

“Research article”

Calculations of Structural and Electronic Properties of Novel Two-Dimensional Planar Aluminum Nitride Allotropes

Behnam Kazempour

Department of Physics, Ah.C., Islamic Azad University, Ahar, Iran.

*Corresponding author: bkazempour@iau.ir

(Received: 17 May 2025, Accepted: 17 August 2025)

Abstract

In this paper, using first principles calculations method based on density functional theory, in order to predict the existence possibility or the ability to synthesize of two-dimensional planar allotropes of aluminum nitride as well as their structural and electronic properties, systematic studies have been done. The investigated systems are included six allotropes in which the atoms of aluminum and nitrogen participate in chemical bonds with and hybridization. After the structural relaxation, all these allotropes despite the less stable than the famous graphene-like aluminum nitride allotrope, still retain their original structure. The amount of the structural stability of these allotropes depends on the hybridization of constituent atoms and the number density of atoms per their unit cell. Regardless of the structure type and the hybridization of atoms, all these allotrope are semiconductors but the amount and type of energy gap is different for different structures.

Conflict of interest: None declared.

Keywords: Aluminum nitride allotropes, Band structure, Structural and electronic properties; First principles calculations; Density functional theory



دانشگاه آزاد اسلامی واحد اهر
فصلنامه‌ی کاربرد شیمی در محیط زیست

سال شانزدهم، شماره‌ی ۶۲
تابستان ۱۴۰۴، صفحات ۷۲-۶۵

"مقاله پژوهشی"

محاسبات خواص ساختاری و الکترونیکی آلوتروپ‌های جدید نیتريد آلومینیوم دوبعدی

بهنام کاظم‌پور

گروه فیزیک، واحد اهر، دانشگاه آزاد اسلامی، اهر، ایران

* نویسنده مسئول مکاتبات: bkazempour@iau.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۴/۰۲/۲۷، پذیرش نهایی: ۱۴۰۴/۰۵/۲۶)

چکیده

در این مقاله، با استفاده از روش محاسبات اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی، به منظور پیش‌بینی امکان وجود یا توانایی سنتز آلوتروپ‌های مسطح دوبعدی نیتريد آلومینیوم و همچنین خواص ساختاری و الکترونیکی آن‌ها، مطالعات سیستماتیک و تاثیر این آلوتروپ‌ها در محیط زیست بررسی شده است. از آنجایی که دلیل مساحت سطح بالا و پایداری شیمیایی، نیتريد آلومینیوم در کاربردهای سنجش شیمیایی و بیولوژیکی استفاده می‌شود. سطح آن را می‌توان برای اتصال انتخابی مولکول‌های هدف فعال کرد و امکان تشخیص گازها، مایعات و زیست مولکول‌ها را فراهم کرد. سیستم‌های مورد بررسی شامل شش آلوتروپ هستند که در آن‌ها اتم‌های آلومینیوم و نیتروژن با هیبریداسیون sp^2 و $sp^1 + sp^2$ در پیوندهای شیمیایی شرکت می‌کنند. پس از آزادسازی ساختاری، همه این آلوتروپ‌ها علیرغم پایداری کم‌تر نسبت به آلوتروپ معروف نیتريد آلومینیوم شبه گرافن، همچنان ساختار اولیه خود را حفظ می‌کنند. میزان پایداری ساختاری این آلوتروپ‌ها به هیبریداسیون اتم‌های تشکیل‌دهنده و تراکم تعداد اتم‌ها در هر سلول واحد آن‌ها بستگی دارد. صرف نظر از نوع ساختار و هیبریداسیون اتم‌ها، همه این آلوتروپ‌ها نیمه‌رسانا هستند، اما میزان و نوع شکاف انرژی برای ساختارهای مختلف متفاوت است.

