بیست و پنجمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و یازدهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه شیراز،
شیراز، ایران.
۱۱-۹ بهمن ۱۳۹۷

مطالعه تغییرات خواص اپتیکی گرافن حاوی ناخالصی سلنیوم Se با درصد های مختلف

یداله صفایی اردکانی، محمود مرادی

گروه فیزیک، پردیس دانشکده علوم، دانشگاه شیراز، میدان ارم، شیراز

چکیده – در این مقاله، گرافن حاوی ناخالصی Se برای در صدهای 2% ، 3% ، 5.5% و 12.5% مورد مطالعه قرار گرفته ا ست. در مورد طیف جذبی برای محدوده ماوراء بنفش در سه مورد ناخالا صی 2% ، 3% و 5.5% دو قله در حوالی 12.58eV و 17.44eV داریم که این رفتار را میتوان به گرافن نسبت داد. در مورد ناخالصی 12.5% بجز قله 12.37eV ، که رفتاری مثل سایر ساختارها دارد، شاهد افزایش دو قله دیگر و جابجایی زیاد قله 17.44eV هستیم. در محدوده مرئی و حوالی آن برای ناخالصی 2% و 3% هر کدام یک قله و برای 5.5% و 12.5% هر کدام دو قله وجود دارند که میتوانند کاربرد های متعددی در دستگاههای اپتیکی داشته باشند.

کلید واژه- گرافن، ناخالصی، خواص اپتیکی

Study of changes in the optical properties of graphene containing Selenium impurity by changing the percentage of impurity

Yadollah Safaei Ardakani, Mahmood Moradi

Department of Physics, Shiraz University, Eram square, Shiraz

Abstract- In this paper, graphene containing Se impurity was studied for 4 impurities 2%, 3%, 5.5% and 12.5%. In the absorption spectrum for the ultraviolet range, in three cases, impurities of 2%, 3% and 5.5%, we have two peaks at around 12.58eV and 17.44eV, which can be attributed to graphene. In the case of 12.5% impurity other than the 12.37eV peak, which is similar to other structures, two new peaks arise and the peak of 17.44eV has a significant displacement. In the visible range and around it, cases of 2% and 3% impurities have one peak, and for the 5,5% and 12.5% we see two peaks which can have a variety of applications in optical devices, particularly in visible absorption.

Keywords: Graphene, Impurity, Optical properties

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

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-10-30]

مقدمه

فیزیک دوبعدی وکاربردهای آن، همیشه یکی از بحثهای مهم در عرصه فیزیک نظری بوده و هست. گرافن یکی از مصادیق آن است که ساختاری دوبعدی دارد. در سال ۲۰۰۴، آندره گایم و کنستانتین نووسلف، بر خلاف قضیه مرمین-واگنر، موفق به ساختِ گرافن شدند[۱]. گرافن به علت داشتن گاف نواری صفر و نیز خواص جالب در رسانندگی الکتریکی و تحرک‌پذیری حامل‌های بار، کاربردهای مهمی در عرصه اپتیک وفیزیک نیمرسانا پیدا کرده است[۲].

سلنیوم، Se، یکی از عناصر گروه ۶ اصلی میباشد. این عنصر خواص الکترونی و اپتیکی مهمی دارد که باعث شده کاربردهای متنوعی از جمله در سلولهای خورشیدی و صنایع شیشه سازی، داشته باشد[۳].

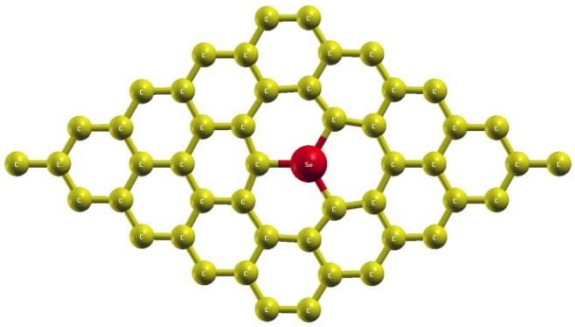
در این مقاله تغییرات خواص اپتیکی گرافن حاوی ناخالصی Se، با تغییر درصد ناخالصی، برای ناخالصی های 2% ، 3% ، 5.5% و 12.5% مطالعه میشود.

