

شبیه سازی و تحلیل خواص الکترونی نانوساختارهای ناهمگون Si₂BN

پروین بهزادی^{۱*}، امیر علی اکبری^۲

^۱ شرکت تولید و بهره برداری سد و نیروگاه دز.

^۲ گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی جندی شاپور، دزفول، ایران.

^۳ گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.

چکیده: هدف این پژوهش بررسی این موضوع است که آیا ساخت نانو نوارها یا ایجاد ساختارهای ناهمگون می تواند عاملی برای باز شدن گاف نوار الکترونی این ترکیب باشد یا خیر. این کار در چارچوب نظریه تابعی چگالی با تقریب های نظیر PBE و LDA مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات توسط روش امواج تخت بهبود یافته و با نرم افزار کوانتوم اسپرسو انجام شده است. گونه جدیدی از شبکه های گرافن گونه هگزagonal با پیوند sp^2 شامل عناصر Si، B و N نیز وجود دارد که دارای پیوند کووالانسی درون لایه ای و پیوند واندروالسی میان لایه ای هستند. خواص ساختاری، الکترونی ترکیب Si₂BN دلالت بر رفتار فلزی این ترکیب دارد. از آنجایی که حرکت الکترون ها در Si₂BN سرعت بالایی دارد، این ویژگی در تولید آند بسیار مفید است. ترکیب این ویژگی ها موجب می شود تا نفوذ یون در آن به خوبی انجام شده و از آن بتوان برای تولید باتری استفاده کرد. شارژ و تخلیه در این آندها، با سرعت بالایی انجام می شود. نتایج شبیه سازی ها و محاسبات این پژوهش می تواند به محققان کمک کند تا از این ماده برای ساخت آند باتری استفاده کنند.

واژگان کلیدی: نظریه تابعی چگالی، نانوساختار، ساختار ناهمگون، ترکیب Si₂BN.

p.behzadi13425@yahoo.com

۱- مقدمه

به عنوان نقطه عطفی در این تحقیقات به شمار می آید [۶]. این ماده، که شامل یک لایه تک اتمی از کربن است، به دلیل ویژگی هایی همچون رسانندگی عالی و شفافیت [۶، ۷] به سرعت در کاربردهایی مانند سلول های خورشیدی، باتری ها و سیستم های فوتوولتائیک [۸] مورد توجه قرار گرفت. علاوه بر گرافن، مواد دوبعدی دیگری با خواص عایق نیز وجود دارند که توجه محققان را به خود جلب کرده اند. نمونه ای از این مواد، بور نیتريد با ساختار هگزagonal (h-BN) است [۹]. این ساختارها، که از ترکیب بور نیتريد (BN) با عناصر گروه چهارم جدول تناوبی مانند کربن (C) و سیلیکون (Si) به وجود می آیند، دارای ویژگی های مشابهی با گرافن هستند. از سال ۱۹۸۹، پژوهش ها در زمینه ترکیب کربن با بور نیتريد آغاز شد [۱۰] و این ترکیبات انواع مختلفی از ساختارها

در سال های اخیر، توجه زیادی به بررسی نانو مواد دوبعدی به دلیل ویژگی های ساختاری خاص و خواص فیزیکی منحصر به فرد آنها جلب شده است. این مواد در زمینه های مختلفی از جمله فیزیک ماده چگال، مهندسی مواد و شیمی مورد توجه قرار گرفته اند. یکی از دلایل اصلی این توجه، کاربردهای متنوع این مواد در حوزه هایی مانند الکترونیک، فناوری های نوری [۱]، کاتالیزورها [۲]، ذخیره و تبدیل انرژی [۳]، تحقیقات زیست پزشکی [۴] و حسگرها [۵] است. این ویژگی ها موجب شده اند که این مواد در دهه اخیر به یکی از حوزه های تحقیقاتی پرطرفدار تبدیل شوند. در این میان، کشف گرافن در سال ۲۰۰۴

