

مقارنة الخواص الإلكترونية لصفائح بورون - نتريد السداسية النانوية باستخدام دالتي التبادل- الارتباط التقريب الموضوعي وتقريب الهجين

أثير علي محمود ، عيسى زين العابدين حسن

athyralkryty191@gmail.com , Issa.assafly@gmail.com

قسم الفيزياء ، كلية التربية للعلوم الصرفة ، جامعة كركوك ، العراق

مستخلص:

في دراستنا الحالية ولمعرفة قابلية نتريد البورون السداسي النقي كيفية التغيرات الحاصلة في الخواص الإلكترونية، تم استخدام نظرية دالية الكثافة (DFT) بالاعتماد على تقريب التدرج المعمم (GGA) وتقريب (HSE03) الهجين، حيث أجريت في المرحلة الأخيرة لكل حالة مدروسة للحصول على التراكيب الإلكترونية مثل تراكيب حزم فجوة الطاقة وكثافة الحالات، تم حساب فجوة الطاقة لنتريد البورون السداسي النقي باستخدام تقريب (GGA) وكانت تساوي (eV4.670) وهي تمثل فجوة طاقة مباشرة والسبب في ذلك تقع على نفس قيم منطقة بريليون، اما باستخدام تقريب (HSE03) الهجين تساوي (eV5.791) وهي تمثل فجوة طاقة غير مباشرة والسبب في ذلك تقع على قيم مختلفة بالنسبة لمناطق بريليون . واثبتنا من خلال دراستنا على وحدة الخلية الكبيرة لنتريد البورون النقي بان فجوة الطاقة غير مباشرة (اي انه عازل ممتاز يتمتع بفجوة طاقة كبيرة تساوي تقريباً إلى 6 eV).

الكلمات المفتاحية: نتريد البورون السداسي (h-BN)، نظرية دالية الكثافة (DFT)، تقريب الهجين (HSE03)، برنامج Castep، الخواص الإلكترونية لنتريد البورون السداسي .

Comparison of electronic properties of hexagonal boron-nitride nanosheets using exchange-correlation functions, local approximation and hybrid approximation.

Atheer Ali Mahmoud , Issa Zainalabdin Hassan

athyralkryty191@gmail.com , Issa.assafly@gmail.com

Department of physics, College of Education for pure Science, University of Kirkuk, Iraq

Abstract:

In our current study, to find out how the pristine hexagonal boron nitride changes in the electronic properties, the density functional theory (DFT) was used based on the (GGA) approximation and the hybrid (HSE03) approximation. Where it was conducted in the last stage for each studied case to obtain the electronic structures such as the energy gap bundle bundles (E_g) and the density of states (DOS), the energy gap (E_g) for pristine hexagonal boron nitride was calculated using the (GGA) approximation and it was equal to (4.670eV) representing a direct energy gap because it is located on the same point in the Brillion Zone, but using the hybrid (HSE03) approximation, the energy gap is equal to (5.791eV) and it represents an indirect energy gap and the reason for that They are located at various points in the Brillion Zone. We proved through our study on the large unit cell of hexagonal borne nitride (h-BN) that the energy gap is indirect, and this means that it is an excellent insulator with a wide energy gap equal to approximately 6 electron volts

يحتوي الغلاف الخارجي لنتريد البورون (BN) على 8 الإلكترونات، يتميز عنصر البورون (B) ببنية إلكترونية $1S^2 2S^2 2P^1$ [9] وهذا يفسر تكافؤه الثلاثي لوجود ثلاثة إلكترونات في المدار الخارجي ويكون في الطبيعة مزيجاً من نظيرين كتلتاهما الذريتان (10)، البورون عنصر يفتقد للإلكترونات حيث أن لديه مدار (p) شاغر. أما عنصر النتروجين (N) يتميز ببنية إلكترونية $1S^2 2S^2 2P^3$ [10] وهذا يفسر تكافؤه الخماسي لوجود خمسة إلكترونات في المدار الخارجي ويعتبر النتروجين من العناصر اللافلزية ويقع في الدورة الثانية. تجري دراسات مكثفة حالياً لإيجاد الاختلاف في الحصول على الخصائص الإلكترونية (فجوة الطاقة).

كدراسة بهرام عبيدي وهمايون جعفري 2019 [11]، استخدم في هذه الدراسة حسابات المبدأ الأول (First Principle Calculations) والاعتماد على نظرية دالية الكثافة (DFT) باستخدام برنامج (QUANTUM ESPRESSO) واختيار تقريب التدرج المعمم (GGA) استناداً إلى حساب المبدأ الأول في إطار نظرية دالية للكثافة تم استخدام خلية كبيرة $(3 \times 3 \times 1)$ لنتريد البورون السداسي تم حساب كل من الخصائص الإلكترونية (فجوة الطاقة وكثافة الحالات) باستخدام تقريب (GGA) ، أظهرت النتائج المحسوبة ان فجوة الطاقة المباشرة تساوي (4.91eV) تقع في مركز مناطق بريليون، اما بالنسبة لكثافة الحالات الجزئية (PDOS) مساهمة مدار p عن استقرار الإلكترونات الموجودة في حزم التوصيل

دراسة نعمت مباشرة واخرون 2020 [12] استخدم في هذه الدراسة حسابات المبدأ الأول (first principle Calculations) والاعتماد على نظرية دالية

