

بررسی تاثیر ساختار یاخته واحد بر خواص اپتیکی نانو ساختار سیلیسین

وحیده کاظم‌لو^۱ | آرش فیروزنیا^{۲*} | کاظم جمشیدی قلعه^۲

۱. پردیس تبریز، گروه فیزیک، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز
۲. گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز

چکیده

در این مقاله، اثر پیکربندی انحناى یاخته واحد نسبت به صفحه دو بعدی روی تابع دی الکترونیک در سیلیسین بررسی شده است. رفتار طیف جذبی و پاشندگی ضریب شکست با استفاده از روش نظریه تابعی چگالی برحسب انرژی فوتون تابشی برای انحناءهای مختلف نمایش داده شده است. نتایج نشان می‌دهند که، برای طول پیوند ثابت، با افزایش زاویه انحناى یاخته واحد از صفحه، جذب و ضریب شکست افزایش می‌یابد. بعلاوه، قله‌های جذب و ضریب شکست به سمت طول موج‌های بلندتر جابه‌جا می‌شود. در این راستا، رفتار طیف جذبی و پاشندگی ضریب شکست اپتیکی به ازاء انحناءهای مختلف رسم شده‌اند. کاهش گاف انرژی با افزایش انحناء ی یاخته واحد دلیل فیزیکی رفتارهای فوق است.

واژگان کلیدی: خواص اپتیکی، زاویه انحناى یاخته واحد از صفحه، سیلیسین، ضریب دی الکترونیک، نظریه تابعی چگالی

۱ مقدمه

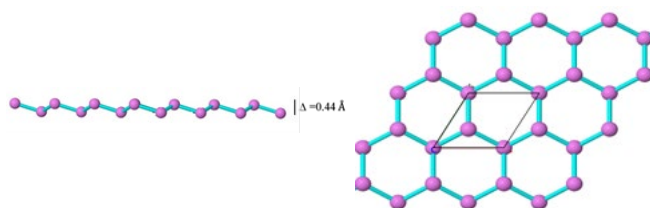
بعد از کشف گرافین در سال ۲۰۰۴، گایم و همکارانش دست به تحقیق و کشف موادی با ساختارهای دو بعدی دیگر در گروه چهار جدول تناوبی زدند [۱]. این مواد دوبعدی با ساختار لانه زنبوری با خواص الکترونیکی و اپتیکی و مکانیکی غیر معمول، جامعه علمی را به عنوان یک ماده اولیه جهت تحقیقات و پژوهش‌های علمی به چالش کشیدند. این چالش‌ها، مانند بهینه سازی و مقرون به صرفه بودن تولید، وجود یا عدم وجود گاف انرژی نواری، بررسی نحوه ترکیب مواد گرافین گونه با سایر عناصر موجود و تاثیر آن بر روی مشخصه‌های فیزیکی تاکنون ادامه دارد.