روشهای محاسباتی

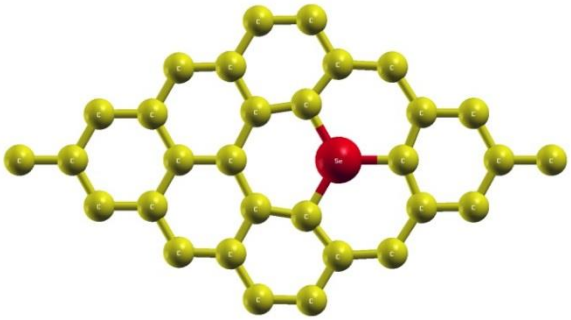
محاسبات، مبتنی بر نظریه تابعی چگالی (DFT) است و از بسته کوانتوم اسپرسو استفاده شده است. در این محاسبات از شبه پتانسیل PBE که حاوی تقریب GGA است بهره گرفته شده است. محاسبات خواص نوری مبتنی بر نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان، TDDFT ، است و برای انجام آن از بسته turbo_eels ،که برای محاسبات پریودیک طراحی شده، استفاده شده است. انرژی جنبشی در 40 Ry قطع شده و برای فضای وارون، مش بندی 7×7×1 در نظر گرفته شده و از Itermax0=2000 و Itermax=20000 استفاده شده است.

نتایج و بحث

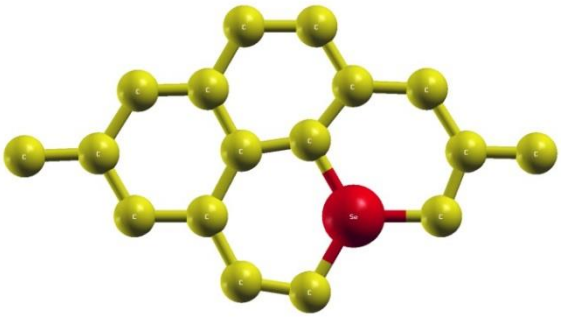
در این مقاله چهار آبَر سلول, super cell , تک لایه گرافن که در آنها جای یک اتم کربن با اتم Se عوض شده بررسی می شوند. این آبَر سلولها عبارتند از (۵×۵) متناظر باناخالصی سلنیوم ۲٪ ، (۴×۴) متناظر با ۳٪ ، (۳×۳) متناظر با ۵,۵٪ و (۲×۲) متناظر با ۱۲,۵٪. در شکلهای ۱ تا ۴ طرحواره هایی از این آبَر سلولها به ترتیب برای چهار حالت ناخالصی ۲٪ ، ۳٪ ، ۵,۵٪ و ۱۲,۵٪ رسم شده اند.



شکل ۱- طرح شماتیک گرافن با ناخالصی سلنیوم (۲٪)



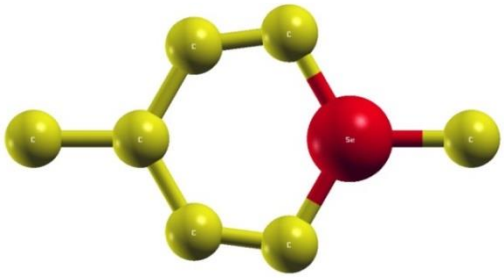
شکل ۲- طرح شماتیک گرافن با ناخالصی سلنیوم (۳٪)



شکل ۳- طرح شماتیک گرافن با ناخالصی سلنیوم (۵,۵٪)

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

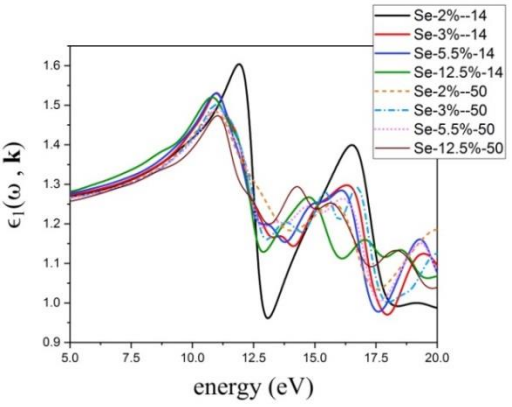
[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-10-30]