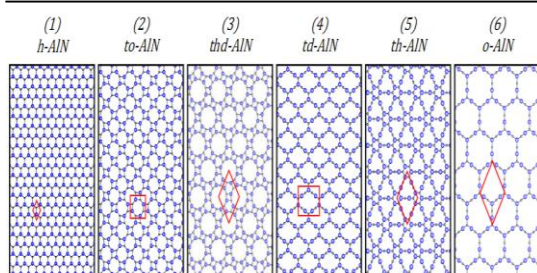
واژه‌های کلیدی: آلوتروپ‌های نیتريد آلومینیوم، محیط زیست، خواص ساختاری و الکترونیکی

مقدمه

کشف تجربی گرافن در سال ۲۰۰۴ (۱) آغاز تحقیقات گسترده در مورد این ماده شگفت‌انگیز با ویژگی‌های غیرمعمول بود. خواص فیزیکی، مکانیکی، شیمیایی و نوری منحصر به فرد و قابل توجه گرافن (۲-۷) در مقایسه با مواد کربنی حجیم، نتیجه برخی محدودیت‌ها در یکی از ابعاد آن است. گرافن یک ساختار مسطح دو بعدی (2D) است که از اتم‌های کربن پیکربندی شده در یک شبکه شش ضلعی لانه زنبوری تشکیل شده است. با این حال، به دلیل اینکه یک شبه فلز است و شکاف باند صفر دارد (۲ و ۱)، از نظر استفاده در برخی از کاربردهای الکترونیکی مانند سلول‌های خورشیدی و حسگرهای گازی محدودیت‌هایی دارد، به همین دلیل برخی از محققان تصمیم به باز کردن شکاف باند آن گرفتند. برای این منظور، تحقیقات نظری و تجربی گسترده‌ای انجام شده است. تأثیرات سودمند نانو لوله‌های آلومینیومی در صنعت دارو سازی و حسگرها، سنسورها و سایر ادوات اپتیکی در تشخیص آلاینده‌گی در محیط زیست به وضوح مشاهده می‌شود (۸). برخی از رویکردهای مختلف مورد بررسی محققان برای باز کردن شکاف باند گرافن عبارتند از: اعمال کرنش‌های مکانیکی (۹)، افزودن ناخالصی‌ها و آلیش به ویژه بور، نیتروژن و فلزات واسطه (۱۰-۱۲)، ایجاد جای خالی در ساختارهای اتمی (۱۳) و برش گرافن در نانوروبان‌های با عرض محدود (۱۵-۱۴)، رویکرد دیگر، حرکت از گرافن به سمت سایر مواد دو بعدی با ساختارهای نزدیک یا مشابه گرافن است. بنابراین، محققان تلاش کردند تا نیمه‌رساناهای دو بعدی جدیدی پیدا کنند که محدودیت‌های گرافن را نداشته باشند. همتایان گرافن

شامل نیتريد آلومینیوم شش ضلعی دو بعدی و نیتريد بور هستند. در واقع، بین مواد مبتنی بر نیتريد آلومینیوم و نیتريد بور و مواد مبتنی بر کربن، تناظر یک به یک وجود دارد. مانند نیتريد بور، مواد مبتنی بر نیتريد آلومینیوم عموماً دارای شکاف‌های باند محدود هستند و نیمه‌رسانا محسوب می‌شوند. نیتريد بور حجیم با ساختارهای مکعبی، ورتزیت و شش ضلعی، نیمه‌رساناهایی با شکاف‌های باند به ترتیب ۵/۱۸، ۵/۸۱ و ۴/۰۷ الکترون‌ولت هستند (۱۷ و ۱۶)، و نیتريد آلومینیوم حجیم با ساختار ورتزیت، نیمه‌رسانایی با شکاف باند وسیع ۶/۳ الکترون‌ولت است (۱۸).