سیلیسین یک لایه اتمی از سیلیکون (Si) می‌باشد که دارای ساختار بسیار شبیه به گرافین است [۲]. شباهت بین گرافین و سیلیسین از این واقعیت ناشی می‌شود که C و Si متعلق به یک گروه در جدول تناوبی عناصر هستند [۳]. با این وجود، Si دارای شعاع یونی بزرگتر و هیبریداسیون SP^3 است، در حالی C هیبریداسیون SP^2 دارد. علاقه به سیلیسین و سایر مواد دو بعدی با ساختار لانه زنبوری در میان محققان همانند گرافین بسیار بالا است، تا سال ۲۰۱۲ که این ساختار توسط آقاکارا و همکاران وی بر روی زمینه نقره تولید شد تحقیقات تئوری و عملی در این زمینه وجود نداشت [۴]. یکی از مزیت‌های اصلی سیلیسین سازگاری آن با عبور جریان الکترونیکی به جهت نیمه رسانا بودن این ماده است، که امکان کاربرد آن را در ادوات جدید الکترونیکی، فراهم می‌سازد [۵] که بر این اساس از سال ۲۰۱۵ در صنعت ساخت ترانزیستورها نقش به‌سزایی ایفا کرده است [۶]. در بین خواص منحصر به فرد سیلیسین، خواص اپتیکی نیز علاقه خاصی در بین محققان به خود جلب کرده است. بر خلاف گرافین مسطح تک لایه، سیلیسین در حالت انحناى محدود یاخته واحد از صفحه پایدار است [۷]. حتی قبل از سنتز سیلیسین، مطالعات اصول اولیه نشان داد که از همان ابتدا بر اساس به حداقل رساندن انرژی کل، سیلیسین می‌تواند با ساختار لانه زنبوری با انحناى یاخته واحد از صفحه وجود داشته باشد [۸]. سیلیسین یک پاشندگی نواری خطی در نزدیکی تراز فرمی در نقطه K از منطقه اول بریلوئن (BZ) در غیاب جفت شدگی اسپین-مدار (SOC) را نمایش می‌دهد. در مورد انتقال خطی نور به این ترتیب می‌توان بحث کرد که یک الکترون یک فوتون از نور ورودی را جذب کرده و به حالت خالی بالاتر گذار انجام می‌دهد. هنگامی که این الکترون به تراز پایین‌تر می‌رود یک فوتون با فرکانس کمتر یا به همان فرکانس نور تابشی ساطع می‌کند.

همچنین حالت تخت (بدون انحناء) میزان جذب در راستای Y و X مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی با استفاده از بسته محاسباتی ABINIT انجام شده است. در این محاسبات از گسسته سازی ناحیه اول بریلوئن به روش مونخورست-پک، یک توزیع $46 \times 46 \times 1$ در فضای وارون به کار گرفته شده است. از آنجایی که نرم افزارهایی نظیر ABINIT که بر اساس توابع موج دوره ای برای یک شبکه دوره ای طرح ریزی شده اند، فضای خلا برای جلوگیری از برهمکنش بین تک لایه های دوره ای در حدود ۲۰ آنگستروم در نظر گرفته شده است. موقعیت اتمی و ثابت شبکه در حالت پایه تعیین می گردند. در این محاسبه مقدار انرژی قطع برای بسط تابع موج بهینه شده است. مقدار بهینه برای این کمیت مقداری است که به ازای مقادیر بزرگتر از آن انرژی کل همگرا شود، در این ساختار با انرژی قطع ۲۵ هارتری همگرایی مناسب به دست آمده است.

محاسبات

در شکل ۱، دو حالت ساختار سیلیسین (الف) سیلیسین تخت (ب) سیلیسین با انحنای یاخته واحد از صفحه به اندازه $(\Delta = 0.100 \text{ \AA})$ و $(\Delta = 0.144 \text{ \AA})$ نشان داده شده است. محاسبه ساختار نوار انرژی الکترونی سیلیسین در حالت پایه، به روش DFT با تقریب چگالی موضعی (LDA) در شکل ۲ نشان داده شده است. نتایج محاسبه شده در شرایط مختلف ساختاری که در نمودارهای شکل ۲ مشاهده می شود، در جدول ۱ گزارش شده است. این نتایج، نشان می دهد که حالت های تخت و انحنای کم یاخته واحد منجر به باز شدن یک گاف انرژی محدود در نقاط دیراک K و K' گشته و در این حالت سیلیسین در فاز نیمه رسانا خواهد بود. در حالت انحنای بالای یاخته واحد، همانطور که از شکل ۲ دیده می شود، ته نوار رسانش به قله ی نوار ظرفیت در نقطه ی دیراک K چسبیده است و مقدار گاف در این نقطه صفر می باشد، یعنی سیلیسین در این حالت فلز است. در حالت کلی دیده می شود که با افزایش انحناء، اندازه گاف کوچکتر می شود.



