

Research Paper;

Effect of Mechanical Activation of Andalusite on Mullitization and Sintering Behavior of Mullite-Based Ceramics for Aerospace and Advanced Thermal Applications

Hamidreza Alborznia¹, Ghobad Mohammad karimi²,

1. Corresponding Author, Department of Physics, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran.

2. Department of Electrical Engineering, South Tehran Branch, Islamic Aazd University, Tehran, Iran

Article Information

Abstract

Accepted:
2026/04/28

Received:
2026/02/22

Keywords:

Density Function Theory, germanium carbide nanotubes, Optical properties, Electronic properties

Corresponding Author:
Mohammad
Sadegh Abdi
Maghsoudlou

Email:
hamidrezaalborznia@gmail.com

Introduction:The development of advanced functional nanomaterials is crucial for next-generation optoelectronic devices. Germanium Carbide Nanotubes (GeCNTs) have emerged as promising candidates due to their unique electronic properties and potential for structural tunability, making them highly relevant for high-tech applications.

Methods:In this study, the electronic and optical properties of GeCNTs with various chiral indices were investigated under the influence of hydrostatic strain. The calculations were performed using first-principles methods based on Density Functional Theory (DFT) within the Perdew-Burke-Ernzerhof Generalized Gradient Approximation (PBE-GGA) framework.

Findings:The results demonstrate a significant dependence of electronic behavior on the nanotube chirality. Specifically, the (5,0) GeCNT exhibits a near-zero direct bandgap, behaving as a quasi-metallic structure, whereas the (10,0) GeCNT functions as a semiconductor with a direct bandgap of 1.29 eV. Optical property analysis in out-of-plane polarization reveals that the most significant optical transitions occur within the 1.5 to 4 eV energy range. Furthermore, both changes in chirality and the application of hydrostatic strain lead to substantial modifications in the optical response of these nanostructures.

Conclusion:GeCNTs offer exceptional tunability in both electronic and optical domains. These characteristics position GeCNTs as highly suitable materials for applications in optical sensors, photonic devices, and infrared detectors, particularly within the aerospace and defense sectors.



فصلنامه علمی دفاع هوافضایی

دوره ۵، شماره ۲

تابستان ۱۴۰۵

صفحات ۶۳-۵۰



مقاله پژوهشی؛

تحلیل الکترونیکی و اپتیکی نانولوله‌های کربید ژرمانیوم تحت تنش با

رویکرد نظریه تابع چگالی

حمیدرضا البرز نیا^{۱،۲}، قباد محمد کریمی^۲^۱. نویسنده مسئول، گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران^۲. گروه مهندسی برق، واحد جنوب تهران، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

چکیده

اطلاعات مقاله

مقدمه: توسعه نانومواد عملکردی پیشرفته برای نسل بعدی ادوات اپتوالکترونیک بسیار حیاتی است. نانولوله‌های کربید ژرمانیوم (GeCNTs) به دلیل خواص الکترونیکی منحصربه‌فرد و قابلیت تنظیم ساختاری، به عنوان کاندیداهای بسیار نویدبخشی شناخته شده‌اند که آن‌ها را برای کاربردهای فناوری بالا بسیار مرتبط می‌سازد.

تاریخ دریافت:

۱۴۰۴/۱۲/۰۳

تاریخ پذیرش:

۱۴۰۵/۰۲/۰۸

کلیدواژه‌ها:

روش‌ها: در این پژوهش، خواص الکترونیکی و اپتیکی نانولوله‌های GeCNT با شاخص‌های مختلف و تحت اعمال تنش هیدرواستاتیکی مورد بررسی قرار گرفت. محاسبات با استفاده از روش‌های اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی (DFT) و در چارچوب تقریب PBE-GGA انجام شده است.

تئوری تابع چگالی، نانولوله‌های کربید ژرمانیوم، خواص اپتیکی، خواص الکترونیکی.

یافته‌ها: نتایج نشان‌دهنده وابستگی شدید رفتار الکترونیکی به شاخص پیچش (Chirality) نانولوله است. به‌طور مشخص، نانولوله (۵,۰) دارای شکاف نواری مستقیم نزدیک به صفر است و رفتاری شبه‌فلزی دارد، در حالی که نانولوله (۱۰,۰) یک نیمه‌رسانای با شکاف نواری مستقیم ۱.۴۹ الکترون‌ولت است. بررسی خواص اپتیکی در قطبش خارج از صفحه نشان می‌دهد که مهم‌ترین گذارهای اپتیکی در بازه انرژی ۱.۵ تا ۴ الکترون‌ولت رخ می‌دهند. همچنین، تغییر شاخص و اعمال تنش هیدرواستاتیکی منجر به تغییرات محسوس در پاسخ اپتیکی این نانوساختارها می‌شود.

نویسنده مسئول:

نتیجه‌گیری: نانولوله‌های GeCNT قابلیت تنظیم استثنایی در هر دو حوزه الکترونیکی و اپتیکی را ارائه می‌دهند. این ویژگی‌ها، این نانوساختارها را به گزینه‌ای بسیار مناسب برای کاربرد در حسگرهای اپتیکی، ادوات فوتونیکی و آشکارسازهای فروسرخ، به‌ویژه در سامانه‌های هوافضا و دفاعی تبدیل می‌کند.

ایمیل:

hamidrezaalborznia@gmail.com

استناد: حمیدرضا البرز نیا، قباد محمد کریمی، تحلیل الکترونیکی و اپتیکی نانولوله‌های کربید ژرمانیوم تحت تنش با رویکرد نظریه تابع چگالی، مجله دفاع هوافضایی، دوره ۵ (شماره ۲)، صفحه ۶۳-۵۰.