1. المقدمة Introduction

تقدم المواد النانوية ثنائية الأبعاد (D2) اهتماماً بحثياً واسعاً منذ ظهور الجرافين في العناوين الرئيسية [1]، تم الوصول ان المواد ثنائية الأبعاد مثل (نتريد البورون السداسي) بانه تمتلك مجموعة من الخصائص الفريدة والحصرية [2]، اجتذبت الصفائح النانوية ثنائية الأبعاد (D2) ذات السماكة الذرية قدراً كبيراً من الاهتمامات البحثية نظراً لخصائصها البصرية والإلكترونية والميكانيكية [3] مثل أجهزة الاستشعار والإلكترونيات والطب الحيوي والتحفيز وتخزين الطاقة ومع ذلك بسبب الصعوبات في إعداد صفائح نانوية ثنائية الأبعاد سميكة ذرياً ركزت الاهتمامات البحثية الحالية بشكل رئيسي على العينات ذات الطبقات المحدودة [4]. توجد ثلاثة اشكال لنتريد البورون [5] وهما الشكل ألفا α -BN والذي له بنية سداسية ويرمز له (h-BN) [6] أما الشكل الثاني فهو الشكل β -BN والذي له بنية مكعبة ويرمز له (c-BN) اما الشكل الثالث و النادر هو (w-BN) لهذا الشكل من أشكال الكربون بنية بلورية سداسية في الفراغ ثلاثي الأبعاد، يكون (w-BN) أصلب من الشكل المكعب (c-BN) [2]. يحتوي نتريد البورون (h-BN) السداسي على ذرتين لكل خلية وحدة تكون على هيئة خلايا سداسية الشكل تشبه خلايا نحل العسل كما موضح الشكل (a-1). يمكن وصف الصفائح النانوية BN على أنها طبقات مشابهة من الجرافين [7]، ترتبط B و N ببعضها البعض بواسطة روابط تساهمية قوية داخل كل طبقة من نتريد البورون السداسي (h-BN) [8]، بينما توجد قوى فان دير فال ضعيفة بين الطبقات المختلفة.

2. الجزء النظري (The Theoretical Part)

تعتبر معادلة شرودنجر (Schrodinger equation) البنية الأساسية للفيزياء والكيمياء النظرية التي تم كتابتها بطريقة رياضية من قبل العالم ارون شرودنجر والتي تكون وصفاً للحالة الموجية للإلكترونات كما موضحة في المعادلة ادناه

$$H \Psi = E \Psi \quad \dots\dots\dots (1)$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v(r) \right] \Psi (r) = E \Psi (r) \quad \dots\dots (2)$$

حيث ان:

$v (r)$: هو جهد البلورة الذي يُرى بواسطة

الإلكترون

$\Psi (r)$: هي دالة الموجة .

E : طاقة الإلكترون

يمكن حل معادلة شرودنجر للأنظمة التي تحتوي الإلكترون واحدًا في غلافها الخارجي، اما بالنسبة للأنظمة التي تحتوي اكثر من الإلكترون لا يمكن حلها بدون تقريبات [10].

نظرية دالية الكثافة (DFT Density Functional Theory) تستخدم للتحقق من التراكيب الإلكترونية (حساب المستوى الارضي) لنظام متعدد الجسيمات وفي تفسير حسابات الخصائص الفيزيائية للمواد وكذلك حساب بنية حزم الطاقة. ان دراسة أنظمة الجزيئات تزداد تعقيداً وذلك بازدياد عدد الذرات، فطريقة هاتري - فوك تعتمد على دالة الموجة وذلك لحساب البنية الإلكترونية للأنظمة المعقدة المكونة من عدد N من الذرات، ونظرية دالية الكثافة تسمح في تحديد خصائص الحالة الارضية لنظام متعدد الاجسام (x, y, z) والطاقات وآليات التفاعل والخصائص الطيفية وتكون الفكرة

الكثافة DFT التي تم تنفيذها في برنامج (QUAN-TUM ESPRESSO) وباستخدام دالية الارتباط-تبادل PBE تم حساب الخصائص الإلكترونية لصفحة نتريد البورون السداسي (h-BN) التي لها ثابت شبكية $(a=b)$ يساوي 2.502 \AA وثابت (c) يساوي 6.660 \AA , استناداً إلى حساب المبدأ الاول في إطار النظرية الدالية للكثافة تم حساب الخصائص الإلكترونية (فجوة الطاقة) وظهرت النتائج المحسوبة ان فجوة الطاقة تكون غير مباشرة تساوي (4.02 eV) تقع بين نقاط مختلفة في مناطق بريليون دراسة بنك هوانك وهوانكي يونك لي 2012 [13]، استخدم في هذه الدراسة حسابات المبدأ الأول (First Principle Calculations) بواسطة برنامج (VASP) وبالاعتماد على نظرية دالية الكثافة (DFT). استناداً إلى حساب المبادئ الأولى في إطار نظرية دالية الكثافة استخدم دالية ارتباط-تبادل (PBE) ضمن تقريب التدرج المعمم (GGA) وتقريب (HSE) الهجين. تم استخدام خلية فائقة $(1 \times 5 \times 5)$ من نتريد البورون السداسي، أعطت حسابات الاختبار الخاصة على الخلية الفائقة $(1 \times 7 \times 7)$ نفس النتائج المحسوبة على الخلية $(1 \times 5 \times 5)$. تم حساب فجوة الطاقة باستخدام تقريب (PBE) وتقريب (HSE) وكانت تساوي 4.56 eV , 5.56 eV ((eV)) على التوالي. من المعروف أن حسابات نوع GGA العادية عادة ما تقلل من فجوات النطاق لأشباه الموصلات وطاقة حافة النطاق المطلقة من حساب GGA ليست موثوقة دائماً لأن الحسابات الوظيفية الهجينة يمكن أن تعطي نتائج محسنة لأشباه الموصلات لذلك يعتمد على تقريب (HSE) الهجين لحساب الخواص الإلكترونية (فجوة النطاق وكثافة الحالات) لنتريد البورون السداسي النقي h-BN .

