

دراسة الخصائص البصرية لنتريد البورون السداسي النقي باستخدام طريقة DFT

اثير علي محمود*، عيسى زين العابدين حسن
قسم الفيزياء، كلية التربية للعلوم الصرفة، جامعة كركوك، العراق
البحث مستل من رسالة ماجستير الباحث الاول



This work is licensed under a [Creative Commons Attribution 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

<https://doi.org/10.54153/sjpas.2023.v5i2.643>

الخلاصة:

استخدمت في هذه الدراسة نظرية دالية الكثافة (DFT) بالاعتماد على تقريب التدرج المعمم (GGA) إذ أجريت في المرحلة الأخيرة لكل حالة مدروسة للحصول على الخصائص البصرية مثل معاملات الامتصاص والانعكاس والانكسار والموصلية وثابت العزل الكهربائي، واثبت من الدراسة على وحدة الخلية الكبيرة لنتريد البورون النقي بان فجوة الطاقة الالكترونية غير مباشرة، تم حساب فجوة الطاقة E_g لمعامل الامتصاص البصري التي تساوي 4eV. بعدها تم تسجيل أعلى قيمة للانعكاسية عند 8.5 eV والتي تقدر (0.0494). تكون قيمة معامل الانكسار هي 1.16 ومن ثم يتزايد معامل الانكسار مع تزايد طاقة الفوتونات ليبلغ 1.4 عند التردد 5eV في منطقة الأشعة فوق البنفسجية. يبدأ ثابت العزل الكهربائي من نقطة 1.34. وقيم الموصلية تشهد تزايداً عند تردد 14.2eV والتي توافق 1.4.

معلومات البحث:

تأريخ الاستلام: 2023/07/23

تاريخ التعديل: 2023/08/15

تأريخ القبول: 2023/08/30

تاريخ النشر: 2023/12/30

الكلمات المفتاحية:

نتريد البورون السداسي ، نظرية دالية الكثافة، تقريب التدرج المعمم، برنامج Castep ، الخواص البصرية لنتريد البورون السداسي

معلومات المؤلف:

الايمل:

athyraltkryty191@gmail.com

الموبايل: 07823957208

المقدمة

تقدم المواد النانوية ثنائية الأبعاد (2D) اهتماماً بحثياً واسعاً منذ ظهور الجرافين في العناوين الرئيسية و إعادة اكتشافه في سنة 2004-2005 ، كان وما يزال هناك زيادة في الاهتمام بعزل واستخدام مواد أخرى جديدة ثنائية الأبعاد، تم الوصول الى مواد ثنائية الأبعاد مثل (نتريد البورون السداسي) بانه تمتلك مجموعة من الخصائص الفريدة والحصرية وبالتالي تم استكشافها في عدد كبير من التخصصات العلمية وهناك مسعى عالمي لإيجاد منهجيات جديدة على نطاق صناعي واسع للتصنيع السهل للمواد ثنائية الأبعاد المتقدمة عبر العديد من المجالات في البحث عن أداء محسن بشكل كبير للأجهزة ، بدءاً من الاستشعار من تخزين الطاقة وتوليدها والإلكترونيات الجزيئية القائمة على الكربون ، والتنوع في التصنيع ومجال واسع من التطبيقات المحتملة [1].
نتريد البورون السداسي (hexagonal boron nitride) h-BN [2] عبارة بلورة ثنائية الأبعاد (2D) تتكون من ذرات متبادلة من ذرات البورون والنيتروجين يتم ترتيب الذرات في شبكة سداسية الشكل وتتطابق بشكل وثيق مع تلك الموجودة في الجرافين تمتلك ثابت شبكي أكبر بنسبة 1.8% من الجرافين [3, 4]، وبسبب الخصائص والهيكل المتشابهين بين نتريد البورون والكرافين أكسبت h-BN لقب "الجرافين الأبيض". وتكون الروابط التساهمية بين B و N كبيرة ، فإن h-BN هو عازل ممتاز يتمتع بفجوة واسعة في النطاق من تتكون من عدة طبقات رقيقة وتكون طبقة واقية مثالية لمنع التسرب الكهربائي للأجهزة الكهربائية [5]، عندما يتم تقليل إلى بلورات h-BN فانقة الرقة يمكن استخدامه كحاجز لأجهزة الكشف الضوئية والخلايا الكهروضوئية، تشكل الطبقات السميكة من h-BN ركيزة مسطحة ذريا مثالية تسمح بخصائص العزل الجيدة [6].

