

اثر بر هم کنش کولنی موضعی بین الکترونی روی جذب اپتیکی صفحات برن نیترید

زیبا آقایی منش ^۱و حامد رضانیا^۲ ^۱گروه فیزیک ،دانشگاه پیام نور تهران ۲ گروه فیزیک، دانشگاه رازی کرمانشاه

چکیده-در این مطالعه مدل هابارد برای توصیف خواص اپتیکی برن نیترید بکار رفته است و در یک تقریب میدان متوسط و حضور یک نظم بلندبردپادفرومغناطیس نحوهی تغییرات جذب اپتیکیموردبررسی قرارگرفته است.اساس محاسبه نرخ جذب فوتون، براساس قانون طلایی فرمی که تحت پتانسیل اختلال بر همکنش نور –ماده می باشد بدست آمده است. نتایج بیانگر این است که افزایش عوامل برهمکنش کولنی ومغناطش زیرشبکهی باعثکاهش گاف انرژی درجذب اپتیکی برن نیترید می شود .بنابراین نتایج گذار فاز عایق باندی را نشان می دهد وبا افزایش قدرت بر همکنش کولنی ومغناطش زیر شبکه ی پهنای گاف کاهش می یابد.

Effects of local coulomb interaction on the optical absorption of Boron-Nitired sheets

Ziba Aghaiimanesh¹ and Hamed Rezania²

¹ Department of Physics, Parand Payamnoor university, Tehran

² Department of Physics, Razi university ,Kermanshah

Abstract-We addressed the frequency behavior of optical absorption of Boron Nitired in the presence of electronic interaction. The Hubbard model has been applied to find the excitation spectrum of compound within mean field approximation. Long rang antiferromagnetic ordering has been considered to obtain optical absorption. Fermi golden rule under time dependent interaction potential between light and matter has been implemented to capture the relation for optical absorption. The results show the increase of coulomb interaction and sublattice magnetization factors leads to decrease energy gap in the optical absorption of Boron Nitired which has been implied via *band insulator* transition implication.

Keywords: coulomb interactions ,optical absorption, Boron Nitired sheet ,Hubbard model

۱–مقدمه

برن نیترید هگزاگونال (h-BN) یک ماده لایه ای شبیه به گرافیت و دارای ساختار بلور هگزاگونال است از جنبه الكترونيك، برن نيتريد هگزاگونال باشكاف نوارى تقريباً ٨/٨ الكترون ولت عايق است.[1]اخيرا محاسبات انجام شده روى قدرت بر هم کنش کولنی در شکل های متفاوت شبکه شانه عسلی نشان داده است که مدل هابارد را می توان به عنوان یک مدل منطقی برای توصیف تحول الکترونهای لایه ظرفيت اين تركيب لحاظ كرد. [2] .تابع دى الكتريك عرضي بيان كننده پاسخ يك ماده به ميدان الكترومغناطيسي اعمال شدہ بهصورت یک جریان الکترونی می باشد[5].طیف نمایی اپتیکی در دهه اخیر به عنوان مهمترین وسیله تجربی برای تعیین ساختار نواری گسترش یافت بنابراین می توان به عنوان یک مساله جالب توجه آثار جمله هابارد طیف بر انگیختگی برن نیترید تک لایه و ظهور طبیعت گذار فاز عایق باندی را در شبکه برن نیترید تک لایه را بررسی کرد. در این مطالعه براساس روش میدان متوسط کلاسیکی تاثیر جمله بر همکنش کولنی را روی طیف اپتیکی برن نیترید مطالعه می کنیم،سپس جذب اپتیکی این ترکیب بدست می آید..نتیجه مهم این مطالعه کاهش گاف انرژی بر انگیختگی تک ذره دستگاه در جذب اپتیکی با افزایش قدرت بر همکنش هابارد در برن نیترید است.

۲-روشهای محاسبات

مدل هابارد به عنوان مدل مناسب جهت توجیه گذار فاز فلز -عایقدر جامدات براساس دو جمله مهم معرفی می شود:۱-جمله انرژی جنبشی الکترونها و بر همکنش آنها با یونهای شبکه ۲-جمله برهمکنش کولنی کوتاه برد الکترون-الکترون با این توضیحات هامیلتونی مدل هاباردبرای شبکه شانه عسلی به صورت زیر معرفی می شود:

$$\begin{split} \mathrm{H} &= -\sum_{i,j} \mathrm{t}_{ij} \, \mathrm{C}^+_{i\alpha\sigma} \mathrm{C}_{j\beta\sigma} + \mathrm{U}_{\mathrm{i}} \sum_{i\alpha} \mathrm{C}^+_{i\alpha\uparrow} \mathrm{C}_{i\alpha\uparrow} \, \mathrm{C}^+_{i\alpha\downarrow} \mathrm{C}_{i\alpha\downarrow} - \\ & \mu \sum_{i\alpha\sigma} \mathrm{C}^+_{i\alpha\sigma} \, \mathrm{C}_{i\alpha\sigma} \,, \quad (1) \qquad [3] \\ \mathrm{Shec} \, \mathrm{C}^t_{i\alpha} \, \left(\mathbf{C}_{i\alpha} \right) \, \mathrm{Ib} \mathrm{Tr}_{\mathrm{C}} \mathrm{ec} \, \mathrm{ce} \, \mathrm{ce}$$