لشريحة واحدة وليس لعدة شرائح أذ يمكن إهمال التفاعل بين الطبقات تبين طول الأصرة حسب القياسات العلمية المحسوبة و المسافة الفاصلة بعد اجراء عملية التهيئة الهندسية تساوي (1.449 Å) كما موضح الشكل (1-b) التي تكون متطابقة مع نتائج الدراسات السابقة (944.1 Å) [20] والزوايا بين ثلاث ذرات مرتبطة مع بعضها (B-N-B) تساوي 1021° [21] كما موضح الشكل (1-c). وبالتالي ستتطرق على بنية الحساب الإلكترونية لنتريد البورون السداسي والتي تعطينا معلومات حول خصائصها الإلكترونية مثل حسابات كل من كثافة الحالات (DOS), وفجوة النطاق الإلكترونية وذلك باستخدام تقريبان مختلفان للحصول على نتائج دقيقة وناجحة لمعرفة فجوة النطاق الإلكترونية (direct) لنتريد البورون السداسي على انه مباشرة (direct) او غير مباشرة (in-direct).

الاساسية لنظرية دالية الكثافة هي استبدال دالة الموجة بالكثافة الإلكترونية ($\rho(r)$ electron-density) الموضحة بالصورة ادناه في معادلة (3 و4). ان هدف نظرية دالية الكثافة في اعتمادها على استبدال دالة الموجة بالكثافة الإلكترونية وهي تحويل مسألة الانظمة المتعددة الى مسألة الانظمة الأحادية المتمثلة بالكثافة الإلكترونية التي يمكن حسابها بثلاثة متغيرات فقط وذلك لتقليل عدد المتغيرات في عملية الحسابات [12,11].

$$\int n(r)dr = N \quad \dots\dots\dots (3)$$

$$n(\vec{r}) = N \int \Psi^*(r) \Psi_e(r) dr \quad \dots\dots\dots (4)$$

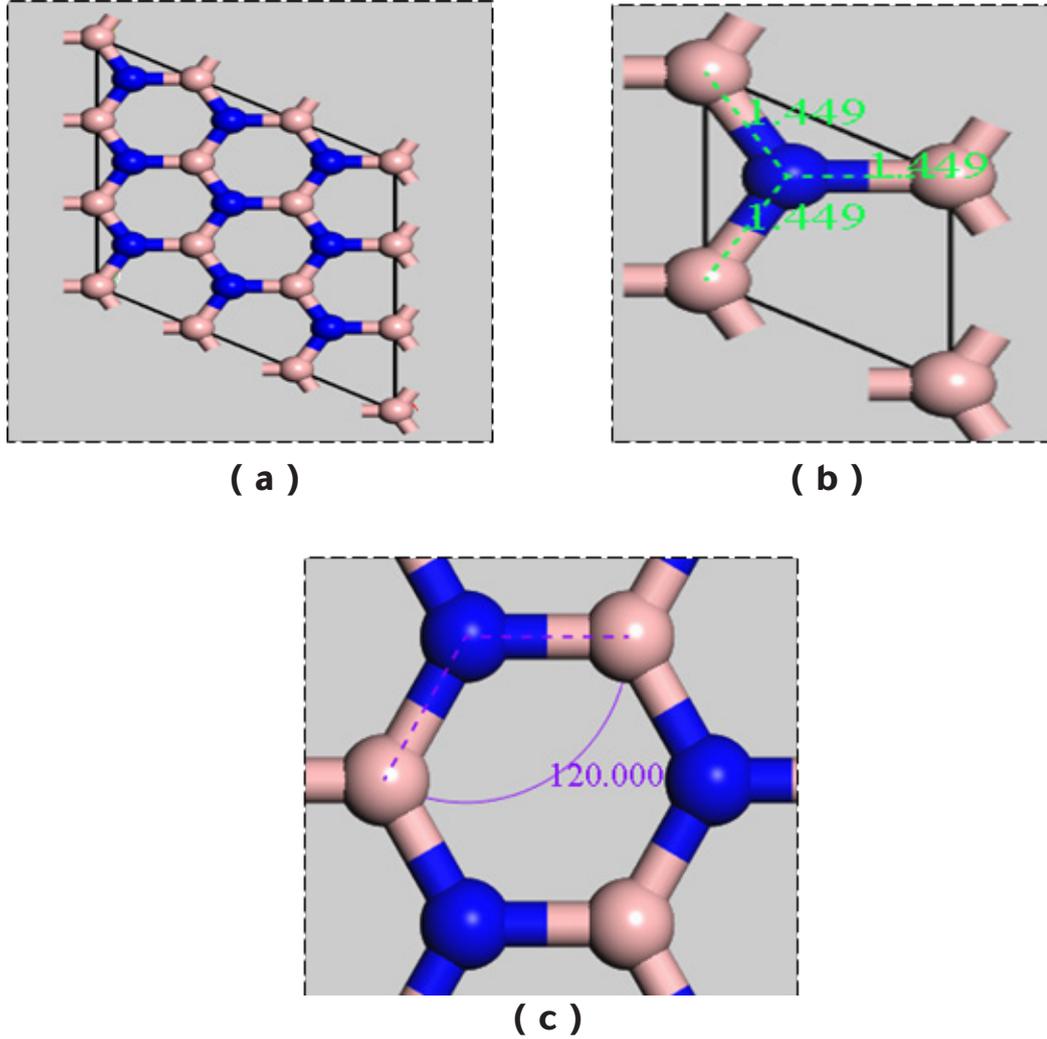
حيث ان

n : كثافة الالكترتون

(N) : تمثل عدد الالكترونات

3. طريقة الحساب Computational details

في دراستنا لهذا البحث استخدمنا حسابات المبدأ الأول [14] (First principle calculation) بالاعتماد على نظرية دالية الكثافة [15] [16] (TFD) بواسطة برنامج [17] (CASTEP), تم اجراء الحسابات على وحدة الخلية (1×3×3) لنتريد البورون السداسي النقي [18] (Pristine h-BN) تم استخدام نظرية (DFT) لوصف الحسابات واختيار تقريب التدرج المعمم [19] (GGA-PBE) وتقريب الهجين (HSE03) [19], تكون ثوابت الشبكة هي (a,b,c) بحيث تكون (a=b) وقيمتها (0.152 Å) في المستوى (X,Y) اما قيمة (c) والتي تمثل البعد بين كل طبقتين فقد تم اختيارها (30.000 Å) بتجاه محور (Z) تم اختيار هذه المسافة لأغراض حسابية لتكون الخواص المحسوبة لنتريد البورون السداسي النقي



