

بررسی ویژگی نوری نانورقه و نانولوله As_2GeSe

بر اساس محاسبات اصول اولیه

پروین بهزادی^۱، پیمان امیری^{۲*}، سید احمد کتابی^۱، امیر علی اکبری^۲

۱- دانشکده فیزیک، دانشگاه دامغان، دامغان، ایران
۲- گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

چکیده: در این مقاله ویژگی نوری نانورقه و نانولوله دسته‌سندلی (۶۶) ترکیب As_2GeSe (بخش حقیقی و موهومی تابع دی-الکتريک، تابع اتلاف انرژی، ضریب شکست، ضریب بازتاب و ضریب جذب) با استفاده از نظریه تابعی چگالی و روش شبه-پتانسیل مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج به دست آمده از ویژگی نوری نانوصفحه، ناهمسانگردی این ترکیب را به خصوص در انرژی‌های پایین و میانی نشان می‌دهد. رفتار تابع دی‌الکتريک این ماده مانند مواد نیم‌رسانا است. بیشتر قله‌های قسمت موهومی تابع دی‌الکتريک برای راستاهای درون صفحه‌ای نانورقه و رشد نانولوله از انرژی‌های پایین تا حدود ۶ الکترون‌ولت شروع می‌شود. انتقال‌های نوری در زیر تراز فرمی به اوربیتال‌های p برای اتم‌های As، Ge و S و در بالای تراز فرمی به اوربیتال‌های p اتم‌های Se و As مربوط هستند. نتایج ما نشان می‌دهد که بیشترین بازتاب برای نانورقه، در راستای درون صفحه‌ای در انرژی ۵/۶۶ الکترون‌ولت برابر با ۴۶٪ است.

واژگان کلیدی: خواص نوری، نانورقه، نانولوله، ترکیب As_2GeSe ، نظریه تابعی چگالی

مقدمه

amiri_physics@yahoo.com

است و تحرک‌پذیری بالای این ترکیب منجر به بررسی امکان کاربرد آن در تجهیزات الکترونیک نوری شده است. افزون بر آن، توانایی Si_2BN در جذب گازها و یون‌های متفاوت منجر به پیش‌بینی کاربردهایی برای این ترکیب در زمینه ذخیره‌سازی هیدروژن، افزایش ظرفیت باتری‌های لیتیومی و حسگرهای گازی شده است. [۲]. در سال ۲۰۲۰، مشاهده شد که ویژگی منحصر به فرد Si_2BN در چند زمینه مکانیکی، الکتریکی، گرمایی، جذب گازها و دارا بودن رسانندگی الکتریکی بیشتر و هدایت گرمایی کمتر آن نسبت به گرافن، این ترکیب را به رقیبی جدی برای گرافن در زمینه‌های مذکور تبدیل می‌کند و جزء یکی از آینده‌دارترین بازیگران عرصه مواد دوبعدی به شمار می‌آید [۳،۴]. از دیگر مطالعات صورت گرفته در سال ۲۰۱۷، می‌توان به

در دهه اخیر، بررسی نانومواد دو بعدی به دلیل جزئیات ساختاری و ویژگی منحصر به فرد آنها واز همه مهم‌تر کاربردهای متنوع این مواد در الکترونیک، اپتوالکترونیک، کاتالیست‌ها، ذخیره و تبدیل انرژی، پژوهش‌های زیست پزشکی و حسگرها این مواد را به مرکز توجه پژوهشگران تبدیل ساخته است [۱]. در سال ۲۰۱۶ ترکیبی دوبعدی از عناصر گروه‌های III، IV و V به صورت نانورقه پیش‌بینی شد. این ترکیب جدید شامل عناصر سیلیکون، بور و نیتروژن با فرمول شیمیایی Si_2BN معرفی شده، که با ضخامت یک اتم دارای ساختار و ویژگی مشابه گرافن است. ماهیت دوبعدی Si_2BN منجر به انعطاف‌پذیری و مورد توجه قرار گرفتن ویژگی مکانیکی آن شده