نيمه پرى $\frac{U}{2} = \mu [S]$ در نظر گرفته شده است. با استفاده – نيمه پرى $\frac{U}{2} = \mu [S]$ در نظر گرفته شده است. با استفاده از تقريب ميدان متوسط هاميلتونى برهمكنش الكترون $H_U^{MF} = U \sum_{l,\alpha} \langle n_{i\alpha\uparrow} \rangle n_{i\alpha\downarrow} + U \sum_{l,\alpha} \langle n_{i\alpha\uparrow} \rangle n_{i\alpha\downarrow} + (1) \sum_{l,\alpha\uparrow} \langle n_{i\alpha\downarrow} \rangle , \quad [3]$ $\langle n_{j,\sigma} \rangle = \frac{n}{2} \pm \frac{m}{2} \begin{cases} + & j \in A \\ - & j \in B \end{cases} , \quad (3) \end{cases}$

n و mبه ترتیب غلظت ومغناطش می باشند که در این بررسی 1=nشرایط نیمه پری را در هر بلور مهیا می کند وضمنا این قانون نیمه پری یک پیش نیازبرای ظهورفاز پاد فرومغناطیس می باشد.m/t مغناطش زیر شبکه ی مجموعه گشتاور دو قطبی مغناطیسی روی هر یک از دو زیر شبکه شانه عسلی می باشد. با جایگزینی معادله (2) در معادله (1) هامیلتونی به شکل زیر نوشته می شود:

$$H = -\sum_{i,j,\alpha,\sigma} t_{ij}^{\alpha\beta} C_{i\alpha\sigma}^{+} C_{j\beta\sigma} + U \sum_{\alpha} \frac{n-\sigma m}{2} n_{i\alpha\downarrow} + U \sum_{\alpha} \frac{n+\sigma m}{2} n_{i\alpha\uparrow} , (4)$$

بردارهای انتقال شبکه مطابق شکل (۱)در نظر گرفته شده است.



شکل ۱:بردارهای انتقال شبکه

مکان کوتاهترین بردارهای شبکه به شکل زیر است.
$$\overline{a_1} = \left(\frac{-\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2}, 0\right), \overline{a_2} = \left(\frac{-\sqrt{3}a}{2}, \frac{-a}{2}, 0\right), (5)$$

ماتریس هامیلتونی با در نظرگرفتن بردارهای انتقال شبکه ب

صورت زیر نوشته می شود:



بیستمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و ششمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران ۸ تا ۱۰ بهمن ماه۱۳۹۲ - دانشگاه صنعتی شیراز



در برن نیترید تک لایه انرژی درون سایتی $\mathcal{E}_{b} = 0.8$ و می باشد.[4]ودر این ماتریس به صورت زیر $\mathcal{E}_{n} = -0.8$ t تعریف می شود:

$$\pm t \sqrt{3 + 2\cos(ak_y) + 3\cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}K_x\right)\cos\left(\frac{a}{2}K_y\right)},(7)$$

که متعلق به منطقه اول بریلوئن می باشد..با در نظر گرفتن رابطه هامیلتونی (6) و سپس حل معادله مشخصه $0 = |I - \lambda I| = 0$ ویژه مقادیرمجاز انرژی به صورت زیر به دست می اید

$$E_{\sigma}(\vec{k}) = \frac{nu-2\mu}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma mu}{2}\right)^{2} + |\phi_{k}|^{2}} \quad (8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$(8)$$

$$\sigma(q = 0, \omega) = \frac{2e^2}{m^2} \sum_{n,m} \int \int \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \frac{|\langle \psi_{mk}|e, p|\psi_{nk} \rangle|^2}{\frac{E_{mk} - E_{nk}}{\hbar}} \frac{(-i)\left[f\left(E_n(\vec{k})\right) - f\left(E_m(\vec{k})\right)\right]}{E_{mk} - E_{nk} - \hbar\omega - io^+}$$
(3)