شکل ۱ الف) ساختار سیلیسین به صورت تخت، (ب) ساختار سیلیسین با انحنای یاخته واحد از صفحه به اندازه ۰/۴۴ آنگستروم

هدف از این تحقیق، به دست آوردن عبارتی برای پاسخ نوری از سیلیسین، در شرایط مختلف ساختار شبکه می باشد. $E(\omega)$ میدان الکتریکی نور ورودی برای قطبی کردن مواد است. این قطبش با استفاده از رابطه زیر محاسبه می شود:

$$P^a(\omega) = \chi_{ab}^{(1)} \cdot E^b(\omega) + \chi_{abc}^{(2)} \cdot E^b(\omega) \cdot E^c(\omega) + \dots \quad (1)$$

در این عبارت $\chi^{(n)}$ پاسخ نوری خطی است. مرتبه های بالاتر (غیر خطی) نیز می تواند محاسبه شود اما در حال حاضر کار ما تنها محاسبه پاسخ نوری خطی می باشد. پاسخ های نوری در تقریب ذرات مستقل و هامیلتونی در یکای $\hbar = m = e = 1$ a.u. به صورت زیر نوشته می شود:

$$H(t) = \sum_i \frac{(P_i - K(t))^2}{2} + V(x_i) \quad (2)$$

در این رابطه، اندیس i مربوط به الکترونهای ماده در موقعیت χ_i می باشد. P همان عملگر ممنتوم می باشد که در فضای حقیقی به صورت $P_i = -i\nabla_i$ بیان می شود، $V(\chi)$ پتانسیل دوره ای موثر و $K(t) = \frac{A(t)}{c}$ پتانسیل برداری ناشی از میدان اعمال شده خارجی است. میدان الکتریکی ماکروسکوپی نیز بصورت $E(t) = -\frac{A(t)}{c}$ مشخص می شود. معادله (۲) را می توان به صورت معادله مستقل از زمان (که ممکن است به طور ضمنی وابسته به زمان باشد) به شکل زیر از هم جدا کرد:

$$H = H_0 + H_1 + H_2 \quad (3)$$

$$H_0 = \frac{1}{2} \sum_i P_i^2 + V(x_i) \quad (4)$$

$$H_1(t) = -K(t) \sum_i P_i \quad (5)$$

$$H_2(t) = \frac{1}{2} NK^2(t) \quad (6)$$

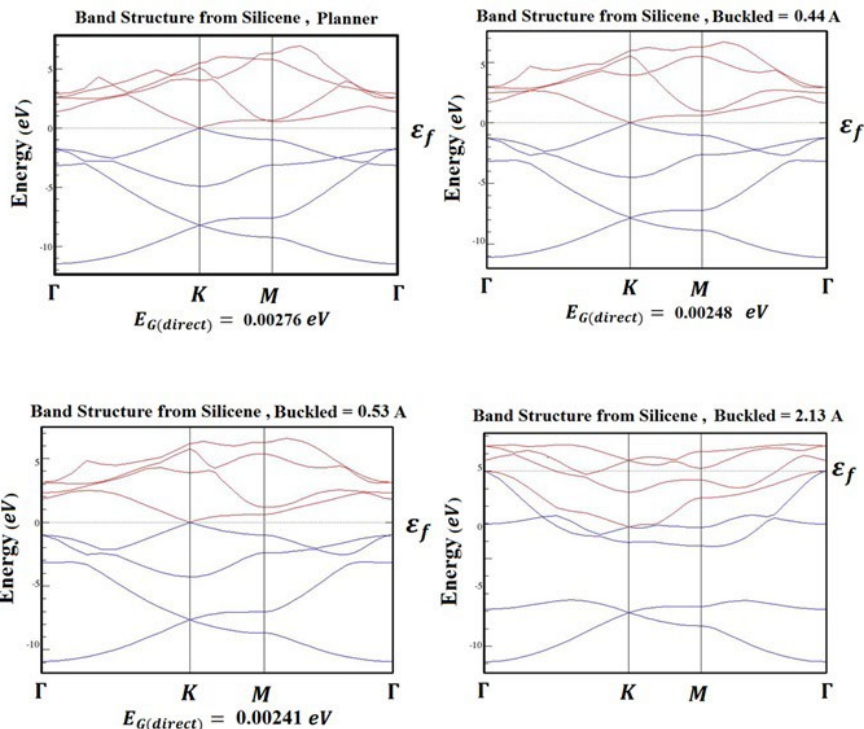
N تعداد کل الکترونها در حجم Ω ماده است. در حد طول موج بلند H_2 تنها یک عامل فاز وابسته زمان را برای توابع موج در بر خواهد داشت و از این رو می توان از آن صرف نظر کرد و H_1 می تواند به عنوان یک اختلال باشد [۹].

