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

مطالعه خواص نوری گرافن دو لایه با ناخالصی های متفاوت و بررسی امکان یافتن پلاسمون های سطحی [gr+Se/gr+X: (X=Ga, P, S)]

یداله صفایی اردکانی، محمود مرادی

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

چکیده – در این مقاله خواص اپتیکی گرافن دو لایه در فاز Bernal با ناخالصی های متفاوت برای ۳ حالت (gr+Se/gr+Ga) ، (gr+Se/gr+P) و (gr+Se/gr+S) محاسبه شده اند. برای مورد (gr+Se/gr+Ga) در دو محدوده، (12.02-12.43eV) با حداکثر عمق 0.318- و (16.22-16.97eV) با حداکثر عمق 0.676- ، جزء حقیقی دی الکتریک منفی است و چون در این دو محدوده جزء موهومی دی الکتریک مثبت است لذا می توانیم این رفتار را دلیل بر تشکیل پلاسمون سطحی بدانیم. برای محدوده (0<E<10eV) طیف جذبی هر سه ساختار تفاوتهای چشمگیری دارند که می توانند در عرصه های مختلف اپتیکی به کار روند.

کلید واژه- گرافن، دولایه، ناخالصی، خواص اپتیکی، پلاسمون

Study of optical properties of bi-layer graphene with different impurities (gr + Se / gr + X: (X = Ga, P, S)) and the study of the possibility of finding surface plasmons

Yadollah Safaei Ardakani, Mahmood Moradi

Department of Physics, Shiraz University, Eram square, Shiraz

Abstract- In this paper, the optical properties of bi-layer graphene in Bernal phase with different impurities are calculated for three cases (gr + Se / gr + Ga), (gr + Se / gr + P) and (gr + Se / gr + S). For the case of (gr + Se / gr + Ga) in two ranges, (12.015-12.425eV) with a maximum depth of -0.318 and (16.215-16.965eV) with a maximum depth of -0.676, the value of ϵ_1 is negative, whereas in these two ranges ϵ_2 is positive, therefore, this behavior is the responsible for the formation of plasmons. For the region of (E <10eV), the absorption spectrums of all three structures have significant differences that are applied in various optical fields.

Keywords: Graphene, Bi-layer, Impurity, Optical properties, Plasmon

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

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-06-19]

مقدمه

از مدتها پیش، روی فیزیک دوبعدی، بحث های نظری جالبی در جریان بوده است. برای اولین بار آندره گایم و کنستانتین نووسلف، موفق به ساختِ گرافن شدند[۱]. گرافن دارای شبکه لانه زنبوری است و فیزیکی دو بعدی دارد. داشتن خواص برجسته در رسانندگی الکتریکی و تحرک‌پذیری حامل‌های بار، گرافن را به ماده‌ای جالب توجه در عرصه اپتیک، فیزیک نیم رسانا و جاذب های گاز تبدیل کرده است[۲]. در سالهای اخیر جدا از بحث گرافن تک لایه، روی ساختارهای چند لایه (با تعداد لایه های کم) از جمله دو لایه ها و انواع فازهای آنها تحقیقات نظری و عملی زیادی انجام شده است[۳].

سلنیوم، Se، یکی از عناصر گروه ۶ اصلی است. این عنصر خواص الکترونی و اپتیکی جالبی داشته و کاربردهای متنوعی در سلولهای خورشیدی و باتریهای لیتیوم-سلنیوم دارد[۴].