ساختارهای دو بعدی اساس بسیاری از مواد را تشکیل می‌دهند. برخی از مواد سه بعدی از لایه‌های دو بعدی که روی هم چیده شده‌اند، تشکیل می‌شوند. برش در جهات خاصی از ساختارهای دو بعدی مسطح، نانوروبان‌هایی را تشکیل می‌دهد که هنگام لوله شدن و چسبیدن به یکدیگر در لبه‌ها، به نانولوله‌ها تبدیل می‌شوند. بنابراین، مطالعه ساختارهای دو بعدی، راه را برای درک بهتر مواد مبتنی بر این نانورقه‌ها هموار می‌کند. در بسیاری از ساختارهای دو بعدی نیتريد آلومینیوم، اتم‌های آلومینیوم و نیتروژن از طریق هیبریداسیون sp^2 به هم متصل می‌شوند. معمول‌ترین ساختار دو بعدی این ماده، نیتريد آلومینیوم شش ضلعی مانند گرافن است که اتم‌های آن با پیکربندی خاصی روی رئوس یک شبکه لانه زنبوری به یکدیگر متصل می‌شوند. پیکربندی‌های دو بعدی دیگری از اتم‌های آلومینیوم و نیتروژن با هیبریداسیون $sp^1 + sp^2$ نیز می‌توانند در نظر گرفته شوند. با توجه به ملاحظات فیزیکی و شیمیایی، ما با شش آلوتروپ دو بعدی مسطح مختلف جدید از گرافن سروکار داریم. در



شکل (۱): نانو لوله و مشتقات شش گانه آن با اتم‌های آلومینیوم و نیتروژن، توپی‌های آب‌شده و سیاه به ترتیب مشخص‌کننده آلومینیوم و نیتروژن می‌باشد.

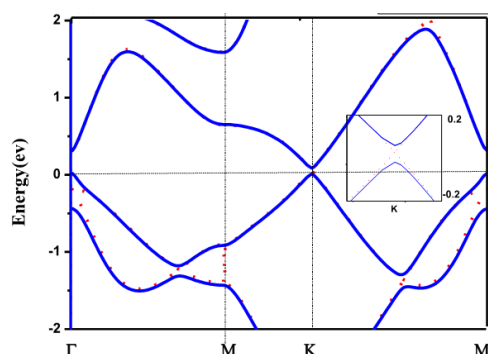
شکل (۱) ساختار دوبعدی آلومینیوم نیتريد نشان می‌دهد که مربوط به ساختار گرافنی است. در این میان، این ساختار کوچکی از آلوتروپ‌های آلومینیوم و نیتروژن می‌باشد. $\{AlN\}$. شکل (۲) آلوتروپی دیگر از این ساختار را نشان می‌دهد که تعداد اتم‌های آلومینیوم و نیتروژن با هم برابر بوده که چهار اتم در الوتروپ $\{Al_2N_2\}$ و هشت اتم در آلوتروپ $\{Al_4N_4\}$ در چرخه مورد نظر دارند. این ساختار آلوتروپی مربعی بوده و دارای چهار اتم آلومینیوم و چهار اتم نیتروژن در چرخه را دارا هستند. شکل (۳-۴) سلول واحد آلوتروپ را با شش آلومینیوم اتمی و شش اتم نیتروژن که در چهار اتم با پیکربندی $\{Al_2N_2\}$ و شش اتم با پیکربندی $\{Al_3N_3\}$ و دوازده اتم با پیکربندی $\{Al_6N_6\}$ در چرخه‌ها را نشان می‌دهد. شکل (۴-۵) ساختار سلول مستطیلی واحد که شامل دوازده اتم یکسان از آلومینیوم و نیتروژن را با پیکربندی $\{Al_6N_6\}$ نشان می‌دهد. دوسوم این ساختار آلوتروپ دارای هیبریداسیون sp^2 و یک سوم دارای هیبریداسیون sp^1 دارا می‌باشد. ما با توجه به تعداد اتم‌ها در چرخه تشکیل آن‌ها در بالا مشخص کردیم و آلوتروپ‌ها از یک تا شش به ترتیب th ، td ، thd ، o ، h ، AlN و to می‌باشند.

