

## بررسی هامیلتونی موثر الکترونی در شبکه‌ی بایفنیلین

محمد رضا افیونی<sup>1\*</sup>، محسن وفائی حسین آبادی<sup>2</sup>، بهمن شیخی<sup>3</sup>، عباس حیدری<sup>4</sup>، سعید عابدی<sup>5</sup>

1- دانشجوی دکترا، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس

Mohammadreza.af1993@gmail.com

2- استادیار، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس

m.vafae@modares.ac.ir

3- دکترا، فیزیک، فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف

bahman.sheikhi.sh@gmail.com

4- دانشیار، ریاضی، ریاضی محض، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس

aheydari@modares.ac.ir

5- دانشجوی دکترا، فیزیک، فیزیک ماده چگال، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

saeidabediy@gmail.com

واژگان کلیدی: بایفنیلین، تنگابست، ACBN0

### 1- مقدمه

در سال‌های اخیر، مطالعه‌ی خواص الکترونی و ساختاری مواد دوبعدی به دلیل ویژگی‌های منحصر به فرد آن‌ها، توجه بسیاری از پژوهشگران را به خود جلب کرده است. از جمله این خواص می‌توان به رسانندگی‌های غیر عادی الکترونی و اسپینی اشاره کرد. این رسانندگی‌های غیر عادی تحت عنوان خواص توپولوژیک شناخته می‌شوند. یکی از این مواد که اخیراً مورد توجه قرار گرفته، شبکه‌ی بایفنیلین است. این ساختار به دلیل آرایش پیچیده و خواص الکترونی خاص خود، کاربردهای بالقوه‌ای در زمینه‌های مختلف از جمله الکترونیک دارد [1].

یکی از ابزارهای کلیدی در بررسی خواص الکترونی این مواد، مدل‌های تنگابست (Tight-Binding) است [2]. توسعه‌ی مدل‌های تنگابست بهینه و دقیق برای مواد دوبعدی نظیر بایفنیلین، می‌تواند نقش مهمی در بهبود و توسعه‌ی نسل جدیدی از دستگاه‌های الکترونیکی ایفا کند و به عنوان ابزاری کارآمد در مدل‌سازی خواص الکترونی این مواد به کار گرفته شود. چالش اصلی در استفاده از این مدل‌ها، بهینه‌سازی دقیق پارامترهای آن‌ها به منظور به دست آوردن هامیلتونی مؤثر است. روش‌های ابتدا به ساکن مبتنی بر نظریه‌ی تابعی چگالی به منظور محاسبه ساختار الکترونی مواد، برای بهینه‌سازی این پارامترها مورد استفاده قرار گرفته‌اند. در این رهیافت، توسعه روش‌های هیبریدی HSE و بس ذره‌ای GW امکان استخراج هامیلتونی مؤثر با دقت بالاتری را فراهم می‌کنند اما دارای هزینه محاسباتی بسیار بالایی نسبت به روش‌های دیگر می‌باشند [3]. روش ACBN0 که بر مبنای رهیافت DFT+U است، به عنوان جایگزینی دقیق و کم‌هزینه نسبت به روش‌های پیچیده‌ای مانند GW معرفی شده است. این روش توانایی بالایی در محاسبه دقیق خواص الکترونی مواد نسبت به اندازه‌گیری‌های تجربی دارد که می‌تواند سبب بهینه‌سازی مناسب پارامترهای تنگابست و ارائه‌ی هامیلتونی مؤثر برای سیستم‌های مختلف شود.

در این مقاله، ما به بررسی و بهینه‌سازی پارامترهای تنگابست در شبکه‌ی بایفینیلن با استفاده از ساختار الکترونی بدست آمده از روش ابتدا به ساکن ACBN0 پرداخته‌ایم. هدف اصلی این پژوهش، به دست آوردن هامیلتونی تنگابست مؤثر است که بتواند به طور دقیق خواص الکترونی این ماده را توصیف کند. با بدست آوردن هامیلتونی مؤثر سعی بر آن داریم تا خواص متنوع و بدیع بایفینیلن را بدست آوریم.