۱- مقدمه

پیش‌بینی و سنتز آلوتروپ‌های مختلف کربن در دهه‌های اخیر، زمینه‌ساز پیشرفت چشمگیری در شناخت خواص فیزیکی و شیمیایی نانوساختارها شده است [۷-۱]. ویژگی‌های منحصر به فرد این مواد، از جمله نسبت سطح به حجم بالا، قابلیت تنظیم خواص الکترونیکی و پایداری مناسب، موجب شده است که کاربردهای گسترده‌ای در ادوات نانوالکترونیکی، اپتوالکترونیکی و فوتونیک پیدا کنند [۸-۳۲]. در ادامه این روند، نانوساختارهای مبتنی بر سیلیسیم و ژرمانیوم، به‌ویژه نانولوله‌های کاربیدی آن‌ها، به دلیل برخورداری از پایداری ساختاری مطلوب، قابلیت تنظیم شکاف نواری و سازگاری با فناوری نیمه‌رساناها، توجه پژوهشگران را به خود جلب کرده‌اند و سنتز آن‌ها با روش‌های مختلف با موفقیت گزارش شده است [۳۳-۵۵]. در سال‌های اخیر، مطالعات متعددی بر روی خواص الکترونیکی و اپتیکی نانولوله‌های کاربید سیلیسیم انجام شده است [۳۶]، اما بررسی جامع رفتار نانولوله‌های کاربید ژرمانیوم، به‌ویژه تحت اعمال تنش و تأثیر آن بر خواص الکترونیکی و اپتیکی، همچنان محدود است. از آنجا که اعمال تنش یکی از روش‌های مؤثر برای تنظیم ساختار نواری و پاسخ اپتیکی نانومواد محسوب می‌شود، مطالعه این اثر می‌تواند در طراحی مواد با عملکرد قابل تنظیم برای کاربردهای اپتوالکترونیکی، آشکارسازهای فروسرخ، حسگرهای نوری و برخی سامانه‌های پیشرفته هوافضا و دفاعی نقش مهمی ایفا کند. با وجود مطالعات انجام‌شده بر روی نانولوله‌های کاربیدی، تاکنون بررسی هم‌زمان اثر شاخص ساختاری و تنش بر خواص الکترونیکی و اپتیکی نانولوله‌های زیگزاگ کاربید ژرمانیوم به‌صورت نظام‌مند گزارش نشده است. از این‌رو، در این پژوهش با استفاده از محاسبات اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی و تقریب GGA-PBE، رفتار الکترونیکی و اپتیکی نانولوله‌های زیگزاگ کاربید ژرمانیوم تحت اعمال تنش مورد بررسی قرار گرفته و تأثیر تغییر شاخص ساختاری بر ویژگی‌های نواری و اپتیکی آن‌ها تحلیل شده است.

ساختار مقاله به این صورت است: در بخش بعد، روش محاسباتی تشریح شده است. در بخش سوم، خواص الکترونیکی مورد بررسی قرار می‌گیرد. بخش چهارم به تحلیل ویژگی‌های اپتیکی اختصاص دارد و در پایان، مهم‌ترین نتایج، محدودیت‌های پژوهش و پیشنهادهایی برای مطالعات آینده ارائه می‌شود.

۲- روش محاسباتی

در این پژوهش، خواص الکترونیکی و اپتیکی نانولوله‌های کاربید ژرمانیوم با استفاده از محاسبات اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی (DFT) مورد بررسی قرار گرفت. تمامی محاسبات با استفاده از بسته نرم‌افزاری SIESTA انجام شد و برهم‌کنش تبادلی-همبستگی در چارچوب تقریب گرادیان تعمیم‌یافته پرودو-برک-ارنزهوف (GGA-PBE) مدل‌سازی گردید [۳۷، ۳۸]. برای بررسی اثر تنش، ساختارهای مورد مطالعه پس از اعمال تنش مورد بهینه‌سازی هندسی قرار گرفتند و سپس خواص الکترونیکی و اپتیکی آن‌ها محاسبه و تحلیل شد. این رویکرد امکان بررسی تأثیر تنش بر ساختار نواری و پاسخ اپتیکی نانولوله‌های کاربید ژرمانیوم را فراهم می‌کند [۴۳-۴۴].

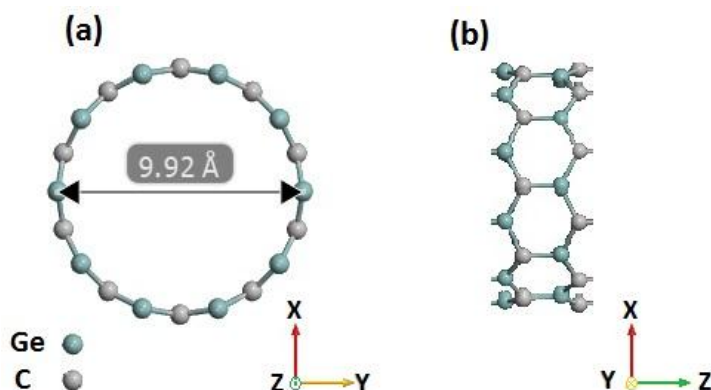
۲-۱ ساختار اتمی

ساختار اتمی سلول واحد نانولوله‌های زیگزاگ کاربید ژرمانیوم (GeCNTs) در صفحه‌های XY و XZ، به همراه پارامترهای شبکه در حالت تعادل، در شکل ۱ نشان داده شده است. در این مدل، اتم‌های ژرمانیوم با کره‌های آبی و اتم‌های کربن با کره‌های خاکستری نمایش داده شده‌اند. این ساختار به‌عنوان مدل اولیه برای

انجام محاسبات اصول اولیه و بررسی تأثیر شاخص ساختاری و اعمال تنش بر خواص الکترونیکی و اپتیکی مورد استفاده قرار گرفته است.

