بیست و یکمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و هفتمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۲۳ تا ۲۵ دی ماه ۱۳۹۳، دانشگاه شهید بهشتی

بررسی خواص نوری گرافن تحت تغییر پتانسیل شیمیایی

احسان فارسی نیا, عبدالناصر ذاکری

بخش فیزیک, دانشکده علوم, دانشگاه شیراز

چکیده – در این مقاله اثر جابجایی پتانسیل شیمیایی بر خواص نوری گرافن در دمای *300 K* بررسی شده است که برای این کار رابطه پتانسیل شیمیایی و چگالی الکترونی بر واحد سطح را بدست آورده ایم سپس اثر تزریق الکترون توسط گیت یک ترانزیستور نوری را بر پتانسیل شیمیایی بررسی و اثر آن را بر خواص نوری گرافن تحقیق نموده ایم و در پایان اثر دما بر پتانسیل شیمیایی را مطالعه کردیم. نتایج نشان داد تغییر دما از *0 K* به *300 K* تغییری برابر *3 mev* در *0 V* در پتانسیل شیمیایی بوجود آورد.

کلید واژه- پتانسیل شیمیایی, ترانزیستور نوری, خواص نوری, گرافن

Effect of change in chemical potential on optical properties of graphene

Ehsan Farsinia, Abdolnaser Zakery

Dept. of Physics, College of Sciences, Shiraz University, Shiraz 71946-84795, Iran

Abstract- In this paper the effect of shifting the chemical potential on the optical properties of graphene has been investigated at 300 K. For achieving this goal the relation between chemical potential and the electron density is calculated and then effect of electron injection from the gate of a phototransistor on chemical potential is considered and finally effect of chemical potential on optical properties of graphene has been investigated. We also studied effect of temperature on the chemical potential. Result of change in the temperature from 0 K to 300 K is 3 mev change in chemical potential at 0 V.

Keywords: Chemical potential, Phototransistor, Optical properties, Graphene

[Downloaded from opsi.ir on 2026-01-30]

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

۱-مقدمه

از سال ۲۰۰۴ که گرافن بصورت آزمایشگاهی مشاهده شد کارهای تئوری و تجربی زیادی روی آن انجام شد. در کنار این تلاش ها برای شناخت خواص گرافن روش های زیادی هم برای تولید گرافن در مقیاس صنعتی مورد بررسی قرار گرفت. علت توجه زیاد محققان به گرافن این بود که این ماده خواص فوق العاده منحصر بفردی دارد که از جمله این خواص ضخامت بسیار کم آن است که یک اتم بیشتر ضخامت ندارد و با این حال از الماس سخت تر است و همچنین هدایت گرمایی بالایی دارد و در کنار این ویژگی ها ترابری الکتریکی بالستیک را هم داریم و همه این دلایل گرافن را یکی از کاندید های جدی برای جایگزینی سیلیکون در ساخت قطعات الکتریکی مطرح کرده است. گرافن حتی در پزشکی هم مورد استفاده قرار گرفته است و به عنوان مثال گرافن در دارو رسانی در بیماری هایی مانند سرطان کاربرد دارد[1]. یکی از خواص منحصر بفرد گرافن جذب اپتیکی حدود ۲,۳٪ در ناحیه مرئی برای گرافن یک لایه است که با توجه به ضخامت یک اتمی آن بالا است [2]. در گرافن یک لایه, باند ظرفیت و رسانش بدون گاف به هم متصل اند و در حالت خالص پتانسیل شیمیایی صفر دارد اما در عمل به علت قرار گرفتن روی زیر لایه پتانسیل شیمیایی آن غیر صفر است و این پتانسیل شیمیایی میتواند با اعمال ولتاژ الکتریکی تغییر کند. همانطور که گفته شد نوار ظرفیت و رسانش به هم متصل است و به این دلیل سطح پتانسیل شیمیایی در حالت غیر صفر یا درون نوار هدایت قرار دارد یا نوار ظرفیت و این ویژگی نتایج جالب توجهی را دارد. در ادامه در قسمت دوم ما رابطه پتانسیل شیمیایی و چگالی حامل ها را بدست می آوریم و در قسمت سوم ابتدا یک ساختار ترانزیستوری نوری کاربردی برای تغییر حامل ها با ولتاژ را پیشنهاد می دهیم سپس نتایج این تغییر را بر خواص اپتیکی بررسی میکنیم.