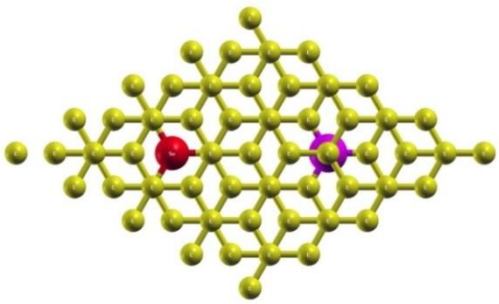
در این مقاله یک اَبَر سلول دو لایه گرافن در فاز Bernal در نظر گرفته شده است. یکی از این لایه ها دارای ناخالصی Se است و دیگری حاوی یک اتم ناخالصی از نوعی دیگر (Ga، P و یا S) می باشد. برای این سه ساختار، دی الکتریک، ضریب جذب و ضریب شکست محاسبه شده اند. از آنجایی که در بحث پلاسمونها روی این مواد، تحقیقات زیادی انجام نشده است، لذا تمرکز ما روی امکان تشکیل پلاسمونهای سطحی در این ساختارهاست.

روش های محاسباتی

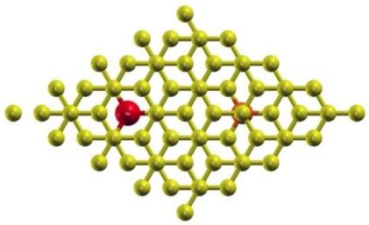
محاسبات ما، مبتنی بر نظریه تابعی چگالی (DFT) است و از بسته کوانتوم اسپرسو استفاده شده است. در این محاسبات از شبه پتانسیل PBE که حاوی تقریب GGA است بهره گرفته شده است. محاسبات خواص نوری مبتنی بر نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان، TDDFT، است که برای انجام آن از بسته turbo_eels، که برای محاسبات بلورهای پریودیک طراحی شده، استفاده شده است. انرژی جنبشی در 40 Ry قطع شده است و برای فضای وارون، مش بندی ۱×۶×۶ در نظر گرفته شده است و از Itermax0=500 و Itermax=20000 استفاده شده است.

نتایج و بحث

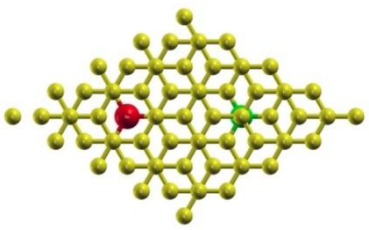
ابتدا یک اَبَر سلول ۱×۴×۴ گرافن دو لایه در فاز Bernal در نظر می گیریم. یکی از این لایه ها حاوی ناخالصی Se است و دیگری یک ناخالصی از نوعی دیگر (Ga ، P و یا S) دارد. در شکلهای ۱ تا ۳ طرحواره هایی از این اَبَر سلولها به ترتیب برای ۳ حالت (gr+Se/gr+Ga)، (gr+Se/gr+P) و (gr+Se/gr+S) رسم شده اند.



شکل ۱- طرح شماتیک از دو لایه (gr+Se/gr+Ga).



شکل ۲- طرح شماتیک از دو لایه (gr+Se/gr+P)

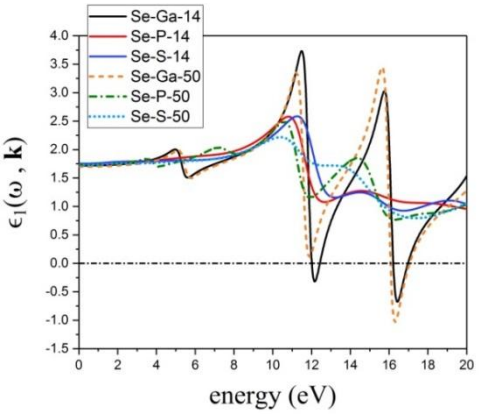


شکل۳- طرح شماتیک از دو لایه (gr+Se/gr+S)

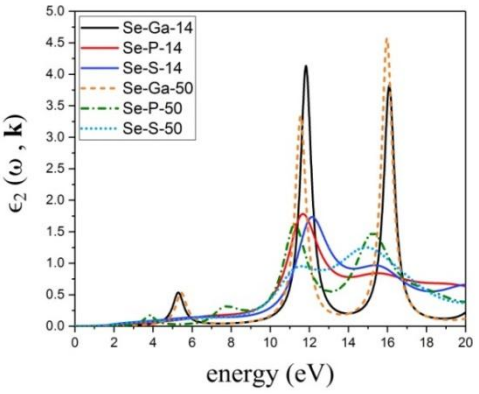
این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-06-19]

تابع دی الکتریک، $\epsilon(\omega, \mathbf{k})$، همزمان به ω و $\vec{k}$ وابسته 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 0 تا 20eV محاسبه کرده ایم. بخش حقیقی و موهومی دی الکتریک بر حسب ω در شکلهای۴ و ۵ رسم شده اند.