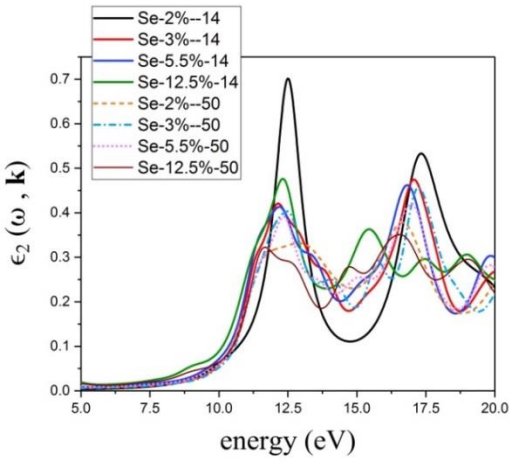
شکل ۴- طرح شماتیک گرافن با ناخالصی سلنیوم (۱۲,۵٪)

برای خواص نوری ابتدا به سراغ دی الکتریک می رویم.

$\epsilon(\omega, \mathbf{k})$ تابع هم زمان فرکانس ω و بردار موج $\vec{\mathrm{k}}$ است. لذا تابع $\epsilon(\omega)$ را به ازای دو بردار موج $\vec{k}_1 = (0,0,0.14)$ و $\vec{k}_2 = (0,0,0.50)$ در بازه 5 تا 20 eV محاسبه کرده ایم. در شکلهای ۵ و ۶ توابع ϵ_1 و ϵ_2 بر حسب فرکانس نشان داده شده اند.



شکل ۵- جزء حقیقی دی الکتریک در محدوده فرا بنفش



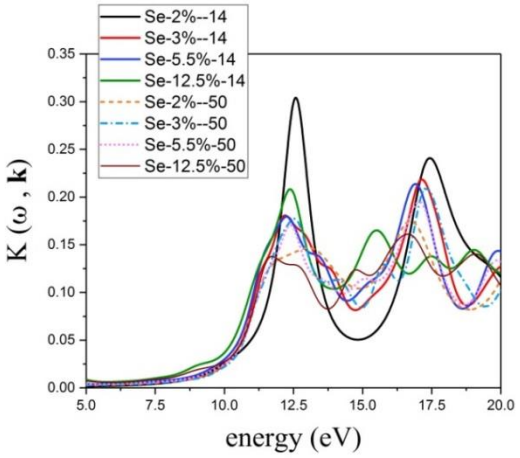
شکل ۶- جزء موهومی دی الکتریک در محدوده فرا بنفش

اکنون میتوان تعدادی از متغیر های اپتیکی مثل ضریب خاموشی، K ، ضریب شکست، n ، و ضریب بازتابش، R ، را محاسبه کرد که نحوه وابستگی آنها به ϵ_1 و ϵ_2 در معادلات (۱)، (۲) و (۳) بیان شده است. در شکل ۷ تابع $\mathrm{K}(\omega)$ به ازای دو بردار موج $\vec{k}_1 = (0,0,0.14)$ و $\vec{k}_2 = (0,0,0.50)$ در بازه 5eV تا 20eV نشان داده شده است.

$$n = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{\frac{1}{2}} + \epsilon_1\right]^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

$$K = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{\frac{1}{2}} - \epsilon_1\right]^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

$$R = \frac{(n-1)^2+K^2}{(n+1)^2+K^2} \quad (3)$$



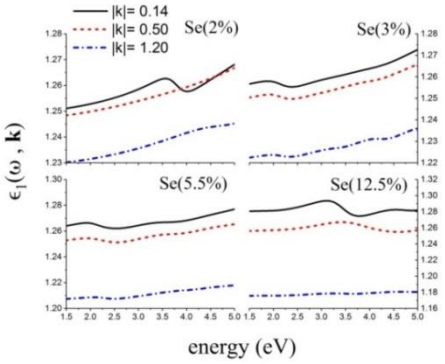
شکل ۷- ضریب خاموشی در محدوده ماوراء بنفش

برای طیف جذبی، شکل ۷، مشاهده میشود که همه ساختارها در حوالی 12.58eV یک قله دارند. این قله در ناخالصی 2% بزرگتر از بقیه می باشد. با افزایش درصد ناخالصی، قله ضعیفتر میشود اما دوباره در 12.5% شروع به رشد میکند. این ساختارها حوالی 17.44eV نیز یک قله دارند. این قله با افزایش درصد ناخالصی کوچکتر شده و به سمت مقادیر پایینتر جابجا میشود. در ناخالصی 12.5% که رفتاری نسبتا متفاوت از دیگران دارد، شاهد دو قله دیگر در 17.48eV و 19.05eV هستیم که قله هایی ملایم با ارتفاع کم می باشند. در ناخالصی 12.5% افزایش |k| باعث میشود که قله 15.5eV به 16.63eV جابجا شود و قله 17.48eV محو شود. در شکلهای ۸ و ۹ و ۱۰ برای محدوده