۲ توصیف ساختار

در این مقاله، برای بررسی اثر انحنای یاخته واحد روی خواص اپتیکی نانو ساختار سیلیسین با طول پیوند یکسان $2/22$ آنگستروم [۲] برای حالت های با انحناء کم 0.144 [۶]، 0.153 آنگستروم [۷]، انحنای زیاد به اندازه $2/13$ آنگستروم [۷] و

جذب اپتیکی با توجه به اندازه گاف انرژی دارد. در مرحله دوم، موقعیت قله جذب در سیلیسین به شدت به گاف نوار انرژی وابسته است. نتایج نشان می‌دهد که برای طول پیوند ثابت، با افزایش زاویه انحنای یاخته واحد از صفحه، به علت کاهش گاف انرژی، میزان جذب افزایش یافته و همچنین قله جذب به سمت طول موج های بلندتر (انرژی فوتون کمتر) جابجا می‌شود.

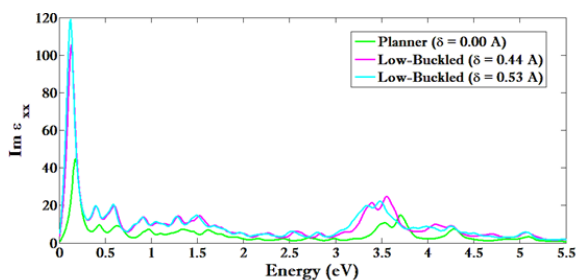
با تمرکز بر روی شکل ۳ مشاهده می‌شود، که میزان جذب در راستای X و Y با هم متفاوت بوده و میزان جذب در حالت کلی در راستای بردار X بیشتر از جذب در راستای Y است. این نکته با توجه به ناهمسانگردی انرژی نوری سیستم در فضای وارون قابل درک است. به این معنی که ناهمسانگردی در طیف انرژی الکترونی ناهمسانگردی جذب اپتیکی را در پی خواهد داشت. با بررسی انجام شده برای حالت انحنای یاخته واحد زیاد و مقایسه با حالت انحنای کم و حالت تخت، در شکل ۴ مشاهده می‌شود که در این حالت نیز فرایند افزایش جذب با افزایش انحنای یاخته واحد از صفحه ادامه دارد و بیشترین جذب را به ازای انحنای زیاد شاهد هستیم.



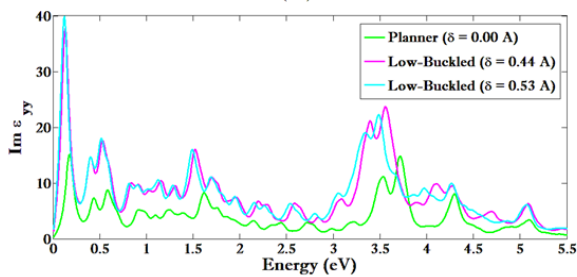
شکل ۲ ساختار نوار انرژی الکترونی سیلیسین در حالت‌های مختلف زاویه انحنای یاخته واحد از صفحه، به روش DFT با تقریب چگالی موضعی (LDA)

جدول ۱ مقادیر گاف انرژی برای حالت‌های مختلف انحنای یاخته واحد

Δ (Å)	۰,۰۰	۰,۴۴	۰,۵۳	۲,۱۳
E_g (eV)	$۲,۷۶ \times 10^{-۲}$	$۲,۴۸ \times 10^{-۲}$	$۲,۴۱ \times 10^{-۲}$	۰



(الف)



(ب)