را تشکیل می‌دهند [۱۱] که هرکدام خواص متفاوتی را به نمایش می‌گذارند. به همین دلیل، مطالعات گسترده‌ای در زمینه ویژگی‌های این مواد صورت گرفته است [۱۲]. یکی از نتایج برجسته در این زمینه، سنتز ترکیب BC_2N در فاز مکعبی در سال ۲۰۰۱ بود. در این تحقیق، ثابت شبکه $3/64$ انگستروم گزارش شد و ساختار آن شباهت زیادی به الماس دارد. این ترکیب با سختی ۷۶ گیگاپاسکال و مدول حجمی ۲۸۲ گیگاپاسکال، پس از الماس، به‌عنوان یکی از سخت‌ترین مواد شناخته‌شده مطرح شد [۱۳]. در همین راستا، ترکیب سیلیکون با بور نیتريد تحت فرمول Si_2BN از سال ۲۰۱۶ آغاز شد [۱۴]. با وجود اینکه بررسی‌های نظری اخیر درباره ترکیب Si_2BN از چند سال گذشته شروع شده است، تاکنون مقالات اندکی در این زمینه منتشر شده است. اگرچه تاکنون ساخت تجربی این ترکیب انجام نشده است، اما پس از انتشار نتایج اولیه به دلیل ویژگی‌هایی همچون پایداری دینامیکی، رفتار فلزی و شباهت به گرافن، مورد توجه پژوهشگران قرار گرفت. تحقیقات اولیه به‌ویژه بر روی خواصی مانند تحرک‌پذیری الکترون‌ها و عوامل موثر بر تغییرات گاف نواری این ترکیب متمرکز شد و این ویژگی‌ها به سرعت شناسایی شدند [۱۵].

در سال ۲۰۱۷، ارنستو دی ساندوال و همکارانش با استفاده از نظریه تابعی چگالی و نرم‌افزار VASP تحت تقریب شیب تعمیم یافته (PBE) [۱۶] تحقیقاتی را انجام دادند که در آن پایداری ترکیبات مختلفی از ترکیب اتم سیلیکون با بلور BN بررسی شد [۱۷]. همچنین در همان سال، شی جیا یوآن و گروهش با بهره‌گیری از نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان و نرم‌افزار Castep [۱۸] به مطالعه پلاسمون‌های سطحی موضعی در ترکیب Si_2BN پرداختند. نتایج آن‌ها نشان داد که این ترکیب قادر به جذب انرژی در اکثر بازه‌های پایین انرژی (بین صفر تا ۴ الکترون‌ولت) است، که در مقایسه با گرافن بازه جذب گسترده‌تری را شامل می‌شود [۱۹]. علاوه بر ویژگی‌های ساختاری، کاربردهای بالقوه این ترکیب نیز در برخی پژوهش‌ها مورد بررسی قرار گرفته است. به‌عنوان مثال، پژوهشی که توسط سینگ و همکارانش انجام شد نشان می‌دهد که ترکیب Si_2BN به‌عنوان یک ماده مناسب برای ذخیره‌سازی هیدروژن عمل می‌کند و پیشنهاد می‌کنند که ذخیره‌سازی هیدروژن در شرایط محیطی با

استفاده از این ترکیب امکان‌پذیر است [۲۰]. همچنین، این ترکیب به‌عنوان یک حسگر برای جذب گازهایی مانند NO ، NO_2 و NH_3 [۲۱] و یا در تحقیقات جدید به‌عنوان ماده‌ای برای استفاده در باتری‌های لیتیومی مورد بررسی قرار گرفته است [۲۲]. باز کردن گاف نواری یک ماده می‌تواند زمینه‌های کاربردی آن را به‌شدت گسترش دهد. این کار باعث می‌شود که ماده مورد نظر در ساخت بسیاری از ابزارهای پرکاربرد مانند سلول‌های خورشیدی، ترانزیستورها، تراشه‌های الکترونیکی و حسگرهای حرارتی استفاده شود [۲۳]. به همین دلیل، مهندسی گاف نواری به یکی از مراحل مهم در طراحی مواد جدید تبدیل می‌شود. برای ترکیب Si_2BN می‌توان از روش‌های مختلفی برای باز کردن گاف نواری بهره برد، از جمله اعمال تنش مکانیکی، استفاده از میدان‌های خارجی، ساخت نانو نوارهای متفاوت، ایجاد ساختارهای دو یا چند لایه و ترکیب ساختارهای ناهمگون. این روش‌ها می‌توانند ویژگی‌های الکترونی ترکیب Si_2BN را تغییر دهند و گاف نواری آن را باز کنند.

