

شبه‌سازی و بررسی ویژگی‌های نوری نانومکسین‌های ایتريوم کاربید $Y_{n+1}C_n$ ($n = 1, 2, 3$)

امیر علی اکبری^{*}، پیمان امیری، زینب آموزه

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

چکیده: در پژوهش کنونی محاسبات به‌طور عمده با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم-اسپرسو و روش شبه‌پتانسیل در چارچوب نظریه تابعی چگالی و تقریب چگالی موضعی انجام شده است. علاوه بر این از تقریب فاز تصادفی در بررسی خواص نوری استفاده شده است. مقادیر منفی بزرگ سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک $\epsilon_1(\omega)$ نشان می‌دهد که مواد رفتاری شبیه درود از خود نشان می‌دهند. جایی که مقدار $\epsilon_1(\omega)$ منفی است یا خیلی نزدیک به صفر است، موج الکترومغناطیسی منتشر نمی‌شود و فرایندهای جذب و اتلاف صورت می‌گیرد. نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک $\epsilon_2(\omega)$ نشان می‌دهد که فرآیند جذب از انرژی‌های کوچک شروع شده است و مکسین‌های ایتريوم کاربید ($Y_{n+1}C_n$; $n=1, 2, 3$) فاقد گاف انرژی هستند که ماهیت فلزی را تأیید می‌کند، هم‌چنین بارزترین قله‌ها در راستای محور Y نشان دهنده برهمکنش بیشتر الکترون و فوتون در این راستا است. نسبت معکوس سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک $\epsilon_1(\omega)$ و طیف بازتاب $n(\omega)$ نشان می‌دهد که در جایی که سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک منفی است، طیف بازتاب برای ترکیبات Y_4C_3 و Y_3C_2 ، Y_2C بالاترین مقدار را دارد و این قله‌ها در محدوده انرژی فوتون ۶ الی ۷ الکترون‌ولت به صفر نزدیک می‌شوند.

واژگان کلیدی: نظریه تابعی چگالی، نانو مکسین، ماهیت فلزی، خواص نوری.

aliakbari.a@scu.ac.ir

ابرخازن‌ها، عایق‌های الکترومغناطیسی، مواد کامپوزیتی با استحکام بالا، سامانه‌های ذخیره انرژی، تصفیه آب، حسگرهای گازی و دستگاه‌های الکترونیکی و کاربردهای محیط زیستی کاربرد دارند. مکسین‌ها در حوزه‌های درمانی نظیر مداوای سرطان نیز مورد استفاده قرار گرفته‌اند. از این رو می‌توان حوزه پزشکی را دیگر زمینه مورد مطالعه و استفاده از نانوذرات مکسین عنوان کرد [۴-۲]. فازهای مکس خانوادگی از جامدات با بیش از ۷۰ عضو و ساختارهای شش ضلعی لایه‌ای و تقارن گروه فضایی P_{63}/mmc هستند که ترکیبات شیمیایی آن‌ها با فرمول شیمیایی $M_{n+1}AX_n$ شناخته می‌شود [۵]. در این فرمول بندی M نشان دهنده یک فلز واسطه مانند اسکاندیوم، تیتانیوم، ایتريوم، وانادیوم و غیره است، A نمایانگر عناصر گروه ۱۳ تا ۱۶ (III A-VIA)

۱- مقدمه

اخیراً مواد دوبعدی به دلیل ویژگی‌های منحصر به فردشان، توجه تحقیقاتی قابل توجهی را در طیف وسیعی از زمینه‌های کاربردی به خود جلب کرده‌اند [۱]. در میان مواد دوبعدی و برخلاف گرافن که فقط از عنصر کربن تشکیل شده است، مکسین‌ها خانواده جدیدی از این‌گونه مواد هستند که از عناصر متعددی تشکیل شده‌اند. نانوذرات مکسین دارای خواص ممتاز ساختاری، الکتریکی، نوری، مغناطیسی و بیولوژیکی هستند و این مواد نوظهور می‌توانند در ساخت مواد پیشرفته با کاربردهای چندگانه مورد استفاده قرار گیرند. استفاده در باتری‌های نسل جدید،