بحث و نتایج

ساختار بهینه شده و واهلش یافته‌ی نانورقه و نانولوله دسته‌سندلی (۶,۶) As_2GeSe در شکل (۱) نشان داده شده است. برای بررسی ویژگی نوری مواد، تابع دی‌الکتریک که پاسخ ماده به امواج الکترومغناطیس است، مورد بررسی قرار می‌گیرد. تابع دی‌الکتریک یک تابع مختلط است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (۱)$$

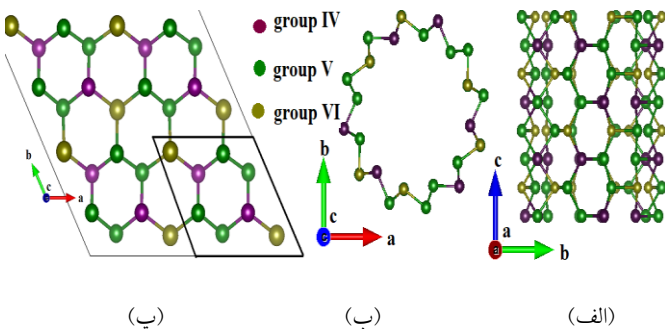
$\varepsilon_1(\omega)$ قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک است. در ناحیه‌ای که $\varepsilon_1(\omega)$ منفی است، امواج منتشر نمی‌شود و فرایندهای جذب و اتلاف غالب هستند. قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک مستقیماً ناشی از گذارهای بین نواری است. روابط کرامرز-کرونیگ قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک را به هم مرتبط می‌کند و تمام ثابت‌های نوری را می‌توان از این داده‌ها به دست آورد [۱۰].

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \left\{ \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \right\} \quad (۲)$$

که در آن قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک به صورت زیر داده می‌شود:

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{i,j} \int_k \langle i|M|j \rangle^2 (f_i - f_j) \delta(E_j - E_i - \hbar\omega) d^3k \quad (۳)$$

در رابطه (۲)، M ماتریس دو قطبی، i و j حالت‌های اولیه و نهایی و f_i و f_j تابع توزیع فرمی برای حالت i ام و j ام انرژی الکترون در آن حالت است.



شکل ۱: ساختار نانولوله دسته‌سندلی (۶,۶) As_2GeSe طولی، (الف) عرضی، (ب) نانورقه As_2GeSe (ب) عرضی، (ب) نانورقه As_2GeSe

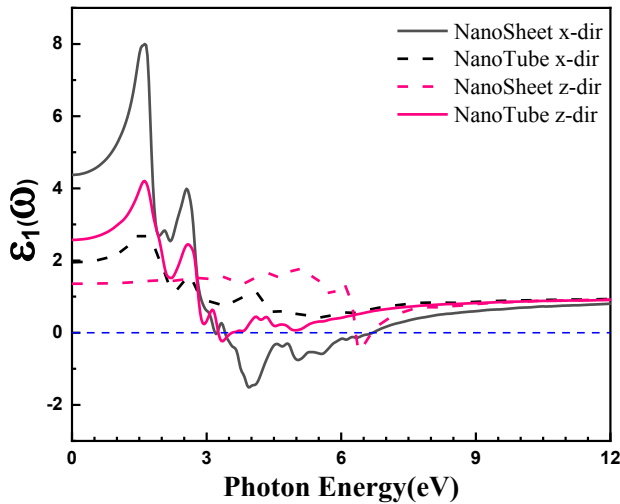
بررسی ساختار بلوری نانوصفحه Si_2BN اشاره کرد که با جانشانی متفاوت از اتم‌های گروه IV، V و VI ترکیبات جدیدی را پیش‌بینی کرده‌اند. پایداری این ترکیبات توسط کینگ زینگ^۱ و همکارانش، با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفته و به عنوان ترکیباتی نیم‌رسانا معرفی شده‌اند که می‌توانند کاندیدای مناسبی کاربردهای الکترونیکی و نوری باشند [۵]. گروهی دیگر در سال ۲۰۱۹، خصوصیات الکترونی، نوری و فونونی نانورقه‌های P_2GeS و As_2GeS را با استفاده از محاسبات اصول اولیه بررسی کرده‌اند. طبق محاسبه HSE06، نانورقه As_2GeS یک گاف نواری مستقیم با مقدار انرژی ۱.۸۹ الکترون‌ولت را نشان می‌دهد در حالی که، نانورقه P_2GeS گاف نواری غیر مستقیم دارد که می‌تواند با اعمال فشار ۳٪ به یک نیم‌رسانا با گاف نواری مستقیم تبدیل شود همچنین، جذب و تجزیه مولکول‌های آب را روی این نانورقه‌ها مطالعه و نشان داده شده است که نانورقه‌های مورد نظر دارای پتانسیل زیادی برای تجزیه آب فتوکاتالیستی هستند [۶]. از طرفی، تبدیل نانوصفحه دوبعدی به یک نانولوله یک بعدی برای تنظیم پذیری ویژگی الکترونی است. در مطالعه پیشین خود، ویژگی ساختاری و الکترونی نانورقه و نانولوله دسته‌سندلی (۶,۶) As_2GeSe را بررسی کرده‌ایم [۷].