تجري دراسات مكثفة حالياً لإيجاد الاختلاف في الحصول على الخصائص البصرية كدراسة مالوزوفسكي يوري وآخرون [7] 2020 استخدم في هذه الدراسة حسابات المبدأ الأول (First Principle Calculations) بواسطة برنامج (BZW-EF)

بالاعتماد على نظرية دالية الكثافة (DFT) , استنادا إلى حسابات المبدأ الأول في إطار DFT تم اختيار تقريب الكثافة الموضعية (LDA) , تم استخدام خلية فائقة من نتريد البورون السداسي وتكون ثوابت الشبكة (lattice parameter) هي (a,b,c) بإذ تكون (a=b) وقيمتها هي (2.504 Å) في المستوى (X,Y) اما قيمة (C) والتي تمثل البعد بين كل طبقتين فقد تم اختيارها (6.661 Å) بتجاه محور (Z) . باستخدام تقريب (LDA) تم حساب الخصائص البصرية لنتريد البورون السداسي وكانت فجوة الطاقة المقاسة (E_g) لمعامل الامتصاص البصري للجزء الحقيقي والخيالي تساوي 3.9 eV و 4.3 eV , وللموصلية الضوئية واطياف الامتصاص للجزء الحقيقي والخيالي تساوي 5.8 eV و 5.83 eV , ومعامل الانعكاس للجزء الحقيقي والخيالي يساوي 4.5eV و 5.2 eV على التوالي.

في دراسة راضيه بيرافاد وشاهو فاليدباكي 2015 [8] استخدم في هذه الدراسة حسابات المبدأ الأول (First Principle Calculations) والاعتماد على نظرية دالية الكثافة (DFT) , استنادا إلى حساب المبدأ في إطار النظرية الدالية تستخدم طريقة الموجة المستوية المعززة الخطية ذات الإمكانات الكاملة مع دالية ارتباط- تبادل (PBE) في تقريب التدرج المعمم (GGA) لكل من الحسابات, تم التحقق في الخصائص البصرية لصفحة النانوية لنتريد البورون السداسي (h-BN) يتم حساب الخصائص البصرية المعتمدة على التردد مثل العزل الكهربائي ومعامل الامتصاص والموصلية البصرية ومعاملات الانكسار ودالة خسارة الطاقة للصفائح النانوية h-BN لكل من استقطابات المجال الكهربائي تظهر النتائج الإلكترونية أن الصفحة النانوية h-BN شبه موصلة مع فجوة نطاق واسعة تبلغ حوالي 4.96 إلكترون فولت، اما نتائج الخصائص البصرية كانت فجوة الطاقة المقاسة (E_g) لمعامل الامتصاص البصري للجزء الحقيقي والخيالي تبلغ حوالي (2.92 eV) و (6.73eV) على التوالي ، تؤكد أن هذه الورقة النانوية لها خصائص شبه موصلة , تتفق النتائج المحسوبة بشكل جيد مع البيانات التجريبية المتاحة , تقترح هذه النتائج تطبيقا محتملا للهياكل النانوية لنتريد البورون السداسي في الأجهزة الإلكترونية والإلكترووضوئية.

في دراسة اكشاي مساتوارا واخرون 2021 [9]. استخدم في هذه الدراسة حسابات المبدأ الأول (First Principle Calculations) بالاعتماد على نظرية دالية الكثافة (DFT) بواسطة برنامج SIESTA code إذ تم اختيار تقريب التدرج المعمم (GGA) , استخدم في هذه الدراسة وحدة الخلية الكبيرة (5×5×1) التي لها ثابت الشبكة (2.511Å) وكانت طول الاصرة بين B-N هي (1.45Å) , تم التحقق من الخصائص الهيكلية والإلكترونية والبصرية لنتريد البورون السداسي (h-BN) استنادا إلى نظرية دالية الكثافة (DFT) بان هيكل النطاق الذي تم الحصول عليه لنتريد البورون السداسي h-BN شبه موصل ويمتلك فجوة نطاق واسعة تبلغ (4.9) إلكترون فولت , تظهر الترددات غير الإيجابية في منحنى تشتت الفونون ان (h-BN) مستقر ديناميكيا , تم التحقق في الخصائص البصرية مثل دالية العزل الكهربائي ومعاملات الامتصاص والانعكاسية والانكسار, تكون اعظم قيمة للانعكاسية بين نطاق الطاقة من 0 إلى 25 إلكترون فولت , و يكون الحد الأقصى للامتصاص هو في منطقة الأشعة فوق البنفسجية عند (14.87) إلكترون فولت ولا يوجد امتصاص في المنطقة المرئية , يقيس معامل الانكسار 1.17 عند حد الطاقة الصفيرية ويرتفع إلى 1.5 في منطقة الأشعة فوق البنفسجية , اثبتت النتائج المحسوبة بان h-BN شبه موصل للكهربائية يتمتع بفجوة طاقة 4.9 إلكترون فولت.

الجزء النظري

تعد معادلة شرودنكر (Schrodinger equation) البنية الاساسية للفيزياء والكيمياء النظرية. التي تم كتابتها بطريقة رياضية من قبل العالم اروين شرودنكر والتي تكون وصفاً لحالة الموجية للإلكترونات

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

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

إذ ان:

V (r) : هو جهد البلورة الذي يرى بواسطة الإلكترون

$\Psi (r)$: هي دالة الموجة

E : طاقة الإلكترون

يمكن حل معادلة شرودنكر للأنظمة التي تحتوي الإلكترون واحد في غلافها الخارجي، اما بالنسبة للأنظمة التي تحتوي أكثر من الإلكترون لا يمكن حلها بدون تقريبات [10].

