



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 در نانوساختار دوبعدی گرافاین GY5 در دو راستای نور فرودی موازی و عمود بر صفحه

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 ساختار گرافاین 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، نشان دهنده وجود چهار بیشینه جذب در انرژی‌های کمتر از ۱۲ eV است و برای انرژی‌های بالاتر از آن تقریباً جذب وجود ندارد. در مورد نور تابیده شده با قطبش عمود بر صفحه، نیز یک پیک وجود دارد. ضمن اینکه اعمال میدان الکتریکی تأثیری در ساختار نواری و جذب اپتیکی نداشته است.

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

Investigation of Optical absorption in Two-Dimensional GY5 Graphyne nanostructure for two parallel and perpendicular polarized light

Hamed Jafarzadeh, Roghaye Hosseini, and Sara Alesheikh

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 cone at 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.

مقدمه

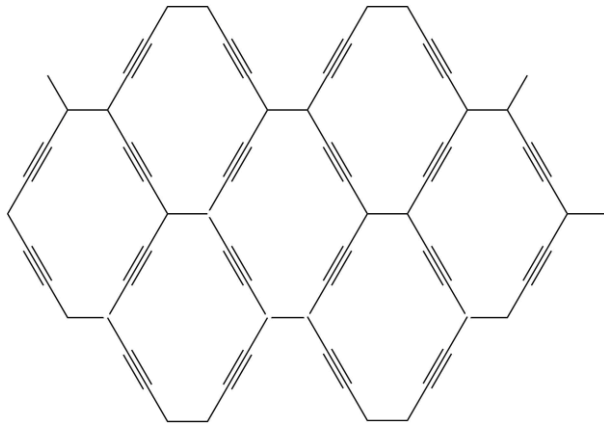
گرافن در سال ۲۰۰۴ به عنوان یک ساختار دوبعدی کربنی که ویژگی‌های فیزیکی منحصر بفردی داشت مطرح شد. پس از آن و به مرور زمان تلاش برای پیش بینی ترکیبات دوبعدی دیگری که بتوانند مانند گرافن ویژگی‌های فیزیکی جذابی برای پژوهش گران داشته باشند، ادامه یافته است. در این میان گرافین‌ها و گرافدین‌ها با توجه به ساختار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

این بررسی‌ها می‌تواند 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 گرافین‌ها 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.

گرافین $GY5$

در شکل ۱ ساختار دوبعدی کربنی گرافین $GY5$ 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 کاملاً 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 $A = 4/87 \text{ \AA}$ است که با یکدیگر زاویه $89/42^\circ$ می‌سازند.

روش محاسبات

در این پژوهش محاسبات ساختار الکترونی و اپتیکی گرافین $GY5$ 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 می‌کند.

در واهلش انجام شده نیروی وارد بر هر اتم کمتر از $0.54 \text{ eV/\AA}$ بود و انرژی همگرایی خودسازگار الکترونی کمتر از 10^{-5} eV در نظر گرفته شد.

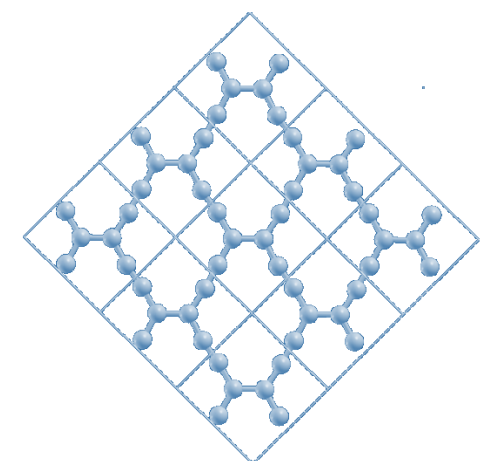
محاسبات به روش خودسازگار و با حل معادلات استاندارد کوهن شم برای مجموعه معینی از نقاط در منطقه اول بریلوئن انجام شد. این نقاط با استفاده از شبکه مونخورست پک برای محاسبات الکترونی $1 \times 25 \times 25$ و برای محاسبات اپتیکی $1 \times 300 \times 300$ در نظر گرفته شد.

توابع موج تخت تا انرژی 370 eV گسترده شده اند. همچنین از برهم کنش اسپین-مدار صرف نظر شد.

