



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 بلندبرد پادفرومغناطیس نحوه تغییرات جذب اپتیکی مورد بررسی قرار گرفته 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 و مغناطش زیر شبکه‌ی باعث کاهش گاف انرژی در جذب اپتیکی برن نیترید می شود. بنابراین نتایج گذار فاز عایق باندی را نشان می دهد و با افزایش قدرت بر همکنش کولنی و مغناطش 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 Aghaiiianesh¹ 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

نیمه پری $\mu = \frac{v}{2}$ [3] در نظر گرفته شده است. با استفاده از تقریب میدان متوسط هامیلتونی برهمکنش الکترون - الکترون در مدل هابارد به صورت زیر معرفی می شود:

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

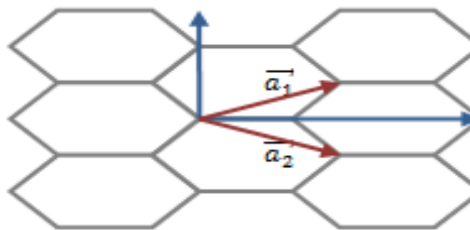
$$\langle n_{j,\sigma} \rangle = \frac{n}{2} \pm \frac{m}{2} \begin{cases} + & j \in A \\ - & j \in B \end{cases}, \quad (3)$$

n و m به ترتیب غلظت و مغناطش می باشند که در این بررسی $n=1$ شرایط نیمه پری را در هر بلور مهیا می کند و ضمناً این قانون نیمه پری یک پیش نیاز برای ظهور فاز 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:

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

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



شکل ۱: بردارهای انتقال شبکه

مکان کوتاهترین بردارهای شبکه به شکل زیر است.

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2}, 0 \right), \vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}, -\frac{a}{2}, 0 \right), \quad (5)$$

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

برن نیتريد هگزگونال (h-BN) یک ماده لایه ای شبیه به گرافیت و دارای ساختار بلور هگزگونال است از جنبه الکترونیک، برن نیتريد هگزگونال باشکاف نواری تقریباً $5/8$ الکترون ولت عایق است. [1] اخیراً 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 الکترونیهای لایه ظرفیت این ترکیب لحاظ کرد. [2]. تابع دی الکتريک عرضی بیان کننده پاسخ یک ماده به میدان الکترومغناطیسی اعمال شده به صورت 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 نیتريد تک لایه و ظهور طبیعت گذار فاز عایق باندی را در شبکه برن نیتريد تک لایه را بررسی کرد. در این مطالعه براساس روش میدان متوسط کلاسیکی تاثیر جمله بر همکنش کولنی را روی طیف اپتیکی برن نیتريد 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 نیتريد است.

۲-روشهای محاسبات

مدل هابارد به عنوان مدل مناسب جهت توجیه گذار فاز فلز - عایق در 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 هابارد برای شبکه شانه عسلی به صورت زیر معرفی می شود:

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

که در اینجا $c_{i\alpha}^{\dagger}$ ($c_{i\alpha}$) عملگر خلق و فنا ی الکترون روی سایت i ام با اسپین و پتانسیل شیمیایی، پتانسیل برهمکنش دافع موضعی بین الکترونها با اسپین مخالف بوده و اتم A یا B می تواند باشد و همچنین $t_{ij}^{\alpha\beta} = t = 2.7$ دامنه پرش الکترون از پایه ای اتمی و یاخته i ام همسایه با بردار است. جمع روی همه ی نزدیکترین همسایگان سایتها را نشان می دهد. شرط

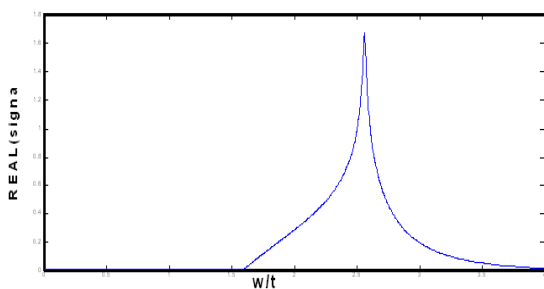
هم چنین سهم گذارهای درون نواری با استفاده از رابطه زیر به دست می آید.

$$\langle \psi_n(\vec{k}, \vec{r}) | \frac{p}{m} | \psi_n(\vec{k}, \vec{r}) \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial k} \quad (11)$$

جایگذاری روابط ۱۰ و ۱۱ در رابطه ۹ و حل حدودی انتگرال گیری روی منطقه اول بریلون می توان به جذب اپتیکی پی برد.

۳-دستاوردها:

نمودار جذب اپتیکی برن نیتريدبر حسب تغییرات فرکانس نور (ω/t) را با حضور برهمکنش کولنی طبق رابطه (۹) با محاسبه سهم گذارهای بین نواری و سهم گذارهای درون نواری را به دست می آوریم. مطابق شکل (۲) می بینیم برن نیتريدخاصیت عایق دارد زیرا در نمودار جذب اپتیکی گاف در نمودار مشاهده شده است ولی مطابق شکل (۳) با لحاظ کردن اثر برهمکنش کولنی $u/t=0.2$ و $u/t=0.1$ و $u/t=0.4$ و $u/t=0.3$ و مغناطش زیر شبکه $m=0.8$ ، 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 می تواند به دلیل اکسیتونها ایجاد شود. در مرحله بعد مطابق شکل (۴) با قرار دادن $u/t=0.2$ و تغییر m به ازای $m/t=0.8$ و $m/t=0.6$ و $m/t=0.4$ و $m/t=0.2$ جذب اپتیکی برن نیتريدرا بررسی کرده و دریافتیم که افزایش مغناطش زیر شبکه ی باعث کاهش پهنای گاف در جذب اپتیکی برن نیتريد می شود. این گذار می تواند به عنوان گذار عایق باندی در نظر گرفته شود.