۲-بررسی رابطه پتانسیل شیمیایی و چگالی حامل ها

چگالی حالت ها در گرافن بصورت $g_{2d} = \frac{2E}{\pi\hbar^2 v_0^2}$ تعریف میشود که v_0 سرعت فرمی است. حال میتوان چگالی حامل ها بر واحد سطح را از رابطه ۱ و ۲ محاسبه کرد:

$$n_e(\mu) = \int_0^{+\infty} dE g_{2d}(E) f_{2d}(E-\mu) = -\frac{2}{\pi}\left(\frac{K_B T}{\hbar v_0}\right)^2 Li_2\left(-e^{\frac{\mu}{K_B T}}\right) \quad (۱)$$

$$n_h(\mu) = \int_{-\infty}^{0} dE g_{2d}(E)(1-f_{2d}(E-\mu)) = \frac{2}{\pi}\left(\frac{K_B T}{\hbar v_0}\right)^2 Li_2\left(-e^{\frac{-\mu}{K_B T}}\right) \quad (۲)$$

در آن f_{FD} تابع توزیع فرمی-دیراک, K_B ثابت بولتزمن, T دما و μ پتانسیل شیمیایی است. برای محاسبه کل حامل ها بر واحد سطح از $n_s=n_e+n_h$ استفاده میکنیم. تابع بدست آمده در سمت راست پلی لگاریتم است و ما به دنبال یک رابطه دقیق اما با قابلیت محاسبه آسان تر برای پتانسیل شیمیایی هستیم و برای این منظور تابع پلی لگاریتم را بسط می دهیم. در گرافن روی زیر لایه معمولا قدر مطلق پتانسیل شیمیایی اولیه از 0.1 eV بزرگتر است و این یعنی $\left|\frac{\mu}{K_B T}\right| > 1$ است. پس توابع پلی لگاریتم را به ازای μ>0 بصورت $Li_2\left(-e^{\frac{\mu}{K_B T}}\right) = -\frac{\pi^2}{12} - \frac{\left(\frac{\mu}{K_B T}\right)^2}{2}$ و $Li_2\left(-e^{\frac{-\mu}{K_B T}}\right) = -e^{\frac{-\mu}{K_B T}}$ بسط میدهیم. بسط این توابع در دمای 300 K و μ های بالاتر از 0.2 eV تطابق فوق العاده بالا و کمتر از 0.2 eV تا 0 تطابق قابل قبولی با تابع اصلی دارد که شکل ۱ به ازای $0 \le \mu < 0.3(eV)$ رسم شده است. در محاسبه n_s جمله $-e^{\frac{-\mu}{K_B T}}$ تاثیر ناچیزی در محاسبه دارد و می توان از آن صرفنظر کرد. پس رابطه نهایی برای n_s بصورت ۳ است:

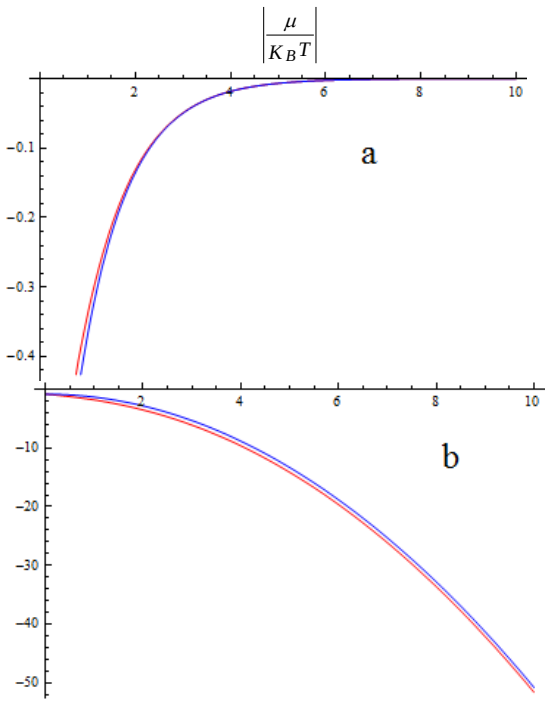
$$n_s = \frac{2}{\pi}\left(\frac{K_B T}{\hbar v_0}\right)^2 \left(\frac{\pi^{12}}{12} + \frac{\left(\frac{\mu}{K_B T}\right)^2}{2}\right) \quad (۳)$$