هدف این تحقیق ارزیابی این نکته است که آیا ساخت نانو نوارها یا ایجاد ساختارهای ناهمگون می‌تواند به عنوان یک روش مؤثر برای باز کردن گاف نواری و تغییر ویژگی‌های الکترونی ترکیب Si_2BN عمل کند. برای پاسخ به این پرسش، از روش نظریه تابعی چگالی بهره گرفته خواهد شد تا اثرات این تغییرات بر خواص الکترونی ترکیب مورد بررسی قرار گیرد.

۲- محاسبات

این تحقیق با استفاده از مفاهیم اولیه در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) با روش شبه‌پتانسیل و استفاده از تقریب‌های مختلف نظیر تقریب شیب تعمیم‌یافته (GGA) [۱۶] و تقریب چگالی موضعی (LDA) برای تخمین پتانسیل تبدیلی-همبستگی با کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام می‌گردد. از ترکیب عناصر Si، N و B ترکیب‌های مختلفی حاصل می‌شود که از میان آن‌ها می‌توان به $(Si_2BN)_{12}$ ، $(Si_2BN)_2$ ، $(Si_2BN)_3$ و Si_2BN [۱۷] اشاره نمود که در این پژوهش به‌صورت خاص ترکیب Si_2BN مورد بررسی قرار می‌گیرد. اما قبل از آن به ساخت و بهینه‌سازی ساختاری ترکیب BN در حالت بلوری با استفاده از تقریب‌های

LDA برابر با $a=6/31 \text{ \AA}$ و $b=10/95 \text{ \AA}$ است که با نتایج حاصل از پژوهش افتناکیس و همکاران [25] ($a=6/42 \text{ \AA}$ و $b=11/29 \text{ \AA}$) همخوانی مناسبی دارد (در مقاله مذکور با توجه به هدفی که مد نظر داشتند سلول واحدی را انتخاب کردند که 2 برابر سلول واحد اورتورومبیک است لذا جهت مقایسه، ثابت شبکه در راستای a حاصل از این مقاله بر 2 تقسیم می‌شود). شاید در بررسی خواص ساختاری و الکترونی ساختار تک‌لایه Si_2BN با سلول واحد اورتورومبیک، تفاوت میان این چهار حالت دارای اهمیت نباشد، اما این سلول واحدهای مختلف جهت تشکیل نانو نوارها، نانولوله‌ها، ساختارهای دو و چندلایه به کار گرفته می‌شوند و تمایز آن‌ها در موارد مذکور قابل مشاهده است. علاوه بر آن، در هر یک از سلول واحدها، بر حسب این که ثابت شبکه a و b ساختار بر کدام یک از محورهای مختصات، منطبق باشد می‌توان دو حالت مختلف ایجاد کرد که با توجه به نحوه چینش اتم‌ها در دو راستای مختلف به آن‌ها حالت زیگزاگی (ZZ) و صندلی (AC) گفته می‌شود و لذا در شکل 1 محور خاصی برای هر یک از راستاها تعریف نشده است و در ادامه، هر بار با توجه به ساختار مورد نظر محورها تعریف می‌گردد که نمونه‌ای از آن در شکل 2 نشان داده می‌شود. به عنوان مثال برای تشکیل نانو نوارها بر حسب این که کدام یک از چینش‌های صندلی یا زیگزاگی، لبه های جانبی نانو نوار را به خود اختصاص دهند، می‌توان دو حالت مختلف را مشاهده کرد که در شکل 2 به ازا عرض 1D، تصاویر سلول واحدهای هر دو حالت صندلی و زیگزاگی بعد از بهینه‌سازی نشان داده می‌شود. لبه‌های جانبی در امتداد عمود بر عرض نانو نوار قرار دارند. برای تشکیل نانو نوارهای تک‌لایه، علاوه بر راستای z ، باید در راستای دیگری (به عنوان مثال در راستای y) نیز خلأ در نظر گرفته شود که در این پژوهش مقدار خلأ در

