بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه شهید چمران اهواز،
خوزستان، ایران.
۱۲-۱۴ بهمن ۱۴۰۰

# مطالعه‌ی خواص الکترونی و اپتیکی لایه گرافن ناخالص شده با اتم بور

**مریم مالمیر**

**گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه لرستان، خرم‌آباد، لرستان**

**malmir.m@lu.ac.ir**

**چکیده- مطالعه‌ی حاضر، در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با استفاده از روش امواج تخت بهساخته‌ی خطی با پتانسیل کامل به محاسبه و بررسی ویژگی‌های الکترونی و ساختاری و در چارچوب همین نظریه با استفاده از تقریب فاز کاتوره‌ای(RPA) به بررسی خواص اپتیکی لایه‌ی خالص گرافن و لایه گرافن ناخالص شده با اتم بور می‌پردازد. با جایگزینی یک اتم کربن با یک اتم بور، مشاهده می‌شود که مخروط دیراک در ساختار نواری گرافن حذف می‌شود. بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک برای گرافن خالص در بازه انرژی eV ۴/۲۱ تا eV ۵/۰۲، منفی است و در این بازه انرژی لایه رفتار فلزی دارد، در حالی‌که این بخش برای لایه گرافن ناخالص شده با اتم بور حذف می‌شود همچنین شدت و تعداد پیک‌ها در طیف جذب، بازتاب و تابع اتلاف انرژی برای دو ساختار متفاوت است.**

کلید واژه: خواص اپتیکی، خواص الکترونی، گرافن، نظریه‌ی تابعی چگالی.

# Study of the Electronic and Optical properties of Graphene modified by Boron

**Maryam Malmir**

**Physics group, Faculty of Science, Lorestan University, Khoramabad, Lorestan**

**malmir.m@lu.ac.ir**

**Abstract- In the framework of the density functional theory (DFT) and using the full potential augmented plane wave (FP-LAPW) method, the present study calculates and investigates the electric and structural properties and optical properties with the random phase approximation (RPA) of the pristine graphene and Boron doped graphene. In doped graphene, the Dirac cone will be disappeared. The real part of the dielectric function of the pristine graphene is negative in the energy range of ٤,٢١ eV to ٥,٠٢ Ev, and this structure shows a metallic manner, while this part is removed in Boron doped graphene. The intensity and number of picks are different in the absorption, reflection, and loss spectra of the two structures.**

Keywords: Density functional theory, Electronic properties, Graphene, Optical properties.

[ Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-27 ]

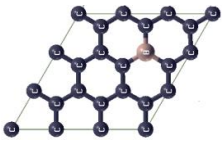
## مقدمه

امروزه مواد دوبعدی به دلیل کاربردهای مختلف در زمینه های الکترونیک، اپتیک و... بسیار مورد توجه دانشمندان هستند. گرافن یک ماده دوبعدی است شامل یک لایه از اتم‌های کربن که در دمای اتاق خواص جالبی همچون بالابودن تحرک حامل‌ها، پایین بودن مقاومت و خواص جالب مکانیکی و اپتیکی است که آن را برای کاربردهای فوتوالکتریک مناسب می‌سازد [۱]. زاو و همکارانش سنسورهای بیولوژیکی و شیمیایی فیبر نوری بر پایه‌ی گرافن را بررسی کردند و ثابت کردند که گرافن در زمینه فیبر نوری بسیار کاربردی است [۲].

در این مطالعه به بررسی خواص الکترونی و اپتیکی لایه گرافن ناخالص شده با اتم بور می‌پردازیم و نشان می‌دهیم که این ساختار پایدار بوده و می‌تواند در زمینه‌ی اپتیک و اپتوالکترونیک کاربرد داشته باشد.