نظرية دالية الكثافة (DFT Density Function 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 الاساسية لنظرية دالية الكثافة هي استبدال دالة الموجة بالكثافة الإلكترونية ($\rho(r)$ electronic density) الموضحة 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]

$$\int n(\mathbf{r})d\mathbf{r} = N \quad (3)$$

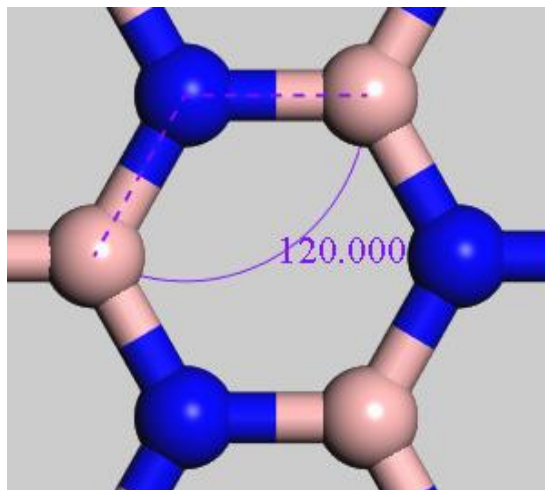
$$n(\vec{r}) = N \int \Psi^*(\mathbf{r}) \Psi_e(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (4)$$

إذ ان

$n(\mathbf{r})$: كثافة الإلكترون
 (N) : تمثل عدد الإلكترونات

طريقة الحساب

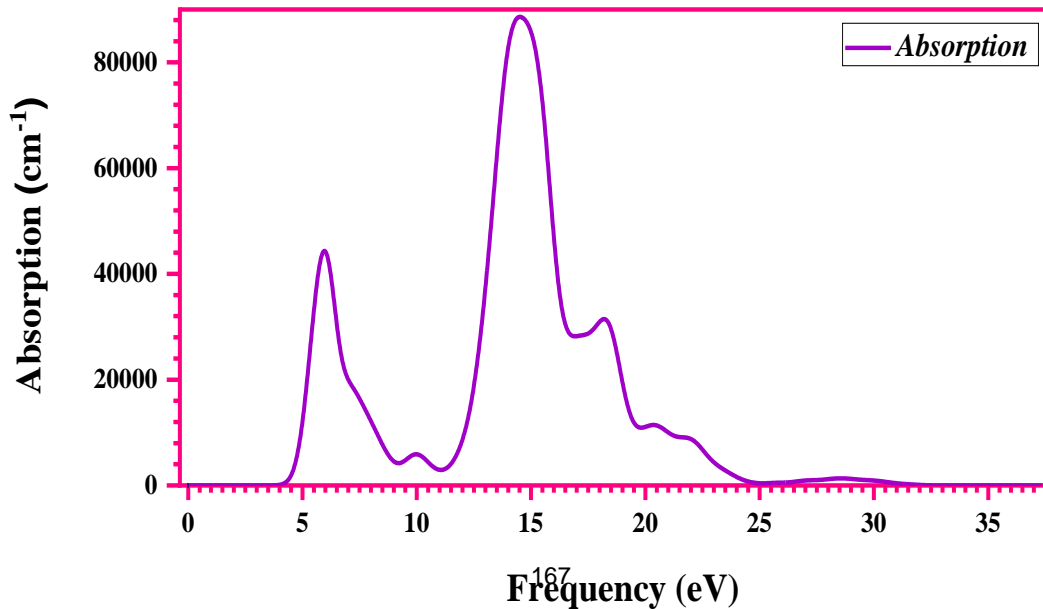
في دراستنا لهذا البحث استخدمنا حسابات المبدأ الأول (First principle calculation) [13], بالاعتماد على نظرية دالية الكثافة DFT [15,14] واختيار تقريب التدرج المعمم (GGA) بواسطة برنامج (CASTEP) [16]. تم اجراء الحسابات على وحدة الخلية $(3 \times 3 \times 1)$ لتتريد البورون السداسي النقي وتكون ثابت الشبكة هي (a,b,c) بإذ تكون $(a=b)$ وقيمته (2.510 \AA) في المستوى (x,y) , اما قيمة (c) والتي تمثل البعد بين كل طبقتين فقد تم اختيارها (30.000 \AA) بتجاه محور (z) تم اختيار هذه المسافة لأغراض حسابية لتكون الخواص المحسوبة لتتريد البورون السداسي النقي لشريحة واحدة وليس لعدة شرائح إذ يمكن اهمال التفاعل بين الطبقات. تتبين طول الأصرة حسب القياسات العلمية بين $(B-N)$ والمسافة الفاصلة بعد اجراء عملية التهيئة الهندسية تساوي (1.449 \AA) التي تكون متطابقة مع النتائج التجريبية (1.449 \AA) [17]. وقيم الزوايا المحسوبة بين ثلاث ذرات مرتبطة مع بعضها $(B-N-B)$ تساوي 120° كما موضح في الشكل 1.



