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

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

زیبا آقایی منش [۱] و حامد رضانیا [۲]

[۱] گروه 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 باعث‌کاهش‌گاف 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.

کلید واژه ها: برهمکنش کولنی، جذب اپتیکی ،صفحات برن نیترید، مدل هابارد

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

Ziba Aghaiimanesh[1] and Hamed Rezania[2]

[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

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-20]

۱-مقدمه

برن نیترید هگزاگونال (h-BN) یک ماده لایه ای شبیه به گرافیت و دارای ساختار بلور هگزاگونال است از جنبه الکترونیک، برن نیترید هگزاگونال باشکاف نواری تقریباً ۵/۸ الکترون ولت عایق است.[1]اخیرا محاسبات انجام شده روی 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 ظرفیت این ترکیب لحاظ کرد.[2] .تابع دی الکتریک عرضی بیان کننده پاسخ یک ماده به میدان الکترومغناطیسی اعمال شده 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:

$$H = -\sum_{i,j} t_{ij}\, C^{+}_{i\alpha\sigma} C_{j\beta\sigma} + U_i \sum_{i\alpha} C^{+}_{i\alpha\uparrow} C_{i\alpha\uparrow}\, C^{+}_{i\alpha\downarrow} C_{i\alpha\downarrow} - \mu \sum_{i\alpha\sigma} C^{+}_{i\alpha\sigma}\, C_{i\alpha\sigma}\,, \quad (1) \qquad [3]$$

که در اینجا($c_{i\alpha}$) $c^{t}_{i\alpha}$عملگر خلق وفنای الکترون روی سایت iام با اسپین‌و پتانسیل شیمیایی،پتانسیل برهمکنش دافع موضعی بین الکترونها بااسپین مخالف بوده و اتم A یا B می‌تواندباشدوهمچنین t=2.7= $t^{\alpha\beta}_{ij}$دامنه پرش الکترون از پایه‌ی اتمی ویاخته iام همسایه با بردار است. جمع روی همه‌ی نزدیکترین همسایگان سایتهارا نشان می‌دهد. شرط نیمه پری $\mu = \frac{U}{2}$ [3]در نظر گرفته شده است. با استفاده از تقریب میدان متوسط هامیلتونی برهمکنش الکترون – الکترون‌در مدل هابارد به صورت زیرمعرفی می شود:

$$H_U^{MF} = U \sum_{I,\alpha} \langle n_{i\alpha\uparrow} \rangle n_{i\alpha\downarrow} + U \sum n_{i\alpha\uparrow} \langle n_{i\alpha\downarrow} \rangle \quad , \quad [3] \qquad (2)$$

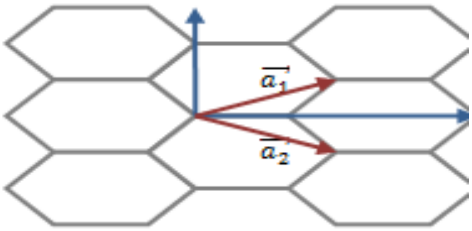
$$\langle n_{j,\sigma} \rangle = \frac{n}{2} \pm \frac{m}{2} \begin{cases} + & j \in A \\ - & j \in B \end{cases} \quad , \quad (3)$$

n وmبه ترتیب غلظت ومغناطش می باشندکه‌در این بررسی n=1شرایط نیمه پری را در هر بلور مهیا می کند وضمنا این قانون‌نیمه‌پری‌یک‌پیش‌نیازبرای‌ظهورفاز پاد فرومغناطیس می باشد.m/t مغناطش‌زیرشبکه ی مجموعه گشتاوردو 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:

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

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



شکل ۱:بردارهای انتقال شبکه

مکان کوتاهترین بردارهای شبکه به شکل زیر است.

$$\overrightarrow{a_1} = \left(\frac{-\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2}, 0\right), \overrightarrow{a_2} = \left(\frac{-\sqrt{3}a}{2}, \frac{-a}{2}, 0\right), \quad (5)$$

ماتریس هامیلتونی با در نظرگرفتن بردارهای انتقال شبکه به صورت زیر نوشته می شود:

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-20]

$$H=\begin{pmatrix} u\left(\frac{n-\sigma m}{2}\right)-\mu & \emptyset_k \\ \emptyset_k^* & u\left(\frac{n+\sigma m}{2}\right)-\mu \end{pmatrix}, (6)$$

در برن نیترید تک لایه انرژی درون سایتی ε_b =0.8t و ε_n =-0.8t می باشد.[4]ودر این ماتریس به صورت زیر تعریف می شود:

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

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

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

برای بررسی خواص اپتیکی برن نیترید از تابع دی الکتریک عرضی استفاده میکنیم، وبه ترتیب بررسی جذب اپتیکی به معنای مطالعه‌ی بخش موهومی ثابت دی الکتریک می باشد بادرنظرگرفتن‌گذارهای‌مستقیم(بدون‌انتقال‌فونون)جذب اپتیکی‌معرفی شده‌ازرابطه‌زیربه‌دست می اید[4]

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

،(۹)

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

سهم گذارهای بین نواری ازرابطه زیر بدست می آید.

$$<\psi_{mk}|e.p|\psi_{nk}>=\left(\frac{m}{\hbar}\right)\left[E_m(\vec{k})-E_n(\vec{k})\right]\frac{1}{N}\sum_\tau u^*_{m\tau}(\vec{k})\frac{\partial}{\partial k}\left(u_{n\tau}(k)\right), (10)$$

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

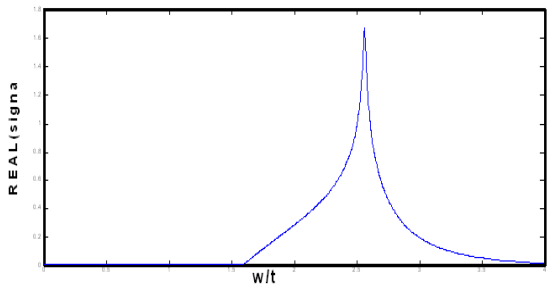
هم چنین سهم گذارهای درون نواری بااستفاده ازرابطه زیر به دست می آید.

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

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 اپتیکی برن نیتریدبر حسب تغییرات فرکانس نور(ω/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 کردن اثر برهمکنش کولنی u/t=0.1 وu/t=0.2 وu/t=0.3 وu/t=0.4 ومغناطش زیر شبکه ی m=0.8،پهنای گاف در نمودار با افزایش قدرت برهمکنش 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 مطابق‌شکل (۴) با قرار دادن u/t=0.2 وتغییرm به ازای m/t=0.2 و m/t=0.4 و m/t=0.6 و m/t=0.8 جذب اپتیکی‌برن نیتریدرا بررسی‌کرده‌ودریافتیم‌که‌افزایش-مغناطش زیر شبکه ی باعث کاهش پهنای گاف در جذب اپتیکی برن نیتریدمی شود.این گذار می تواند به عنوان گذار عایق باندی در نظر گرفته شود.



[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-20]

شکل ۲:جذب اپتیکی برن نیترید تک لایه بدون لحاظ کردن اثر برهمکنش کولنی u/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:

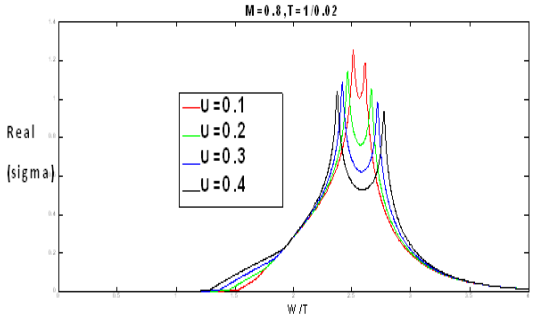
[1] Materials today, May 2007, V.10, No.5, p.p.30-38

[2]T.O.Weihong and etal, phy .Rev lett806 ,236805(2011)

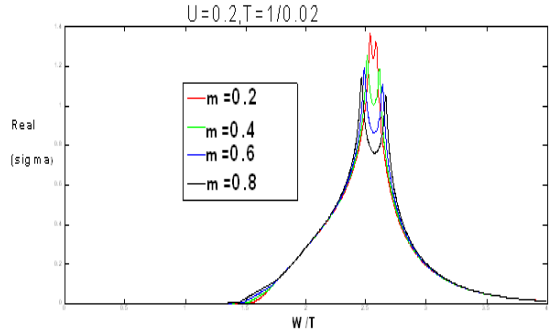
[3]. P.Fazekas,Lecture Notes on Electron correlation and Magnetism, world scientific ,Singapore,2003

[4]X. Blase, A. Rubio, S.G. Louie, M.L. Cohen: Europhys. Lett.**28**, 335(1994); Phys. Rev. B **51**, 6868 (1995)

[5] 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=0.1و u/t=0.2 و u/t=0.3 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 کولنی u/t=0.2ومغناطش زیر شبکه ی m/t=0.2 m/t=0.8,m/t=0.6,m/t=0.4

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-20]