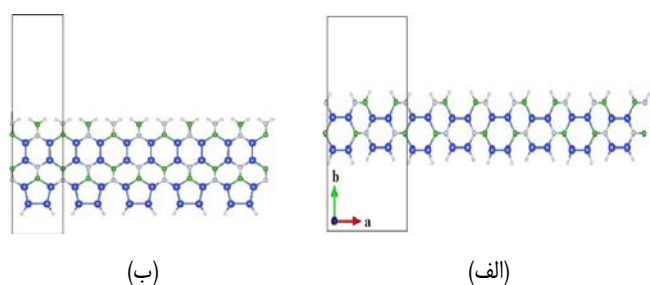
PBE پرداخته می‌شود. در این محاسبات مقدار همگرایی انرژی 10^{-8} ریدبرگ و حداکثر نیروی وارد بر اتم‌ها مقدار 10^{-6} ریدبرگ بر بوهر (Ry/Bohr) انتخاب شده است. علاوه بر این تعداد نقاط شبکه در منطقه اول بریلوئن $15 \times 15 \times 1$ و انرژی قطع تابع موج 65 ریدبرگ به دست آمده است. در بررسی ساختارهای تک‌لایه با توجه به این که خلأ اعمالی در راستای z است؛ تعداد نقاط شبکه در راستای z مقدار 1 در نظر گرفته شده است. برای مشخصات ساختاری ترکیب BN که دارای ساختاری هگزاگونالی است از نتایج حاصل از پژوهش ایکس یو یانگ نیان و همکاران $a=2/49 (\text{\AA})=4/71 (a.u.)$ و $c/a=2/67$ استفاده شده است [24].

۳- بحث و نتایج

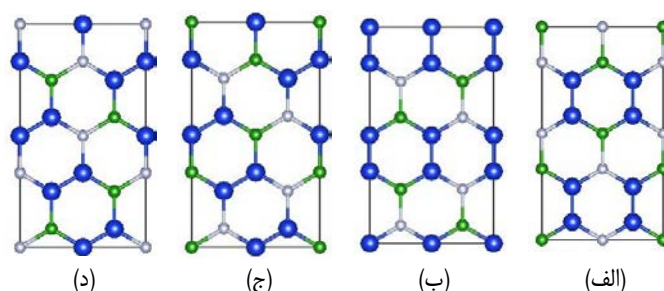
۱-۳ بهینه‌سازی ساختاری و خواص الکترونی نانونوارهای Si_2BN

یکی از راه‌کارهای مناسب جهت ساخت و توصیف نانو نوارهای مختلف $\text{Si}_2\text{BN}_{\text{mono}}$ ، استفاده از سلول واحد اورتورومبیک است. با توجه به نحوه قرار گرفتن اتم‌ها در راستای ثابت شبکه a و b ساختار، می‌توان 4 نوع سلول واحد مختلف تشکیل داد که در شکل 1 نشان داده می‌شود. تمام بهینه‌سازی‌های ساختاری نظیر بهینه‌سازی ثابت شبکه، مکان اتم‌ها برای $\text{Si}_2\text{BN}_{\text{mono}}$ با سلول واحد اورتورومبیک انجام می‌گردد.

این سلول واحد شامل 8 اتم Si؛ 4 اتم B و 4 اتم N است و اگر ثابت شبکه کوچک‌تر را a و ثابت شبکه بزرگ‌تر را b در نظر گرفته شود، مقدار ثابت شبکه بهینه سلول واحد $\text{Si}_2\text{BN}_{\text{mono}}$ با تقریب GGA برابر با $a=6/37 \text{ \AA}$ و $b=11/03 \text{ \AA}$ و با تقریب



شکل 2. نمایش سلول واحد نانو نوار Si_2BN با عرض 1D و لبه (الف) صندلی و (ب) زیگزاگی.



شکل 1. نمایش انواع سلول واحدهای اورتورومبیک ساختار $\text{Si}_2\text{BN}_{\text{mono}}$.

خاص در همه نمودارها تقریباً یکسان است. یکی از اهداف بررسی نانو نوارها، امکان ایجاد گاف نواری در نانو نوارهای صندلی و زیگزایی بود تا بتوان کاربرد ساختارهای نیم‌رسانای حاصل از آن را در تجهیزات مختلف مورد بررسی قرار داد که طبق نتایج حاصل از این بخش، در تمامی شرایط ساختارها خاصیت فلزی خود را حفظ می‌کنند. علاوه بر آن امکان تشکیل نانو نوارهایی با اتم‌های لبه‌ای مشابه نیز وجود دارد که در این پژوهش، این حالت ها مورد بررسی قرار نگرفته اند. همانطور که اشاره شد از جمله موارد دیگر جهت بررسی بازکردن گاف نواری ایجاد ساختارهای ناهمگون می‌باشد که در ادامه مورد بررسی قرار می‌گیرد.