الشكل 1: نتريد البورون السداسي ذات الخلية الكبيرة و قيمة الزوايا بين B-N-B

النتائج والمناقشة معامل الامتصاص

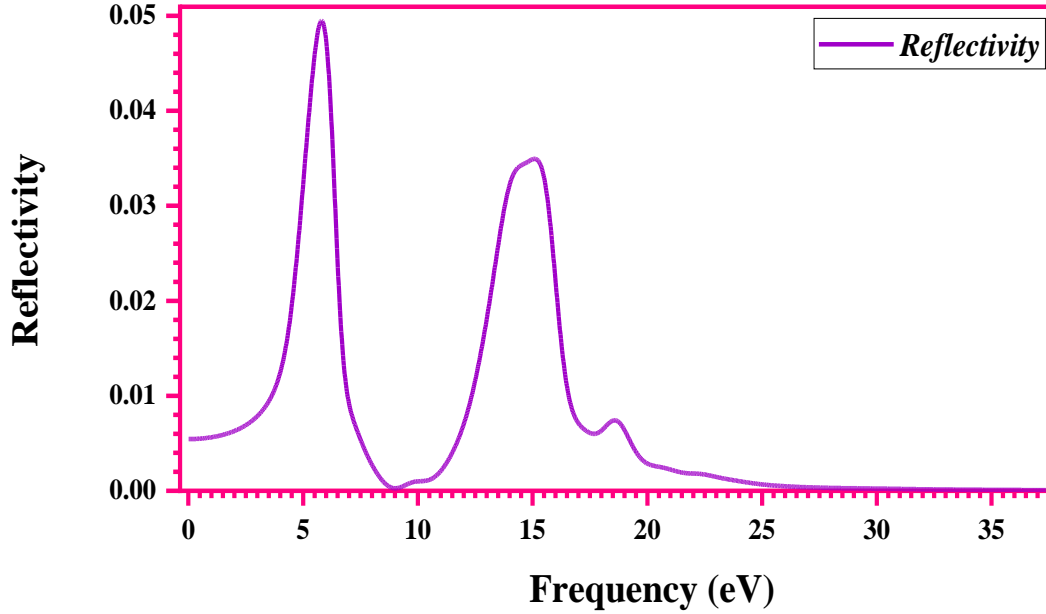
يوضح الشكل 2 المجال الممتد من (0 الى 4) وهي عبارة عن الزيادة السريعة الحاصلة في الامتصاص وهذا عندما يتساو تردد الأشعة الممتصة و طاقة الفجوة والتي تمثل أقل فرق في الطاقة بين اعلى نقطة في حزمة التكافؤ وادنى نقطة في حزمة التوصيل والتي تسمى E_g ولا يوجد امتصاص في المنطقة المرئية, تم حساب فجوة الطاقة (E_g) لمعامل الامتصاص البصري التي تساوي 4 eV و تكون تقريبا متساوية مع النتائج النظرية التي تساوي 3.9 eV [18]. في منطقة الامتصاص في المجال الممتد من (4 الى 10.5) نجد ما يوافق قيم امتصاص من (0 الى 43000) تكون بداية انطلاق الامتصاص (حصول الامتصاص)، وفي منطقة الامتصاص في المجال الممتد من (10.5 الى 16.9) الذي يوافق الامتصاص (4330 الى 28200) نجد اعظم شدة للامتصاص اي أن الإلكترونات تنتقل من حزم التكافؤ الى حزم التوصيل في المستويات الممتدة بينهما تم تسجيل اعلى شدة في الامتصاص عند قمة (88600). اما في منطقة الامتصاص في المجال الممتد من (25 الى 34) نجد ما يوافق قيم امتصاص من (425 الى 0.27) ويكون الامتصاص ضعيفا مما يصعب علينا دراسة الامتصاص والسبب في ذلك صعوبة انتقالات الإلكترونات من مستوى الى مستوى اخر نستنتج في الاخير من تحليلنا للمنحنى في الشكل (2) ادناه باستخدام تقريب التدرج المعمم (GGA-PBE) ان نتريد البورون السداسي (h-BN) تكون شفافة في المنطقة المرئية للمجالين من (4 الى 10.5) , (16.9 الى 22.5) وممتصة في منطقة فوق البنفسجية (UV) للمجال من (10.5 الى 16.9).