به منظور تعیین پارامترهای شبکه در حالت تعادل، ابتدا انرژی کل ساختار برای حجم‌های مختلف محاسبه و سپس منحنی انرژی-حجم با استفاده از معادله حالت برچ-مورناگان برازش شد [۳۹]. این معادله یکی از روش‌های متداول برای تعیین پارامترهای تعادلی مواد جامد است و امکان استخراج دقیق ثابت‌های شبکه متناظر با کمینه انرژی کل را فراهم می‌کند. پارامترهای به دست آمده مبنای تمامی محاسبات الکترونیکی و اپتیکی ارائه شده در این پژوهش قرار گرفته‌اند.

$$E(V) = E_0 + \frac{9B_0V_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^3 B'_0 \right\} + \frac{9B_0V_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^2 \left[6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} \right] \right\} \quad (۱)$$



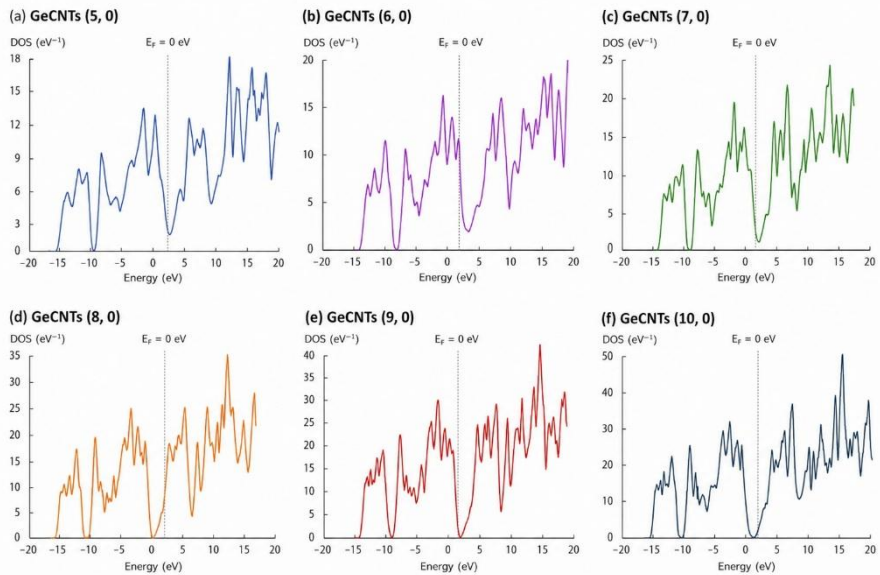
شکل (۱): یاخته واحد نانولوله کربید ژرمانیوم (a) صفحه XY (b) صفحه XZ

در ادامه، ویژگی‌های الکترونیکی و نوری نانولوله‌های کربید ژرمانیوم در راستای خارج از صفحه، برای مقادیر مختلف، با استفاده از روش تقریب PBE-GGA مورد مطالعه قرار گرفتند.

۲-۲ خواص الکترونیکی:

در این بخش، خواص الکترونیکی نانولوله‌های زیگزاگ کربید ژرمانیوم با شاخص‌های $(۷,۰)$ ، $(۶,۰)$ ، $(۵,۰)$ ، $(۸,۰)$ ، $(۹,۰)$ و $(۱۰,۰)$ از طریق محاسبه چگالی حالت‌ها (DOS) و ساختار نوار انرژی در چارچوب تقریب PBE-GGA مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاصل، اطلاعات ارزشمندی درباره تأثیر تغییر شاخص ساختاری بر رفتار الکترونیکی این نانوساختارها ارائه می‌دهد.