## 2- روش محاسباتی

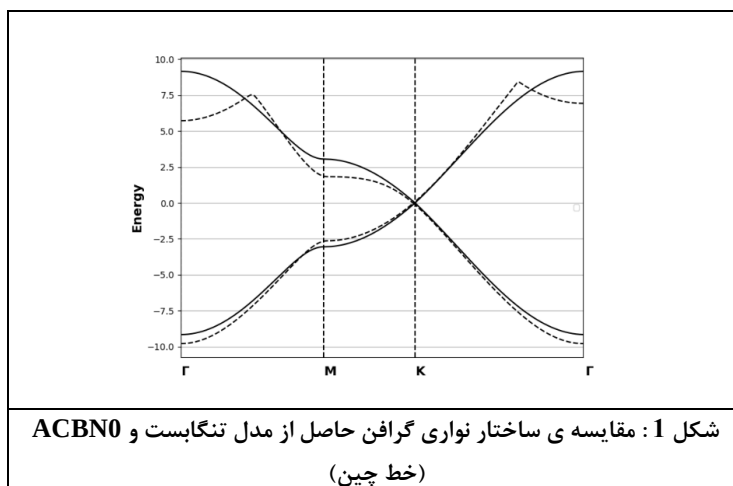
در این مطالعه، شبیه‌سازی های ابتدا به ساکن برای بدست آوردن خواص الکترونی بایفینیلن با استفاده از بسته‌های محاسباتی کوانتوم اسپرسو (Quantum ESPRESSO) و AFLOW $\pi$  انجام شده‌است [3, 4]. در این محاسبات از تقریب گرادیان های تعمیم یافته و تابعی تبادلی-همبستگی PBE برای محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) استفاده شده است. همچنین از شبه‌پتانسیل‌های نرمال-حفظ‌شده (norm-conserving pseudopotentials) و مش‌بندی  $8 \times 8 \times 1$  برای نمونه‌برداری از منطقه بریلوئن استفاده شده است. انرژی قطع تابع موج نیز به مقدار Ry 60 تنظیم شده است تا همگرایی دقیق خواص الکترونی سیستم تضمین شود.

به منظور محاسبه ساختار الکترونی در رهیافت DFT+U از روش ACBN0 استفاده شده و بسته AFLOW $\pi$  بکار گرفته شده است. در این روش پارمتر هابارد برای اتم ها به صورت خودسازگار محاسبه شده و منجر به افزایش دقت محاسبات نظریه تابعی چگالی استاندارد می‌گردد.