در این مقاله، با تکیه بر نظریه تابعی چگالی ویژگی نوری ساختارهای نانورقه و نانولوله As_2GeSe را در سامانه دسته‌سندلی محاسبه و بررسی شد که تا کنون مورد بحث قرار نگرفته است و با نتایج پیشین خود مقایسه‌ای داشته باشیم.

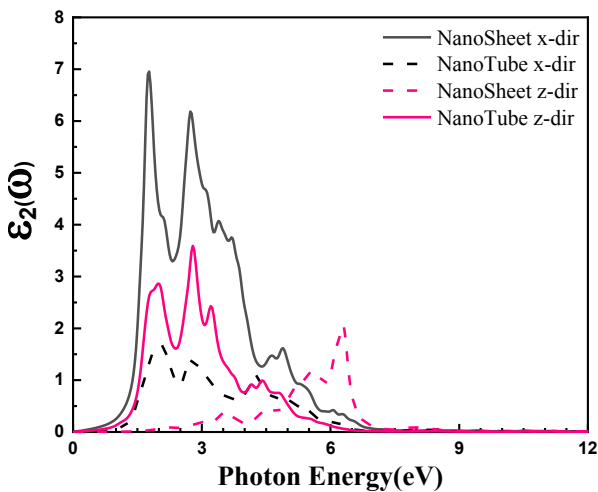
روش محاسبه

محاسبات بر اساس نظریه تابعی چگالی و با استفاده از روش شبه پتانسیل پایه‌های موج تخت توسط نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو انجام گرفته است [۸]. در این محاسبات از شبه پتانسیل‌های ساخته شده به روش بقای نرم با تقریب PBE استفاده کرده‌ایم [۹]. محاسبات با تقریب GGA، تعداد نقاط بهینه k به ترتیب برای نانورقه و نانولوله دسته‌سندلی (۶,۶) برابر $8 \times 8 \times 1$ و $1 \times 1 \times 8$ ، انرژی قطع 70 Ry و برای جلوگیری از برهم کنش با ساختار مجاور یک لایه خلاً به اندازه 15 \AA برای هر دو سامانه مورد استفاده قرار گرفت. در محاسبات نوری از تقریب فاز تصادفی استفاده شده است.

که تا حدود پیش از 1.5 eV مقدار قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک بسیار کم است. این مقدار از انرژی قابل مقایسه با گاف انرژی محاسبه شده در ساختار نواری هر دو سامانه است [۱۰].