## روش محاسبات

محاسبات با استفاده از روش موج تخت به‌ساخته‌ی خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) برای حل معادلات تک‌ذره‌ی کان-شم در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) و با استفاده از بسته‌ی محاسباتی Wien۲k انجام شده است [۳]. مقادیر RKmax و lmax به‌ترتیب برابر با ۷ و ۱۰ قرار داده شد که R شعاع کوچکترین کره موفین-تین و Kmax بردار قطع در بسط موج‌تخت است. تعداد نقاط k در ناحیه‌ی کاهش‌ناپذیر بریلوئن برای لایه گرافن خالص و لایه ناخالص شده با اتم بور به‌ترتیب در (۱×۱۲×۱۲) ۱۹ و (۱×۱۴×۱۴) ۶۱ نقطه همگرا شدند. برای محاسبه پتانسیل تبادلی-همبستگی از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) با تابعی پردو و همکاران استفاده شد [۴]. موقعیت‌های اتمی و پارامترهای شبکه نیز تا همگرایی ۱/۰ mRy/a.u. بهینه شدند. شکل ۱ ساختار لایه گرافن ناخالص شده در این مطالعه را نشان می‌دهد که شامل یک ابریاخته (۱×۳×۳) است با یک اتم ناخالصی بور. محاسبات اپتیکی با استفاده از کد محاسباتی مذکور و در تقریب فاز کاتوره‌ای (RPA) انجام شده‌اند [۵]. برای جلوگیری از برهمکنش لایه ها خلا ۲۰ آنگستروم در نظر گرفته شده است.



شکل ۱: مدل ابریاخته (۱×۳×۳) گرافن ناخالص شده با اتم بور.

## نتایج

انرژی تشکیل[۱] ساختار لایه ناخالص شده با بور از رابطه‌ی (۱) محاسبه شده:

$$E_{Formation}=E_{system}- E_{graphene}+m\ \mu_{carbon}- n\ \mu_{Boron} \quad (۱)$$

که در آن E ها انرژی‌های کل سیستم ناخالص و گرافن خالص و μ ها پتانسل‌های شیمیایی گرافن خالص و فاز استاندارد کریستال بور هستند. انرژی بستگی برابر با انرژی کل گرافن ناخالص شده با اتم بور منهای انرژی‌های کل لایه‌ی خالص گرافن و اتم بور بوده و مقادیر مربوط به این انرژی ها و اطلاعات ساختاری در جدول ۱ آمده‌اند. منفی بودن انرژی بستگی و انرژی تشکیل گرافن ناخالص شده با اتم بور پایدار بودن ساختار و امکان ساخت آن به روش تجربی را نشان می‌دهد.

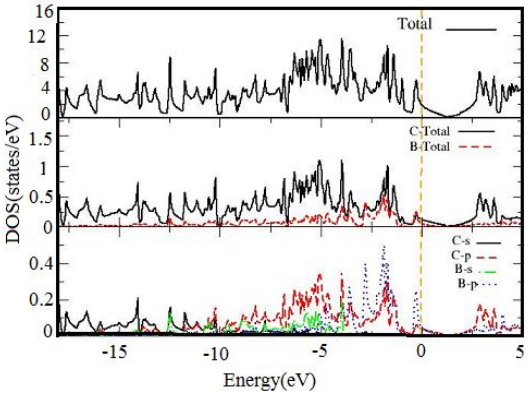
شکل ۲، چگالی حالت های لایه ناخالص شده و شکل ۳ ساختار نواری لایه‌ی خالص و ناخالص شده با اتم بور را نشان می‌دهد. در شکل (۳) الف، اتصال انتهای نوار هدایت و بالای نوار ظرفیت در نقطه‌ی k ناحیه بریلوئن نشان

[۱] Formation Energy



[ Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-27 ]

دهنده‌ی مخروط دیراک لایه‌ی خالص گرافن است که در توافق با مطالعات قبلی است، که با اضافه شدن ناخالصی بور، شکل ۲و ۳ (ب)، این اتصال شکسته شده و سطح فرمی کاملاً نوار هدایت را قطع می‌کند و ساختار نهایی کاملاً فلز خواهد بود. چگالی حالت‌های جزئی ارائه شده در شکل ۲ نشان از غالب بودن الکترون‌های اوربیتال p اتم ناخالصی بور در نزدیکی سطح فرمی دارد.