الشكل (1) - (a) شكل نتريد البورون السداسي النقي ذات الخلية الكبيرة (3x3x1). (b) طول الاصرة بين B-N). (c) قيمة الزاوية بين B-N-B.

طاقة مباشرة (Direct band gap) [22]. تعمل هذا الفجوة على عرقلة سير الإلكترونات بسبب عدم احتوائها على إلكترونات حرة على سطحها وهذه النتائج العملية تتوافق (تتطابق) تقريباً مع النتائج النظرية التجريبية كما موضح في الجدول (1) ادناه . من الشكل (2-b) تم حساب تراكيب الحزم (فجوة الطاقة) والتي تساوي (197.5 Ve) عند النقط G و K باستخدام تقريب (HSE03) المهجين تبين ان قيم الطاقة تقع على قيم مختلفة عند النقط G و K, اي تكون حزم طاقة غير مباشرة [23] (in-direct).

4. النتائج والمناقشة

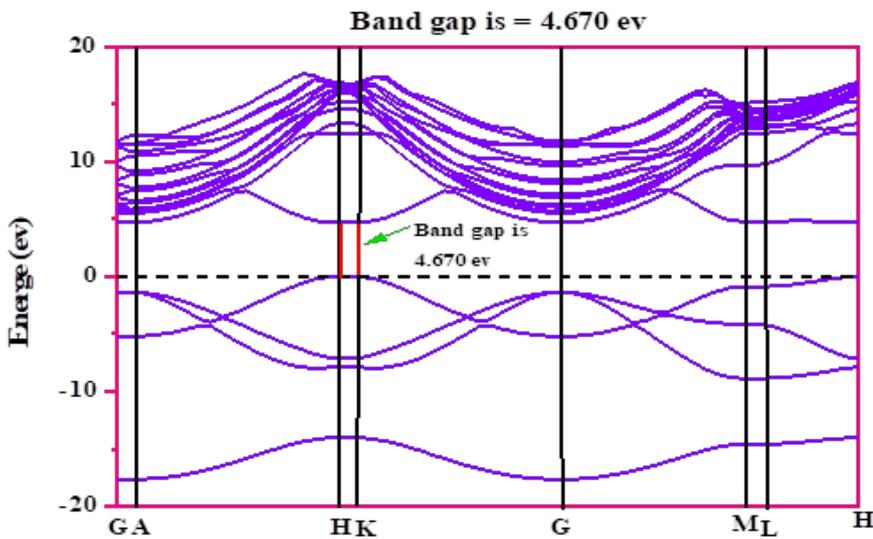
(Results and discussion)

4.1. فجوة الطاقة (Band gap)

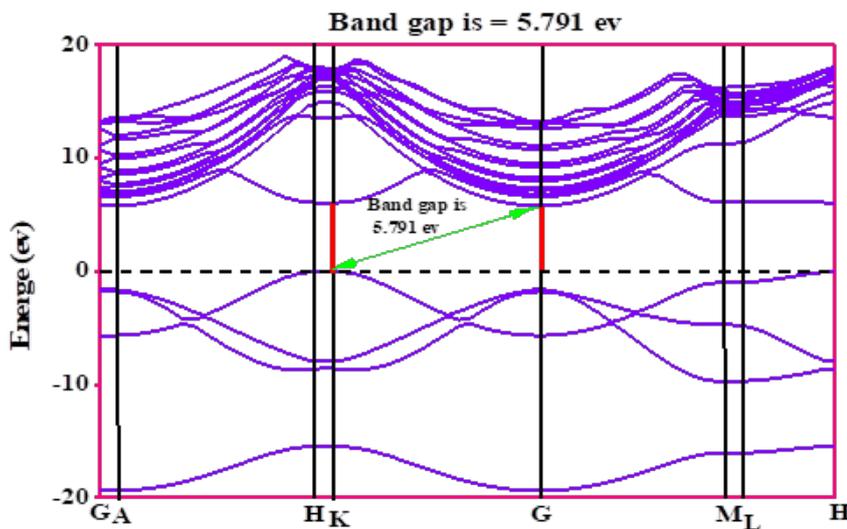
يبين الشكل (2-a) تراكيب الحزم ومن خلاله تم حساب فجوة الطاقة لوحدة الخلية الكبيرة (1x3x3) والتي تساوي (4.670 eV) عند النقطة (K) باستخدام تقريب التدرج المعمم (GGA-PBE) يتم حساب قيمة فجوة الطاقة من خلال قيم الفرق بين أقرب نقطتين في حزمة التوصيل وحزمة التكافؤ، يتبين ان قيم الطاقة تقع على نفس قيم (K) اي تكون حزم

الكهربائية الحساسة دون التأثير بخصائصها. وهذه النتائج العملية تتوافق (تتطابق) تقريباً بشكل صحيح مع النتائج النظرية (الدراسات السابقة) عندما فجوة الطاقة تساوي (5.65 eV) [13] و (5.59 eV) [5].