۳-۲- ساختارهای ناهمگون

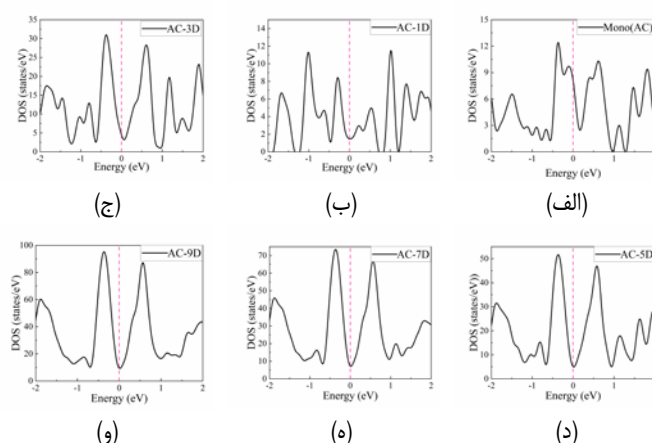
با توجه با این که حضور ساختار hBN در کنار گرافن موجب تغییر تقارن ساختار در نقطه دیراک و باز شدن گاف نواری گرافن می‌گردد [۲۶]، لذا یکی از ایده‌های محتمل در این پژوهش، تشکیل ساختارهای چند لایه Si₂BN و hBN و بررسی تغییرات گاف نواری در آن‌ها می‌باشد. در ابتدا لازم است سلول واحد مشترکی برای هر دو ساختار تعریف گردد. ثابت شبکه سلول واحد هگزاگونالی hBN برابر است با $a = 2.52 \text{ \AA}$ و برای Si₂BN برابر است با $a = 6.37 \text{ \AA}$. بنابراین لازم است ابرسلول 5×5 از hBN و ابرسلول 2×2 از Si₂BN در نظر گرفته شود که به ازاء آن طول بردار ابرسلول هر دو ساختار به اندازه 1.09 درصد عدم انطباق شبکه دارد.

اگر ساختار Si₂BN با نام A و hBN با نام C (برای این که از نمایش عنصر بور با حرف B متمایز باشد با C نام‌گذاری می‌گردد) نشان داده شود، ساختار دولایه AC و ساختار سه لایه ACA مطابق با شکل ۴ تشکیل می‌گردد و فاصله بهینه میان A و C با عنوان DAC با استفاده از کمینه نمودار تغییرات انرژی جدایی بر حسب DAC محاسبه می‌شود.

فاصله بهینه میان دولایه با استفاده از تقریب LDA و vdW به ترتیب برابر با $3.70 \text{ \AA}$ و $3.86 \text{ \AA}$ است، که به ازاء آن انرژی هم‌دوسی ساختار AC با استفاده از تقریب LDA و vdW به ترتیب برابر با 2.20 eV و 2.92 eV است. در نتیجه همان‌طور که انتظار می‌رفت تقریب vdW ساختار پایدارتری را به دست می‌دهد.

راستای محور Z و Y در همه ساختارها، برابر با 15 آنگستروم در نظر گرفته می‌شود. علاوه بر آن در نانو نوارها، پیوندهای آزاد توسط اتم هیدروژن پر می‌شود و همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌گردد اتم Si حاصل از پیوند Si-Si که در راستای طول نانو نوار زیگزایی قرار می‌گیرد، به جای تشکیل پیوند با دو اتم هیدروژن تمایل دارد که با اتم Si که در مجاورت آن قرار دارد، پیوند تشکیل دهد.

ساختارهای صندلی و زیگزایی Si₂BN دارای خاصیت فلزی هستند و در ادامه به عنوان نمونه تغییر خواص الکترونی نانو نوارهای صندلی در عرض‌های مختلف مورد بررسی قرار می‌گیرد. در ابتدا بعد از ایجاد خلأ و پر کردن پیوندهای آزاد با اتم هیدروژن، هر یک از ساختارها بهینه‌سازی می‌شوند و سپس خواص الکترونی آن محاسبه می‌گردد که در شکل ۳ چگالی حالت‌های همه ساختارها نمایش داده می‌شود. علاوه بر آن در شکل مذکور، جهت مشاهده تغییرات ایجاد شده، چگالی حالت‌های سلول واحد اورتورومبیک اولیه نیز با عنوان مونو^۱ در این شکل نشان داده می‌شوند. همان‌طور که در شکل ۳ نشان داده می‌شود تمام نانو نوارهای تشکیل شده دارای خاصیت فلزی هستند و با افزایش عرض نانو نوارها با توجه به افزایش تعداد اتم‌ها مقدار چگالی حالت‌ها نیز افزایش می‌یابد، اما انرژی قله‌های نمودار چگالی حالت‌ها تغییر نمی‌کنند و به خصوص دو قله در محدوده سطح فرمی قابل مشاهده است که انرژی این دو قله