الشكل 2: منحني معامل الامتصاص

الانعكاسية

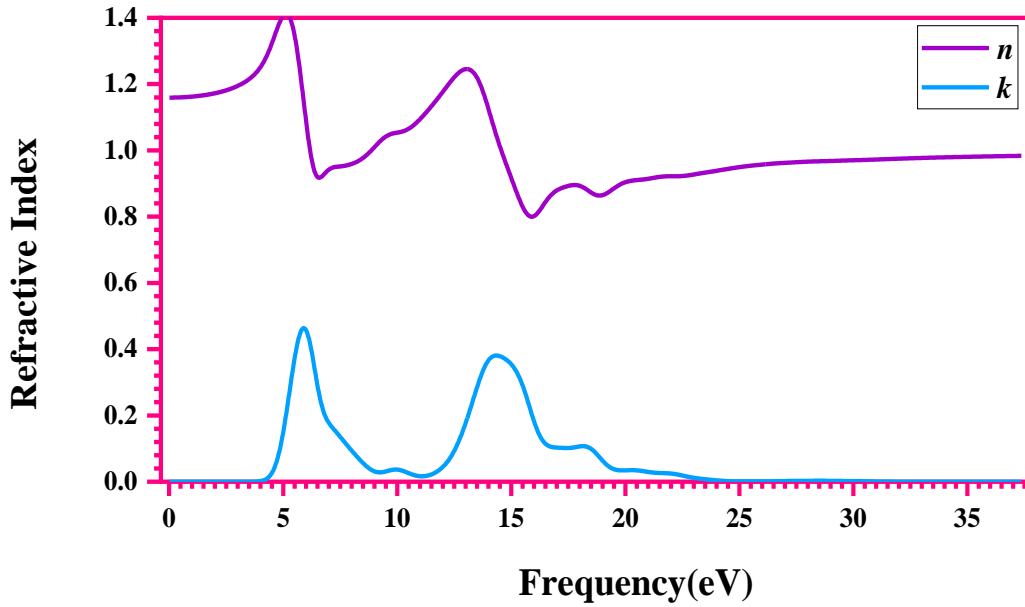
يمثل الشكل 3 منحني الانعكاس بدلالة التردد (eV) فيلاحظ ان الانعكاسية تتزايد انطلاقاً من القيمة 00544.0 عند 0eV حتى تصل الى 0.0349 عند 15 eV, ثم تسجيل اعلى قيمة للانعكاسية عند 8.5 eV والتي تقدر 0.0494 ثم تبدأ في التناقص بسرعة من اجل الترددات العليا وهذا يعني ان هذه المادة (h-BN) تسلك سلوك نصف ناقل.



الشكل 3: منحني معامل الانعكاسية

معامل الانكسار

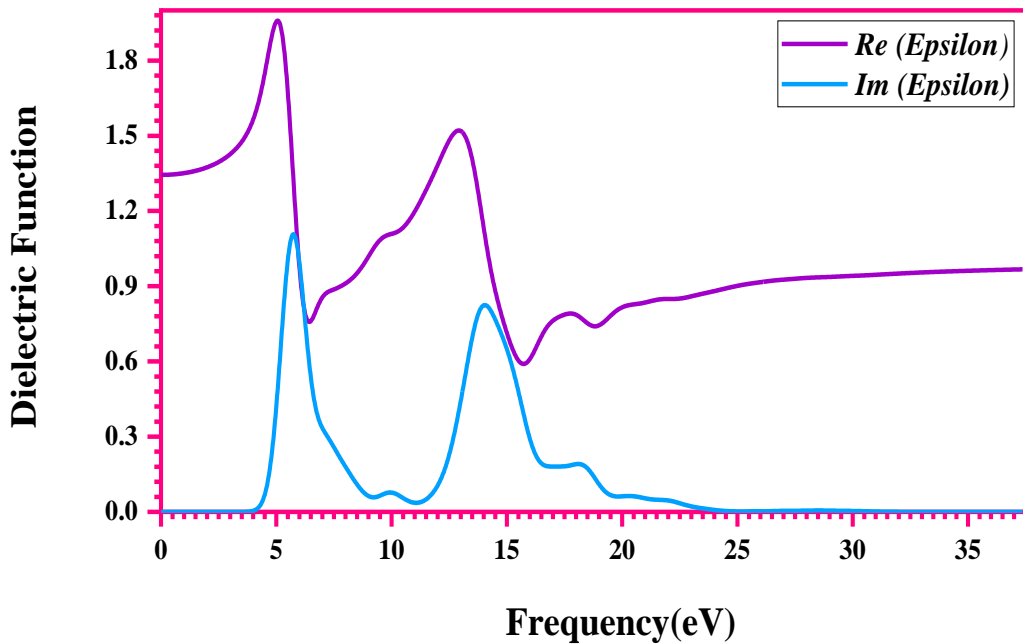
يوضح الشكل 4 اختلافات معامل الانكسار (n_0) بدلالة التردد (eV) كدالة لطول موجة الفوتون الساقط للأغشية في المنطقة المرئية، يتكون معامل الانكسار من الجزء الحقيقي (n) والجزء الخيالي (k) ويعتمد معامل الانكسار على الأطوال الموجية وان الزيادة في معامل الانكسار يؤدي الى نقصان سرعة الضوء في الوسط. تم تسجيل قيم مؤشرات الانكسار والتي تنطلق من 0 و 1.16 على التوالي، تكون قيمة الانكسار الخيالي للمركب (نتريد الباريون السداسي) هي 0 ومن ثم يتزايد معامل الانكسار مع تزايد طاقة الفوتونات ليبلغ 0.463 عند التردد (6eV)، التي تمثل كمية فقدان الامتصاص عندما تنتشر الموجة الكهرومغناطيسية عبر المادة (تشير الى شدة خسائر الامتصاص عند طول موجي معين او بتعبير اخر يقصد فيها توهين الاشعة). بينما تكون قيمة معامل قيمة الانكسار الحقيقي للمركب (نتريد الباريون السداسي) هي 1.16 ومن ثم يتزايد معامل الانكسار مع تزايد طاقة الفوتونات ليبلغ 1.4 عند التردد 5eV في منطقة الأشعة فوق البنفسجية والتي تمثل معامل انكسار المادة التي تكون تقريبا متساوية مع النتائج النظرية (التجريبية) التي تساوي (1.5)[17], إذ يعد الانكسار مهماً فقط في المنطقة الممتصة والتي تقع تحت فجوة الطاقة.



