronic and Properties of  $Zn_{1-x}Mg_xO$  ternary alloys using modified Becke–Johnson potential, *Materials Science in Semiconductor Processing*, 18, pp. 114–121.
- [13] Hohenberg, P. and kohn, W. (1964). Perspective on Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.* 136, pp. 864.
- [14] Lin, H. And Zexiang, S. (2009). Bandgap engineering of graphene: A density functional theory study. *Appl. Phys. Lett.* 95,
- [15] Mosayeb, N., Jalilian J., Salahub, R., Lourenço, M. P. and Rezaei, G., (2022). Hexatetra-Carbon: A Novel Two-Dimensional Semiconductor Allotrope of Carbon. *Computation*, 10, pp.19.
- [16] Bencherifa, K., Yakoubia, A. and Mebtouchea, H., (2017). Structural and Electronic Properties of the BN, BP and BAs in the Different Phases of Zinc-Blende, NaCl and CsCl. *Acta Physica Polonica A*, 131, pp.
- [17] Labidi, S., Meradji, Ghemid, H., Mecabih, S., Abbara S., B., (2009). Pressure dependence of electronic and optical properties of zincblende BP, BAs and BSb compounds, *JOAM*, pp. 994–1001.
- [18] Şahin, H., Cahangirov, S., Topsakal, M., Bekaroglu, E., Akturk, E., Senger, R. T. and Ciraci, S., (2009). Monolayer honeycomb structures of group-IV elements and III-V binary compounds: First-principles calculations, *Phys. Rev. B*, 80, pp. 155453.
- [19] Özcelik, V. O., Kecik, D., Durgun, E., Ciraci, S., (2015). Adsorption of Group IV Elements on Graphene, Silicene, Germanene and Stanene: Dumbbell Formation. *The Journal of Physical Chemistry C*, 119, 1, pp. 845–853.
- [20] Roohandeh, N., Alaei, H. R., (2022). First-principles study of Si adatom on the ZnO honeycomb structure, *Indian Journal of Physics*, 96, pp. 441.

## Si Adsorption on the boron phosphide honey-combe structure

Hamidreza Alaei\*, Mahnaz Joorabloo

Department of Physics, Islamic Azad University, Varamin-Pishva Branch, Varamin, Iran

E-mail: hr\_alai@yahoo.com

Submitted: 25 January 2023, Revised: 15 May 2023, Accepted: 23 May 2023

---

### Abstract

In this work, based on the Density Function Theory we studied the Boron Phosphide honey-combe structure and for comparing the dimensionality effects, we performed a brief study about its three-dimension (bulk) too. These first-principle calculations obtained an indirect band gap for 3D of BP where it obtained one direct (about 0.9024 eV) for its honey-combe structure that is transparent for vertical polarization beam with a selection ability in transmittance/ adsorbance and reflectance for horizontal polarization. The obtained band gaps are near to reports. As a new work, by adsorption of Si at four outstanding positions on the honey-combe structure of BP we studied its electrical and optical properties where the omitting of band gap and pseudo-metalizing of structure was a superior result for Si adsorption. For improvement of calculation results we used the Modified Becke–Johnson potential proposed by Tran and Blaha (TB-MBJ).

**Keywords:** Boron Phosphide, Graphene like, DFT, Si adsorption, Band Structure.