

اثرات میدان الکتریکی بر خواص اپتیکی نانونوار گرافینی

درویشی گیلان، مهدی^۱؛ چگل، رعد^۱

^۱گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ملایر

چکیده

در این کار تاثیر میدان الکتریکی بر خواص اپتیکی نانونوار گرافینی آرمچیر با استفاده از بسته محاسباتی *SIESTA* بررسی شده است. با افزایش میدان در راستای عرض نوار شاهد کاهش اندازه گاف انرژی و همچنین جابجایی قله های جذب اپتیکی به سمت ناحیه سرخ و بسامدهای پایینتر هستیم.

Electrical field effects on optical properties of graphene nanoribbons

Darvishi Gilan, Mahdi¹; Chegel, Raad¹

¹ Department of Physics, Faculty of Science, University of Malayer

Abstract

In this work, the electrical field effects on optical properties of armchair graphene nanoribbons are investigated by using *SIESTA*. By increasing the strength of the field the gap is decreased and red shift in the absorbed peaks are observed.

PACS No. 70.00

مقدمه

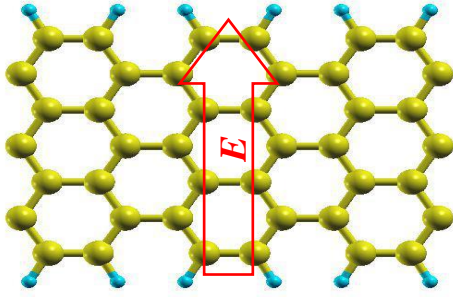
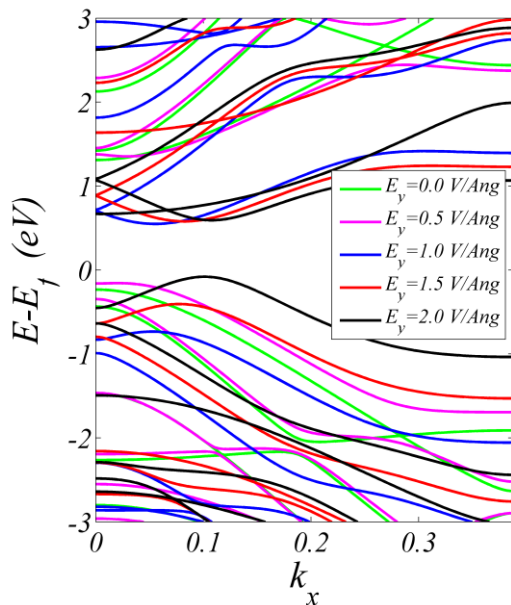
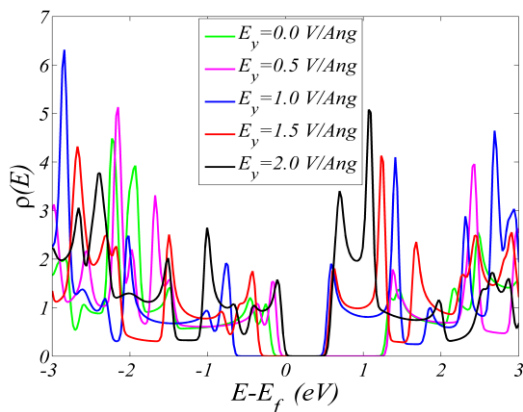
نانونوارهای گرافینی از جمله ساختارهای یک بعدی است که در کنار دیگر مواد مانند نانولوله ها و نانونوارهای بورون نیتريد و ديگر ساختارهای مشابه زمينه های تحقيقاتی فراوانی را در فناوری نانو و فیزیک مواد نانو مقیاس فراهم کرده است. یکی از موضوعات مهم در این زمينه بررسی خواص اپتیکی و ارتباط آن با ابعاد سیستم، حضور ناخالصیها و میدانهای اعمالی است. در این کار اثرات میدان الکتریکی بر روی خواص الکترونیکی و اپتیکی نانونوار گرافینی آرمچیر با عرض $W=7$ بررسی شده است. مبنای کار تقریب دو قطبی [۱] و تقریب LDA [۲، ۳] در محاسبات نظریه تابعی چگالی [۴] با استفاده از بسته محاسباتی *SIESTA* میباشد [۵]. میدان الکتریکی در صفحه نوار و در راستای عرض آن بوده (شکل ۱) و نور فرودی نیز نور ناقطبیده در نظر گرفته شده است.