بخش بعد، پس از معرفی روش محاسبه و ساختار هر آلوتروپ، پارامترهای ساختاری آزاد مانند ثابت‌های شبکه، طول پیوندها، پایداری‌های مقایسه‌ای و غیره را محاسبه می‌کنیم. سپس خواص الکترونیکی این آلوتروپ‌ها را بررسی کرده و نوع رسانایی و اندازه و نوع شکاف نواری آن‌ها را تعیین می‌کنیم. نمودارهایی برای ساختار نواری، چگالی حالت‌ها و چگالی بار این آلوتروپ‌ها نشان داده شده است. انتظار می‌رود نتایج این تحقیق در تولید نسل جدید دستگاه‌های الکترونیکی مبتنی بر نیتريد آلومینیوم مفید باشد.

مواد و روش‌ها

سیستم‌های دو لایه یا چند لایه و امثال آن است. در تمام رویکردهای فوق الذکر، شبکه کامل آلومینیوم نیتريد، متشکل از مختصات سه تاییه اتم‌های Al و N در هیبریداسیون sp^2 و آرایش یافته در یک ساختار لانه زنبوری از شش ضلعی‌های $\{Al_3N_3\}$ ، به عنوان ماده پایه به کار رفته است. نانولوله مدل صندلی (۶،۶) که شامل ۴۲ اتم در یاخته بسیط آن می‌باشد و قطر این نانولوله را $8/41$ آنگستروم و فاصله بین لوله‌ها را $3/41$ آنگستروم در نظر می‌گیریم. نانولوله (۶،۶) از نوع نانولوله‌های صندلی وار است و رسانا به حساب می‌آید. شکلی از نحوه قرار گرفتن اتم‌های کربن به صورت مدل صندلی و ابر الکترونی اتم‌ها نشان داده شده است که برای رسم آن از همان نرم‌افزار IVASP استفاده کرده‌ایم. همان طور که مشاهده می‌شود رویهم رفتگی ابر الکترونی نانولوله خالص زیاد است و در ادامه خواهیم دید که با اضافه کردن ناخالصی‌ها چه تغییری در ابر الکترونی مشاهده می‌شود. شکل (۱) مدل اتمی صفحه‌ای دو بعدی را برای آلومینیوم نیتروژن نشان می‌دهد.

نیم‌رسانای AlN به ترتیب در شکل (۴) نشان داده شده است.

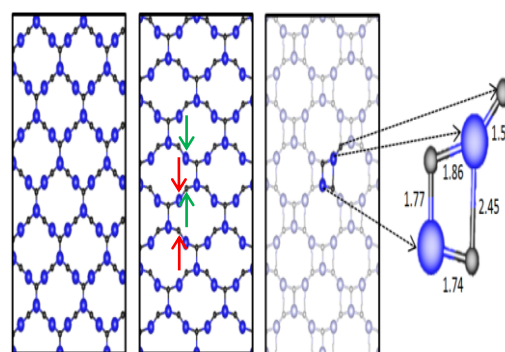


شکل (۴): ساختار نواری نیم رسانای AlN.

به وضوح مشخص است که نیم‌رسانای مزبور دارای گاف نواری مستقیم در امتداد نقطه Γ می‌باشد که اندازه آن برای AlN در حدود $2/4 \text{ eV}$ بدست آمده است. دلیل اختلاف زیاد گاف نواری با مقادیر تجربی ($1.6/1.7 \text{ eV}$ و $4/3 \text{ eV}$)، به نوع تقریب بکار رفته در جمله تبدیلی - همبستگی مربوط می‌شود، اما مقادیر بدست آمده در مقایسه با دیگر مقادیر تئوری که از روش شبه پتانسیل بدست آمده است کاملاً هم‌خوانی دارد.

