بیست و ششمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و دوازدهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه خوارزمی،
تهران، ایران.
۱۶-۱۵ بهمن ۱۳۹۸

مطالعه جذب اپتیکی درنانوساختار دوبعدی گرافاین GY5 در دو راستای نور فرودی موازی و عمود برصفحه

حامد جعفرزاده، رقیه حسینی و سارا آل شیخ

دانشگاه صنعتی قوچان h.jafarzadeh@qiet.ac.ir

چکیده –در این پژوهش ساختار نواری الکترونی و خواص اپتیکی ساختارگرافاین GY5 مورد بررسی قرار گرفت. محاسبات اصول اولیه براساس نظریه تابعی چگالی انجام شد. ساختار نواری الکترونی نشان دهنده وجود گاف انرژی صفر و مخروط دیراک است. جذب اپتیکی نیز محاسبه شد که برای نور تابیده شده با قطبش موازی با صفحه، نشان‌دهنده وجود چهار بیشینه جذب درانرژی‌های کمتر از eV ۱۲ است و برای انرژی‌های بالاتر از آن تقریبا جذب وجود ندارد. در مورد نور تابیده شده با قطبش عمود بر صفحه، نیز یک پیک وجود دارد. ضمن اینکه اعمال میدان الکتریکی تاثیری در ساختار نواری و جذب اپتیکی نداشته است.

کلید واژه- جذب اپتیکی، گرافاین،نانو ساختار کربنی، نظریه تابعی چگالی، GY5

Investigation of Optical absorptionin Two-Dimensional GY5 Graphyne nanostructurefor two parallel and perpendicular polarized light

Hamed Jafarzadeh, RoghayeHosseini, and Sara Al**e**sheikh

Quchan University of Technology**h.jafarzadeh@qiet.ac.ir**

Abstract- In this paper we have investigated some electronic and optical properties of GY5 graphyne structure. Investigations have been done by first principle calculation based on density functional theory.Electronic band structure shows zero band gap and Dirac coneat Fermi energy. Investigation of optical absorption for energies less than 12 eV represents four peaks for parallel polarization and there were not any absorption for higher energies. There was only one peak for perpendicular polarization. Electric field doesn't have any impact on the band structure and optical absorption.

Keywords: Carbon nanostructure,Density functional theory, Graphyne, GY5,Optical absorption.

[Downloaded from opsi.ir on 2024-10-12]

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

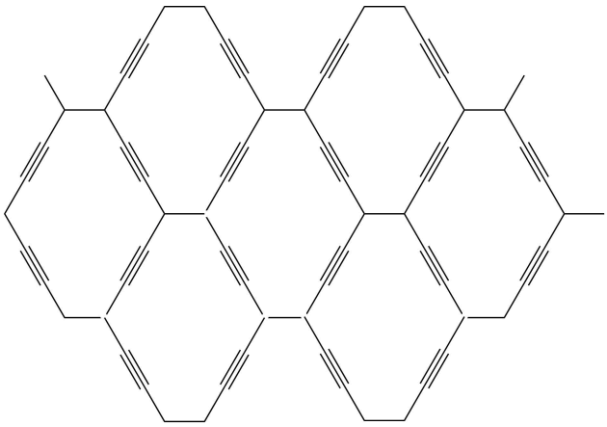
مقدمه

گرافن در سال ۲۰۰۴ به عنوان یک ساختار دوبعدی کربنی که ویژگی های فیزیکی منحصربفردی داشت مطرح شد. پس از آن و به مرور زمان تلاش برای پیش بینی ترکیبات دوبعدی دیگری که بتوانند مانند گرافن ویژگی های فیزیکی جذابی برای پژوهش گران داشته باشند، ادامه یافته است. در این میان گرافاین‌ها و گرافداین‌ها با توجه به ساختار دوبعدی کربنی‌شان گزینه‌های جدی‌تری برای پژوهش به شمار می روند[۱]. هیبریداسیون اتم‌های کربن در الماس SP^3، در گرافن SP^2 و در خانواده گرافاین‌ها و گرافداین‌ها ترکیبی از هیبریداسیون SP و SP^2 می‌باشد که باعث تغییر ویژگی‌های الکترونیکی و اپتیکی نسبت به گرافن شده است. پژوهش های بسیاری در مورد ویژگی های الکترونیکی، اپتیکی، مکانیکی، حرارتی، ساختاری و حسگری گرافاین ها انجام شده است[۴-۲]. مطالعات نظری موید وجود مخروط دیراک مشابه گرافن در تعدادی از ساختارهای گرافاین می‌باشد که موجب شکل گرفتن ویژگی‌های الکترونیکی و اپتیکی مورد توجه می شود.