مدل و فرمولبندی

با استفاده از نظریه اختلال وابسته به زمان عناصر ماتریس گذار اپتیکی میان حالت اولیه در نوار ظرفیت و حالت نهایی در نوار رسانش بصورت زیر داده می شود [۶]:

$$M_{v \rightarrow c} = i \frac{e\hbar}{m\omega} \sqrt{\frac{I}{\epsilon c}} e^{i(\omega_f - \omega_i - \omega)t} \vec{p} \cdot \langle \psi_{c\vec{k}'} | \vec{\nabla} | \psi_{v\vec{k}} \rangle. \quad (1)$$

که در آن I ، ω و \vec{p} بترتیب شدت، فرکانس و بردار قطبش نور فرودی می باشند. همچنین ω_i و ω_f به فرکانسهای حالات اولیه و نهایی در نوارهای ظرفیت و رسانش نسبت داده می شوند. در رابطه بالا بردار دو قطبی $\vec{D}_{cv} = \langle \psi_{c\vec{k}'} | \vec{\nabla} | \psi_{v\vec{k}} \rangle$ نقشی بسیار مهم در تعیین پذیرفتاری خطی اپتیکی (و به تبع تابع دی الکتریک) دارد و می توان با استفاده از روابط جابجایی عملگری رابطه ای بصورت زیر برای آن بدست آورد [۱]:

شکل ۱: ساختار نانونوار گرافینی آرمچیر با عرض $w=7$.شکل ۲: ساختار نواری نانونوار گرافینی آرمچیر با عرض $w=7$ در حضور میدان الکتریکی با شدتهای مختلف.شکل ۳: چگالی کلی حالات نانونوار گرافینی آرمچیر با عرض $w=7$ در حضور میدان الکتریکی با شدتهای مختلف.

$$\vec{D}_{cv} = \frac{E_{cv}(\vec{k}, \vec{k}')}{(e\hbar^2/m)} \langle \psi_{c\vec{k}'} | \vec{r} | \psi_{v\vec{k}} \rangle. \quad (2)$$

در این رابطه e و m بترتیب بار و جرم الکترون می‌باشند. همچنین در اینجا $E_{cv}(\vec{k}, \vec{k}') = E_c(\vec{k}') - E_v(\vec{k})$ تفاوت انرژی بین دو نوار رسانش و ظرفیت در فرآیند گذار الکترونی است. با توجه به رابطه (۲) مشاهده می‌کنیم که بردار دو قطبی با استفاده از ساختار نواری و ساختار هندسی ماده، قابل محاسبه است و با استفاده از آن می‌توان پذیرفتاری خطی اپتیکی را تعیین کرد [۷-۹]:

$$\chi(\omega) = \frac{2e^2}{V\hbar^2 m} \sum_{vc} \int_{1BZ} \left| \frac{\vec{D}_{cv}}{E_{cv}(k)} \right|^2 \frac{E_{cv}(k)}{(E_{cv}(k))^2 - (\hbar\Omega)^2} dk.$$

در اینجا V حجم سلول پایه و $\Omega = \omega + i\Gamma$ یک عدد موهومی شامل فرکانس فوتون فرودی و یک ضریب پهن شدگی است. رابطه ضریب جذب اپتیکی با قسمت موهومی پذیرفتاری اپتیکی عبارت است از:

$$\alpha(\omega) = (4\pi\omega/n(\omega)c) \text{Im} \chi(\omega). \quad (4)$$

که در آن $n(\omega)$ ضریب شکست ماده و c سرعت نور است. همچنین با توجه به رابطه بین تابع دی الکتریک و پذیرفتاری اپتیکی بصورت $\epsilon(\omega) = 1 + 4\pi\chi(\omega)$ می‌توان قسمت موهومی تابع دی الکتریک را بعنوان کمیتی در تعیین ضریب جذب اپتیکی ماده در نظر گرفت. با محاسبه قسمت موهومی تابع دی الکتریک با استفاده از بسته محاسباتی *SIESTA*، میتوان قسمت حقیقی تابع دی الکتریک، همچنین ضریب شکست و درنهایت ضریب جذب اپتیکی برای نانونوار گرافینی آرمچیر تحت تاثیر میدان الکتریکی یکنواخت در راستای پهنای نوار را تعیین کرد.