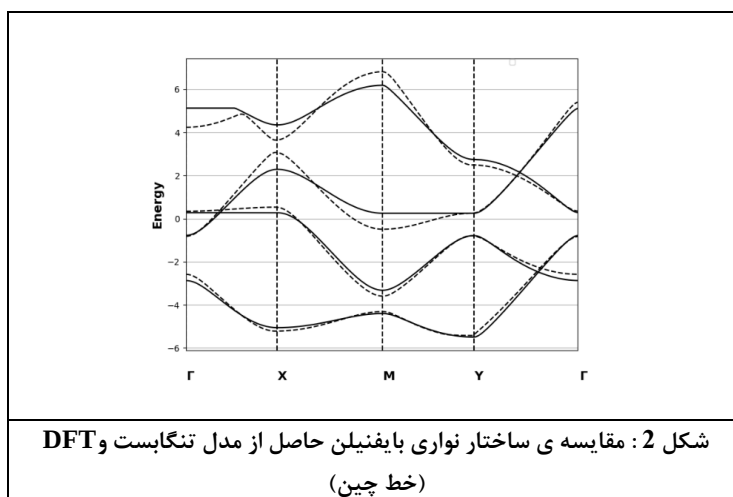
## 3- بحث و نتیجه گیری

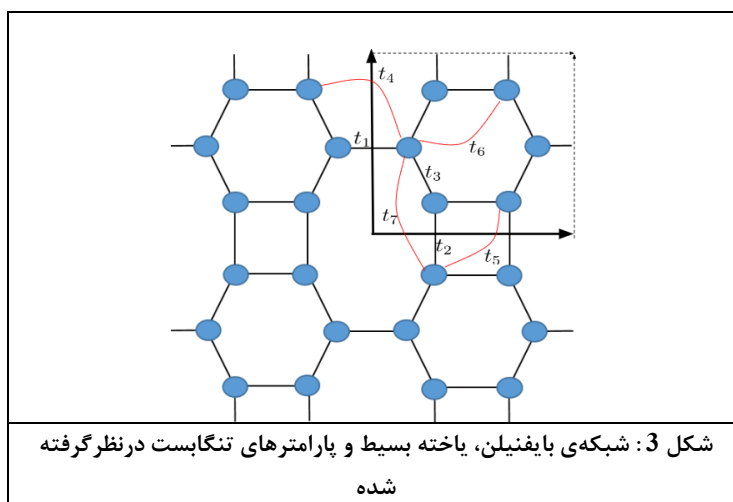
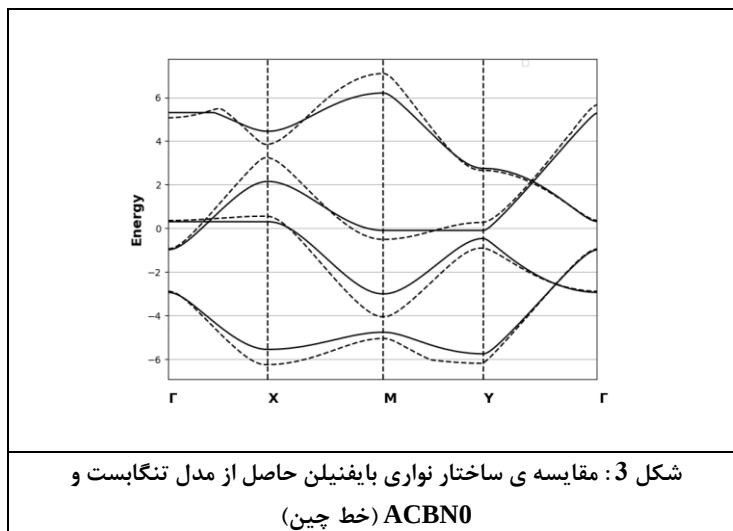
محاسبات GW به دلیل دقت بالای خود در پیش‌بینی خواص الکترونی، یکی از روش‌های معتبر برای مطالعه خواص الکترونی در فیزیک مواد است [5, 6]. با این حال، این روش بسیار زمان‌بر و پرهزینه است، عابدی و همکارانش نشان دادند که روش‌های GW و ACBN0 در محاسبه خواص الکترونی با یکدیگر قابل مقایسه بوده و نتایج حاصل از هر دو روش بسیار نزدیک به مقادیر تجربی است [7]. این سوال مطرح می‌شود که آیا محاسبات GW و ACBN0 برای مواد مبتنی بر کربن نظیر گرافن نیز نتایج مشابهی دارند یا خیر. به منظور مقایسه عملکرد این روش با روش GW در تولید هامیلتونی مؤثر، ابتدا به بررسی گرافن می‌پردازیم.

در این مطالعه، پارامتر جهش برای گرافن در تقریب نزدیکترین همسایه و با روش ACBN0 محاسبه شد و مقدار 3.05- الکترون ولت به دست آمد و ساختارهای نواری بدست آمده از روش ACBN0 و تنگابست برای این ساختار در شکل 1 نمایش داده شده است که به طور چشمگیری با مقادیر گزارش شده در محاسبات GW و آزمایشات تجربی مطابقت دارد [8, 9]. این توافق نشان می‌دهد که روش ACBN0 می‌تواند جایگزینی مناسب و کارآمد برای محاسبات GW در سیستم‌های متشکل از اتم‌های کربن باشد.