شکل۴- بخش حقیقی دی الکتریک، ϵ_1 ،برحسب فرکانس



شکل ۵- بخش موهومی دی الکتریک، ϵ_2، برحسب فرکانس

همانطور که در شکل ۴ مشاهده می شود برای مورد گرافن دو لایه با ناخالصیهای Se و Ga در دو محدوده، شاهد منفی شدن جزء حقیقی دی الکتریک هستیم. برای مورد |k|=0.14، در (12.02-12.43eV) یک محدوده منفی با عمق 0.318- و در (16.22-16.97eV) یک محدوده دیگر منفی با عمق 0.676- داریم. محدوده اول با افزایش |k| افول کرده به نحوی که در |k|=0.50 این محدوده دیگر منفی نیست. اما محدوده دوم با افزایش |k| پهنتر و عمیقتر می شود. در |k|=0.50 حدود این منطقه، به (16.08-17.05eV) و عمق آن به 1.03- می رسد. از آنجایی که در این دو محدوده علامت جزء موهومی دی الکتریک با توجه به شکل ۵ مثبت است لذا می توانیم این رفتار را دلیل بر تشکیل پلاسمون سطحی بدانیم.

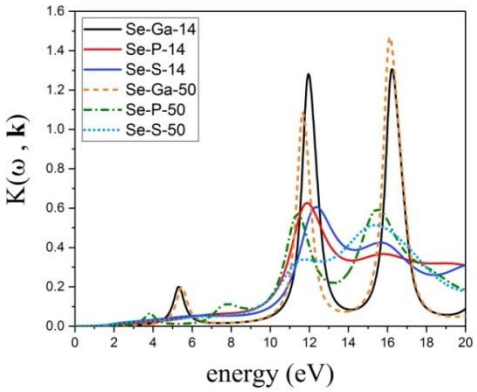
اکنون می توان تعدادی از متغیر های اپتیکی از جمله ضریب خاموشی، K، ضریب شکست، n، و ضریب بازتابش، R، را محاسبه کرد. نحوه وابستگی آنها به ϵ_1 و ϵ_2 در معادلات (۱)، (۲) و (۳) بیان شده است. در شکلهای ۶ و ۷ توابع $K(\omega)$ و $n(\omega)$ به ازای دو بردار موج $\vec{k}_1 = (0,0,0.14)$ و $\vec{k}_2 = (0,0,0.50)$ در بازه 0 تا 20 eV نشان داده شده اند.

$$n = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{\frac{1}{2}} + \epsilon_1\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (۱)$$

$$K = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{\frac{1}{2}} - \epsilon_1\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (۲)$$

$$R = \frac{(n-1)^2+K^2}{(n+1)^2+K^2} \qquad (۳)$$

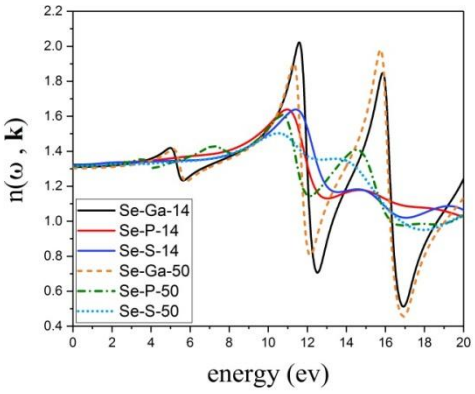
در شکل ۶ برای مورد Ga-Se و به ازای |k|=0.14، برای نمودار $K(\omega)$ در 11.97eV و 16.25eV دو قله جذبی داریم. این دو قله در سایر نمودارها نیز با تغییراتی جزئی دیده می شوند. لذا می توان آنها را به ساختار دو لایه گرافن (وجه شباهت هر سه ساختار) نسبت داد.