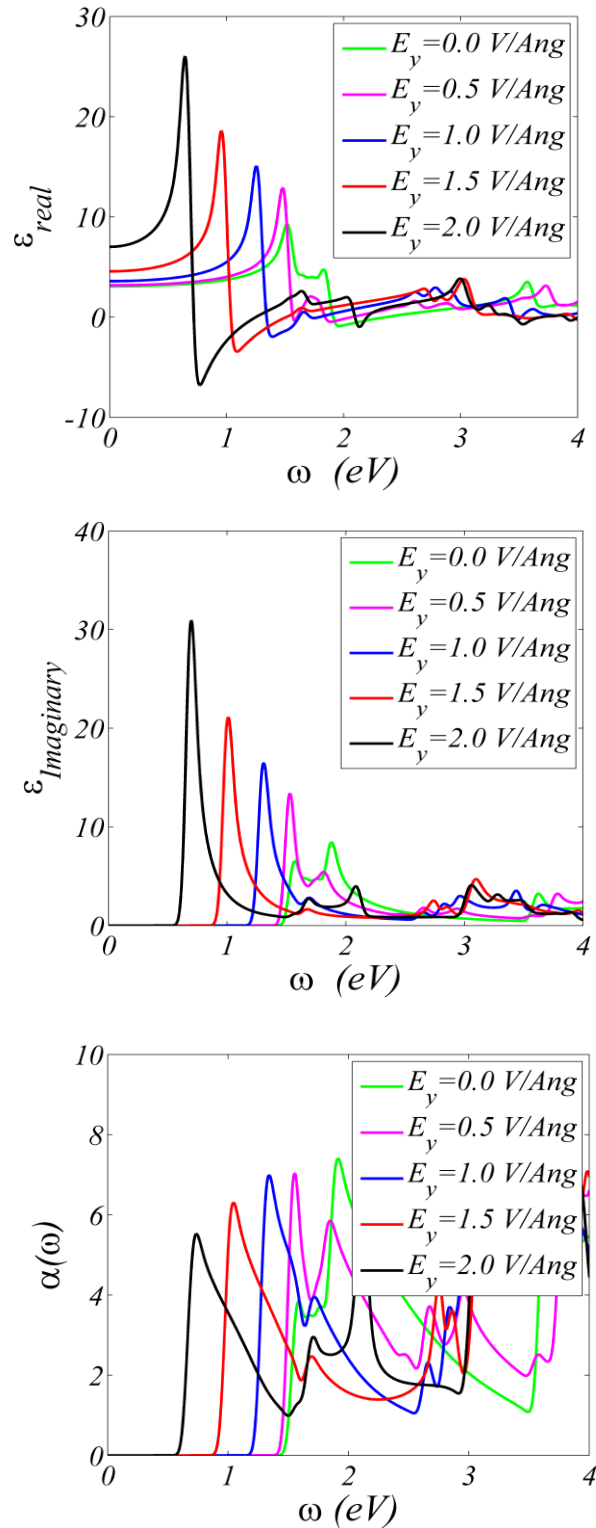
محاسبات

با استفاده از پایه های DZP [۱۰] در بسته محاسباتی *SIESTA* [۵] و استفاده از تقریب *LDA* در محاسبات بر مبنای نظریه تابعی چگالی همچنین با در نظر گرفتن جذب اتمهای هیدروژن روی لبه-ها، سیستم نانونوارگرافینی با عرض $w=7$ (شکل ۱) را در حالت غیر اسپینی بررسی می‌کنیم. میدانهای مختلف اعمال شده در راستاهای مختلف حاکی از این امر است که تنها میدان الکتریکی

اعمال شده در صفحه نوار و در راستای عرض آن اثرات قابل ملاحظه‌ای در ساختار نواری و خواص اپتیکی و الکترونیکی آن دارد.