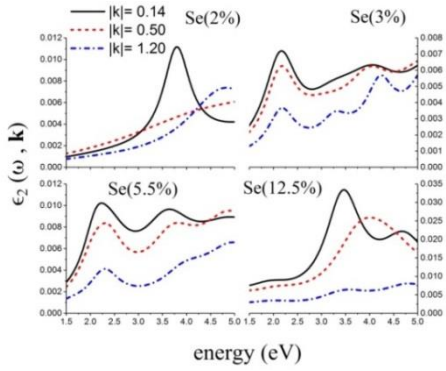
این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-10-30]

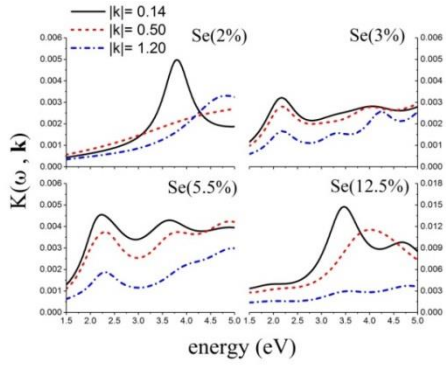
مرئی، نمودارهای ϵ_1 ، ϵ_2 و $K(\omega)$ برای سه بردار موج $\vec{k}_1 = (0,0,0.14)$ ، $\vec{k}_2 = (0,0,0.50)$ و $\vec{k}_3 =$ $(0,0,1.20)$ در بازه 1.5eV تا 5eV نشان داده شده اند.



شکل ۸- نمودار $\epsilon_1(\omega)$ در محدوده مرئی و اطراف آن



شکل ۹- نمودار $\epsilon_2(\omega)$ در محدوده مرئی و اطراف آن



شکل ۱۰- نمودار $K(\omega)$ در محدوده مرئی و اطراف آن

در شکل ۱۰ در ناخالصی 2% حوالی 3.75eV یک قله داریم که با افزایش |k| محو میشود. برای ناخالصی 3% حوالی 2.25eV یک قله داریم که با افزایش |k| ضعیف تر میشود اما از بین نمی رود. برای 5.5% نیز در همین نقطه یک قله با شدت بیشتر داریم. این قله نیز با افزایش |k| از بین نمیرود. در ناخالصی 5.5% یک قله دیگر نیز در حوالی 3.6eV داریم که با افزایش |k| بسیار ضعیف میشود. در مورد ناخالصی 12.5% دو قله در 3.5eV و 4.75eV داریم که هردو با افزایش |k| از بین میروند.

جمع بندی :

در این مقاله گرافن حاوی ناخالصی Se برای درصدهای 2% ، 3% ، 5.5% و 12.5% بررسی میشوند. در طیف جذبی برای محدوده فرابنفش در سه مورد 2% ، 3% و 5.5% دو قله در حوالی 12.58eV و 17.44eV داریم. این رفتار را میتوان به گرافن نسبت داد. در مورد ناخالصی 12.5% بجز قله 12.37eV که مثل سایر ساختارهاست. شاهد پیدایش دو قله دیگر و جابجایی در قله 17.44eV هستیم. در محدوده مرئی، ناخالصی های 2% و 3% یک قله و ناخالصی های 5.5% و 12.5% دو قله دارند. در ناخالصی های 3% و 5.5% با افزایش |k| ، قله ها از بین نمی روند. در ناخالصی های 2% و 12.5% با وجود اینکه قله ها تیزتر هستند اما با افزایش |k| از بین می روند.

منابع :

[1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva,A. A. Firsov,"Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films", Science. 306 (2004) 666–669

[2] Madhuri Sharon and Maheshwar Sharon ,'' Graphene: An Introduction to the Fundamentals and Industrial Applications", Willy (2015)

[3] John R. Rumble,"CRC Handbook of Chemistry and Physics", (98th ed.) CRC Press.(2017-2018)

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-10-30]

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