شکل ۶- ضریب خاموشی بر حسب فرکانس

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

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-06-19]



شکل ۷- ضریب شکست بر حسب فرکانس

برای محدوده (0<E<10eV) تفاوتهای طیف جذبی هر سه ساختار قابل چشپوشی نیست. برای مثال در مورد Se-P ، برای |k|=0.50، در 7.82eV شاهد بروز یک قله هستیم که در سایر نمودارها وجود ندارد. برای مورد Se-Ga نیز به ازای |k|=0.14 ، در 5.33eV یک قله جذبی داریم که با افزایش |k|، این قله به 5.48eV منتقل می شود. در مورد Se-P هم، به ازای |k|=0.50، شاهد یک قله دیگر در 3.84eV هستیم که در سایرین وجود ندارد.

جمع بندی:

در این مقاله خواص اپتیکی گرافن دو لایه در فاز برنال با ناخالصی های متفاوت، برای ۳ حالت (gr+Se/gr+Ga)، (gr+Se/gr+P) و (gr+Se/gr+S) (که درصد هر کدام از این ناخالصی ها 1.5% می باشد) محاسبه شده اند. برای مورد گرافن دو لایه با ناخالصیهای Se و Ga، در دو محدوده شاهد منفی شدن جزء حقیقی دی الکتریک هستیم. در (12.02-12.43eV) یک محدوده منفی با عمق 0.318- و در (16.22-16.97eV) یک محدوده منفی دیگر با عمق 0.676- داریم. از آنجایی که در این دو محدوده علامت جزء موهومی دی الکتریک مثبت است لذا می توانیم رفتار دی الکتریک در این دو محدوده را دلیل بر تشکیل پلاسمون های سطحی بدانیم.

پلاسمون سطحی وقتی تشکیل می شود که I- یک فلز در مجاورت دی الکتریک باشد، II- بردار موج فوتون فرودی، مولفه مماس با سطح داشته باشد. برای مورد Se-Ga، با افزودن اتمهایی از گروه ۳ و ۶، حاملهای بار زیاد شده و گرافن، فلز می شود. این امر در دو مورد Se-S و Se-P ضعیفتر است. از طرفی به علت بزرگی اتمهای Ga و Se نسبت به کربن، بعد از relaxation، در گرافن ناهمواریهایی ایجاد می شود. در این حالت هندسهٔ جسم اجازه می دهد که بردار موج فوتون فرودی مولفه مماسی داشته باشد. برای Se-S و Se-P ناهمواریها کمتر است. اما بین هر دولایه گرافن، با دولایه بعدی، هوا در نظر گرفته شده که مجاورت فلز و دی الکتریک را توجیه می کند. لذا شرایط پیدایش پلاسمون سطحی در (gr+Se/gr+Ga) وجود دارد.

برای محدوده (0<E<10eV) تفاوتهای طیف جذبی هر سه ساختار قابل چشپوشی نیست. برای مثال در مورد Se-P و برای |k|=0.50 در 7.82eV شاهد بروز یک قله هستیم که در سایر نمودارها وجود ندارد. و یا برای مورد Se-Ga حوالی 5.33eV یک قله جذبی داریم. همچنین برای Se-P و به ازای |k|=0.50 شاهد یک قله در 3.84eV هستیم که در سایرین وجود ندارد.

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] Pablo A. Denis and Federico Iribarne ," The effect of the dopant nature on the reactivity, interlayer bonding and electronic properties of dual doped bilayer graphene ", Phys. Chem. Chem. Phys., 2016, 18, 24693

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

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

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-06-19]