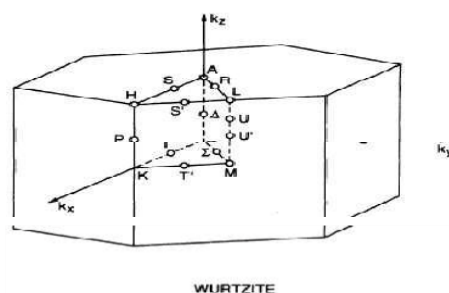
محاسبات عددی

بعد از معرفی واهلش ساختاری خواص الکترونی و پایداری آلوتروپ پیشنهادی در شکل (۱) را مورد بررسی قرار دادیم، که بعضی از ویژگی‌ها در جدول (۳) فهرست شده است. در اینجا N تعداد مولکول‌های واحد در سلول یاخته واحد از شکل (۱) می‌باشد. در این جدول انرژی کل $E_0 = E_0/N$ انرژی کل بر واحد تعداد آلوتروپ در ساختار ارائه شده می‌باشد و $E'_0 (\text{eV}) = E'_0(\text{considered allotrope}) - E'_0(\text{allotrope 1})$ اختلاف انرژی مابین آلوتروپ مورد نظر و آلوتروپ $h - \text{AlN}$ می‌باشد. همانطوری که از این جدول مشاهده می‌شود، آلوتروپ‌های ۱ تا ۴



شکل (۲): ساختار هندسی آلوتروپ AlN-th با طول باندهای مربوطه بر حسب آنگستروم

برای محاسبه ساختار نواری نیم‌رساناهای مذکور لازم است در ابتدا محاسبات خود سازگار انجام گیرد تا انرژی فرمی برای رسم ساختار نواری مشخص شود. نکته مهم بعد از انجام محاسبات خودسازگار، انتخاب مسیر مناسب انتگرال‌گیری در ناحیه کاهش ناپذیر بریلوئن ۲ برای محاسبه نوارهای انرژی می‌باشد. در شکل (۳) مسیر انتگرال‌گیری در فضای وارون برای محاسبات ساختار نواری ساختار ورتسایت مشخص شده که از این مسیر در محاسبات صورت گرفته برای رسم ساختار نواری استفاده شده است.



شکل (۳): مسیر انتگرال‌گیری در منطقه اول بریلوئن برای محاسبات ساختار نواری ساختار ورتسایت

بعد از استخراج داده‌های ضروری، ساختار نواری نمونه‌های مورد مطالعه توسط کد محاسباتی بدست آمده است. نتیجه محاسبات ساختار نواری برای

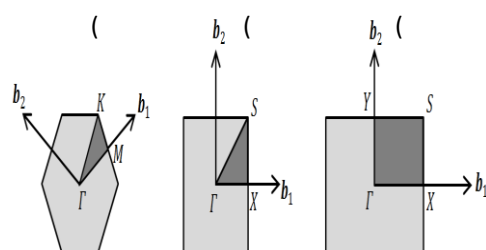
اتم به حجم (منطقه در این مورد) به تعداد بیش‌تری از باندها پایان می‌یابد و بنابراین یک ساختار پایدار تر است. همانطور که در شکل (۱) و جدول (۱) دیده می‌شود، فشردگی سازه‌ها و در نتیجه ثبات آن‌ها از آلوتروپ $h - AlN$ به آلوتروپ شکل شش $o - AlN$ کاهش می‌یابد.

که دارای هیبریداسیون sp^2 می‌باشند، پایدارتر از آلوتروپ‌های $th - AlN$ و $o - AlN$ می‌باشند که دارای هیبریداسیون $sp^1 + sp^2$ هستند.