شکل ۳. نمودار (الف) چگالی حالت‌های ساختار تک‌لایه Si₂BN و چگالی حالت‌های نانو نوار لبه صندلی Si₂BN به ازاء عرض‌های (ب) 1D، (ج) 3D، (د) 5D، (ه) 7D و (و) 9D.

¹ Mono

Nanotechnol, 10 (4). 313-318 (2015).

3. Y. Sun, S. Gao, Y. and Xie, Chem. Soc. Rev, 43 (2), 530-546 (2014).

4. X. Peng, L. Peng, C. Wu, Y. Xie, Chem. Soc. Rev, 43 (10), 3303-3323 (2014).

5. Y. Chen, C. Tan, H. Zhang, L. Wang, Chem. Soc. Rev, 44 (9), 2681-2701 (2015).

6. C. Tan, P. Yu, Y. Hu, J. Chen, Y. Huang, Y. Cai, Z. Luo, B. Li, J. Am. Chem. Soc, 137 (32), 10430-10436 (2015).

7. K. Novoselov, A. Geim, S. Morozov, D. Jiang, M. Katsnelson, I. Grigorieva, S. Dubonos, Nature, 438 (7065), 197-200 (2005).

8. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, Science 320 (5881), 1308 (2008).

9. A. C. Ferrari, F. Bonaccorso, V. Fal'Ko, K. Novoselov, S. Roche, P. Bøggild, S. Borini, F. H. Koppens, V. Palermo, Nanoscale 7 (11), 4598-4810 (2015).

10. Y. Lin, T. V. Williams, J. W. Connell, J. Phys. Chem. Lett. (1), 277-283 (2009).

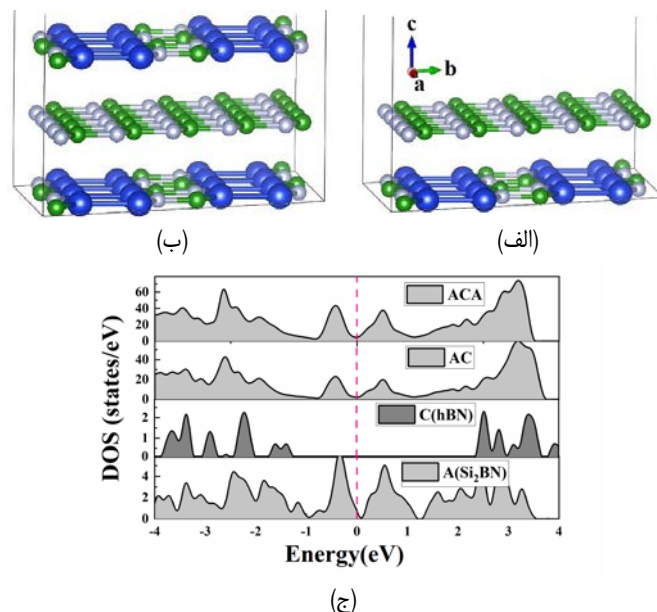
11. A. Y. Liu, R. M. Wentzcovitch, M. L. Cohen, Phys. Rev. B Condens, 39 (3), 1760 (1989).

12. H. Nozaki, S. Itoh, J. Phys. Chem. Solids, 57 (1), 41-49 (1996)

13. K. T. Lam, Y. Lu, Y. P. Feng, G. Liang, Appl. Phys. Lett., 98 (2), 022101 (2011).

14. J. Sun, X-F. Zhou, Y-X. Fan, J. Chen, H-T. Wang, X. Guo, J. He, J. Phys. Rev. B Condens., 73 (4), 045108 (2006.)

15. L. Liu, L. Z. Zhao, T. Yu, S. Zhang, J. Lin, G. Yang, J. Phys. Chem. C 2(12). 6801-6807 (2018).



شکل ۴. نمایش سلول واحد ساختار ناهمگون (الف) $\text{Si}_2\text{BN}/\text{hBN}$ (AC)، (ب) $\text{Si}_2\text{BN}/\text{hBN}/\text{Si}_2\text{BN}$ (ACA) و (ج) نمایش چگالی حالت‌های تک لایه Si_2BN (A)؛ (C) hBN و ساختارهای ناهمگون $\text{Si}_2\text{BN}/\text{hBN}$ (AC) و $\text{Si}_2\text{BN}/\text{hBN}/\text{Si}_2\text{BN}$ (ACA).