۳-خواص اپتیکی گرافن تحت تغییر پتانسیل شیمیایی

ما برای طراحی ترانزیستور نوری مورد نیاز برای تغییر در خواص نوری گرافن که حاصل تغییر در پتانسیل شیمیایی آن است ساختار زیر را پیشنهاد می دهیم. توجه شود که

[Downloaded from opsi.ir on 2026-01-30]

همه اجزا در مادون قرمز نزدیک شفاف اند. برای گیت



شکل ۱: تابع بسط داده شده آبی است و تابع اصلی (پلی لگاریتم) قرمز

برای a- $Li_2(-e^{\frac{-\mu}{K_B T}})$ و b- $Li_2(-e^{\frac{\mu}{K_B T}})$

In_2O_3 با ضخامت 444 nm وضریب شکست 1.9 [3] و اکسید TiO_2 با ضخامت 15 nm و ضریب شکست 2.4 [4] انتخاب شده است. کانال این ترانزیستور گرافن رشد هم بافته روی زیر لایه 4H-SiC(0001) با چگالی الکترونی 6.8×10^{12} cm^{-2} (در دمای 300 K) است[5]. برای محاسبه پاسخ اپتیکی گرافن به موج فرودی, بازتاب r و عبور t را محاسبه بعد جذب را بدست آوردیم. در ساختار ما دو لایه نازک In_2O_3 و TiO_2 داریم که بعد از نوشتن شرایط مرزی ماتریس انتقال بصورت

$$m_j = \begin{pmatrix} Cos(\Delta_j) & \frac{iSin(\Delta_j)}{\gamma_j} \\ i\gamma_j Sin(\Delta_j) & Cos(\Delta_j) \end{pmatrix}$$

بدست آمد و:

$$t = \frac{2\gamma_0}{m11\gamma_0 + m12\gamma_0(\gamma_s+\sigma) + m21 + m22(\gamma_s+\sigma)} \quad (۴)$$

$$r = \frac{m11\gamma_0 + m12\gamma_0(\gamma_s+\sigma) - m21 - m22(\gamma_s+\sigma)}{m11\gamma_0 + m12\gamma_0(\gamma_s+\sigma) + m21 + m22(\gamma_s+\sigma)} \quad (۵)$$

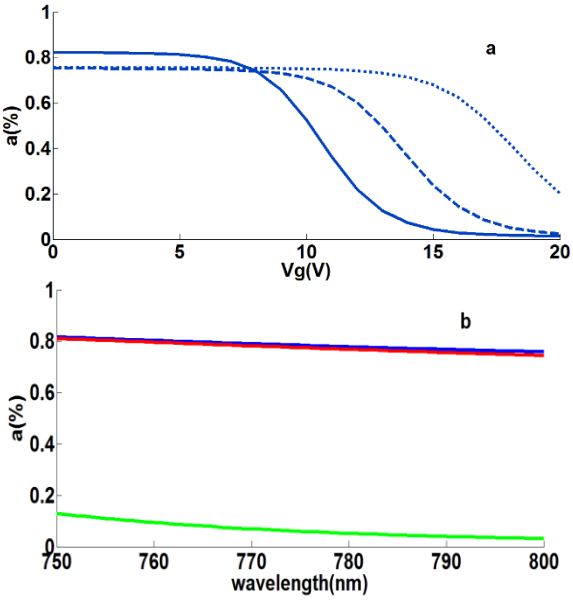
که عبور t و بازتاب r است و پارامترها بصورت $\gamma_j = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}}$ و $\Delta_j = \frac{2\pi}{\lambda_0} n_j d_j$ و در آن ثابت گذردهی خلا ε_0 , μ_0 ثابت تراوایی خلا, λ_0 طول موج پرتو تابانده شده, n_j ضریب شکست و d_j ضخامت فیلم نازک مورد نظر و γ_s مربوط به زیر لایه SiC و γ_0 مربوط به هوا است. σ رسانندگی گرافن است که از مرجع [6] استفاده شده است. برای محاسبه عبور و بازتاب از فصل مشترک هوا و SiC از روابط فرنل استفاده می کنیم. گفتیم که n_s کل چگالی بار بر واحد سطح شامل الکترون و حفره است که برای نمونه در نظر گرفته شده $n_{s0}=6.8\times10^{12}$ cm^{-2} است و این میزان را آثاری نظیر بارهای موجود در فصل مشترک TiO_2 و گرافن و اثر ولتاژ باند صاف که ناشی از اختلاف تابع کار گرافن [7] و In_2O_3 [8] است تحت تاثیر قرار می دهد که اولی را بسیار ناچیز فرض کردیم و دومی بسیار کم است. پس برای محاسبه بار ناشی از گیت رابطه ۶ را داریم [9]:

$$n_{sg} = n_g - n_q\left(\sqrt{1+\frac{2n_g}{n_q}} - 1\right) \quad (۶)$$

و $n_g = \frac{C_0|V_g|}{q}$ که در آن C_0 ظرفیت بین گیت و گرافن, V_g ولتاژ اعمالی و q بار الکترون است و $n_q = \left(\frac{\pi}{2}\right)\left(\frac{C_0\hbar v_0}{q^2}\right)^2$ ناشی از ظرفیت کوانتومی است که سرعت فرمی 10^6 m/s است. در گرافن بعد از اعمال ولتاژ از طریق گیت تعداد حامل ها تغییر می کند. در اینجا به علت اعمال ولتاژ مثبت تعداد آنها در نوار رسانش افزایش یافته و سطح پتانسیل شیمیایی را افزایش می دهند. حال برای محاسبه کل چگالی بار از $n_s=n_{s0}+n_{sg}$ استفاده میکنیم. در محاسبات فرض شده موج از طرف In_2O_3 وارد و از SiC خارج می شود و دمای مورد بررسی 300 K است. رسانندگی گرافن دو بخش داخل نواری و بین نواری دارد که رسانندگی داخل نواری در مادون قرمز دور و رسانندگی بین نواری در مادون قرمز نزدیک و میانی غالب است. همانطور که در شکل ۲ مشاهده می شود ما از مادون قرمز نزدیک استفاده کرده ایم. در شکل 2-a ضریب جذب a برحسب ولتاژ گیت Vg رسم شده است و همانطور که مشاهده می شود به عنوان مثال در طول موج 1000 nm جذب, در صفر ولت, ۰,۸٪ و در ۲۰ ولت حدود صفر است. علت این تغییرات به پتانسیل شیمیایی مربوط است که با افزایش آن انتقال بین نواری غیر ممکن می شود و علت آن انسداد پاولی است[10]

[Downloaded from opsi.ir on 2026-01-30]

که بر اساس آن انرژی کمتر از |2μ| امکان انتقال بین نواری را ندارد و تفسیر آن این طور است که ساختار باندی گرافن



شکل ۲ : a-تغییرات ضریب جذب به ازای طول موج 1000 nm خط , 900 nm خط چین و 800 nm نقطه چین b- تغییرات ضریب جذب به ازای طول موج های مختلف در ولتاژ 0 V آبی, 10 V قرمز و 20 V سبز

متقارن و بدون گاف است و به این دلیل وقتی الکترون میخواهد از مکانی با فاصله انرژی E- از نقطه دیراک در نوار ظرفیت به مکانی داخل نوار رسانش برود,(به علت تقارن و گاف صفر) این مکان هم دارای همان انرژی یعنی E ولی بالای نقطه دیراک است پس در نتیجه انرژی لازم برای این انتقال باید |2E| باشد. حال اگر پتانسیل شیمیایی را افزایش دهیم(بوسیله اعمال ولتاژ مثبت) به علت اصل طرد پاولی تنها الکترون به مکانی در نوار رسانش امکان انتقال دارد که آنجا خالی باشد یعنی این نقطه حداقل روی سطح پتانسیل شیمیایی یا بالاتر از آن است و چون پتانسیل شیمیایی از نقطه دیراک اندازه گیری میشود طبق استدلال قبل باید انرژی داده شده به الکترون حداقل |2μ| باشد. در شکل 2-b جذب به ازای ولتاژهای مختلف در طول موج های مختلف رسم شده و مثلا در 20 V به ازای 750 nm جذب داریم اما به ازای 800 nm جذب صفر است که انسداد پاولی این نتیجه را تفسیر می کند. اگر در نتایج حاصل از رابطه 3 (بدون اعمال ولتاژ) پتانسیل شیمیایی در دمای 0 K و دمای 300 K را مقایسه کنیم مشاهده می شود که در دمای 0 K پتانسیل شیمیایی مقدار 487 meV و در دمای 300 K مقدار 484 meV را دارد و این یعنی دما اثر بسیار کمی بر پتانسیل شیمیایی دارد. سیستم پیشنهادی ما شفافیت بالایی در مادون قرمز نزدیک دارد و همچنین مشاهده کردیم رسانندگی گرافن به راحتی با ولتاژ کنترل می شود که این ویژگی ها می تواند در ساخت مدولاتورهای نوری [11] و آشکار سازهای نوری مورد استفاده قرار گیرد که برای افزایش جذب نوری می توان از نانو ساختار در گرافن یا چند لایه گرافن استفاده کرد.