یکی از عوامل اصلی ثبات در تعداد باندها است که رابطه مستقیمی با تراکم تعداد اتم‌ها در یک سلول واحد دارد. به این دلیل است که نسبت بالاتر از تعداد

جدول (۱): خواص الکترونی آلوتروپ آلومینیوم نیتريد

Allotrope	N	Hybridization	E_0 (eV)	E'_0 (eV)	$\Delta E'_0$ (eV)	$\Delta E'_0$ (%)	Conductivity	E_g (eV)	gap type
(1) $h - AlN$	1	sp^2	-15.16	-15.16	0.00	0.00	Semiconductor	3.05	Indirect
(2) $to - AlN$	4	sp^2	-58.89	-14.72	0.44	2.90	Semiconductor	3.01	Indirect
(3) $thd - AlN$	6	sp^2	-87.64	-14.61	0.55	3.63	Semiconductor	3.05	Indirect
(4) $td - AlN$	6	sp^2	-80.36	-13.39	1.77	11.68	Semiconductor	1.95	direct (Γ)
(5) $th - AlN$	6	$sp^1 + sp^2$	-77.45	-12.91	2.25	14.85	Semiconductor	1.68	Indirect
(6) $o - AlN$	4	$sp^1 + sp^2$	-49.58	-12.40	2.76	18.21	Semiconductor	0.50	direct (Γ)

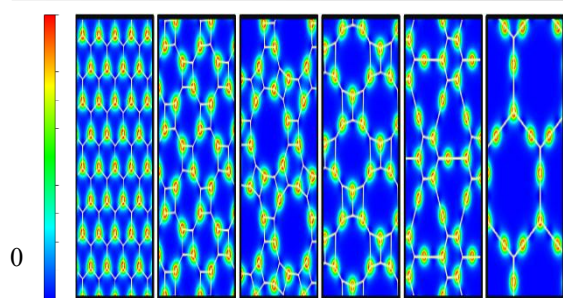


شکل (۵): منطقه اول بریلوئن برای (a) ساختار شش ضلعی (b) ساختار مربعی و (c) ساختار مستطیلی

در شکل (۶) نمودار ساختار نواری (در سمت چپ شکل) و نمودار چالی حالت‌ها (در سمت چپ) نشان داده شده است. در تمامی شکل‌ها مقدار انرژی فرمی به طرف صفر انتقال یافته و توسط خط چین افقی نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که در تمامی این آلوتروپ‌ها انرژی توسط باند گاف از هم جدا شده اند. بنابراین، باندهای هدایت و باند گاف از هم جدا شده و این آلوتروپ‌ها تماماً نیمه‌رسانا هستند.

در جدول (۱) نوع گاف، تعداد باندهای گاف و حالت‌های هدایت گزارش شده است. از نتایج این جدول مشاهده می‌شود که تمامی آلوتروپ‌ها نیمه-رسانا هستند. در آلوتروپ $td - AlN$ و $o - AlN$ گاف انرژی مستقیم بوده و در نقطه Γ منطقه اول بریلون قرار دارد، در حالی دیگر آلوتروپ‌ها دارای گاف انرژی غیر مستقیم می‌باشند.

شکل (۵) منطقه اول بریلوئن با شبکه مستقیم را برای ساختار شش ضلعی، مربعی و مستطیلی نشان می‌دهد. در هر شکل مناطق تیره غیر تکراری مربوط به محاسبات باند بوده و ما این محدوده را مد نظر قرار می‌دهیم. در این شکل‌ها نقاط با تقارن بیش‌تر و ساختار باند مشخص ارائه شده است.



شکل (۷): توزیع چگالی بار دوبعدی در اطراف آلوتروپ‌ها

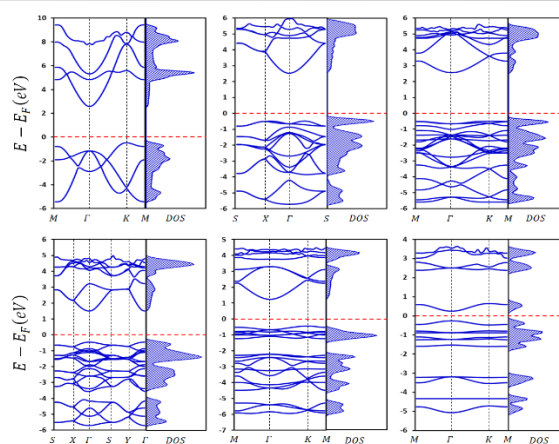
نتیجه‌گیری

در این مقاله، شش آلوتروپ دوبعدی مسطح از نیتريد آلومینیوم معرفی شدند. ما از روش محاسبه اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی برای به دست آوردن خواص ساختاری و الکترونیکی برای هر آلوتروپ استفاده کردیم. نکات و نتیجه‌گیری‌های حاصل را