شکل ۲: قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک نانورقه و نانولوله دسته‌سندلی (As_2GeSe) در راستای x و z



شکل ۳: قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک نانورقه و نانولوله دسته‌سندلی (As_2GeSe) در راستای x و z

قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک تک لایه As_2GeSe بر حسب انرژی فوتون- فرودی در دو راستای x (درون صفحه‌ای)، راستای z (عمود بر صفحه) و برای نانولوله در دو راستای x (عمود بر محور نانولوله) و z (موازی محور نانولوله)، در شکل‌های ۲ و ۳ نشان داده شده و مقایسه شده‌اند. بیشینه قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک هر دو ساختار در حدود انرژی 1.5 eV قرار دارد و با افزایش انرژی فوتون، تابع دی‌الکتریک به سرعت افت می‌کند و به مقادیر صفر و منفی می‌رسد. مقدار تابع دی‌الکتریک در انرژی‌های بسیار پایین، تابع دی‌الکتریک استاتیکی (الکترونی) را مشخص می‌کند. این کمیت در محاسبه برخی کمیت‌های مهم دیگر مانند ثابت استتار بار اهمیت دارد. تابع دی‌الکتریک استاتیکی برای هر دو سامانه و جهت مقایسه با ساختار مشابه As_2GeTe در جدول ۱ خلاصه شده‌اند. مشاهده می‌شود که این مقادیر در ترکیبات مشابه به ازای راستاهای متفاوت به یکدیگر نزدیک هستند ولی برای هر ترکیب نتایج در راستاهای متفاوت متفاوت هستند [۱۱ و ۱۲]. بنابراین می‌توان گفت که رفتار تابع دی‌الکتریک در ساختار نانوصفحه مورد نظر ناهمسانگرد است. این رفتار ناهمسانگردی برای راستاهای (درون صفحه‌ای) از انرژی‌های بسیار پایین تا حدود 6 eV است و از 6 eV به بعد در هر دو راستا کامل بر هم منطبق هستند. در انرژی بین ریشه‌های قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک، جایی که مقدار $\epsilon_1(\omega)$ منفی است یا خیلی نزدیک به صفر است، موج الکترومغناطیسی منتشر نمی‌شود و فرایندهای جذب و اتلاف صورت می‌گیرد. ریشه‌های قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک نانورقه و نانولوله As_2GeSe و ساختار مشابه As_2GeTe در جدول (۱) گزارش شده‌اند. نتایج نشان می‌دهند که بیشترین پهنای انرژی برای میرایی امواج الکترومغناطیسی در نانورقه As_2GeSe در راستای x دیده می‌شود با افزایش انرژی فوتون فرودی، قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک هر دو سامانه در هر دو راستا به آرامی افزایش می‌یابد و به اولین بیشینه خود می‌رسند که این از رفتار مواد نیم‌رسانا است. همان طور که از نمودار قسمت حقیقی شکل (۲) مشاهده می‌شود، برای هر دو سامانه در انرژی 7 eV تمایلی به برهم‌کنش با فوتون ندارند، زیرا نمودار زودتر میرا می‌شود چون ارتعاشی ندارد. با توجه به قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک برای هر دو سامانه در شکل ۳، کامل مشخص است

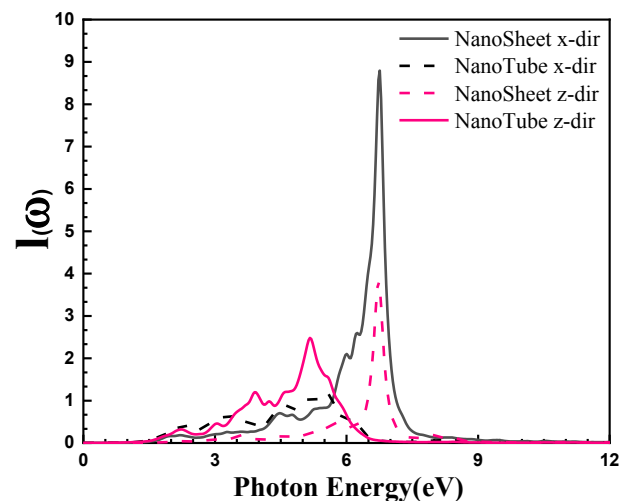
ضریب اتلاف

از ویژگی نوری دیگر می توان به محاسبه ضریب اتلاف اشاره کرد. این تابع متناسب با احتمال اتلاف انرژی در واحد طول برای الکترون در حال عبور از محیط است. وجود قله در نمودار ضریب اتلاف به عنوان قله‌ی پلاسمونی شناخته می‌شود که نشان دهنده برانگیختگی‌های حجمی چگالی بار الکترون‌های عبوری است. در یک بلور امکان وجود چند قله‌ی پلاسمونی است. بلندترین قله متناظر با پلاسمون حجمی و بسامد متناظر با آن بسامد پلاسمای نامگذاری می‌شود.