الشكل 4: منحنى معامل الانكسار

ثابت العزل

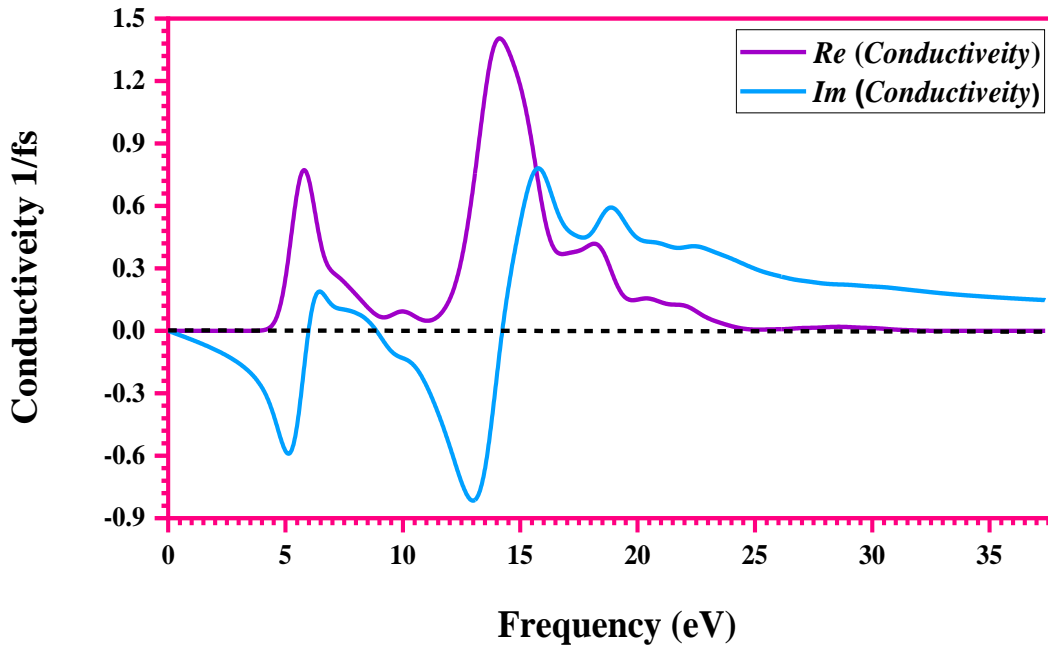
الدالة العازلة هي كمية معقدة تصف الاستجابة الخطية لنظام الإشعاع الكهرومغناطيسي وتحكم انتشار الإشعاع في الوسط ترتبط بتفاعل الفوتونات مع الإلكترونات [19] يوضح الشكل 5 الدالة العازلة الكهربائية للضوء المستقطب الحقيقي والخيالي بدلالة التردد (eV). إذ نلاحظ في الجز الخيالي تم تسجيل اول قمة للامتصاص عند النقطة 5.59 eV والبالغ قيمتها 1.1 نتيجة انتقال الالكترونات من اعلى حزم التكافؤ إلى أدنى حزم التوصيل إذ يرافقها تناقص لأطياف الجزء الخيالي في المجال الممتد من الالكترونات (5.59eV الى 25eV) إلى أن تنعدم فتكون حزم التكافؤ خالية من الإلكترونات , يمثل الجزء الخيالي لدالة العزل طاقة الامتصاص او فقدان الطاقة . اما في الجزء الحقيقي يبدأ ثابت العزل من نقطة 1.34 وتم تسجيل اول قمة عند النقطة 5eV والبالغ قيمتها 1.96 إذ يرافقها تناقص لأطياف الجزء الحقيقي في المجال الممتد من (5eV الى 15.eV) .