۴- نتیجه گیری

در این پژوهش، با استفاده از روش‌های ابتدا به ساکن و مدل محاسباتی کوانتوم اسپرسو ویژگی‌های ساختاری و الکترونی ساختار Si_2BN در حالت نانو نوار تک‌لایه و ایجاد ساختار ناهمگون (از جمله چگالی حالت‌ها و ساختار نوری) با هدف بررسی باز کردن گاف نوری ترکیبات، جهت کاربرد این ساختار در قطعات صنعتی مورد بررسی قرار گرفت که در ترکیبات مورد بررسی خاصیت فلزی حفظ گردید. از آنجایی که حرکت الکترون‌ها در Si_2BN سرعت بالایی دارد، این ویژگی در تولید آند بسیار مفید است. لذا به نظر می‌رسد با توجه به ویژگی فلز بودن این ساختار کاربرد این ترکیب به عنوان آند در بانری‌های لیتیمی و سلول‌های خورشیدی مناسب باشد.

مراجع

1. L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, C. Grazianetti, M. Fanciulli, M. Dubey, M. Molle, D. Akinwande, Nat. Nanotechnol, 10 (3), 227-231 (2015).

2. M. Acerce, D. Voiry, M. Chhowalla, Nat.

16. AN. Andriotis, E. Richter, M. Menon, Phys. Rev. B Condens., 93 (8), 081413 (2016).
17. G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B Condens., 47 (1), 558 (1993).
18. J. Heyd, G E. Scuseria, M. Ernzerhof, JCP 124 (21), 219906 (2006).
19. D. Singh, S. K .Gupta, Y. Sonvane, T. Hussain, R. Ahuja, PCCP 20 (33), 21716-21723 (2018).
20. J P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, PRL 77 (18), 3865 (1996).
21. E D. Sandoval, S.Hajinazar, AN. Kolmogorov, Phys. Rev. B Condens. 94 (9), (2016).
22. M. Segall, P J. Lindan, M. Probert, C. Pickard, P. Hasnip, S. Clark, M. Payne, J. Condens. Matter. Phys. 14 (11), 2717 (2002.)
23. M. Balkanski, R F. Wallis, OUP,(2000).
24. S-J. Yuan, H. Zhang, X-L .Cheng, Plasmonics, 1-7 (2017).
25. Z. G. Fthenakis, M. Menon, Phys. Rev. B 99(20), 205302205316 (2019).
26. T. P. Kaloni, Y. C. Cheng, Mater. Chem. 22(3), 919922 (2012).
27. K. Watanabe, T. Taniguchi, H. Kanda, Nat. Mater. 3(6), 404–409 (2004).



Simulation and analysis of electronic properties of Si₂BN heterogeneous nanostructures

Parvin Behzadi^{1,2,*} Amir Aliakbari³

¹ Dez dam and power plant production and operation company.

² Department of Physics, Faculty of Science, Jundi-Shapur University of Technology, Dezful, Iran.

³ Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.

Abstract: The aim of this study is to investigate whether the creation of nanoribbons or the creation of heterogeneous structures can be a main factor in the opening of the electronic band gap of these compounds. This work has been investigated in the framework of density functional theory with approximations such as PBE and LDA. Calculations have been performed using the augmented plane waves method and Quantum Espresso software. There is also a new type of hexagonal graphene network with sp² bonding, including Si, B, and N elements, which have intralayer covalent bonding and interlayer van der Waals bonding. The structural and electronic properties of the Si₂BN compound indicate the metallic behavior of this compound. Since the movement of electrons in Si₂BN is high, this feature is very useful in the production of anodes. The combination of these features allows for good ion penetration in it and it can be used to produce batteries. Charging and discharging in these anodes are carried out at high speeds. The results of the simulations and calculations of this research can help researchers use this material to make battery anodes.

Keywords: Density functional theory, Nanostructure, Heterogeneous structure, Si₂BN composition.