بحث و نتیجه گیری

هر چند می‌توان اثرات میدان الکتریکی را در فضای مستقیم با اضافه کردن پتانسیل مولد میدان به عناصر هامیلتونی بررسی کرد، اما رهیافت بهتر برای تحلیل فیزیکی این اثرات، استفاده از مفهوم تکانه بلوری و اعمال تکانه ناشی از میدان الکتریکی در فضای وارون است. به گونه‌ای که بردار تکانه در جهت میدان به بردار تکانه تمام الکترونیهای بلور اضافه می‌گردد. حال با استفاده از تعریف ناحیه بریلیون در راستای طول نوار (که شامل تمام جوابهای فیزیکی متمایز برای دستگاه بوده و در اینجا این ناحیه به خاطر تقارن انتقالی بلور در راستای طول نوار تعریف می‌شود)، ذکر این نکته لازم است که تکانه ناشی از میدان در این راستا تنها باعث یک جابجایی در محور عدد موج می‌گردد که با استفاده از بردارهای پایه شبکه وارون، این جابجایی به راحتی قابل تحول به منطقه اول بریلیون می‌باشد و در نهایت مولفه میدان در راستای طول نوار عملاً تاثیر محسوسی در خواص الکترونیکی و اپتیکی نانونوار ندارد. اما با توجه به محدودیت کوانتومی عرض نانونوار، جوابهای تابع موج در این راستا با استفاده از شرایط انتهای بسته همانند تابع موج در چاه دارای عدد موج گسسته می‌باشد. همچنین در راستای عرض نوار مفهوم ناحیه بریلیون و بردارهای پایه شبکه وارون نیز وجود ندارند. بنابراین اضافه شدن مولفه تکانه ناشی از میدان در این راستا به این عدد موجهای گسسته، عملاً جوابهای متمایز فیزیکی را می‌طلبد و در نهایت شاهد تاثیر محسوس میدان عرضی بر خواص الکترونیکی و اپتیکی دستگاه نانونوار خواهیم بود. در ادامه با توجه به محاسبات و نتایج بدست آمده می‌توان گفت که میدان اعمالی در صفحه نانونوار و در راستای عرض آن اثرات قابل ملاحظه‌ای در ساختار نواری (شکل ۲) و الکترونیکی از جمله اندازه گاف انرژی (شکل ۳) و همچنین خواص اپتیکی (شکل ۴) دارد. با توجه به ساختار نواری (شکل ۲) مشاهده می‌شود که در اثر اعمال میدان الکتریکی باز هم ماده، یک نیم‌رسانای گاف مستقیم بوده و اولین گذار بین بیشینه نوار ظرفیت و کمینه نوار



شکل ۴: قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک و همچنین ضریب جذب اپتیکی برای نانونوار گرافینی آرمچیر با عرض $w=7$ در حضور میدان الکتریکی با شدتهای مختلف.

رسانش در یک عدد موج یکسان اتفاق می‌افتد، اما با این تفاوت که عدد موج مربوط به این گذار با افزایش شدت میدان نیز از مقدار صفر برای حالت میدان صفر به سمت مقادیر بالاتر میل می‌کند (شکل ۲). در بررسی خواص اپتیکی با استفاده از نمودار ضریب جذب (شکل ۴)، با افزایش شدت میدان الکتریکی شاهد جابجایی قله های جذب به سمت ناحیه با فرکانس کمتر (ناحیه فرورسرخ) طیف هستیم که متناظر با کاهش اندازه گاف انرژی در این سیستم نیز می‌باشد (شکل ۳). و در نهایت می‌توان گفت: با اعمال میدان الکتریکی با شدتهای مختلف در راستای عرض نوار می‌توان خواص الکترونیکی و اپتیکی مختلف و قابل کنترلی را برای نانونوارهای گرافینی آرمچیر در دسترس داشت.

مرجع‌ها

- [1] J. J. Sakurai and J. Napolitano, "Modern quantum mechanics"; 2th edition, Addison-Wesley, (1985) 337.
- [2] D. M. Ceperley and B. J. Alder, "Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method," *Physical Review Letters*, vol. **45**, (1980) 566.
- [3] J. P. Perdew and A. Zunger, "Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems," *Physical Review B*, vol. **23**, (1981) 5048.
- [4] P. Hohenberg and W. Kohn, "Inhomogeneous Electron Gas," *Physical Review*, vol. **136**, (1964) B864.
- [5] M. S. José, A. Emilio, D. G. Julian, G. Alberto, J. Javier, O. Pablo, et al., "The SIESTA method for ab initio order- N materials simulation," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. **14**, (2002) 2745.
- [6] J. Jiang, R. Saito, A. Grüneis, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, "Optical absorption matrix elements in single-wall carbon nanotubes," *Carbon*, vol. **42**, (2004) 3169.
- [7] R. Chegel and S. Behzad, "Effects of axial magnetic field on the electronic and optical properties of boron nitride nanotube," *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. **43**, (2011) 1631.
- [8] M. Graf and P. Vogl, "Electromagnetic fields and dielectric response in empirical tight-binding theory," *Physical Review B*, vol. **51**, (1995) 4940.
- [9] R. Moradian, R. Chegel, and S. Behzad, "Optical absorption of zigzag single walled boron nitride nanotubes," *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. **43**, (2010) 312.
- [10] E. Artacho, D. Sánchez-Portal, P. Ordejón, A. García, and J. M. Soler, "Linear-Scaling ab-initio Calculations for Large and Complex Systems," *physica status solidi (b)*, vol. **215**, (1999) 809.