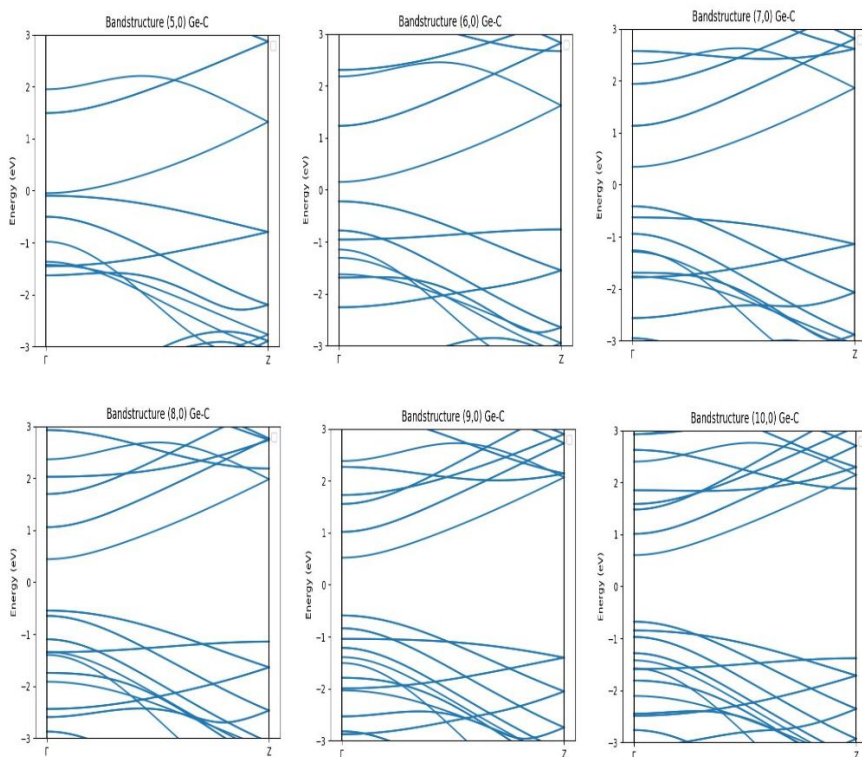
همان‌گونه که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، با افزایش شاخص نانولوله، توزیع حالت‌های الکترونی در نزدیکی تراز فرمی دستخوش تغییر شده و لبه نوار رسانش به سمت انرژی‌های بالاتر جابه‌جا می‌شود. این رفتار نشان‌دهنده کاهش برهم‌کنش اوربیتال‌های مرزی و تغییر در همپوشانی اوربیتال‌های اتمی ژرمانیوم و کربن است که در نهایت موجب افزایش شکاف نوری می‌شود. همچنین کاهش انحنای نانولوله با افزایش قطر، کرنش خمشی ساختار را کاهش داده و به پایداری بیشتر ساختار الکترونیکی منجر می‌شود.



شکل (۲): چگالی حالت‌های الکترونی (DOS) نانولوله‌های زیگزاگ کاربید ژرمانیوم با شاخص‌های (۵,۰) تا (۱۰,۰)

ساختارهای نواری متناظر در شکل ۳ ارائه شده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش شاخص نانولوله از (۵,۰) به (۱۰,۰)، شکاف نواری مستقیم به تدریج افزایش می‌یابد. نانولوله (۵,۰) دارای شکاف نواری مستقیم نزدیک به صفر بوده و رفتار شبه فلزی از خود نشان می‌دهد، در حالی که با افزایش شاخص، شکاف نواری به صورت پیوسته افزایش یافته و برای نانولوله (۱۰,۰) به مقدار ۱.۲۹۲ الکترون‌ولت می‌رسد. در تمامی ساختارهای دارای شکاف نواری، بیشینه نوار ظرفیت (VBM) و کمینه نوار رسانش (CBM) در نقطه Γ قرار دارند که بیانگر ماهیت نیمه‌رسانای با شکاف مستقیم این نانولوله‌ها است.

افزایش شکاف نواری با افزایش شاخص را می‌توان به تغییر در هندسه ساختار، کاهش اثرات انحنای دیواره نانولوله و تغییر میزان هیبریداسیون اوربیتال‌های Ge و C نسبت داد. این تغییرات موجب کاهش برهم‌کنش بین حالت‌های ظرفیت و رسانش شده و در نتیجه، انتقال الکترون‌ها به انرژی‌های بالاتر نیازمند انرژی بیشتری خواهد بود. چنین رفتاری نشان می‌دهد که خواص الکترونیکی نانولوله‌های کاربید ژرمانیوم را می‌توان از طریق انتخاب شاخص ساختاری و اعمال تنش به صورت مؤثری تنظیم کرد که این ویژگی برای طراحی ادوات نانوالکترونیکی و اپتوالکترونیکی قابل تنظیم اهمیت زیادی دارد.



شکل (۳): ساختارهای نوار انرژی (5,0), (6,0), (7,0), (8,0), (9,0), (10,0)

۲-۳ خواص اپتیکی:

در این بخش، تابع دی‌الکتریک مختلط نانولوله‌های GeCNTs مورد مطالعه قرار گرفته است. تابع دی‌الکتریک مختلط مرجعی برای شناسایی جنبه‌های اپتیکی مانند طیف جذب و بازتابندگی محسوب می‌شود. این تابع شامل مؤلفه‌های حقیقی و موهومی است که توسط معادله زیر مشخص می‌شوند. [40]

$$\varepsilon(\omega) = R_\varepsilon + iI_\varepsilon \quad (2)$$

که R_ε و I_ε به ترتیب قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط. با استفاده از رابطه کرامرز-کرونینگ قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک را می‌توان برحسب قسمت موهومی آن به صورت زیر نوشت [۲۹]:

$$R_\varepsilon(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} P_r \int_0^\infty \frac{\omega' I_\varepsilon(\omega')}{\omega^2 - \omega'^2} \omega' d\omega' \quad (3)$$

که در آن P_r تابع کوشی و I_ε قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط است که از رابطه ذیل استنتاج می‌گردد [۳۰]:

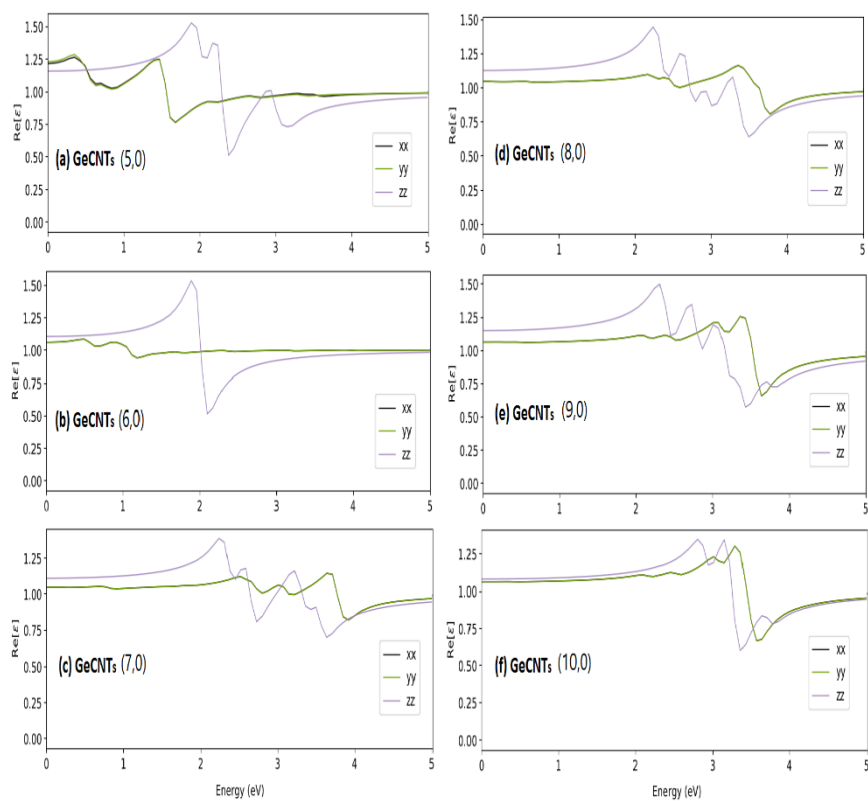
$$I_\varepsilon = \frac{h^2 e^2}{\pi^2 m^2 \omega^2} \sum_n \int d_k \langle \psi_k^{c_n} | P^\alpha | \psi_k^{v_n} \rangle \langle \psi_k^{v_n} | P^\beta | \psi_k^{c_n} \rangle \delta(E_k^{c_n} - E_k^{v_n} - \omega) \quad (4)$$

که در رابطه فوق P ماتریس دوقطبی و V_n و C_n حالت‌های اولیه و نهایی می‌باشند. با محاسبه قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط، می‌توان ویژگی‌های اپتیکی مانند ضرایب شکست $n(\omega)$ ، خاموشی $k(\omega)$ ، بازتاب $R(\omega)$ و ضریب جذب هر ساختاری به‌سادگی به دست می‌آید.

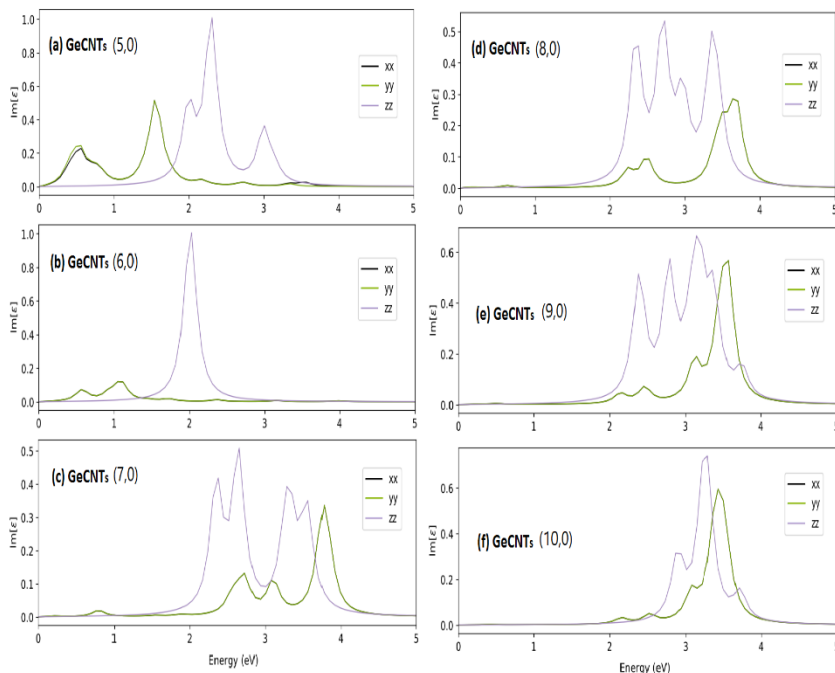
شکل‌های ۴ و ۵ به‌ترتیب قسمت حقیقی و قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک مختلط نانولوله‌های زیگزاگ GeCNT با شاخص‌های $(5,0)$ تا $(10,0)$ را نشان می‌دهند.

همان‌گونه که در شکل ۴ مشاهده می‌شود، در نانولوله $(5,0)$ یک قله شاخص در حدود ۲ الکترون‌ولت ظاهر می‌شود که با افزایش شاخص نانولوله به‌تدریج به سمت انرژی‌های بالاتر جابه‌جا شده و برای نانولوله $(10,0)$ به حدود ۳ الکترون‌ولت می‌رسد. این انتقال آرام (Blue Shift) ناشی از افزایش شکاف نواری و تغییر در ساختار الکترونیکی نانولوله‌ها است. با کاهش اثرات انحنای ساختار و تغییر میزان همپوشانی اوربیتال‌های ژرمانیوم و کربن، انرژی لازم برای گذارهای بین‌نواری افزایش یافته و در نتیجه قله‌های دی‌الکتریک به نواحی پرانرژی‌تر منتقل می‌شوند.