جدول تناوبی نظیر آلومینیوم، سیلیکون، فسفر و غیره است و X نیز نشان گر کربن یا نیتروژن و ۱،۲،۳،۴ n= است. این مواد دوبعدی به دلیل کنده کاری از فازهای مکس، مکسین نامیده می-شوند. به عنوان مثال فرمول شیمیایی این کنده کاری مطابق $Ti_3AlC_2 + 3HF = AlF_3 + 3/2 H_2 + Ti_3C_2$ خواهد بود [۶]. تاریخچه مکسین ها به سال ۲۰۱۱ باز می گردد که توسط یوری گوگوتسی و میشل بارسوم کشف شد. تاکنون بیش از ۳۰ مکسین به طور تجربی سنتز شده اند که در سال ۲۰۱۱، Ti_3AlC_2 به عنوان اولین مکسین سنتز شد [۶]. در سال ۲۰۱۹، یک مکسین پنج لایه $Mo_4VC_4T_x$ کشف شد که به طور کلی سطح جدیدی از کنترل ساختاری را به مکسین ها و مواد دو بعدی اضافه کرد [۷]. در سال ۲۰۲۲ علی اکبری و همکاران به بررسی ساختار نانومکسین های ایتريوم کاربرد ($Y_{n+1}C_n$; n=1, 2, 3) در فاز شش گوشه پرداختند و نشان دادند تمامی ترکیبات ذکر شده به لحاظ ساختاری پایدارند و دارای خاصیت فلزی هستند [۸]. علاوه بر این در سال ۲۰۲۳ علی اکبری و همکاران با در نظر گرفتن نسبت حجم به سطح به بررسی ویژگی های نوری ساختار نانومکسین های $Y_{n+1}C_n$ (n=1, 2, 3) و انبوهه YC پرداختند و نشان دادند تمامی ترکیبات Y_2C ، Y_3C_2 ، Y_4C_3 و YC دارای خاصیت فلزی هستند [۹].

۲- روش محاسباتی

در کار حاضر، محاسبات با استفاده از روش ابتدا به ساکن در چارچوب نظریه تابعی چگالی توسط بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو با تقریب چگالی موضعی (LDA) [۱۰] برای مدل سازی پتانسیل تبادل-همبستگی انجام گرفته است. در روش تابعی چگالی با استفاده از موج تخت، حجم محاسبات بالا است، بنابراین شبه پتانسیلی که بتواند خواص بلور را توصیف نماید و همچنین حجم محاسبات را کاهش دهد، بسیار با اهمیت است. در این بسته محاسباتی، معادلات تک ذره کوهن-شم [۱۱] با استفاده از روش شبه پتانسیل و بسط توابع موج الکترون های ظرفیت بر اساس امواج تخت حل می گردند. برای کاهش حجم محاسبات، تعدادی از نقاط شبکه به عنوان نماینده تمام نقاط در فضای وارون انتخاب می شود. از آنجایی که محاسبات خواص نوری با ساختار نوار الکترونیکی در ارتباط مستقیم است، برای انجام

محاسبات نوری ۱۰۰ نقطه در مسیر پرتقارن $\Gamma.M.K.\Gamma$ در منطقه اول بریلوئن مشابه مسیر ساختار نوار الکترونیکی در نظر گرفته شده است. به منظور بهینه سازی تعداد نقاط شبکه با تعیین مبنای همگرایی (eV) ۰/۰۱ به انجام محاسبات خودسازگار پرداخته و تغییرات انرژی به ازای مقادیر مختلف نقاط شبکه محاسبه شده است و این نقاط با استفاده از روش مونخورست-پک به دست می آید [۱۲]. پس از انجام بهینه سازی های لازم تعداد نقاط شبکه برای تقریب چگالی موضعی $16 \times 16 \times 16$ به دست آمده است. انرژی قطع برای این محاسبات ۷۰ ریذبرگ و برای جلوگیری از برهم کنش با ساختار مجاور یک لایه خلأ به اندازه ۱۸ آنگستروم در نظر گرفته شده است. ثابت شبکه بهینه شده برای این ترکیبات در ساختار دوبعدی $a=b=3.42 \text{ \AA}$ برای Y_2C ، $a=b=3.48 \text{ \AA}$ برای Y_3C_2 و $a=b=3.75 \text{ \AA}$ برای Y_4C_3 است [۹ و ۸]. علاوه بر این از تقریب فاز تصادفی در بررسی خواص نوری استفاده شده است. شکل ۱ نمای جانبی ساختار بهینه نانومکسین های ایتريوم کاربرد ($Y_{n+1}C_n$; n=1, 2, 3) در ساختار شش گوشه را نشان داده است. در این شکل کره های خاکستری اتم های ایتريوم و کره های زرد اتم های کربن را نشان می دهند.