الشكل 5: منحنى ثابت العزل الكهربائي

الموصلية الضوئية

يوضح الشكل 6 تغيرات الموصلية بدلالة التردد (eV)، تتكون الموصلية من الجزء الحقيقي والجزء الخيالي نلاحظ بالنسبة للجزء الحقيقي الواقع في حزم التوصيل في المجال الممتد من (0 الى 4) عدم تسجيل اي قيمة للموصلية والسبب في ذلك لأنها واقعة على طاقة فيرمي، بينما في المجال الممتد من (4 الى 16.5) والتي توافق قيم الموصلية تشهد تزايداً عند تردد 14.2eV والتي تساوي 1.4. وكذلك نلاحظ في المجال الممتد من (16.5 الى 25) تناقص كبير جداً من قيمة الموصلية أي من 1.4 إلى 0.293. اما بالنسبة للجزء الخيالي الواقع في حزم التكافؤ نلاحظ في المجال الممتد من (0 الى 13) تشهد تزايداً عند تردد 13 eV والتي توافق -0.813. ثم تبدأ الموصلية في الجزء الخيالي في الحصول على تشتت بصري قوي نتيجة لذلك للانتقال بين النطاقات من مدارات (s,p) في ذرة N الى مدارات (s,p) في ذرة B. وفي النهاية تكون فجوة الطاقة (E_g) المحسوبة للموصلية في الجزء الحقيقي والتي تساوي 4eV و تتفق النتائج المحسوبة بشكل جيد مع البيانات التجريبية المتاحة [20].



الشكل 6: منحنى الموصلية

الاستنتاجات

تمت دراسة الخصائص البصرية الخطية للصفائح النانوية السداسية لنتريد البورون باستخدام حساب المبدأ الأول (First principle calculation) المطبقة في برنامج (Castep) وبالاعتماد على نظرية دالية الكثافة (DFT) واختيار تقريب التدرج المعمم (GGA), لاستكشاف الوظائف البصرية لهذا الصفيحة النانوية, وجدنا بان فجوة الطاقة لمعامل الامتصاص تساوي 4 إلكترون فولت تمتص جيدا في منطقة الأشعة فوق البنفسجية من الطيف ولا يوجد امتصاص في المنطقة المرئية (أي تكون شفافة), بالإضافة الى ذلك تكون قيمة معامل الانكسار مقارنة لمعامل انكسار الزجاج , وجدنا ان دالة العزل الكهربائي للصفحة النانوية للجزئين الحقيقي والخيالي يختلف بعضهما عن بعض , وبالتالي تم الاستنتاج بان هذه الحسابات تؤكد أن الصفيحة النانوية لنتريد البورون السداسي لها خصائص شبه موصلة و تتفق النتائج المحسوبة بشكل جيد مع البيانات التجريبية المتاحة , تقترح هذه النتائج تطبيقات محتملة للهياكل النانوية لنتريد البورون السداسي في الأجهزة الإلكترونية والإلكتروضوئية ويمكن تطويرها في الدراسات المستقبلية.

References

- [1] Choudhry, N. K., Panda, B., & Kumar, S. (2023). Enhanced energy absorption performance of 3D printed 2D auxetic lattices. *Thin-Walled Structures, Journal of Materials Engineering and Performance*, 186, 110650. <https://doi.org/10.1016/j.tws.2023.110650>
- [2] Zhang, K., Feng, Y., Wang, F., Yang, Z., & Wang, J. (2017). Two dimensional hexagonal boron nitride (2D-hBN): synthesis, properties and applications. *Journal of Materials Chemistry C*, 5(46), 11992-12022. <https://doi.org/10.1039/C7TC04300G>
- [3] Jung, J., DaSilva, A. M., MacDonald, A. H., & Adam, S. (2015). Origin of band gaps in graphene on hexagonal boron nitride. *Nature communications, Journal of nature communications*, 6(1), 6308. [DOI: 10.1038/ncomms7308](https://doi.org/10.1038/ncomms7308)
- [4] Lin, Y., & Connell, J. W. (2012). Advances in 2D boron nitride nanostructures: nanosheets, nanoribbons, nanomeshes, and hybrids with graphene. *Nanoscale, journal of The Royal Society of Chemistry* 4(22), 6908-6939.
- [5] Kostoglou, N., Polychronopoulou, K., & Rebholz, C. (2015). Thermal and chemical stability of hexagonal boron nitride (h-BN) nanoplatelets. *Journal of the European Ceramic Society. Vacuum*, 112, 42-45. <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2014.11.009>.
- [6] Ahn, S., Kim, G., Nayak, P. K., Yoon, S. I., Lim, H., Shin, H. J., & Shin, H. S. (2016). Prevention of transition metal dichalcogenide photodegradation by encapsulation with h-BN layers. *Journal of ACS nano*, 10(9), 8973-8979. <https://doi.org/10.1021/acs.nano.6b05042>
- [7] Malozovsky, Y., Bamba, C., Stewart, A., Franklin, L., & Bagayoko, D. (2020). Accurate Ground State Electronic and Related Properties of Hexagonal Boron Nitride (h-BN). *arXiv preprint arXiv: Journal of Modern Physics*, 2001.11596. <https://doi.org/10.4236/jmp.2020.116057>
- [8] Beiranvand, R., & Valedbagi, S. (2015). Electronic and optical properties of h-BN nanosheet: A first principles calculation. *Diamond and Related Materials*, 58, 190-195. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2015.07.008>
- [9] Satawara, A. M., Shaikh, G. A., Gupta, S. K., & Gajjar, P. N. (2021). Structural, electronic and optical properties of hexagonal boron-nitride (h-BN) monolayer: An Ab-initio study. *Journal of Materials Today: Proceedings*, 47, 529-532. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.10.589>
- [10] Schlücker, S., Singh, R. K., Asthana, B. P., Popp, J., & Kiefer, W. (2001). Hydrogen-bonded pyridine– water complexes studied by density functional theory and Raman spectroscopy. *The Journal of Physical Chemistry A*, 105(43), 9983-9989. <https://doi.org/10.1021/jp0122272>