این بررسی ها می تواند با استفاده از روش‌های اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی و یا با استفاده از روش تنگ بست قوی انجام پذیرد. یکی از ساختارهای خانواده گرافاین‌ها که تنها تحقیق منحصر به فردی در مورد آن انجام شده است[۵]، GY5 می‌باشد. در این پژوهش ساختار نواری الکترونی و جذب اپتیکی این نانوساختار را با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار دادیم. جذب اپتیکی در دو حالت قطبش در راستای صفحه و عمود بر آن محاسبه شده است.

گرافاین GY5

در شکل ۱ ساختار دوبعدی کربنی گرافاین GY5 نمایش داده شده است. همان طور که در شکل آمده، اتم‌های کربن در صفحه با هیبرید SP و SP^2 قرار گرفته‌اند به گونه‌ای که برخی از پیوندها یگانه و برخی سه‌گانه اند. همچنین اتصالات استیلنی در شکل کاملا مشخص است.



شکل ۱: ساختار هندسی تک لایه صفحه ای GY5

در این ساختار به دلیل تقارن، سلول واحد به صورت لوزی شکل با شش اتم در نظر گرفته شده است. اندازه طول اضلاع لوزی یا همان ثابت شبکه برابر $\mathring{A}$ ۴/۸۷ است که با یکدیگر زاویه °۸۹/۴۲ می‌سازند.

روش محاسبات

در این پژوهش محاسبات ساختار الکترونی و اپتیکی گرافاین GY5 در کد سایستا که براساس روش اصول اولیه مبتنی بر نظریه تابعی چگالی می‌باشد، انجام شد. پایه مورد استفاده برای بسط و محاسبه تابع موج PBE بوده و برهمکنش تبادلی همبستگی با تقریب چگالی موضعی LDA عمل می کند.

در واهلش انجام شده نیروی وارد بر هر اتم کمتر از eV/Å ۰/۵۴بود و انرژی همگرایی خودسازگار الکترونی کمتر از eV $۱۰^{-۵}$ در نظر گرفته شد.

محاسبات به روش خودسازگار و با حل معادلات استاندارد کوهن شم برای مجموعه معینی از نقاط در منطقه اول بریلوئن انجام شد. این نقاط با استفاده از شبکه مونخورست پک برای محاسبات الکترونی۱×۲۵×۲۵و برای محاسبات اپتیکی۱×۳۰۰×۳۰۰در نظر گرفته شد.

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

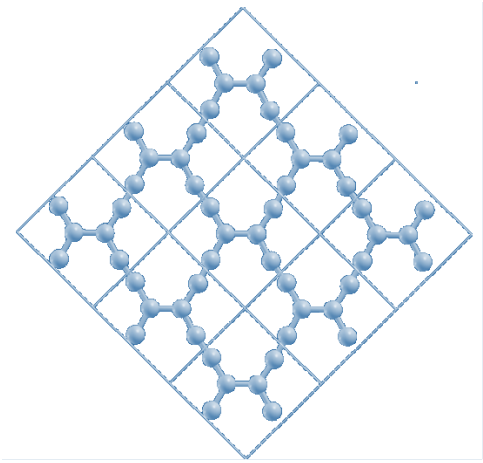
[Downloaded from opsi.ir on 2024-10-12]

توابع موج تخت تا انرژی ۳۷۰ eV گسترده شده اند. همچنین از برهم‌کنش اسپین-مدارصرفنظر شد.

محاسبات جذب اپتیکی برای دو جهت از نور قطبیده انجام شدکه یک جهت آن در راستای موازی با صفحه و جهت دیگر در راستای عمود بر آن می‌باشد. درپایان به منظور بررسی اثر میدان الکتریکی، این میدان نیز به ساختار اعمال شد.