استخدام تقريب (HSE03) الهجين يعطينا قيم دقيقة وواضحة لكن بتكاليف عالية (زمنياً، وحاسوبياً). وبالتالي اثبتنا من خلال استخدام التقريب الهجين (HSE03) ان h-BN هو (in-direct) عازل ممتاز يتمتع بفجوة طاقة كبيرة تساوي (197.5 eV) وتكون طبقة واقية عازلة مثالية لمنع التسرب الكهربائي للأجهزة



(a)



(b)

الشكل (2) التراكيب الإلكترونية (فجوة الطاقة) [24]

لصفحة نتريد البورون السداسي باستخدام (a) تقريب (PBE) (b) تقريب HSE03

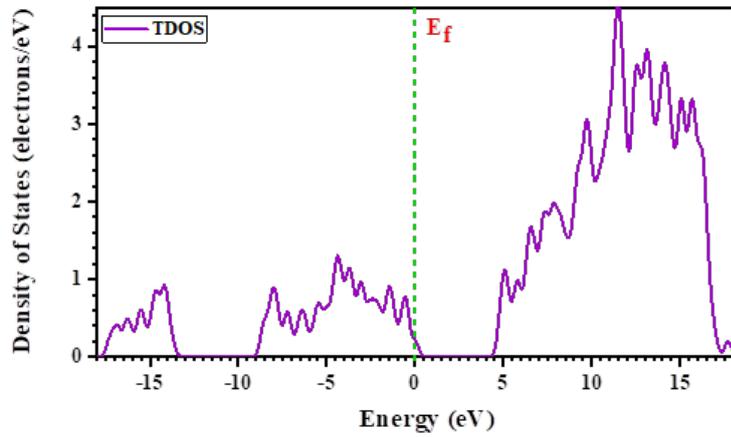
جدول (1) حساب فجوة الطاقة لنتريد البورون السداسي باستخدام برامج وتقاريف مختلفة [25]

البرنامج المستخدم	التقريب المستخدم	فجوة الطاقة (eV)
Linear Combination of Pseudoatomic Orbitals (LCPAO)	LDA	3.7
FP-LAPW	LDA	3.9
Ab-initio Pseudopotential	LDA	4.3
OLCAO	LDA	4.07
FP-LAPW	GGA- PBE	4.54
Projected-Augmented-Wave (PAW)	LDA	4.02
FP-LAPW	LDA	4.58
PAW (VASP)	GGA	4.21
Ultra soft Pseudopotential	LDA	4.5
GW	LDA	5.95

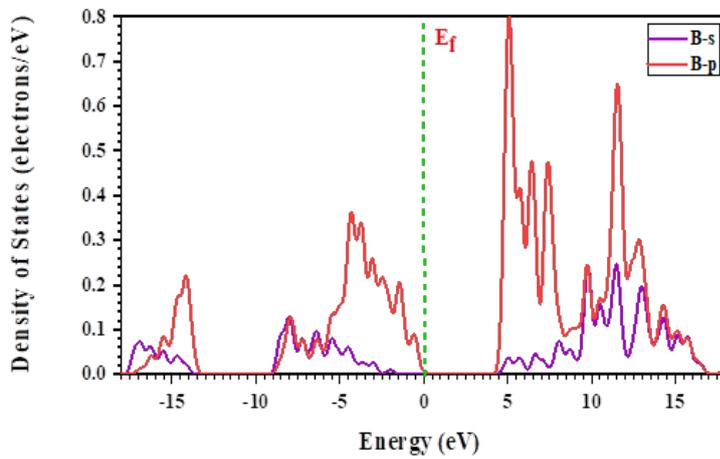
تكون غنية بالإلكترونات وتكون احتمالية انتقال الإلكترونات من حزمة التوصيل إلى منطقة التكافؤ كبيرة جداً كما موضح في الشكل (3-b). أما من خلال التوزيع الإلكتروني لعنصر النتروجين (N) [28]، الذي يساوي نلاحظ تواجد قمم لكثافة الحالات في منطقة حزم التكافؤ يرجع الأساس إلى المداران (p,s)، والقمم الصغيرة المتواجدة في حزم التوصيل يرجع الاصل إلى المدار (s)، كما موضح في الشكل (3-c). وبالتالي بالنسبة لذرة البورون تكون كثافة الحالات عالية في مدار (p) أكثر من مدار (s) وهذا يدل على أن المدار (p) هو المسؤول عن استقرار ذرة البورون (B)، وهذا النتائج تتوافق مع النتائج النظرية بشكل صحيح [20، 29]. أما في ذرة النتروجين (N) تكون كثافة الحالات عالية في المداران (p,s) وهذا يدل على أن هو المسؤول عن استقرار ذرة الهيدروجين المداران (p,s).

2.4. كثافة الحالات (DOS)