۳- نتایج و بحث

رفتاری که مواد مختلف در مقابل پرتوهای نور مرئی از خود نشان می دهند به عنوان خواص نوری مواد شناخته می شود. دانستن خواص نوری در بسیاری از کاربردهای صنعتی و علمی مانند اندازه گیری دما بدون تماس با جسم، مدل سازی، انتقال حرارت، تکنولوژی لیزر، اپتیک (آینه ها، لنزها و پنجره های نوری)، انرژی، ساخت و ساز، صنعت هوافضا و بسیاری دیگر از صنایع حیاتی است.

برای بررسی خواص نوری مواد، تابع دی الکتریک 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 [۱۳]:

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

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

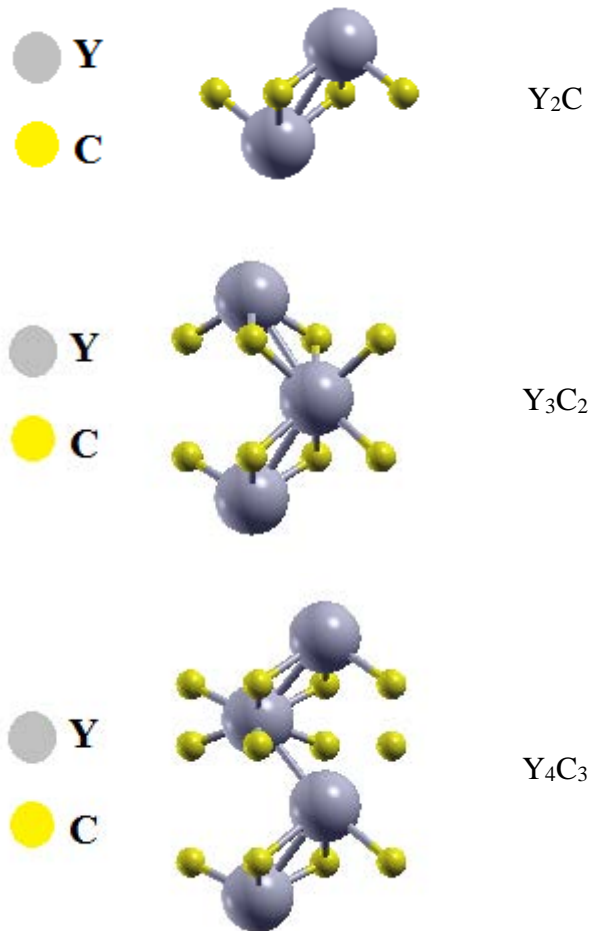
که در آن سهم موهومی تابع دی‌الکتریک به صورت زیر داده می‌شود:

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

در جایی که P با مقدار اولیه کوشی مطابقت دارد، تغییری در انتگرال‌گیری لازم است تا صفر در مخرج به $\omega' = \omega$ تبدیل شود. در ساختار شش‌ضلعی، سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک تک‌لایه‌های $Y_{n+1}C_n$ بر حسب انرژی فوتون فرودی در جهت-های x، y و z در شکل‌های ۲ و ۳ نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که برای تک‌لایه‌های $Y_{n+1}C_n$ ، ریشه‌های تابع دی‌الکتریک در انرژی‌های کم رخ می‌دهد. سهم درون‌نواری در خواص نوری نقش مهمی ایفا می‌کند و عمدتاً بخش کم‌انرژی (مادون قرمز) طیف را تحت تأثیر قرار می‌دهد. تمام قله‌های کم‌تر از ۱ الکترون‌ولت به دلیل انتقال درون‌نواری الکترونی به نوارها نسبت داده می‌شوند. مقادیر منفی بزرگ $\varepsilon_1(\omega)$ در شکل ۲ نشان می‌دهد که مواد رفتاری شبیه درود از خود نشان می‌دهند در حالی که در انرژی‌های بالاتر، انتقال درون‌نواری رخ می‌دهد.