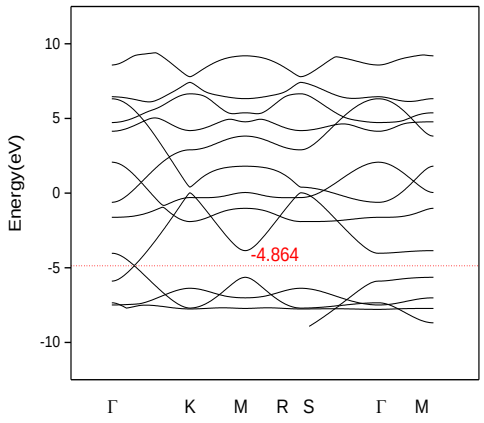
نتایج و بحث

در شکل ۲ تصویر گرافیکی ساختار گرافاین GY5 آمده است که در آن سلول واحد نیز نشان داده شده است.



شکل۲: تصویر گرافیکی ساختار گرافاینGY5

در شکل۳ساختار نواری الکترونی بدست آمده از محاسبات نشان داده شده است.

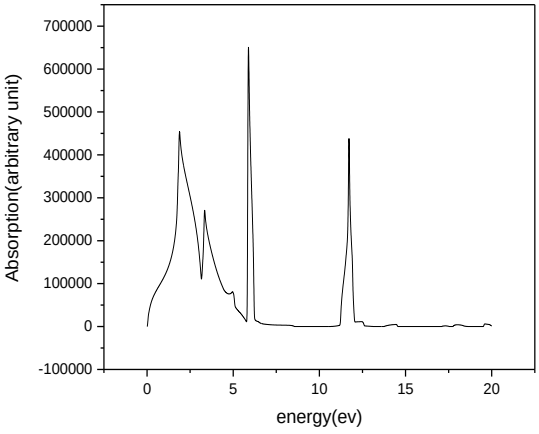


شکل۳: ساختار نواری الکترونیGY5

انرژی فرمی درانرژی۸/۸۶۴ eV-بوده که در شکل با خط چین قرمز رنگ نشان داده شده است.

همانطور که در شکل ۳ دیده می‌شود GY5 دارای انرژی گاف صفر است و در فاصله بین نقاط Γ و M دارای مخروط دیراک می‌باشد.

در شکل ۴ نمودار جذب اپتیکی بر حسب انرژی برای نور تابیده با قطبش موازی باصفحه تا انرژی ۲۰ eV نشان داده شده است.



شکل۴: نمودار جذب اپتیکی بر حسب انرژی برای نور تابیده شده با قطبش در صفحه ساختار

از شکل ۴ مشخص می شودکه میزان جذب در ۴ انرژی دارای بیشینه می باشد. این مقادیر انرژی به ترتیب عبارتنداز:

۱۱/۷۱ eV ، ۱/۸۹ eV ، ۳/۳۴۸ eV ، ۵/۸۸ eV

ضمن اینکه در انرژی‌های بیشتر از ۱۲/۵ eVمیزان جذب بسیار ناچیز است.

با توجه به ساختار نواری و اینکه انرژی گاف صفر است، می توان نتیجه گرفت که در همان انرژی های اولیه بایستی جذب وجود داشته باشد که در شکل ۴ مشخص است. منشا این جذب اپتیکی گذارهایی است که در آن الکترون‌ها با گرفتن انرژی فوتون‌های تابیده شده از

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

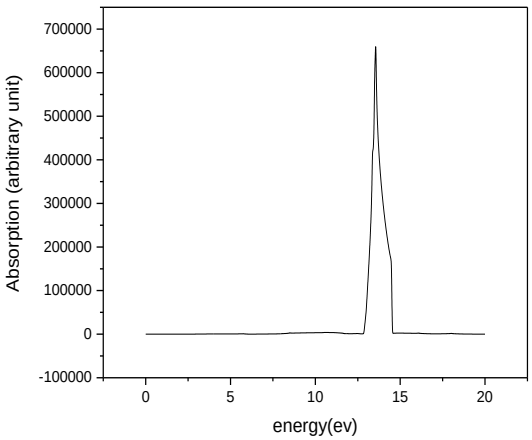
[Downloaded from opsi.ir on 2024-10-12]

انرژی‌های کمتر از انرژی فرمی به انرژی‌های بالاتر از آن می‌روند.