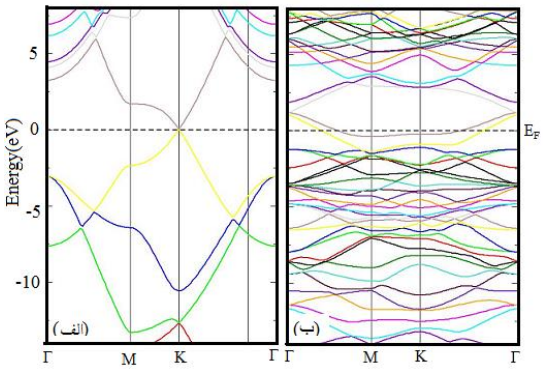

شکل۲: چگالی حالت‌های جزئی و کلی ساختار لایه گرافن دوپ شده با اتم بور.

جدول ۱: طول پیوند، انرژی بستگی و انرژی تشکیل ساختار گرافن خالص و ناخالص شده با اتم بور.

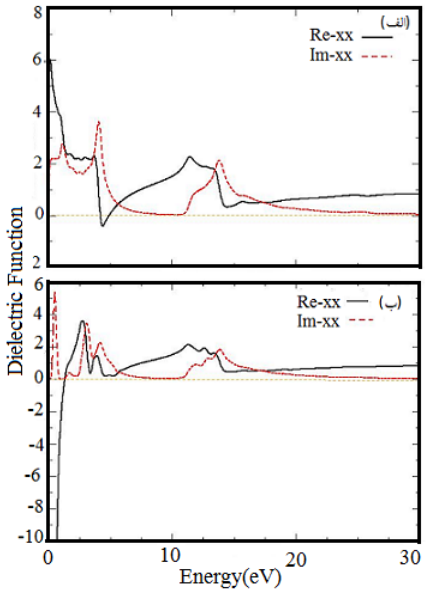
| | طول پیوند (Å) | | انرژی بستگی (eV) | انرژی تشکیل (eV) |
|---|---|---|---|---|
| | C-C | C-B | | |
| گرافن ناخالص | ۱/۴۰<br>۱/۴۲- | ۱/۴۷ | -۸۹۴/۲۵ | -۱۱۹۳/۷ |
| گرافن خالص | ۱/۴۲ | -- | ----- | ------ |

## خواص اپتیکی

خواص اپتیکی لایه‌ی ناخالص شده با اتم بور و لایه‌ی خالص با استفاده از تابع دی‌الکتریک، طیف جذب، طیف بازتاب و طیف خاموشی بررسی شد. شکل ۴ (الف) تابع دی‌الکتریک لایه خالص را نشان می‌دهد که بخش حقیقی آن در بازه انرژی ۴/۲۱eV تا ۵/۰۲ eV، منفی است و این بدان معناست که بردار موج در این ناحیه انرژی، عددی موهومی است و فوتون‌ها با این انرژی اجازه انتشار در لایه خالص گرافن را ندارند و در این بازه انرژی لایه رفتار فلزی دارد. بعد از اضافه‌کردن ناخالصی به لایه، در بازه انرژی مذکور رفتار فلزی دیده نمی‌شود اما در انرژی های پایین مقدار بینهایت فیزیکی خواهد داشت که نشان از فلز بودن در این نواحی انرژی است. بخش موهومی لایه خالص و ناخالص شامل نواحی منفی نیست.




شکل ۳: ساختار نواری (الف) لایه خالص و (ب) لایه دوپ شده با اتم بور.



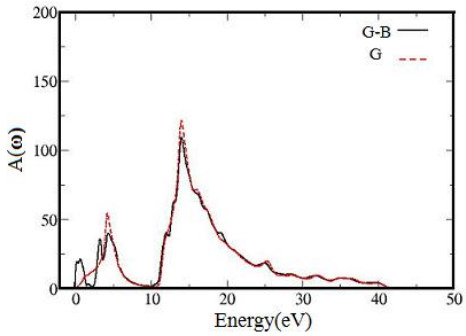

شکل ۴: بخش حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک (الف) لایه‌ی خالص گرافن و (ب) لایه‌ی گرافن با اتم ناخالصی بور.