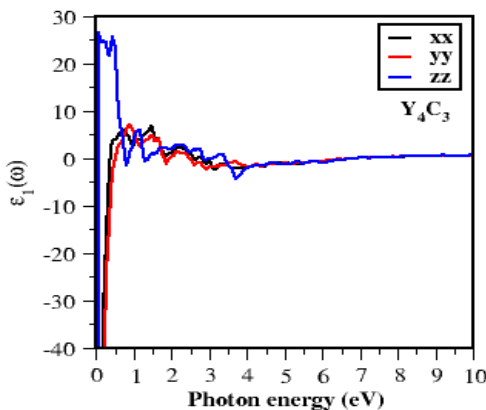
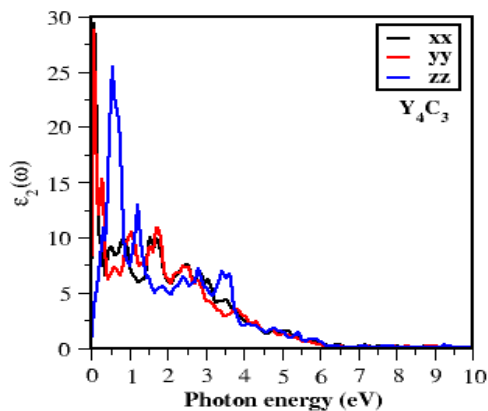
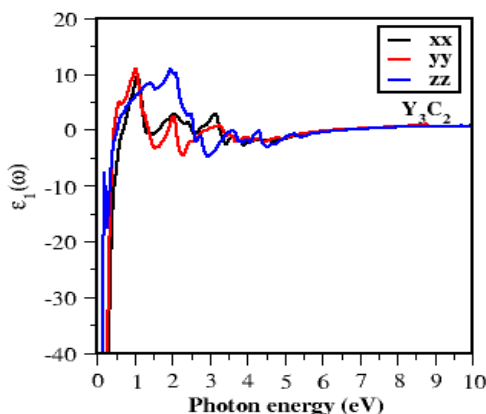
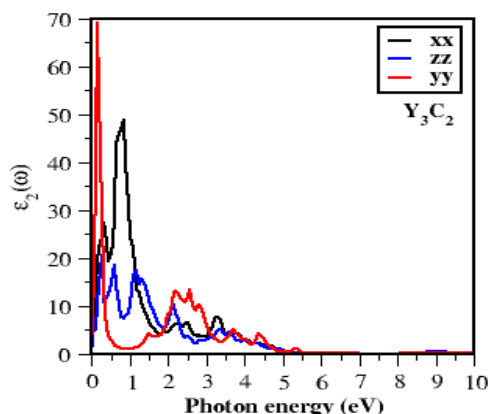
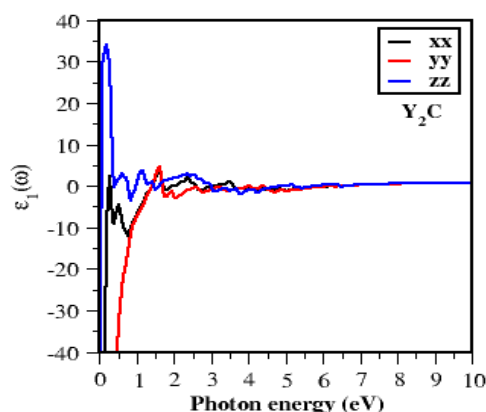
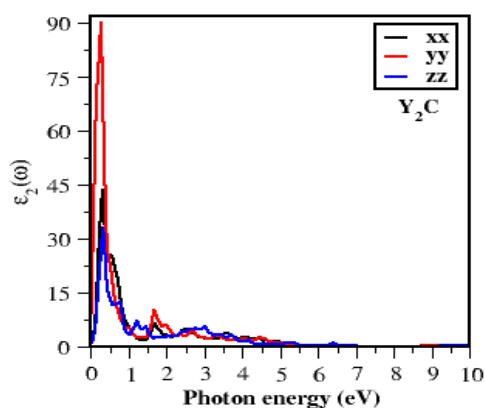
در سهم موهومی تابع دی‌الکتریک $\varepsilon_2(\omega)$ ، جذب از حداقل انرژی‌ها شروع شده است که نشان می‌دهد ماده در ساختار مربوطه گاف انرژی ندارد و ماهیت فلزی این ترکیبات را تأیید می‌کند. این نتایج، در توافق خوبی با گاف صفر به دست آمده از ساختار نوار الکترونی و چگالی حالت‌های کل تک‌لایه‌های $Y_{n+1}C_n$ است [۸]. مقایسه سهم‌های موهومی تابع دی‌الکتریک تک‌لایه‌های $Y_{n+1}C_n$ در شکل ۳ نشان می‌دهد که بارزترین قله متعلق به راستای y است که نشان‌دهنده برهم‌کنش بیشتر الکترون‌ها با فوتون‌ها در این جهت است.