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

در برن نیتريد تک لایه انرژی درون سایتی $\epsilon_b = 0.8t$ و $\epsilon_n = -0.8t$ می باشد. [4] و در این ماتریس به صورت زیر تعریف می شود:

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

که متعلق به منطقه اول بریلون می باشد. با در نظر گرفتن رابطه هامیلتونی (6) و سپس حل معادله مشخصه $\det|H - \lambda I| = 0$ ویژه مقادیر مجاز انرژی به صورت زیر به دست می آید

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

برای بررسی خواص اپتیکی برن نیتريد از تابع دی الکتریک عرضی استفاده میکنیم، و به ترتیب بررسی جذب اپتیکی به معنای مطالعه ی بخش موهومی ثابت دی الکتریک می باشد بادر نظر گرفتن گذارهای مستقیم (بدون انتقال فونون) جذب اپتیکی معرفی شده از رابطه زیر به دست می آید [4]

$$\sigma(q = 0, \omega) = \frac{2e^2}{m^2} \sum_{n,m} \int \int \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \frac{|\langle \psi_{mk} | e \cdot p | \psi_{nk} \rangle|^2}{\frac{E_{mk} - E_{nk}}{\hbar}} \frac{(-i) [f(E_n(\vec{k})) - f(E_m(\vec{k}))]}{E_{mk} - E_{nk} - \hbar\omega - i0^+} \quad (9)$$

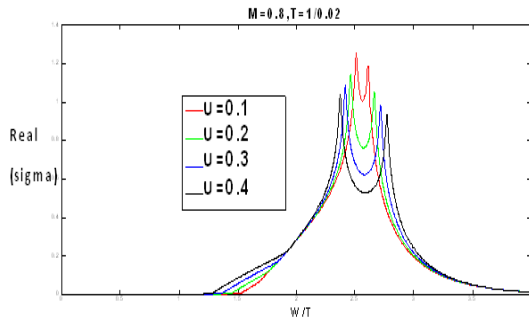
که در رابطه بالا E_n معرف ساختار نواری الکترونی دستگاه می باشد به علاوه $f(E) = \frac{1}{e^{\beta(E - \mu)} + 1}$ معرف تابع توزیع فرمی دیراک می باشد. جهت محاسبه رابطه 9 به گذارهای بین نواری نیاز داریم.

سهم گذارهای بین نواری از رابطه زیر بدست می آید.

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

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

شکل ۲: جذب اپتیکی برن نیتريد تک لایه بدون لحاظ کردن اثر
برهمکنش کولنی $u/t=0$



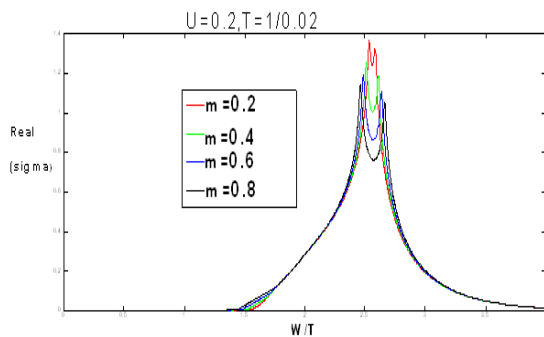
۴- نتیجه گیری:

نتایج به دست آمده از نمودارها نشان میدهد که افزایش برهمکنش کولنی و مغناطش زیرشبهی باعث کاهش پهنای گاف موجود در جذب اپتیکی برن نیتريد تک لایه و گذار عایق باندی می شود و با لحاظ کردن اثر برهمکنش ما دو پیک را در نمودار مشاهده می کنیم که منشا این پیک ها می تواند به دلیل اکسیتونها ایجاد شود. نتیجه ی مهم تر این مطالعه کاهش گاف انرژی برانگیختگی های تک ذره ای دستگاه با افزایش قدرت برهمکنش هابارد در برن نیتريد تک لایه است.

مراجع:

- [1] Materials today, May 2007, V.10, No.5, p.p.30-38
- [2] T.O. Weihong and et al, phy. Rev lett 806, 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 ۳: جذب اپتیکی برن نیتريد تک لایه با لحاظ کردن اثر برهمکنش کولنی $u/t=0.1$ و $u/t=0.2$ و $u/t=0.3$ و $u/t=0.4$ مغناطش زیر شبکه ی $m=0.8$.



شکل ۴: جذب اپتیکی برن نیتريد تک لایه با لحاظ کردن اثر برهمکنش کولنی $u/t=0.2$ و مغناطش زیر شبکه ی $m/t=0.2$ و $m/t=0.4$ و $m/t=0.6$ و $m/t=0.8$.