تابع اتلاف انرژی به صورت زیر با تابع دی‌الکتریک رابطه دارد:

$$I(\omega) = -\text{Im}\left(\frac{1}{\varepsilon(\omega)}\right) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} \quad (4)$$

این رابطه نشان می‌دهد که تابع اتلاف انرژی با تابع دی‌الکتریک رابطه معکوس دارد که بدین معناست که در بازه‌هایی که تابع اتلاف دارای قله است قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مقادیر بسیار کوچکی دارند.

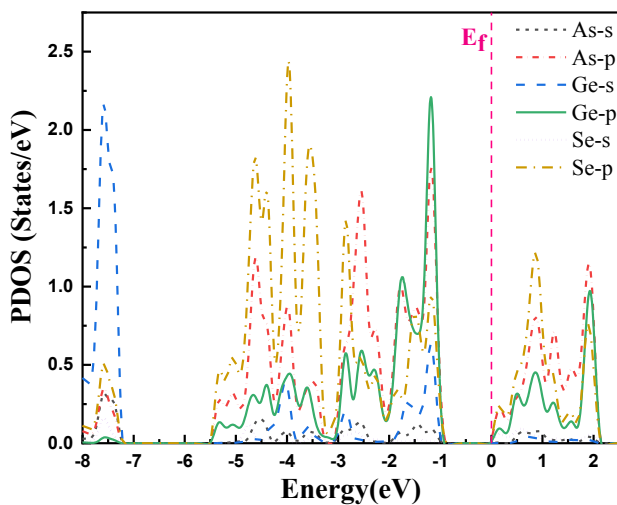


شکل ۴: پراکندگی اتلاف نانورقه و نانولوله دسته‌صندلی (۶،۶) در راستای x و z

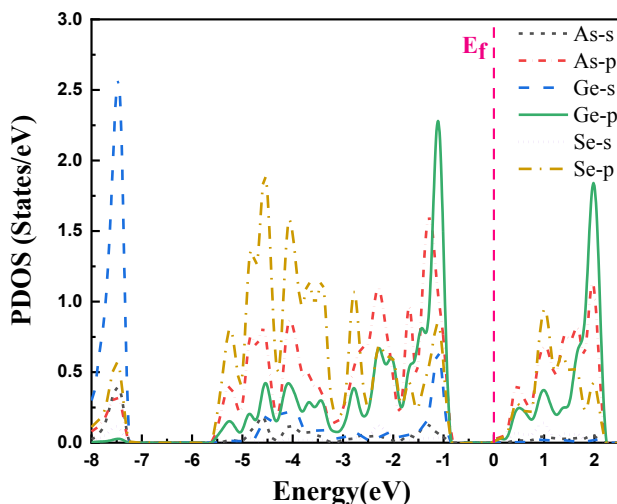
تابع اتلاف انرژی نانورقه و نانولوله As_2GeSe در دو راستای x و z در شکل (۴) ارائه شده است. مقدار قله‌های تیز انرژی پلاسمون برای ساختارهای نانورقه As_2GeSe به ترتیب در جهت x و z، 6.75 eV و 6.73 eV محاسبه شده است و در مورد

ساختار نانولوله دسته‌صندلی (۶، ۶) به ترتیب در جهت x و z، 5.17 eV و 5.50 eV است.

با توجه به قسمت موهومی نمودار (۳)، پس از حدود 1.5 eV قله‌هایی در نمودار دیده می‌شوند که مربوط به انتقال‌های نوری بین نواری در هر دو سامانه است. قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک به فرایندهای جذب و انتقال‌های اپتیکی مربوط می‌شود. بر اساس چگالی حالت‌ها و ساختار نواری، می‌توان تعیین کرد که قله‌های قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک $\varepsilon_2(\omega)$ مربوط به کدام انتقال‌های نوری در ساختارها هستند.