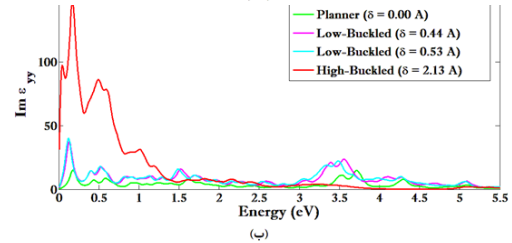
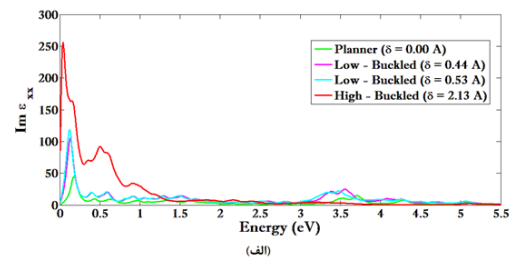
شکل ۳ نمودار جذب (قسمت موهومی ضریب دی الکتریک) با طول پیوند ۲/۲۲ آنگستروم در حالت‌های انحنای کم و حالت تخت، (الف) در راستای X، (ب) در راستای Y

شکل ۳، رفتار طیف جذب اپتیکی سیلیسین را برحسب انرژی فوتون تابشی در حالت‌های انحنای کم و حالت تخت در دو راستای X و Y نشان می‌دهد. مقیاس انرژی بر حسب الکترون ولت می‌باشد. با توجه نمودارها، بخش اول شامل یک قله ی باریک در نزدیکی انرژی ۰/۱۵ الکترون ولت است که مربوط به انتقال الکترون در محدوده گاف نوار انرژی می‌باشد و بخش دوم در میانه ی راستای محور انرژی است که پنجره جذب دیگری حول انرژی ۳/۲ تا ۳/۸ الکترون ولت وجود دارد که مربوط به انتقال الکترون در بین نوارهای ظرفیت و نوار رسانش است. پس از بحث در ساختار سیلیسین در قسمت قبلی، نتایج به دست آمده برای خواص پاسخ نوری از سیلیسین مورد بحث خواهند بود. در مرحله اول، مشاهده شده است که گاف نوار انرژی در سیلیسین نزدیک سطح فرمی می‌باشد و با افزایش میزان انحنای یاخته واحد اندازه گاف انرژی کاهش می‌یابد و این تغییرات اثر قابل ملاحظه در

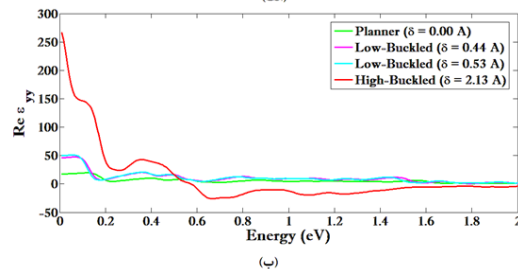
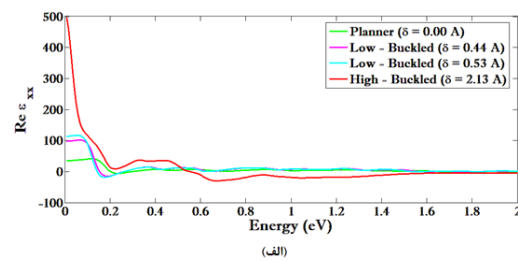
زاویه انحنای یاخته واحد از صفحه، خواص اپتیکی سیلیسین تغییر می‌یابد و میزان جذب و ضریب شکست افزایش یافته و قله طول موج جذب و ضریب شکست به سمت طول موجهای بلندتر جابه جا می‌شود. همچنین نشان داده شد که با افزایش انحناء، گاف انرژی کاهش می‌یابد. نتایج عددی همچنین بیانگر ناهمسانگردی در طیف جذب سیستم به دلیل ناهمسانگردی در پاشندگی الکترونی فضای وارون است که این امر در متفاوت بودن طیف جذب در راستاهای تابشی متفاوت ظاهر می‌گردد.