- [11] Yang, H., Cheng, T., & Goddard III, W. A. (2020). London Dispersion Corrections to Density Functional Theory for Transition Metals Based on Fitting to Experimental Temperature-Programmed Desorption of Benzene Monolayers. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 12(1), 73-79. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.0c03126>
- [12] Bagayoko, D. (2014). Understanding density functional theory (DFT) and completing it in practice. Published by the AIP Publishing. <https://doi.org/10.1063/1.4903408>
- [13] Freysoldt, C., Grabowski, B., Hickel, T., Neugebauer, J., Kresse, G., Janotti, A., & Van de Walle, C. G. (2014). First-principles calculations for point defects in solids. *Reviews of modern physics*, 86(1), 253. DOI:<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.86.253>
- [14] Niraula, P. R. (2020). Density functional theory study of two-dimensional boron nitride films (Doctoral dissertation, City University of New York).
- [15] Orio, M., & Pantazis, D. A. (2021). Successes, challenges, and opportunities for quantum chemistry in understanding metalloenzymes for solar fuels research. *journal of Chemical Communications*, 57(33), 3952-3974..
- [16] Clark, S. J., Segall, M. D., Pickard, C. J., Hasnip, P. J., Probert, M. I., Refson, K., & Payne, M. C. (2005). First principles methods using CASTEP. *journal of Zeitschrift für kristallographie-crystalline materials*, 220(5-6), 567-570. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2017.12.008>
- [17] Satawara, A. M., Shaikh, G. A., Gupta, S. K., & Gajjar, P. N. (2021). Structural, electronic and optical properties of hexagonal boron-nitride (h-BN) monolayer: An Ab-initio study. *Materials Today: Proceedings*, 47, 529-532. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.10.589>
- [18] Malozovsky, Y., Bamba, C., Stewart, A., Franklin, L., & Bagayoko, D. (2020). Accurate Ground State Electronic and Related Properties of Hexagonal Boron Nitride (h-BN). *Journal of Modern Physics*. <https://doi.org/10.4236/jmp.2020.116057>.
- [19] Kittel, C., & McEuen, P. (2018). *Introduction to solid state physics*. John Wiley & Sons.
- [20] Beiranvand, R., & Valedbagi, S. (2015). Electronic and optical properties of h-BN nanosheet: A first principles calculation. *Diamond and Related Materials*, 58, 190-195. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2015.07.008>

Study of the optical properties of pristine hexagonal boron nitride using the DFT method

Atheer Ali Mahmoud *, Issa Zine El Abidine Hassan

Department of Physics, College of Education for Pure Science, University of Kirkuk, Iraq

Article Information

Received: 23/07/2023

Revised: 15/08/2023

Accepted: 30/08/2023

Published: 30/12/2023

Keywords:

Hexagonal boron nitride, Density function theory, Generalized gradient approximation, Castep program, Optical properties of hexagonal boron nitride

Corresponding Author

E-mail:

Mobile:

Abstract

Density Functional Theory (DFT) was used based on the Generalized Gradient Approximation (GGA) as it is conducted in the last stage for each studied case to obtain the optical properties such as absorption coefficients, reflection, refraction, conductivity and dielectric constant. And it has been proved through our study on the large unit cell of pristine boron nitride that the electronic energy gap is indirect, the energy gap (E_g) was calculated for the optical absorption coefficient which is equal to 4eV. Then the highest value of reflectivity is recorded at 8.5 eV, which is estimated at (0.0494). The value of the refractive index is 1.16, then the refractive index increases with the increase in the energy of the photons to reach 1.4 at the frequency eV5 in the ultraviolet region. The dielectric constant starts at 1.34. The conductivity values are increasing at the frequency of 14.2 eV, which corresponds to 1.4.