شکل ۵: چگالی حالت‌های جزئی نانورقه As_2GeSe



شکل ۶: چگالی حالت‌های جزئی نانولوله دسته‌صندلی (۶،۶) As_2GeSe

با توجه به شکل‌های (۳، ۵ و ۶) مشاهده می‌شود که در نانورقه As_2GeSe قله‌های برجسته در راستای z در انرژی‌های بالاتری نسبت به راستای x واقع شده‌اند و در مورد نانولوله دسته‌صندلی

درون محیط و ضریب خاموشی بزرگ به معنای نفوذ سخت امواج به درون محیط است.

با محاسبه قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در انرژی صفر و با استفاده از رابطه $n(\omega) = \sqrt{\epsilon(\omega)}$ می‌توان ضریب شکست استاتیک را به دست آورد. ضریب خاموش و ضریب شکست نانورقه As_2GeSe در دو جهت x و z در شکل‌های ۷ و ۸ نشان داده شده‌اند. ضریب شکست $n(\omega)$ و ضریب خاموش $k(\omega)$ با استفاده از $\epsilon_1(\omega)$ و $\epsilon_2(\omega)$ از رابطه‌های زیر محاسبه شدند [۱۰].

$$k(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{-\epsilon_1(\omega) + \sqrt{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)}}. \quad (5)$$

$$n(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\epsilon_1(\omega) + \sqrt{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)}}. \quad (6)$$

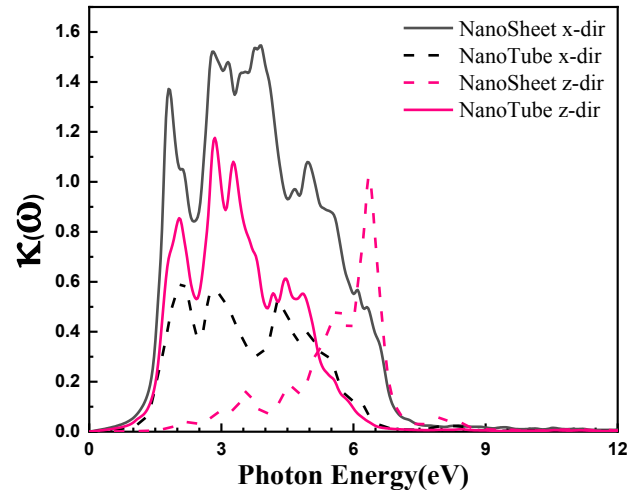
ضریب شکست استاتیک تک لایه As_2GeSe ، ۲٫۰۹ و ۱٫۷ برای جهت x و z در امتداد محور x و z هستند. مقایسه نتایج شکل ۸ نشان می‌دهد که بیشینگی ضریب شکست در جهت x برای ساختار نانورقه As_2GeSe و در جهت z برای ساختار نانولوله As_2GeSe به ترتیب در انرژی - فوتون ۱٫۶۲ و ۱٫۶۵ الکترون‌ولت رخ می‌دهد.

بیشینه‌ی ضریب شکست هر دو ساختار در محدوده انرژی فروسرخ، طیف الکترومغناطیسی هستند. مقدار بزرگ ضریب شکست، این مواد را به عنوان کاندیدای بالقوه برای استفاده در دستگاه‌های نوری تبدیل می‌کند.