برای بررسی بیشتر، محاسبات ACBN0 برای شبکه بایفنیلین که از اتم‌های کربن تشکیل شده است انجام شد. سپس پارامترهای مدل تنگابست تا نزدیکترین همسایه‌ی دوم در حضور و عدم حضور تابعی ACBN0 بهینه‌سازی شدند. نتایج ما نشان می‌دهد که ساختار نواری الکترونی و پارامترهای تنگابست محاسبه شده در روش DFT به طور قابل توجهی با محاسبات انجام شده در منبع [10] مطابقت دارد. ساختار نواری بدست آمده از روش‌های DFT و تنگابست در شکل 2 نمایش داده شده است. پارامترهای تنگابست، زمانی که با استفاده از ساختار نواری بدست آمده با روش ACBN0 بهینه‌سازی می‌شوند، توصیف دقیق‌تری از خواص الکترونی بایفنیلین ارائه می‌دهند و اعتبار این روش را به عنوان جایگزینی مناسب برای روش پرهزینه GW تایید می‌کنند. ساختارهای نواری بدست آمده از روش ACBN0 و تنگابست در شکل 3 نمایش داده شده است. پارامترهای تنگابست بهینه شده با روش‌های ACBN0 و PBE در جدول 1 نمایش داده شده است.





|       | t1    | t2    | t3    | t4   | t5    | t6    | t7   | o     |
|-------|-------|-------|-------|------|-------|-------|------|-------|
| DFT   | -2.81 | -2.81 | -2.80 | 0.28 | -0.37 | -0.03 | 0.13 | -0.14 |
| ACBN0 | -3.10 | -3.00 | -2.80 | 0.20 | -0.30 | 0.00  | 0.12 | -0.20 |

جدول 1) پارامترهای تنگابست بهینه شده با استفاده از روش های مختلف برحسب eV انرژی پتانسیل روی هر موقعیت شبکه است).

## منابع و مراجع

- 1- Xie, Y., Chen, L., Xu, J., & Liu, W. (2022). Effective regulation of the electronic properties of a biphenylene network by hydrogenation and halogenation. *RSC Advances*, 12(31), 20088-20095.
- 2- Slater, J. C., & Koster, G. F. (1954). Simplified LCAO method for the periodic potential problem. *Physical Review*, 94(6), 1498.

- 3- Agapito, L. A., Curtarolo, S., & Buongiorno Nardelli, M. (2015). Reformulation of DFT+U as a pseudohybrid Hubbard density functional for accelerated materials discovery. *Physical Review X*, 5(1), 011006.
- 4- Cococcioni, M., & de Gironcoli, S. (2005). Linear response approach to the calculation of the effective interaction parameters in the LDA+U method. *Physical Review B*, 71(3), 035105.
- 5- Hedin, L. (1965). New method for calculating the one-particle Green's function with application to the electron-gas problem. *Physical Review*, 139(3A), A796.
- 6- Shishkin, M., & Kresse, G. (2006). Implementation and performance of the frequency-dependent GW method within the PAW framework. *Physical Review B*, 74(3), 035101.
- 7- Abedi, S., Ahmadpour, M. T., Baninajarian, S., Kahnouji, H., Hashemifar, S. J., Han, Z.-K., & Levchenko, S. V. (2023). Statistical analysis of the performance of a variety of first-principles schemes for accurate prediction of binary semiconductor band gaps. *The Journal of Chemical Physics*, 158(18).
- 8- Reich, S., Maultzsch, J., Thomsen, C., & Ordejón, P. (2002). Tight-binding description of graphene. *Physical Review B*, 66(3), 035412.
- 9- Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., & Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, 81, 109-162.
- 10- Mo, S., Seo, J., Son, S.-K., Kim, S., Rhim, J.-W., & Lee, H. (2024). Engineering two-dimensional nodal semimetals in functionalized biphenylene by fluorine adatoms. *Nano Letters*, 24(16), 4885-4892.