همان‌طور که در شکل ۵ مشاهده می‌شود، طیف بخش موهومی تابع دی‌الکتریک نانولوله‌ی کرید ژرمانیوم با شاخص‌های مختلف $n=5$ تا 10 نشان می‌دهد که پیک‌های اصلی این نمودارها مربوط به طیف جذب میان نوار ظرفیت و نوار رسانش هستند که در بازه‌ی انرژی ۲ تا ۴ الکترون‌ولت رخ می‌دهند. شایان ذکر است که بیشترین شدت این پیک‌ها مربوط به نانولوله‌ی زیگزاگ $(5,0)$ در حدود ۲.۴ الکترون‌ولت و نانولوله‌ی $(6,0)$ در حدود ۲ الکترون‌ولت است؛ این مقادیر در محدوده‌ی انرژی نور مرئی قرار دارند. در نهایت، برای نانولوله‌ی زیگزاگ $(10,0)$ ، این پیک‌ها به انرژی‌های بالاتر در بازه‌ی ۳ تا ۴ الکترون‌ولت منتقل می‌شوند. که این رفتار با افزایش شکاف نواری و تغییر مکان ترازهای الکترونی کاملاً سازگار است.



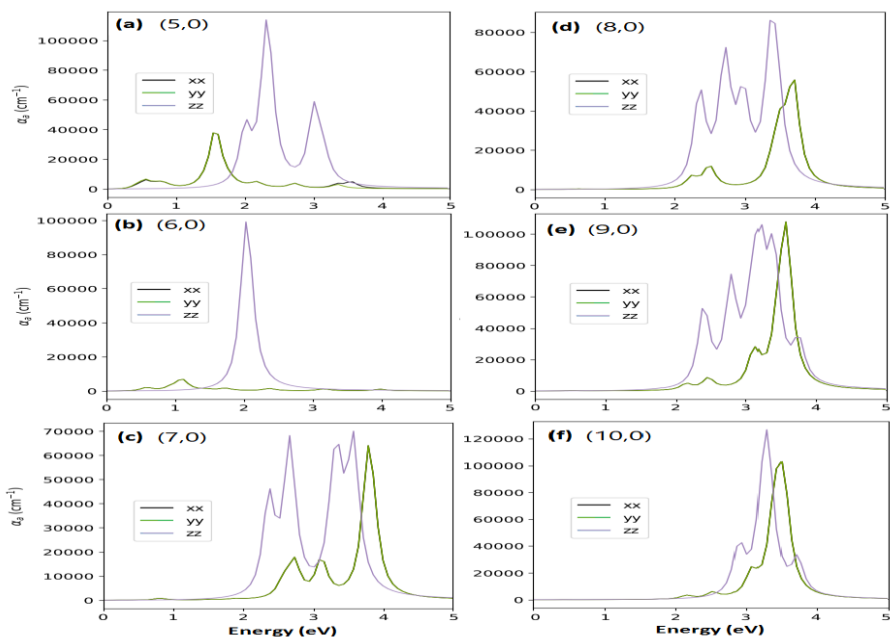
شکل (۴): طیف حقیقی تابع دی الکتریک (5,0), (6,0), (7,0), (8,0), (9,0), (10,0)



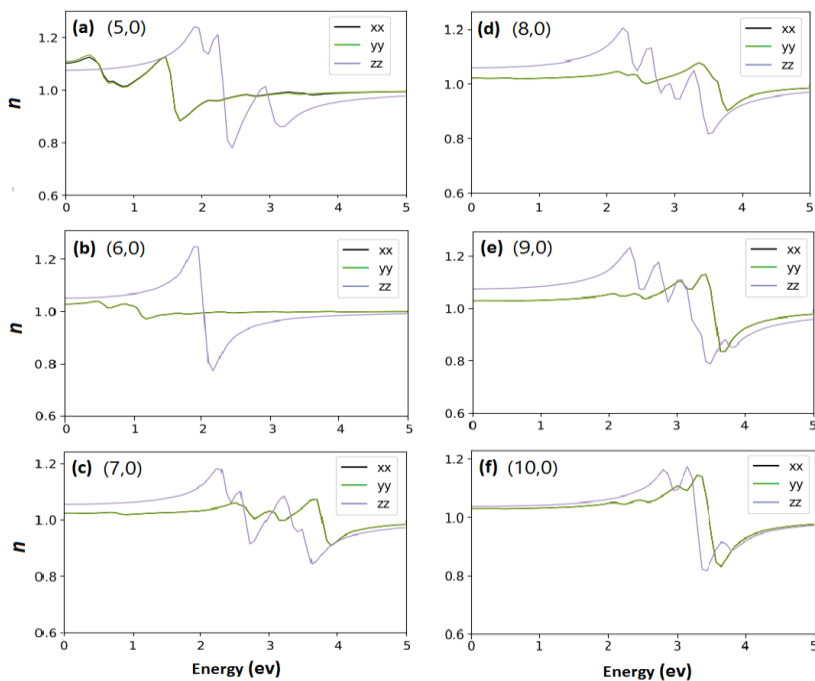
شکل (۵): طیف موهومی تابع دی الکتریک (5,0), (6,0), (7,0), (8,0), (9,0), (10,0)

طیف‌های جذب و بازتابندگی نانولوله‌های زیگزاگ GeCNTs به‌عنوان دو جنبه‌ی مهم از ویژگی‌های نوری، که از مؤلفه‌های تابع دی‌الکتریک مختلط استخراج شده‌اند، در شکل‌های ۶ و ۷ در بازه‌ی انرژی ۰ تا ۵ الکترون‌ولت ترسیم شده‌اند. همان‌طور که در این شکل‌ها مشاهده می‌شود، برای مقادیر $n=5$ و ۶ شدت پیک‌های جذب و بازتابندگی در محدوده‌ی انرژی نور مرئی (۱.۵ تا ۲ الکترون‌ولت) رخ می‌دهد. با افزایش مقدار n به ۷، ۸، ۹ و ۱۰، این پیک‌های جذب و بازتابندگی افزایش یافته و به انرژی‌های بالاتر در بازه‌ی ۳ تا ۴ الکترون‌ولت منتقل شده و هم‌زمان شدت آن‌ها نیز افزایش می‌یابد.