(۱) آلوتروپ‌های $h - AlN$ و $o - AlN$ ساختار شش ضلعی هستند و آلوتروپ‌های $to - AlN$ مربعی هستند، آلوتروپ دارای ساختار $td - AlN$ می‌باشد. (۲) برای آلوتروپ‌های $thd - AlN$ و $h - AlN$ و $td - AlN$ اتم‌های آلومینیوم و نیتروژن در هیبریداسیون sp^2 مشارکت دارند در حالی که برای آلوتروپ‌های در هیبریداسیون $sp^1 + sp^2$ قرار دارند. (۳) حضور تهی جای در ساختار شبکه نانو نوارهای مذکور، خواص مغناطیسی و قطبیدگی اسپینی آن‌ها را تحت تأثیر قرار می‌دهد.

(۴) مقدار گشتاور مغناطیسی محاسبه شده برای نانونوار آرمچیر یک لایه‌ای مفروض در حضور یک تهیجای برابر $1/53$ مگنتون بوهر است.

(۵) تمامی آلوتروپ‌های معرفی شده نیمه رسانا می‌باشند. آلوتروپ‌های $tdh - AlN$ و $h - AlN$ دارای بیش‌ترین گاف انرژی ($3/5$ الکترون ولت) و



شکل (۶): ساختار نواری (در سمت چپ) و چگالی حالت‌ها (در سمت راست) برای آلوتروپ‌های معرفی شده در شکل (۴۱). انرژی به صفر انتقال شده است.

علاوه بر این، ما مشاهده می‌کنیم که کمینه نوار ظرفیت در تمامی آلوتروپ‌های معرفی شده در نقطه Γ واقع شده است و بیشینه نوار رسانش در ما بین نقاط K, X, K, Γ, K قرار دارد. بنابراین، گاف‌های موجود در آلوتروپ‌های $td - AlN$ مستقیم بوده و بقیه آلوتروپ‌ها گاف غیر مستقیم دارند.

از شکل (۷) پراکندگی الکترون‌ها را در اطراف آلوتروپ‌ها نشان می‌دهد، همانطور که مشاهده می‌کنیم سهم اوربیتال p فلزات واسطه در نوارهای رسانش و ظرفیت (اطراف انرژی فرمی (نسبت به اوربیتال S اتم-های کالکوزن بیش‌تر است. در شکل ۱ نیز چگالی بار دو بعدی ساختارهای مذکور نشان داده شده است. این طرح‌ها، نحوه توزیع بار در اطراف هر یک از اتم‌ها را به صورت رنگین‌کمانی از آبی برای کم‌ترین مقدار بار (صفر) تا رنگ قرمز برای بیش‌ترین مقدار بار (یک) ارائه می‌دهند. همچنین مشاهده می‌شود، بار اضافی در اطراف یون‌های نیتروژن قرار گرفته‌اند بدین معنی که اتم‌های نیتروژن پذیرنده و اتم‌های آلومینیوم دهنده می‌باشند.