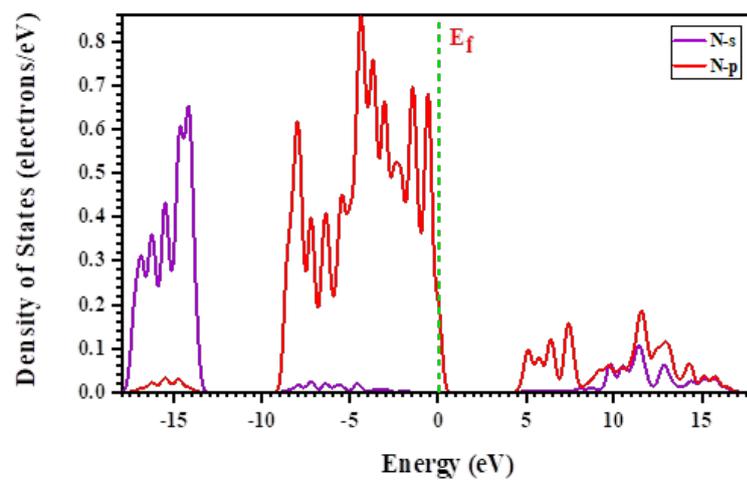
2.4.1. باستخدام تقريب (GGA-PBE)
تم حساب كثافة الحالات الكلية (SODT) [26]، لنتريد البورون السداسي (NB-h) وتبين لنا أعلى قمم لكثافة الحالات وذلك في مجال (4.35 إلى 18.2) في منطقة التوصيل والتي تقدر (5.4/eta) وهذا يتوافق بان هذا المنطقة تكون غنية بتواجد الإلكترونات كما في الشكل (3-a). بعد ذلك تم حساب كثافة الحالات الجزئية (SODP) لكل عنصر من نتريد البورون، من خلال التوزيع الإلكتروني لعنصر البورون (B) [27]، $5B = 1S^2 2S^2 2P^1$ ، الذي يساوي نلاحظ تواجد قمم لكثافة الحالات في منطقة حزم التوصيل يرجع الأساس إلى المدار (p) والقمم الصغيرة المتواجدة في حزم التكافؤ يرجع الاصل إلى المدار (s). وعليه نستطيع القول بان المسؤول عن كثافة الحالات المتواجدة في حزم التوصيل المدار (p) وهذا يعني بان هذه المنطقة



(a)



(b)

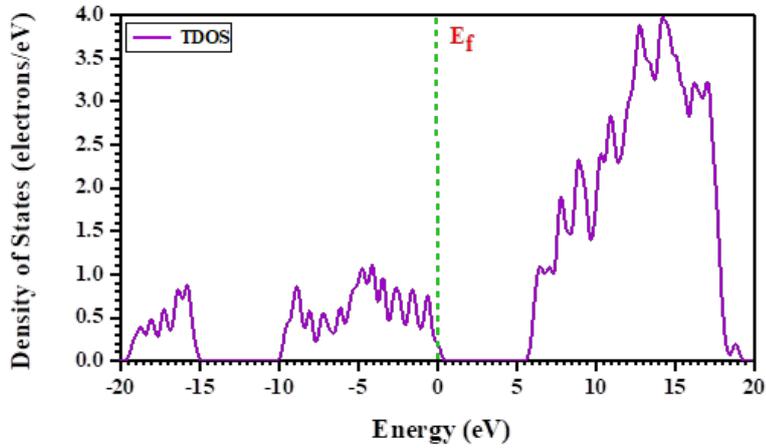


(c)

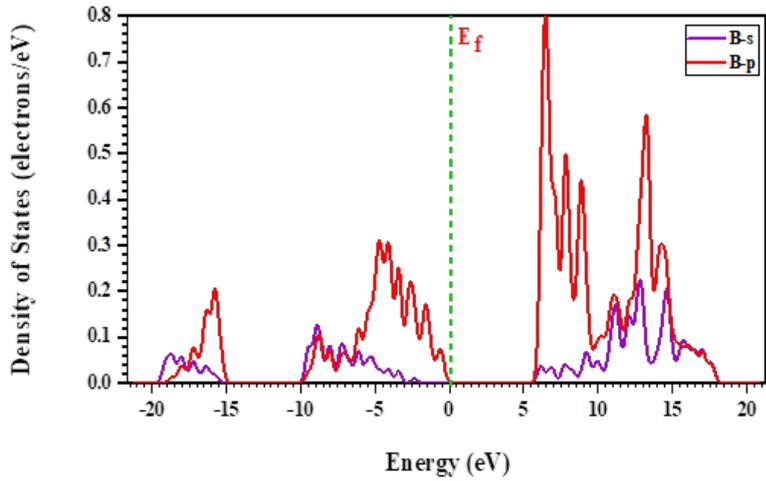
الشكل (3) التراكيب الإلكترونية (كثافة الحالات الكلية و الجزئية) لصفحة نتريد البورون السداسي باستخدام تقريب PBE . حيث (a) الكثافة الكلية TDOS . (b) الكثافة الجزئية PDOS لذرة B . (c) الكثافة الجزئية PDOS لذرة N

المتواجدة في حزم التوصيل المدار (p) وهذا يعني بان هذه المنطقة تكون غنية بالإلكترونات وتكون احتمالية انتقال الإلكترونات من حزمة التوصيل الى منطقة التكافؤ كبيرة جداً في الشكل (b-4)، بالنسبة لعنصر النتروجين تواجد قمم لكثافة الحالات في منطقة حزم التكافؤ يرجع الأساس إلى المداران (p,s)، والقمم الصغيرة المتواجدة في حزم التوصيل يرجع الاصل الى المدار (s) وعليه نستطيع القول بان المسؤول عن كثافة الحالات المتواجدة في حزم التكافؤ المداران (p,s) وهذا يعني بان هذه المنطقة تكون غنية بالإلكترونات وتكون احتمالية انتقال الإلكترونات من حزمة التوصيل الى منطقة التكافؤ كبيرة كما في الشكل (c-4). وبالتالي بالنسبة لذرة البورون تكون كثافة الحالات عالية في مدار (p) اكثر من مدار (s) وهذا يدل على ان المدار (p) هو المسؤول عن استقرار ذرة البورون (B) [20]، اما في ذرة النتروجين (N) تكون كثافة الحالات عالية في المداران (p,s) وهذا يدل على ان هو المسؤول عن استقرار ذرة الهيدروجين المداران (p,s) .