مراجع

- [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*, vol. 306, pp. 666–669, 2004.
- [2] N. D. Drummond, V. Z'olyomi, and V. I. Fal'ko, "Electrically tunable band gap in silicene", *Physical Review B*, vol. 85, pp. 075423, 2012.
- [3] J.-A. Yan, S.-P.ao, R. Stein, and G. Coard, "Emergence of the nematic electronic state in FeSe", *Phys. Rev. B*, vol. 91, pp. 155106, 2015.
- [4] A. Kara, C. Léandri, M.E. Dávila, P. de Padova, B. Ealet, H. Oughaddou, B. Aufray, G. L. Lay, "Physics of Silicene Stripes", *J. Supercond. Novel Magnetism*, vol. 22, pp. 259-263, 2009.
- [5] G. G. Guzmán-Verri, L. C. Lew Yan Voon, "Electronic structure of silicon-based nanostructures", *Physical Review B*, vol. 76 (7), pp. 075131, 2007.
- [6] L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, C. Grazianetti, M. Fanciulli, M. Dubey, A. Molle, D. Akinwande, "Silicene Field-Effect Transistors Operating at Room Temperature", *Nature Nanotechnology*, vol. 10, pp. 227-231, 2015.
- [7] Z. Ni, Q. Liu, K. Tang, J. Zheng, J. Zhou, R. Qin, Z. Gao, D. Yu, and J. Lu, "Tunable Band Gap in Silicene and Germanene", *Nano Lett.*, vol. 12, pp. 113-118, 2011.
- [8] S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Aktu"rk, H. Shahin, and S. Ciraci, "Two- and One-Dimensional Honeycomb Structures of Silicon and Germanium", *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102 (23), pp. 236804, 2009.
- [9] S. Sharma, C. Ambrosch-Draxl, "Linear and Second-Order Optical Response from First Principles", *Physica Scripta*, vol. T109, pp. 128–134, 2004.



شکل ۴ نمودار جذب (قسمت موهومی ضریب دی الکتریک) در سیلیسین با طول پیوند ۲/۲۲ آنگستروم در حالت‌های انحنای مختلف، (الف) در راستای X، (ب) در راستای Y



شکل ۵ نمودار ضریب شکست (قسمت حقیقی تابع دی الکتریک) در سیلیسین با طول پیوند ۲/۲۲ آنگستروم در حالت‌های انحنای مختلف، (الف) در راستای X، (ب) در راستای Y

در شکل ۵ نمودار ضریب شکست یا همان قسمت حقیقی تابع دی الکتریک بر حسب انرژی به ازای انحنای یاخته واحدهای مختلف محاسبه شده است، همانطور که در نمودار جذب نیز مشاهده شد با افزایش انحنای یاخته واحد، میزان ضریب شکست نیز افزایش یافته است و این مقدار ضریب شکست در راستای X و Y با هم متفاوت بوده و در راستای بردار X بیشتر از راستای Y می‌باشد.

۳ نتیجه‌گیری

در این مقاله محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریه ی تابعی چگالی انجام شد. نتایج بدست آمده نشان می‌دهند که برای طول پیوند ثابت، با افزایش

The Effect of Buckled Configuration of the Unit Cell on Optical Properties in Silicene Nano-structure

V.Kazemlou | A.Phirouznia* | K.Jamshidi-Ghaleh

Madani University, Faculty of Basic Science, Department of Physics

Abstract

In this paper, the effect of the buckled configuration on dielectric function of silicene is investigated. The behavior of the optical absorption spectrum and the refractive index dispersion are studied using the density functional theory in terms of incident photon energy at different buckling heights. Results are shown that for the fixed bond length, increasing the buckling height in unit cell increases the absorption and the refractive index. In addition, their peaks shift toward the longer wavelengths (red shift). For this, the behavior of the optical absorption spectrum and refractive index dispersion at different buckling heights are illustrated. Reducing the band gap with increasing the buckling height is the physical interpretation of the behaviors.

Keywords

Buckled, Density functional theory, Dielectric function, Optical properties, Silicene