



بررسی ساختار الکتریکی بورون نیتراید تک لایه در حضور لیتیوم

فاطمه چراغی کریموندی^۱، رستم مرادیان^۲

^۱دانشگاه رازی کرمانشاه، کارشناسی ارشد فیزیک-نانو فیزیک faticheraghi.1371@gmail.com

^۲دانشگاه رازی کرمانشاه، گروه فیزیک rmmoradian@razi.ac.ir

چکیده

آلاییدن نیمه رساناها می تواند ویژگی های فراوانی از جمله تغییر در رسانندگی، به این نوع مواد برای استفاده در صنعت اضافه کند. در این تحقیق، با استفاده از مدل تنگ بست در رهیافت کوانتس دوم، محاسبه ساختار نواری و چگالی حالات صفحه تخت بورون نیتراید در حضور اتم لیتیوم، مورد بررسی قرار گرفته شده است. روش تنگ بست روی روش تئوری تابع چگالی در نقاط تقارنی تطبیق داده شد و توسط آن انتگرال های پرش محاسبه گردید.

با تحلیل ساختار نواری و چگالی حالات برای صفحه ی بورون نیتراید و صفحه ی بورون نیتراید در حضور لیتیوم، نتایج نشان دهنده این است که، افزودن لیتیوم به صفحه بورون نیتراید، ساختاری فلزی به آن می دهد.

واژه های کلیدی

بورون نیتراید، مدل تنگ بست، رهیافت کوانتس دوم، رهیافت تابع گرین، چگالی حالات

مقدمه

همواره جستجو برای کشف نانو ساختارهایی از مواد مختلف دنبال شده است. از جمله این مواد بورون نیتراید است. فرمول شیمیایی بورون نیتراید شامل تعداد یکسانی از اتم های بور (B) با عدد اتمی ۵ و نیتروژن (N) با عدد اتمی ۷ می باشد که با اتم کربن در یک دوره تناوب قرار دارند. از این رو از نظر تعداد الکترون ها با ساختارهای کربنی که در فرم های مختلف بلوری قرار دارند یکسان است. بورون نیتراید در طبیعت وجود ندارد، و در نتیجه ی یک واکنش شیمیایی که ترکیبی از عنصر بور، (مانند اسید بوریک یا اکسید بور) با منابع مختلف نیتروژن، (مانند گاز آمونیاک یا پتاسیم سیانید) در دمای بالا (بیش از ۱۲۰۰ درجه سانتی گراد) تشکیل می شود. بورون نیتراید ابتدا از واکنش بین اسید بوریک مذاب و پتاسیم سیانید سنتز شد [۲،۱].

بورون نیتراید ساختار بلوری شبیه به ساختار آلوتروپ های کربن همچون گرافیت، الماس، گرافن، فولرن و نانولوله دارد. رایج ترین و

پایدارترین شکل بورون نیتراید، مشابه با گرافیت دارای یک ساختار چند لایه و ویژگی ذاتا لغزنده و نرم است، بنابراین به طور گسترده ای به عنوان یک روان کننده و پرکننده به محصولات آرایشی مورد استفاده است. مشابه گرافیت، بورون نیتراید دارای یک ساختار لانه زنبوری اما با اتم های متناوب بور و نیتروژن است که به وسیله ی پیوند هیبرید اوربیتالی sp^2 ، و لایه های بورون نیتراید توسط نیروی واندروالس به هم متصل هستند و شکاف باند آن $6/4$ الکترون ولت است [۳]. در سال ۱۹۹۵ نانولوله بورون نیتراید توسط چوپرا و همکارانش ایجاد شد [۴] و نانومواد یک بعدی بورون نیتراید مانند نانوسیم ها، نانومیل ها و نانوالیاف ۱۰ سال پس از آن گزارش شد. نانو تیوب های بورون نیتراید یک عایق الکتریکی با شکاف نواری به اندازه $5/5$ الکترون ولت هستند، که مستقل از شکل تیوب هاست [۶،۵]. پس از کشف فولرن کربن، فولرن بورون نیتراید هشت سطحی صفر بعدی به ترتیب توسط استفان^۱ و گلدبرگ^۲ در سال ۱۹۹۸ سنتز شد [۸،۷].

کشف خواص فیزیکی شگفت انگیز گرافن، کنجکاوی محققان را در مواد دو بعدی تحریک کرد [۹]. یکی از نمونه های دو بعدی که به طور گسترده مورد مطالعه قرار گرفته است نانو صفحه ی بورون نیتراید است. در سال ۲۰۰۵ اولین آزمایش در مورد بورون نیتراید دو بعدی صورت گرفت [۱۰]. سایجین هانگ^۳ و همکارانش طی بررسی خود نشان دادند که نانو ذرات دو بعدی بورون نیتراید $(h - BN)$ می تواند به عنوان یک بستر پشتیبانی کننده قوی برای ترکیب اکسیدهای فلزی کاربرد داشته باشند. نتایج آن ها یک رویکرد جدید برای طراحی و توسعه منطقی کامپوزیت های اکسید فلزی ارائه می دهد و راه را به طیف گسترده ای از کاربردهای مهم مواد دو بعدی $h - BN$ باز می کند [۱۱]. کوینگ تانگ^۴ و همکارانش خواص الکتریکی نانو صفحه ی بورون نیتراید را با استفاده از محاسبات نظریه تابع چگالی مورد بررسی قرار دادند. آنها مشاهده نمودند که نانو صفحه ی بورون نیتراید دارای شکاف باند $4/78$ الکترون ولت است. همچنین نانو صفحه ی بورون نیتراید در حضور ناخالصی ای از مولکول های آلی دهنده و پذیرنده ی قوی الکترون را با استفاده از محاسبات نظریه ی تابع چگالی مورد بررسی قرار دادند. نتایج نشان داد که اعمال این ناخالصی به طور قابل توجهی می تواند شکاف باند انرژی را در نانو صفحه ی

³ Caijin Huang

⁴ Qing Tang

¹ Stephan

² Golberg