۴-نتیجه گیری

در گرافن یک لایه به علت عدم وجود گاف, جابجایی پتانسیل شیمیایی می تواند اثر زیادی بر جذب نوری در این ماده بگذارد و ما با همین اثر توانستیم جذب گرافن را تا حدود صفر کم کنیم و این کار با تزریق الکترون از گیت یک ساختار ترانزیستور نوری که در مادون قرمز نزدیک شفاف بود, انجام شد و همچنین مشاهده کردیم که اثر دما بر پتانسیل شیمیایی بسیار کم است پس اثر ناچیزی بر خواص نوری دارد.

مراجع

[1] K. Muthoosamy, R.G. Bai, S. Manickam, *Graphene and Graphene Oxide as a Docking Station for Modern Drug Delivery System*. **Current drug delivery** 11, 1 (2014).

[2] Soldano, Caterina, Ather Mahmood, and Erik Dujardin. *Production, properties and potential of graphene*. **Carbon** 48, 2127 (2010).

[3] L. Miao, S. Tanemura, Y. G. Cao, G. Xu, *Spectroscopic ellipsometry study of In2O3 thin films. Journal of Materials Science*. **Materials in Electronics** 20, 71 (2009).

[4] A. Suchodolskis, A. Reza, V. Bukauskas, A. Mironas, A. Setkus, I. Simkiene, *Optical Study of Ultrathin TiO2 Films for Photovoltaic and Gas Sensing Applications*. **Materials Science** 20, 150 (2014).

[5] E. Pallecchi, F. Lafont, V. Cavaliere, F. Schopfer, D. Mailly, W. Poirier, A. Ouerghi, *High Electron Mobility in Epitaxial Graphene on 4H-SiC(0001) via post-growth annealing under hydrogen*. **Scientific reports** 4 (2014).

[6] J. M. Dawlaty, S. Shivaraman, J. Strait, P. George, M. Chandrashekhar, F. Rana, M. G. Spencer, D. Veksler, Y. Chen. *Measurement of the optical absorption spectra of epitaxial graphene from terahertz to visible*. ***Applied Physics Letters*** 93, 131905 (2008).

[7] G. Giovannetti, P. Khomyakov, G. Brocks, V. Karpan, J. Van-Den-Brink, P. Kelly, *Doping graphene with metal contacts*. **Physical Review Letters** 101, 026803 (2008).

[8] O. Lang, C. Pettenkofer, J. F. Sánchez-Royo, A. Segura, A. Klein, W. Jaegermann, *Thin film growth and band lineup of In2O3 on the layered semiconductor InSe*. **Journal of Applied Physics** 86, 5687 (1999).

[9] T. Fang, A. Konar, H. Xing, D. Jena, *Carrier statistics and quantum capacitance of graphene sheets and ribbons*. **Applied Physics Letters** 91, 092109 (2007).

[10] K. F. Mak, L. Ju, F. Wang, T. F. Heinz, *Optical spectroscopy of graphene: From the far infrared to the ultraviolet*. **Solid State Communications** 152, 1341 (2012).

[11] B. Sensale-Rodriguez, R. Yan, M. M. Kelly, T. Fang, K. Tahy, W. S. Hwang, D. Jena, L. Liu, H. G. Xing. *Broadband graphene terahertz modulators enabled by intraband transitions*, **Nature communications** 3, 780 (2012).

[Downloaded from opsi.ir on 2026-01-30]