یکی دیگر از پارامترهای مهم برای ارزیابی خواص نوری امواج الکترومغناطیسی در محیط، ضریب شکست $n(\omega)$ است (معادله ۴). بخش واقعی ضریب شکست نشان‌دهنده انتشار موج است. سهم موهومی پراکندگی امواج را نشان می‌دهد و میزان جذب امواج الکترومغناطیسی را اندازه‌گیری می‌کند [۱۶].



شکل ۱. نمای جانبی ساختار بهینه نانومکسین‌های ایتريوم کاربرد $Y_{n+1}C_n$ (n=1, 2, 3) در ساختار شش‌گوشی و در صفحه XZ

که $\varepsilon_1(\omega)$ سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک است (معادله ۲). این بخش بیان‌کننده جریان حامل بار در حضور میدان خارجی است و میزان قطبش محیط را نشان می‌دهد. در ناحیه‌ای که منفی است، امواج منتشر نمی‌شود و فرآیندهای جذب و اتلاف غالب هستند. $\varepsilon_2(\omega)$ سهم موهومی تابع دی‌الکتریک را نشان می‌دهد که مستقیماً ناشی از گذارهای بین‌نواری است (معادله ۳). سهم موهومی تابع دی‌الکتریک توصیف‌کننده برهم‌کنش الکترون با فوتون است و برای نشان دادن اختلال وابسته به زمان برای حالت‌های الکترونی در حالت پایه است که یک شاخص مؤثر محسوب می‌شود. به ازای $\varepsilon_1(\omega) < 0$ ، ماده ماهیت فلزی دارد و به ازای $\varepsilon_1(\omega) > 0$ ، ماده رفتار دی‌الکتریکی از خود نشان می‌دهد [۱۴]. روابط کرامرز-کرونیک سهم‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک را به هم مرتبط می‌کند و تمام ثابت‌های نوری را می‌توان از این داده‌ها به دست آورد [۱۵].



شکل ۳. نمودارهای سهم موهومی تابع دی الکتریک برای نانومکسین های ایتريوم $(Y_{n+1}C_n; n=1, 2, 3)$ در فاز شش گوشي در تقريب LDA

شکل ۴. نمودارهای سهم حقيقي تابع دی الکتریک برای نانومکسین های ایتريوم $(Y_{n+1}C_n; n=1, 2, 3)$ در فاز شش گوشي در تقريب LDA

تابع دی الکتریک منفي است، طيف بازتاب برای ترکیبات Y_2C ، شکست ایستا $n(0)$ و قله های برجسته ضريب شکست نانومکسین های ایتريوم Y_3C_2 و Y_4C_3 بالاترين مقدار را دارد. ضريب شکست ایستا $n(0)$ و قله های برجسته ضريب شکست نانومکسین های ایتريوم $(Y_{n+1}C_n; n=1, 2, 3)$ در تقريب LDA محاسبه و در جدول ۱ گزارش شده است. این قله ها در محدوده انرژی فوتون ۶ الی ۷ الکترون ولت به صفر نزدیک می شوند.