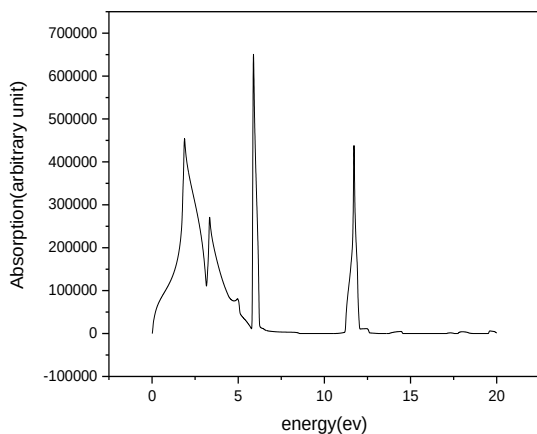
محاسبات جذب اپتیکی برای دو جهت از نور قطبیده انجام شد که یک جهت آن در راستای موازی با صفحه و جهت دیگر در راستای عمود بر آن می باشد. در پایان به منظور بررسی اثر میدان الکتریکی، این میدان نیز به ساختار اعمال شد.

نتایج و بحث

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



شکل ۲: تصویر گرافیکی ساختار گرافاین GY5



شکل ۴: نمودار جذب اپتیکی بر حسب انرژی برای نور تابیده شده با قطبش در صفحه ساختار

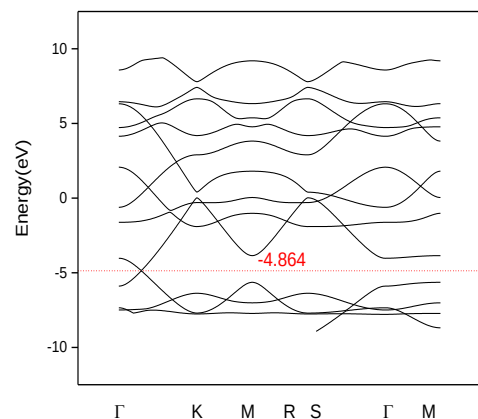
از شکل ۴ مشخص می شود که میزان جذب در ۴ انرژی دارای بیشینه می باشد. این مقادیر انرژی به ترتیب عبارتند از:

$$11/71 \text{ eV}, 1/89 \text{ eV}, 3/348 \text{ eV}, 5/88 \text{ eV}$$

ضمن اینکه در انرژی های بیشتر از $12/5 \text{ eV}$ میزان 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 الکترون ها با گرفتن انرژی فوتون های تابیده شده از

در شکل ۳ ساختار نواری الکترونی بدست آمده از محاسبات نشان داده شده است.



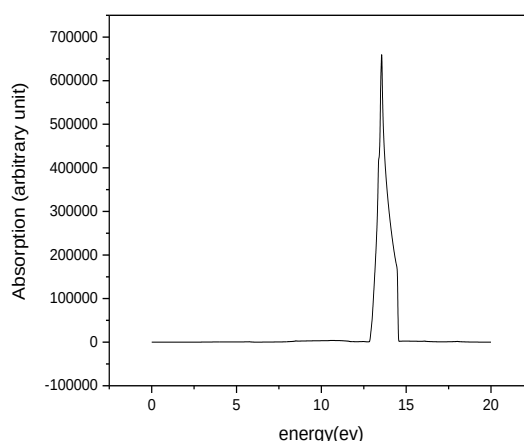
شکل ۳: ساختار نواری الکترونی GY5

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 می‌شود.

سپس در انرژی‌های بیشتر از $12/5 \text{ eV}$ با کاهش احتمال گذار میزان جذب نیز کاهش می‌یابد.

در شکل ۵ نمودار جذب اپتیکی بر حسب انرژی برای نور تابیده شده با قطبش عمود بر صفحه ساختار تا انرژی 20 eV ، نشان داده شده است.



شکل ۵: نمودار جذب اپتیکی بر حسب انرژی برای نور تابیده شده با قطبش عمود بر صفحه ساختار

با توجه به شکل ۵ مشاهده می‌شود که میزان جذب اپتیکی برای نور تابیده شده با قطبش عمود بر صفحه، تنها یک پیک برجسته دارد که در انرژی $13/55 \text{ eV}$ اتفاق می‌افتد و سایر پیشنهادها 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 پیوندهای π 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 کاملاً دوبعدی و صفحه ای GY5 باشد. به عبارت دیگر عدم وجود فراز و فرود در مکان اتم‌ها در این صفحه موجب عدم تغییر پتانسیل الکتریکی حاصل از میدان الکتریکی خارجی بر روی هر کدام از اتم‌ها می‌شود و لذا 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 $12/5 \text{ eV}$ تقریباً جذب وجود ندارد. ضمن اینکه با اعمال میدان الکتریکی هیچ تغییری در ویژگی‌های 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 graphdynes", *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.
- [4] جعفرزاده، حامد، رضایی رکن آبادی، محمود، شاه طهماسبی، ناصر، مطالعه ساختار نواری بتا گرافاین نانورویان و بررسی اثر میدان الکتریکی بر روی آن، کنفرانس 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.