که در رابطه بالا
$$E_n$$
 معرف ساختار نواری الکترونی دستگاه
می باشد به علاوه $\frac{1}{e^{ar{eta}\,(B-\mu)}+1}$ معرف تابع توزیع
فرمی دیراک می باشد.جهت محاسبه رابطه 9 به گذارهای
بین نواری نیاز داریم.

$$\left(\frac{m}{\hbar}\left[E_{m}(\vec{k})-E_{n}(\vec{k})\right]\frac{1}{N}\sum_{\tau}u_{m\tau}^{*}(\vec{k})\frac{\partial}{\partial k}(u_{n\tau}(k)),(10)\right)$$

در رابطه فوق هم چنین همان ویژه توابع انرژی ماتریس هامیلتونی معادله ۶ می باشند.

هم چنین سهم گذارهای درون نواری بااستفاده ازرابطه زیر به دست می آید.

$$<\psi_n(\vec{k},\vec{r})\left|\frac{p}{m}\right|\psi_n(\vec{k},\vec{r})>=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial k}$$
(11)

جایگذاری روابط ۱۰و۱۱ در رابطه ۹ و حل حدودی انتگرال گیری روی منطقه اول بریلوئن می توان به جذب اپتیکی پی برد.

۳-دستاوردها:

نمودار جذب اپتيكى برن نيتريدبر حسب تغييرات فركانس نور (w/t) را با حضور بر همکنش کولنی طبق رابطه (۹)با محاسبه سهم گذارهای بین نواری وسهم گذارهای درون نواری را به دست می آوریم. مطابق شکل (۲) می بینیم برن نیتریدخاصیت عایق دارد زیرا در نمودار جذب اپتیکی گاف در نمودار مشاهده شده است ولی مطابق شکل(۳)با لحاظ كردن اثر برهمكنش كولني u/t=0.1وu/t=0.2 ,u/t=0.3وu/t=0.4ومغناطش زير شبكه یm=0.8،پهنای گاف در نمودار با افزایش قدرت برهمکتش کولنی کاهش می یابد همانطور که در نمودار (۳)مشاهده می شود با لحاظ کردن اثر برهمکنش ما دو پیک را مشاهده میکنیم که منشا این پیک ها میتواند به دلیل اکسیتونها ایجادشود.درمرحلهبعد مطابق شکل (۴) با u/t=0.2وتغيير mبه دادن قرار m/t=0.2 وm/t=0.4 وm/t=0.4 m/t=0.8 m/t=0.8 m/t=0.8 جذب اپتیکیبرن نیتریدرا بررسی کردهودریافتیم کهافزایش-مغناطش زیر شبکه ی باعث کاهش یهنای گاف در جذب اپتیکی برن نیتریدمی شود.این گذار می تواند به عنوان گذار عایق باندی در نظر گرفته شود.



شکل ۲:جذب اپتیکی برن نیترید تک لایه بدون لحاظ کردن اثر برهمکنش کولنیu/t=0

۴–نتیجه گیری:

نتایج به دست امده از نمودارها نشان میدهد که افزایش بر همکنش کولنی و مغناطش زیرشبکهی باعث کاهش پهنای گاف موجوددرجذب اپتیکی برن نیتریدتک لایه و گذار عایق باندی میشودوبا لحاظ کردن اثر بر همکنش ما دو پیک را در نمودار مشاهده می کنیم که منشا این پیک ها می تواند به دلیل اکسیتونها ایجاد شود.نتیجهی مهم تراین مطالعه کاهش گاف انرژی برانگیختگی های تک ذرهای دستگاه با افزایش قدرت برهمکنش هابارد در برن نیترید تک لایه است.

مراجع:

 Materials today, May 2007, V.10, No.5, p.p.30-38
 T.O.Weihong and etal, phy .Rev lett806, 236805(2011)
 P.Fazekas,Lecture Notes on Electron correlation and Magnetism, world scientific ,Singapore,2003
 S.Blase, A. Rubio, S.G. Louie, M.L. Cohen: Europhys. Lett.28, 335(1994); Phys. Rev. B 51, 6868 (1995)
 Grosso, G., and Parravicini, G. P. Solid

State Physics, Academic Press, (2000)



شکل:3جذب اپتیکی برن نیترید تک لایه با لحاظ کردن اثر بر همکنش کولنی u/t=0.2 و u/t=0.2 و u/t=0.4 و u/t=0.4 مغناطش زیر شبکه ی m=0.8 .



شکل ٤:جذب اپتیکی برن نیترید تک لایه با لحاظ کردن اثر بر همکنش کولنیu/t=0.2وومغناطش زیر شبکه ی m/t=0.2 m/t=0.8,m/t=0.6,m/t=0.4