این انتقال به سمت انرژی‌های بالاتر را می‌توان به افزایش شکاف نواری و تغییر در ساختار الکترونیکی نانولوله‌ها نسبت داد. افزایش شاخص ساختاری و اعمال تنش، موجب تغییر در همپوشانی اوربیتال‌های ژرمانیوم و کربن و در نتیجه افزایش انرژی لازم برای گذارهای بین‌نواری می‌شود. بنابراین، بیشینه جذب و بازتاب در انرژی‌های بالاتر ظاهر می‌شود. این قابلیت تنظیم پاسخ اپتیکی از طریق تغییر شاخص ساختاری و اعمال تنش، نانولوله‌های کاربید ژرمانیوم را به گزینه‌ای مناسب برای طراحی حسگرهای نوری، ادوات فوتونیک و آشکارسازهای فروسرخ تبدیل می‌کند.



شکل (۶): طیف جذب $n=5,6,7,8,9,10$



شکل (۷): طیف بازتابش $n=5,6,7,8,9,10$

۴- نتیجه گیری

به طور خلاصه، بررسی رفتارهای الکترونیکی و نوری نانولوله های کربید ژرمانیوم بر پایه ی محاسبات اصول اولیه و در چارچوب نظریه ی تابع چگالی نشان می دهد که جنبه های الکترونیکی این نانوساختارها از جمله ساختارهای نوار انرژی و چگالی حالت ها تحت شرایط مورد مطالعه در تنش زیگزاگ با شاخص های $n = 5, 6, 7, 8, 9, 10$ ، بیانگر آن است که شکاف نواری الکترونیکی صفر نانولوله ی زیگزاگ $(5,0)$ با شکاف مستقیم، به تدریج افزایش یافته و برای نانولوله ی $(10,0)$ به مقدار 1.29 الکترون ولت می رسد. جنبه های نوری تحت شرایط بررسی شده در قطبش خارج از صفحه نشان می دهند که برای $n = 5$ و ϵ پیک های جذب و بازتابندگی در محدوده ی انرژی نور مرئی $(1.5$ تا 2 الکترون ولت) رخ می دهند. با افزایش مقدار n به $7, 8, 9$ و 10 ، این پیک ها افزایش یافته و به انرژی های بالاتر در بازه ی 3 تا 4 الکترون ولت منتقل می شوند. نتایج این پژوهش بیانگر آن است که خواص الکترونیکی و اپتیکی نانولوله های کربید ژرمانیوم را می توان از طریق تغییر شاخص ساختاری و اعمال تنش به طور مؤثر تنظیم کرد. این ویژگی، قابلیت استفاده از این نانوساختارها را در طراحی حسگرهای اپتیکی، ادوات فوتونیک، آشکارسازهای فروسرخ، سلول های خورشیدی و سایر سامانه های اپتوالکترونیکی، به ویژه در کاربردهای هوافضا و دفاعی، افزایش می دهد. از محدودیت های این پژوهش می توان به استفاده از تقریب GGA-PBE اشاره کرد که معمولاً منجر به کم آورد شدن مقدار شکاف نواری می شود. از این رو، استفاده از تابع های تبدیلی-همبستگی دقیق تر مانند HSE06 یا روش GW می تواند در مطالعات آینده به بهبود دقت نتایج منجر شود. همچنین بررسی اثر نقص های ساختاری، ناخالصی ها، قطبش درون صفحه و شبیه سازی ترابرد الکترونی تحت شرایط مختلف می تواند به درک عمیق تر رفتار این نانوساختارها و گسترش کاربردهای عملی آن ها کمک کند.

۵- تشکر و قدردانی

نویسندگان از کارکنان مرکز اطلاع رسانی دانشگاه پدافند هوایی خاتم الانبیاء (ص) که منابع سخت-افزاری لازم را جهت اجرای شبیه سازی های این مقاله در اختیار گذشتند تشکر و قدردانی می نمایند.

۶- تعارض منافع

نویسنده (گان) اعلام می دارند که در مورد انتشار این مقاله تضاد منافع وجود ندارد. علاوه بر این، موضوعات اخلاقی شامل سرقت ادبی، رضایت آگاهانه، سوء رفتار، جعل داده ها، انتشار و ارسال مجدد و مکرر توسط نویسندگان رعایت شده است.

۷- دسترسی آزاد

این نشریه دارای دسترسی باز است و اجازه اشتراک (تکثیر و بازآرایی محتوا به هر شکل) و انطباق (بازترکیب، تغییر شکل و بازسازی بر اساس محتوا) را می دهد.