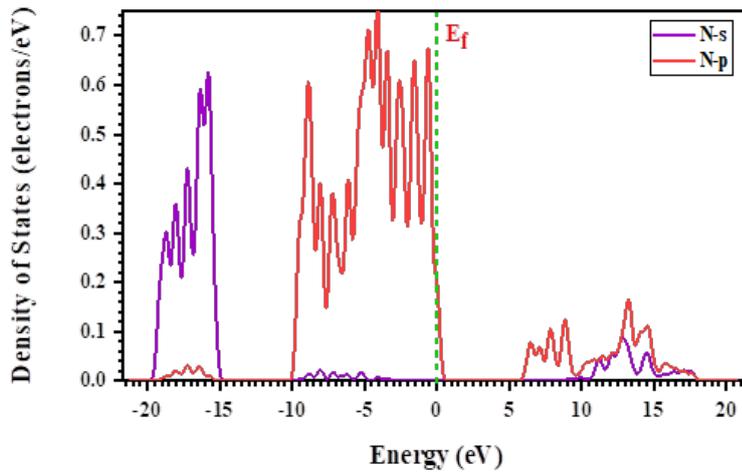
2.2.4 . باستخدام تقريب (30ESH) الدقيق تعتمد كثافة الحالات الكلية (SODT) والجزئية (SODP) لصفحة نتريد البورون السداسي على عدد الذرات في الصفحة وتراكيبها الكيميائية والفيزيائية. يتم الحصول على الكثافة الكلية عن طريق جمع قيم جميع النطاقات، يمثل الشكل (a-4) تغيرات كثافة الحالات الكلية (SODT) بدلالة الطاقة حيث نلاحظ في المجال الممتد من 0 الى 20 والتي تمثل منطقة حزم التوصيل وجود أعلى قمة التي يظهر فيه تغير محسوس في المجال الممتد من (5.5 الى 19.2) والتي تساوي (Ve/ etast) كما تم تسجيل قمم كثافة الحالات في المجال الممتد من (0 الى -20) والتي تمثل منطقة حزم التكافؤ وجود القمة الاولى في المجال الممتد من (0 الى -10) التي تساوي (Ve/ etast1.1) والقمة الثانية في المجال الممتد من (-15 الى -19.5) والتي تقدر (Ve/ etast88.0) تكون في هذا القمم احتمالية انتقال الإلكترونات قليلة نوعاً ما تمثل هذا القمم المتواجدة في هذا الحزم والقريبة من طاقة فيرمي (E_f) [30] تكون لها نفس القيم تقريبا اي انها يتواجد فيها كثافة الحالات مقارنة بالحالة التي تكون فيها كثافة الحالات منعدمة. وبالتالي تبين لنا اعلى قمم لكثافة الحالات وذلك في مجال (5.5 الى 19.2) في منطقة التوصيل والتي تقدر (Ve/etast4) وهذا يتوافق بان هذا المنطقة تكون غنية بتواجد الإلكترونات. اما كثافة الحالات الجزئية (SODP) لذرة البارون (B) نلاحظ تواجد قمم لكثافة الحالات في منطقة حزم التوصيل يرجع الأساس إلى المدار (p)، والقمم الصغيرة المتواجدة في حزم التكافؤ يرجع الاصل الى المدار (s). وعليه نستطيع القول بان المسؤول عن كثافة الحالات



(a)



(b)



(c)

الشكل (4) التراكيب الإلكترونية (كثافة الحالات الكلية و الجزئية) لصفحة نتريد البورون السداسي باستخدام تقريب 30ESH. حيث (a) الكثافة الكلية SODT. (b) الكثافة الجزئية SODP لذرة B. (c) الكثافة الجزئية SODP لذرة N

5_12

- [4] W. Yang, X. Zhang, and Y. J. N. T. Xie, "Advances and challenges in chemistry of two-dimensional nanosheets," vol. 11, no. 6, pp. 793-816, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.nantod.2016.10.004>
- [5] B. Mclean and A. J. Page, Boron Nitride Nanomaterials: Properties, Fabrication, and Applications. CRC Press, 2022.
- [6] S. Angizi et al., "Towards the two-dimensional hexagonal boron nitride (2D h-BN) electrochemical sensing platforms," vol. 167, no. 12, p. 126513, 2020. [10.1149/1945-7111/abaf29](https://doi.org/10.1149/1945-7111/abaf29)
- [7] J. Wang, F. Ma, W. Liang, and M. J. M. T. P. Sun, "Electrical properties and applications of graphene, hexagonal boron nitride (h-BN), and graphene/h-BN heterostructures," vol. 2, pp. 6-34, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2017.07.001>
- [8] K. Luo et al., "New hexagonal boron nitride polytypes with triple-layer periodicity," vol. 121, no. 16, p. 165102, 2017. <https://doi.org/10.1063/1.4981892>
- [9] D. L. Prasad and E. D. J. P. r. l. Jemmis, "Stuffing improves the stability of fullerene-like boron clusters," vol. 100, no. 16, p. 165504, 2008. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.165504>
- [10] I. Levinson, A. Bolotin, and L. Levin, "TWO-CONFIGURATION APPROXIMATION FOR ATOMIC SPECIES OF NITROGEN TYPE (DVUKHKONFIGURATSIONNOE PRIBLIZHENENIE V SLUCHAE ATOMOV TIPA AZOTA)," AMERICAN METEOROLOGICAL SOCIETY BOSTON MASS1966.
- [11] B. A. Ravan and H. J. C. C. M. Jafari, "DFT study on electronic and optical properties of halogen-adsorbed hexagonal boron nitride," vol. 21, p. e00416, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.cocom.2019.e00416>
- [12] N. Mishra, B. Pamuk, and D. Schlom, "ATOMIC PROPERTIES OF HEXAGONAL BORON NITRIDE FROM FIRST PRINCIPLES."