طیف جذب لایه گرافن خالص (G) و ناخالص (G-B) در شکل ۵ آمده است. ماکزیمم طیف برای هر دو لایه‌ی

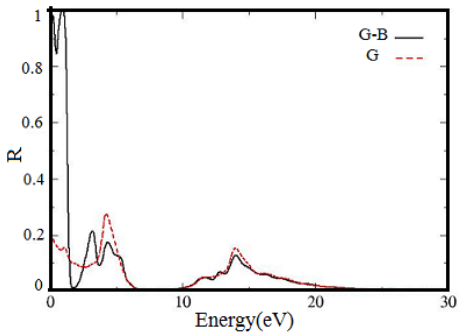


[ Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-27 ]

خالص و ناخالص در ۴/۳۴ و ۱۴/۰۹ الکترون ولت رخ می-دهد که شدت آن‌ها برای لایه‌ی خالص بیشتر است و لایه ناخالص یک پیک اضافی در ۰/۷۱ الکترون ولت دارد. کمتر از ۱۲ الکترون ولت طیف جذب برای لایه‌ی ناخالص بیشتر است که نشان دهنده قابلیت این ساختار در جذب نور مادون قرمز است. بیشترین نرخ جذب برای هر دو ساختار در ۱۴/۰۹ الکترون ولت رخ می‌دهد که نشان دهنده قابلیت بیشتر برای جذب نور مرئی است و بعد از ۴۰ الکترون ولت جذب صفر است.



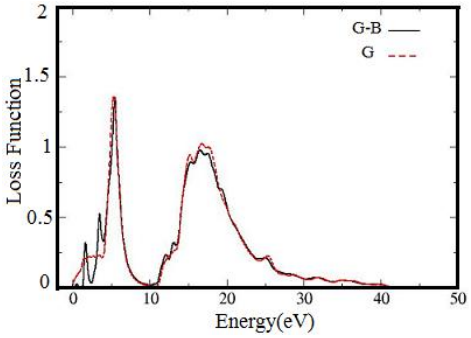

شکل ۵: طیف جذب لایه‌ی خالص (G) و لایه ناخالص (G-B)




شکل ۶: طیف بازتابی گرافن خالص و گرافن ناخالص شده با اتم بور.

شکل ۶، طیف بازتابی لایه گرافن خالص و ناخالص شده با بور را نشان می‌دهد. با مشاهده این طیف به این نتیجه می‌رسیم که گرافن ناخالص شده با بور طیف بازتابی بزرگتری نسبت به گرافن خالص دارد.

شکل ۷ طیف اتلاف انرژی هر دو ساختار لایه گرافن خالص و ناخالص را نشان می‌دهد. برای هر دو ساختار بیشترین اتلاف انرژی به ترتیب در ۵/۴۹ eV و ۱۶/۹ eV رخ میدهد و گرافن ناخالص شده با اتم بور علاوه بر این‌ها دو پیک اتلاف انرژی کوچکتر در ۳/۵۱ eV و ۱/۶۷ eV دارد.




شکل ۷: تابع اتلاف انرژی لایه گرافن خالص(G) و ناخالص شده با اتم بور(G-B).

## نتیجه‌گیری

در این مطالعه با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن، خواص الکترونی، ساختاری و اپتیکی لایه‌ی گرافن خالص و ناخالص شده با اتم بور مورد بررسی قرار گرفت. نمود قله های جدید در طیف ها، نشان داد که این ساختارها مناسب برای کاربردهای اپتیکی و الکترونیکی هستند.

## مرجع‌ها

[۱] 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", J. Sci., Vol. ٣٠٦, pp. ٦٦٦, ٢٠٠٤.

[۲] Y. Zhao, X. Li, X. Zhou, Y. N. Zhang, " Review on the graphene based optical fiber chemical and biological sensors", J. Sensor Actuat B-Chem. Vol. ٢٣١, pp. ٣٢٤, ٢٠١٦.

[۳] P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, S. B. Trickey, " Full-potential, linearized augmented plane wave programs for crystalline systems", Comput. Phys. Commun, Vol. ٥٩, pp. ٣٣٩-٤١٥, ١٩٩٠.

[٤] H. J. Monkhorst , J. D. Pack," Special Points for Brillouin-Zone Integrations", Physical Review B, Vol. ١٣, pp. ٥١٨٨-٥١٩٢, ١٩٧٦.

[ Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-27 ]

**[۵]** S. L. Adler;" Quantum Theory of the Dielectric Constant in Real Solids", Phys. Rev. Vol. ١٢٦, pp. ٤١٣, ١٩٦٢.

[ Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-27 ]