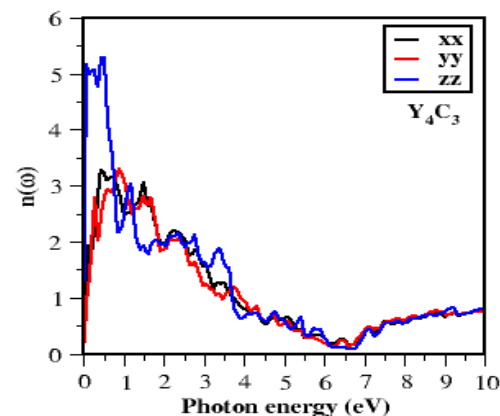
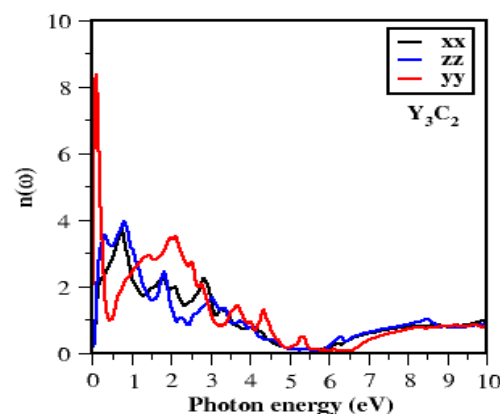
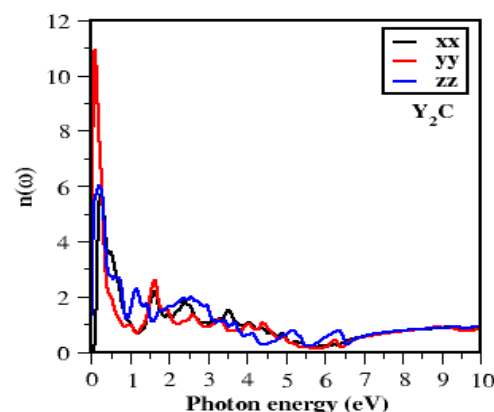
$$n(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\epsilon_1 + \sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \right)} \quad (4)$$

همان طور که در شکل ۴ نشان داده شده است، مقادير ضريب شکست ایستا $n(0)$ برای تمام ساختارهای $Y_{n+1}C_n$ مقادير کمی دارند. نسبت معکوس سهم حقيقي تابع دی الکتریک $\epsilon_1(\omega)$ و طيف بازتاب $n(\omega)$ نشان می دهد که در جایی که سهم حقيقي

جدول ۱. محاسبه ضریب شکست استاتیک $n(0)$ و قله های شاخص ضریب شکست نانومکسین های $(Y_{n+1}C_n; n=1, 2, 3)$ در فاز شش گوشه با تقریب

LDA

| قله های شاخص | | | $n(0)$ | | | پارامترها |
|--------------|------|------|--------|-------|-------|-----------|
| | | | | | | راستا |
| z | y | x | z | y | x | ترکیب |
| ۰٫۲۰ | ۰٫۰۹ | ۰٫۲۶ | ۰٫۰۱۰ | ۰٫۰۱۹ | ۰٫۰۲۹ | Y_2C |
| ۰٫۸۲ | ۰٫۱۰ | ۰٫۷۶ | ۰٫۱۳۷ | ۰٫۰۲۴ | ۰٫۰۲۷ | Y_3C_2 |
| ۰٫۴۹ | ۰٫۹۲ | ۰٫۴۵ | ۰٫۰۵۴ | ۰٫۰۲۸ | ۰٫۰۲۴ | Y_4C_3 |



جذب انرژی در سهم موهومی تابع دی الکتریک $\epsilon_2(\omega)$ از مقادیر بسیار کوچک شروع شده است، می توان بیان کرد که نانومکسین های Y_2C ، Y_3C_2 و Y_4C_3 دارای ماهیت فلزی هستند. همچنین نمودار $\epsilon_2(\omega)$ نشان می دهد، بارزترین قله ها متعلق به راستای y است که بیانگر برهم کنش بیشتر الکترون ها با فوتون ها در این جهت است. علاوه بر این، نسبت معکوس طیف بازتاب $n(\omega)$ و قسمت حقیقی تابع دی الکتریک $\epsilon_1(\omega)$ نشان می دهد که در جایی که بخش حقیقی تابع دی الکتریک منفی است، طیف بازتاب برای نانومکسین های Y_2C ، Y_3C_2 و Y_4C_3 بیشترین مقدار را دارد.