۸-مراجع

- [1] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., et al. (2004). *Science*, 306, 666.
- [2] Okada, S. (2008). *Physical Review B*, 77, 041408.
- [3] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Katsnelson, M. I., Grigorieva, I. V., et al. (2005). *Nature*, 438, 197.
- [4] Su, C., Jiang, H., & Feng, J. (2013). *Physical Review B*, 87, 075453.
- [5] Mukhopadhyay, G., & Behera, H. (2013). *World Journal of Engineering*, 10, 39.
- [6] Zhu, J., Yang, D., Yin, Z., Yan, Q., & Zhang, H. (2014). *Small*, 10, 3480.
- [7] Alborznia, H. (2024). *Journal of Optoelectronical Nanostructures*, 9, 53–76.
- [8] Malko, D., Neiss, C., Vines, F., & Görling, A. (2012). *Physical Review Letters*, 108, 086804.
- [9] Liu, C. C., Feng, W., & Yao, Y. (2011). *Physical Review Letters*, 107, 076802.
- [10] Alborznia, H. (2023). *International Journal of Modern Physics B*, 2450085.
- [11] Amirian, S., Alborznia, H., & Yalameha, S. (2024). *Solid State Communications*, 394, 115693.
- [12] Watanabe, K., Taniguchi, T., & Kanda, H. (2004). *Nature Materials*, 3, 404.
- [13] Alborznia, H., & Hosseini Moradi, S. A. (2023). *Aerospace Defense*, 1, 1–11.
- [14] Balendhran, S., Walia, S., Nili, H., Sriram, S., & Bhaskaran, M. (2015). *Small*, 11, 640.
- [15] Zhang, S., Zhou, W., Ma, Y., Ji, J., Cai, B., Yang, S. A., et al. (2017). *Nano Letters*, 17, 3434.
- [16] Althib, H., Flemban, T. H., Aljameel, A. I., Mera, A., Ashiq, M. G. B., Mahmood, Q., et al. (2021). *Bulletin of Materials Science*, 44, 254.
- [17] Lopez-Bezanilla, A., & Littlewood, P. B. (2015). *The Journal of Physical Chemistry C*, 119, 19469.
- [18] Benidris, M., Aziz, Z., Khandy, S. A., Terkhi, S., Ahmad, M. A., Bouadjemi, B., et al. (2021). *Bulletin of Materials Science*, 44, 221.
- [19] Zhou, W., Guo, S., Zhang, S., Zhu, Z., Song, X., Niu, T., et al. (2018). *Nanoscale*, 10, 3350.
- [20] Alborznia, H., Naseri, M., & Fatahi, N. (2019). *Optik*, 180, 125.
- [21] Alborznia, H., Amirian, S., & Mohammadi, S. T. (2021). *Journal of Research on Many-Body Systems*, 11, 1.
- [22] Wakhare, S. Y., & Deshpande, M. D. (2019). *Bulletin of Materials Science*, 42, 206.
- [23] Alborznia, H. R., & Mohammadi, S. T. (2021). *Bulletin of Materials Science*, 44, 180.
- [24] Celik, F. A. (2022). *Bulletin of Materials Science*, 45, 108.
- [25] Alborznia, H. R., & Mohammadi, S. T. (2020). *Iranian Journal of Physics Research*, 20, 259.
- [26] Alborznia, H., & Mohammadi, S. T. (2022). *Indian Journal of Physics*, 32,

2.

- [27] Tayran, C., Caglayan, R., Mogulkoc, Y., Cakmak, M., & Alkan, B. (2021). *Journal of Electronic Materials*, 50, 6253.
- [28] Alborznia, H., Amirian, S., & Naziradeh, M. (2022). *Optical and Quantum Electronics*, 54, 608.
- [29] Belkhanchi, H., Ziat, Y., Hammi, M., Laghlimi, C., Moutcine, A., Benyounes, A., et al. (2021). *Optik*, 229, 166234.
- [30] Hoat, D. M., Amirian, S., Alborznia, H., Laref, A., Reshak, A. H., & Naseri, M. (2021). *Indian Journal of Physics*, 95, 2365.
- [31] Alborznia, H., Naseri, M., & Fatahi, N. (2019). *Superlattices and Microstructures*, 133, 106217.
- [32] Alborznia, H. (2022). *Surface Review and Letters*, 29, 2250078.
- [33] Hofheinz, M., Jehl, X., Sanquer, M., Molas, G., Vinet, M., & Deleonibus, S. (2006). *Applied Physics Letters*, 89, 143504.
- [34] Zhang, X. Q., Li, H., & Liew, K. M. (2007). *Journal of Applied Physics*, 102, 073709.
- [35] Alborznia, H. (2024). *Indian Journal of Chemistry*, 9, 855–859.
- [36] Vatankhah, C., & Badehian, H. A. (2021). *Optik*, 237, 166740.
- [37] Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). *Physical Review Letters*, 77, 3865.
- [38] Soler, J. M., et al. (2002). *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14, 2745.
- [39] Birch, F. (1986). *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 91, 4949.
- [40] Abt, R., Ambrosch-Draxl, C., & Knoll, P. (1994). *Physica B: Condensed Matter*, 194–196, 1451–1452.
- [41] Alborznia, H. (2024). *Iranian Journal of Physics Research*, 24, 255–262.
- [42] Zarhri, Z., Cano, A., Oubram, O., Ziat, Y., & Bassam, A. (2022). *Micro and Nanostructures*, 166, 207223.
- [43] Hosseini Moradi, S. A., & Amirzadeh, M. (2024). Removal of acidic dye by electrochemical method using polymeric nanofiber containing reduced graphene oxide nanoparticles and catalyst. *Journal of Color Science and Technology*, 17(4), 287–301.
- [44] Alborznia, H., & Hosseini Moradi, S. A. (2025). Calculation of reflection coefficient of radar absorbing composite lattice grids using silica and carbon nanofibers. *Aerospace Defense*, 4(1), 121–129.