الاستنتاجات :

تمت دراسة الخصائص الإلكترونية الخطية للصفائح النانوية السداسية لنتريد البورون باستخدام حساب المبدأ الأول (Fermi-Dirac statistics) وبالإعتماد على نظرية دالية الكثافة (TFD) واختيار تقريب التدرج المعمم (AGG). لاستكشاف الوظائف الإلكترونية لهذا الصفائح النانوية، وجدنا بان هيكل النطاق الإلكتروني (band structure) لنتريد البورون السداسي عازل ممتاز للكهربائية ذات فجوة طاقة واسعة تبلغ 5.791 إلكترون فولت، تظهر الكثافة الجزئية للحالات مساهمة المدار p₂ لذرة البورون في حزمة التوصيل، وبالتالي تم الاستنتاج بان هذه الحسابات تؤكد أن الصفائح النانوية لنتريد البورون السداسي لها خصائص عازلة جيدة وتتفق النتائج المحسوبة بشكل جيد مع البيانات التجريبية (الدراسات السابقة) المتاحة، تقترح هذه النتائج تطبيقات محتملة للهياكل النانوية لنتريد البورون السداسي في الأجهزة الإلكترونية والإلكترونية ويمكن تطويرها في الدراسات المستقبلية.

المصادر

- [1] C. E. Banks and D. A. Brownson, 2D materials: characterization, production and applications. CRC Press, 2018.
- [2] Y. Li, "Innovative synthesis and characterization of large h-BN single crystals: from bulk to nanosheets," Université de Lyon, 2019.
- [3] Z. Khanam, N. Gogoi, and D. N. Srivastava, 2D Nanomaterials for Energy and Environmental Sustainability. Springer, 2022. <https://doi.org/10.1007/978-981-16-8538->

- [22] S. Chabi and K. J. N. Kadel, "Two-dimensional silicon carbide: emerging direct band gap semiconductor," vol. 10, no. 11, p. 2226, 2020.
- [23] J. Rautert et al., "Optical orientation and alignment of excitons in direct and indirect band gap (In, Al) As/AlAs quantum dots with type-I band alignment," vol. 99, no. 19, p. 195411, 2019.
- [24] R. Woods-Robinson et al., "Wide band gap chalcogenide semiconductors," vol. 120, no. 9, pp. 4007-4055, 2020. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00600>
- [25] Y. Malozovsky, C. Bamba, A. Stewart, L. Franklin, and D. J. a. p. a. Bagayoko, "Accurate Ground State Electronic and Related Properties of Hexagonal Boron Nitride (h-BN)," 2020. <https://doi.org/10.4236/jmp.2020.116057>
- [26] M. Dai et al., "A direct method to extract transient sub-gap density of state (DOS) based on dual gate pulse spectroscopy," vol. 6, no. 1, p. 24096, 2016. <https://doi.org/10.1038/srep24096>
- [27] Y. V. Kaneti, D. P. Benu, X. Xu, B. Yulianto, Y. Yamauchi, and D. J. C. R. Golberg, "Borophene: two-dimensional boron monolayer: synthesis, properties, and potential applications," vol. 122, no. 1, pp. 1000-1051, 2021. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.1c00233>
- [28] C. J. J. S. Stevens, "Nitrogen in the environment," vol. 363, no. 6427, pp. 578-580, 2019.
- [29] A. Shuaibu, O. J. Adeyemi, U. R. Ushiekpan, O. G. Olowomofe, B. J. Akinade, and O. A. J. A. J. o. C. M. P. Kafayat, "First principle study of structural, elastic and electronic properties of hexagonal boron nitride (hex-BN) single layer," vol. 9, no. 1, pp. 1-5, 2019.
- [30] C. Kittel and P. McEuen, Introduction to solid state physics. John Wiley & Sons, 2018.
- [13] B. Huang and H. J. P. R. B. Lee, "Defect and impurity properties of hexagonal boron nitride: A first-principles calculation," vol. 86, no. 24, p. 245406, 2012. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.245406>
- [14] C. Freysoldt et al., "First-principles calculations for point defects in solids," vol. 86, no. 1, p. 253, 2014. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.86.253>
- [15] A. J. Cohen, P. Mori-Sánchez, and W. J. C. r. Yang, "Challenges for density functional theory," vol. 112, no. 1, pp. 289-320, 2012. <https://doi.org/10.3389/fenrg.2022.1031118>
- [16] D. J. A. A. Bagayoko, "Understanding density functional theory (DFT) and completing it in practice," vol. 4, no. 12, 2014. <https://doi.org/10.1063/1.4903408>
- [17] M. J. J. C. P. C. Rutter, "C2x: A tool for visualisation and input preparation for Castep and other electronic structure codes," vol. 225, pp. 174-179, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2017.12.008>
- [18] L. Shi, A. Xu, T. J. A. A. M. Zhao, and Interfaces, "First-principles investigations of the working mechanism of 2D h-BN as an interfacial layer for the anode of lithium metal batteries," vol. 9, no. 2, pp. 1987-1994, 2017. <https://doi.org/10.1021/acsaami.6b14560>
- [19] C. Sujith, S. Joseph, T. Mathew, V. J. J. o. P. Mathew, and C. o. Solids, "First-principles investigation of structural, electronic and optical properties of quasi-one-dimensional barium cadmium chalcogenides Ba₂CdX₃ (X= S, Se, Te) using HSE06 and GGA-PBE functionals," vol. 161, p. 110488, 2022.
- [20] A. M. Satawara, G. A. Shaikh, S. K. Gupta, and P. J. M. T. P. Gajjar, "Structural, electronic and optical properties of hexagonal boron-nitride (h-BN) monolayer: An Ab-initio study," vol. 47, pp. 529-532, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.10.589>
- [21] K. Waters and R. J. J. o. P. C. M. Pandey, "Stability, elastic and electronic properties of a novel BN₂ sheet with extended hexagons with N-N bonds," vol. 30, no. 13, p. 135002, 2018. [10.1088/1361-648X/aaad96](https://doi.org/10.1088/1361-648X/aaad96)