مراجع

1. D. Akinwande, C. J. Brennan, J. S. Bunch, P. Egberts, J. R. Felts, H. Gao, and Y. Zhu, *Extreme Mechanics Letters* 13, 42-77 (2017).
2. M. Naguib, V. N. Mochalin, M. W. Barsoum, and Y. Gogotsi, *Advanced materials*, 26, 992-1005 (2014).
3. L. M. Dong, C. Ye, L. L. Zheng, Z. F. Gao, F. Xia, *Nanophotonics* 9, 2125-2145 (2020).
4. A. Sinopoli, Z. Othman, K. Rasool, K. A. Mahmoud, *Current Opinion in Solid State and Materials Science* 23, 100760 (2019).

شکل ۴. نمودارهای ضریب شکست برای نانومکسین های ایتريوم کاربرد ($Y_{n+1}C_n$; $n=1, 2, 3$) در فاز شش گوشه در تقریب LDA

۴- نتیجه گیری

در این مقاله خواص نوری نانومکسین های ایتريوم کاربرد ($Y_{n+1}C_n$; $n=1, 2, 3$) با استفاده از روش شبه پتانسیل و کد محاسباتی کوانتوم-اسپرسو مورد بررسی قرار گرفته است. مقادیر منفی بزرگ سهم حقیقی تابع دی الکتریک $\epsilon_1(\omega)$ نشان دهنده این است که این مواد رفتاری شبیه درود دارند. از آنجایی که

5. A. Aliakbari, P. Amiri, and A. Ghalambor Dezfuli, *Applied Physics A* 129, 476 (2023).
6. S. J. Kim, H. J. Koh, C. E. Ren, O. Kwon, K. Maleski, S. Y. Cho, H. T. Jung, *ACS nano* 12, 986-993 (2018).
7. G. Deysher, C. E. Shuck, K. Hantanasirisakul, N. C. Frey, A. C. Foucher, K. Maleski, Y. Gogotsi, *ACS nano* 14, 204-217 (2019).
8. A. Aliakbari, P. Amiri, and H. Salehi, *FlatChem* 31, 100328 (2022).
9. A. Aliakbari, P. Amiri, and H. Salehi, *Computational and Theoretical Chemistry* 1222, 114053 (2023).
10. J. P. Perdew, and Y. Wang, *Physical Review B* 46, 12947 (1992).
11. P. Hohenberg, and W. Kohn, *Physical review* 136, B864 (1964).
12. H. J. Monkhorst, J. D. Pack, *Physical review B* 13, 5188 (1976).
13. X. H. Li, X. Y. Su, R. Z. Zhang, C. H. Xing, and Z. L. Zhu, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 137, 109218 (2020).
14. P. Amiri, N. Mokhtaripoor, A. Aliakbari, and H. Salehi, *Solid State Commun.* 343, 1-13 (2022).
15. P. Amiri, A. Aliakbari, P. Behzadi, and S. A. Ketabi, *Computational Condensed Matter* 37, e00837 (2023).
16. Z. Amoudeh, P. Amiri, and A. Aliakbari, *Solid State Sciences* 144, 107306 (2023).

Simulation and investigation of the optical properties of yttrium carbide $Y_{n+1}C_n$ ($n = 1, 2,$ and 3) Nano-MXenes

A. Aliakbari*, P. Amiri, Z. Amoudeh

Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran

Abstract: In the current research, the calculations were mainly done using Quantum-Espresso computing package and pseudo-potential method in the framework of density functional theory and local density approximation (LDA). In addition, random phase approximation has been used in the investigation of optical properties. The large negative values of the real part of the dielectric function, $\epsilon_1(\omega)$ show that the materials exhibit a behavior similar to that of Drude-like. Where the value of $\epsilon_1(\omega)$ is negative or very close to zero, the electromagnetic wave does not propagate and absorption and dissipation processes take place. The diagrams of the imaginary part of the dielectric function $\epsilon_2(\omega)$ indicate that the absorption process started from small energies and yttrium carbide MXenes ($Y_{n+1}C_n$; $n=1, 2, 3$) have no energy gap, which confirms the metallic nature. Also the most obvious peaks in the y-direction indicate the greater interaction of electrons and photons in this direction. The inverse ratio of the real part of the dielectric function $\epsilon_1(\omega)$ and the reflection spectrum $n(\omega)$ shows that where the real part of the dielectric function is negative, the reflection spectrum has the highest value for Y_2C , Y_3C_2 , and Y_4C_3 compounds. These peaks approach zero in the photon energy range of 6-7 eV.

Keywords: Density functional theory, Nano-MXenes, Metallic nature, Optical properties.