در انرژی‌های بالاتر، وابسته به چگالی حالت‌های الکترونی و با افزایش آن احتمال گذارهای بین نواری افزایش می‌یابد که حاصل آن در قله‌های میزان جذب اپتیکی دیده می شود.

سپس در انرژی‌های بیشتر از ۱۲/۵ eV با کاهش احتمال گذار میزان جذب نیز کاهش می یابد.

در شکل ۵ نمودار جذب اپتیکی بر حسب انرژی برای نور تابیده شده با قطبش عمود بر صفحه ساختار تا انرژی ۲۰ eV، نشان داده شده است.



شکل۵: نمودار جذب اپتیکی بر حسب انرژی برای نور تابیده شده با قطبش عمود بر صفحه ساختار

با توجه به شکل۵ مشاهده می‌شود که میزان جذب اپتیکی برای نور تابیده شده با قطبش عمود بر صفحه ، تنها یک پیک برجسته دارد که در انرژی۱۳/۵۵ eV اتفاق می‌افتد و سایر بیشینه‌ها در مقابل آن قابل صرفنظر کردن می‌باشند.

این تفاوت در جذب اپتیکی برای نور تابیده با دو قطبش مختلف می‌تواند به دلیل وجود اربیتال‌های P_z عمود بر صفحه اتم‌های کربن باشد. این اربیتال‌ها در ایجاد پیوندهایπ موثر می‌باشند و بدین ترتیب در ایجاد ویژگی‌های الکترونیکی و اپتیکی موثر می‌باشند. در پایان میدان الکتریکی به ساختار اعمال شد و تغییر ساختار نواری و جذب اپتیکی در دو حالت قطبش بررسی شد که نتایج نشان دهنده عدم تغییر در ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی بود.

این عدم تغییر می‌تواند به علت ساختار کاملا دوبعدی و صفحه ای GY5 باشد. به عبارت دیگر عدم وجود فراز و فرود درمکان اتم‌ها در این صفحه موجب عدم تغییر پتانسیل الکتریکی حاصل از میدان الکتریکی خارجی برروی هرکدام از اتم‌ها می‌شود ولذا نتایج بدون تغییر باقی می‌مانند.

نتیجه‌گیری

محاسبات اصول اولیه برپایه نظریه تابعی چگالی برای ساختار دوبعدی کربنی GY5 نشان‌دهنده انرژی گاف صفر و مخروط دیراک در ساختار نواری و چهار پیک جذب برای نور تابیده با قطبش موازی صفحه است که در این حالت برای انرژی‌های بیش از ۱۲/۵ eV تقریبا جذب وجود ندارد. ضمن اینکه با اعمال میدان الکتریکی هیچ تغییری در ویژگی های الکترونی و اپتیکی اتفاق نیفتاده است.

سپاسگزاری

این پژوهش توسط دانشگاه صنعتی قوچان تحت قرارداد شماره ۱۵۷۸۳۶ مورد حمایت قرار گرفته است.

مرجع‌ها

[1]A. Ivanovskii, “Graphynes and graphdyines”,*Progress in Solid State Chemistry*, Vol.41, pp. 1, 2013.

[2]H. Jafarzadeh and M. Ghodrati, “Investigation of Electronic and Optical Properties of Zigzag α-Graphyne Nanotubes by Using a Tight-Binding Method”, *Journal of Electronic Materials*, vol. 48, pp. 4669, 2019.

[3]H. Jafarzadeh, MR. Roknabadi, N. Shahtahmasebi and M. Behdani, ,“ Electronic properties of α-graphyne nanoribbons under the electric field effect”, Physica E, vol. 67, pp. 54-58, 2013.

[۴]جعفرزاده، حامد،رضایی رکن آبادی،محمود،شاه طهماسبی، ناصر،مطالعه ساختار نواری بتا گرافاین نانوروبان و بررسی اثر میـدان الکتریکـی بـر روی آن، کنفـرانس فیزیک ایران،۱۳۹۲.

[5] H. Zhang, H. Pan, M. Zhang and Y. Luo, “First-principles prediction of a new planar hydrocarbon material: half-hydrogenated 14, 14, 14-graphyne”,*Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 18, pp. 23954.2016.

این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2024-10-12]