- [12] Marinopoulos, A.G., et al., 2004, Ab initio study of the optical absorption and wave-vector dependent dielectric response of graphite. *Physical Review B*, 69(24): p. 245419.
- [13] Novoselov, K.S., et al., 2004, Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, 2004. 306(5696): p. 666-669.
- [14] Haberer, D., et al., 2010, Tunable Band Gap in Hydrogenated Quasi-Free-Standing Graphene. *Nano Letters*, 10(9): p. 3360-3366.
- [15] Gierz, I., et al., 2008, Atomic Hole Doping of Graphene. *Nano Letters*, 8(12): p. 4603-4607.
- [16] Ryu, S., et al., 2008, Reversible Basal Plane Hydrogenation of Graphene. *Nano Letters*, 8(12): p. 4597-4602.
- [17] Kuila, T., et al., 2012, Chemical functionalization of graphene and its applications. *Progress in Materials Science*, 57(7): p. 1061-1105.
- [18] Sofo, J.O., A.S. Chaudhari, and G.D. Barber., 2007, Graphane: A two-dimensional hydrocarbon. *Physical Review B*, 75(15): p. 153401.
- [19] Savini, G., A.C. Ferrari, and Giustino, F., 2010, First-Principles Prediction of Doped Graphane as a High-Temperature Electron-Phonon Superconductor. *Physical Review Letters*, 105(3): p. 037002.
- [20] Einollahzadeh, H., R.S. Dariani, and Fazeli, S.M., 2016, Computing the band structure and energy gap of penta-graphene by using DFT and G0W0 approximations. *Solid State Communications*, 229: p. 1-4.
- [21] Shunhong Zhang, J.Z., Qian, W., Xiaoshuang, Ch., 2015, Yoshiyuki Kawazoe and Puru Jena Penta-graphene: A new carbon allotrope. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 112(8): p. 5.
- [22] Wu, X., et al., 2016, Hydrogenation of Penta-Graphene Leads to Unexpected Large Improvement in Thermal Conductivity. *Nano Letters*, 16(6): p. 3925-3935.
- [23] Stauber, T., J.I. Beltrán, and Schliemann, J., 2016, Tight-binding approach to penta-graphene. *Scientific Reports*, 6: p. 22672.

آلوتروپ‌های $td - AlN$ و $o - AlN$ دارای کم‌ترین گاف انرژی (۰/۵ الکترون ولت) می‌باشند.

منابع

- [1] Wang, Z., et al., 2016, Electronic and optical properties of novel carbon allotropes. *Carbon*, 101: p. 77-85.
- [2] Coleman, J.N., et al., 2011, Two-Dimensional Nanosheets Produced by Liquid Exfoliation of Layered Materials. *Science*, 331(6017): p. 568-571.
- [3] Allen, M.J., V.C. Tung, and R.B. Kaner., 2010, Honeycomb Carbon: A Review of Graphene. *Chemical Reviews*, 110(1): p. 132-145.
- [4] Shahrokhi, M., 2016, Quasi-particle energies and optical excitations of ZnS monolayer honeycomb structure. *Applied Surface Science*, 2016., 390: p. 377-384.
- [5] Schniepp, H.C., et al., 2006, Functionalized Single Graphene Sheets Derived from Splitting Graphite Oxide. *The Journal of Physical Chemistry B*, 110(17): p. 8535-8539.
- [6] Berger, C., et al., 2004, Ultrathin Epitaxial Graphite: 2D Electron Gas Properties and a Route toward Graphene-based Nanoelectronics. *The Journal of Physical Chemistry B*, 108(52): p. 19912-19916.
- [7] Nair, R.R., et al., 2008, Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene. *Science*, 320(5881): p. 1308-1308.
- [8] Laref, A., et al., 2015, First-principle analysis of the electronic and optical properties of boron and nitrogen doped carbon mono-layer graphenes. *Carbon*, 81: p. 179-192.
- [9] Bunch, J.S., et al., 2007, Electromechanical Resonators from Graphene Sheets. *Science*, 315(5811): p. 490-493.
- [10] Sun, Z., et al., 2010, Graphene Mode-Locked Ultrafast Laser. *ACS Nano*, 4(2): p. 803- 810.
- [11] Shahrokhi, M. and Leonard, C., 2017, Tuning the band gap and optical spectra of silicon-doped graphene: Many-body effects and excitonic states. *Journal of Alloys and Compounds*, 693: p. 1185-1196.