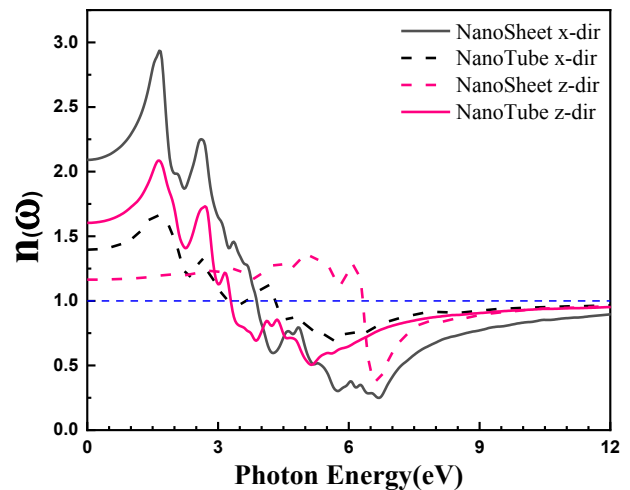
مقدار ضریب شکست برای ساختار نانورقه As_2GeSe (در جهت x) و نانولوله دسته‌صندلی (۶، ۶) As_2GeSe (در جهت z) برای انرژی - فوتون بالاتر از تقریباً ۳٫۵ eV کمتر از ۱ است و بنابراین پدیده سوپرلومینال مشاهده می‌شود. به عبارت دیگر، سرعت انتقال فوتون (سرعت فاز) در آن بیشتر از سرعت نور است. (در پدیده سوپرلومینال، سرعت فاز نور در محیط بیشتر از خلأ است بنابراین، ضریب شکست محیط کمتر از یک است) [۱۱].

آستانه ظهور پدیده سوپرلومینال در جهت z برای تک لایه As_2GeTe در انرژی - فوتون ۶٫۱ eV دیده می‌شود ۲٫۱ eV بالاتر از جهت x است. همچنین، آستانه ظهور پدیده سوپرلومینال

(۶، ۶) ساختار ذکر شده این قله‌ها در راستای رشد لوله (z) در انرژی کمتری نسبت به راستای x قرار دارند که بیشتر این قله‌ها در هر دو سامانه به انتقال‌های نوری اوربیتال‌های p اتم‌های Ge ، As و Se در زیر تراز فرمی و به اوربیتال‌های p اتم‌های As و Se در بالای تراز فرمی مربوط هستند. دامنه مهم انرژی برای انتقال نوری بین انرژی‌های ۱ تا ۶ الکترون‌ولت است.



شکل ۷: ضریب خاموش نانورقه و نانولوله دسته‌صندلی (۶، ۶) As_2GeSe در راستای x و z



شکل ۸: ضریب شکست نانورقه و نانولوله دسته‌صندلی (۶، ۶) As_2GeSe در راستای x و z

ضریب شکست

بخش حقیقی ضریب شکست، میزان انتشار موج و بخش موهومی آن پاشندگی امواج را نشان می‌دهد و معیاری از جذب امواج الکترومغناطیس است. ضریب خاموشی معیاری از میزان جذب پرتو الکترومغناطیسی با استفاده از آن ماده است. ضریب خاموشی کوچک به معنای عبور آسان امواج الکترومغناطیسی از

برای R_{max} هر دو سامانه نانورقه، نانولوله و به منظور مقایسه با ساختار مشابه As_2GeTe در جدول ۱ گزارش شده است. هر دو سامانه مورد مطالعه، دارای بازتاب نوری بسیار کم (~ 0.05) در بسامدهای بالاتر از فرابنفش دارند، که آن‌ها را به یک کاندید جالب برای کاربرد بازتابندگی تبدیل می‌کند.

ضریب جذب

ضریب جذب یک ماده برابر با تعداد فوتون‌های جذب شده بر واحد طول است. در اثر جذب فوتون، الکترون‌های نواز ظرفیت برانگیخته شده و به نوار رسانش می‌روند. به جذب فوتون توسط الکترون‌ها، جذب بین نواری می‌گویند. طیف جذب بیانگر انتقال‌های نوری مجاز الکترون بین حالت‌های اشغال شده نوار ظرفیت و حالت‌های اشغال نشده نوار رسانش است. ضریب جذب از طریق رابطه زیر به قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مربوط می‌شود؛ که c سرعت نور در خلاء می‌باشد.

$$\alpha(\omega) = \frac{\sqrt{2\omega}}{c} \left\{ \left[\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega) \right]^{\frac{1}{2}} - \varepsilon_1(\omega) \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (8)$$

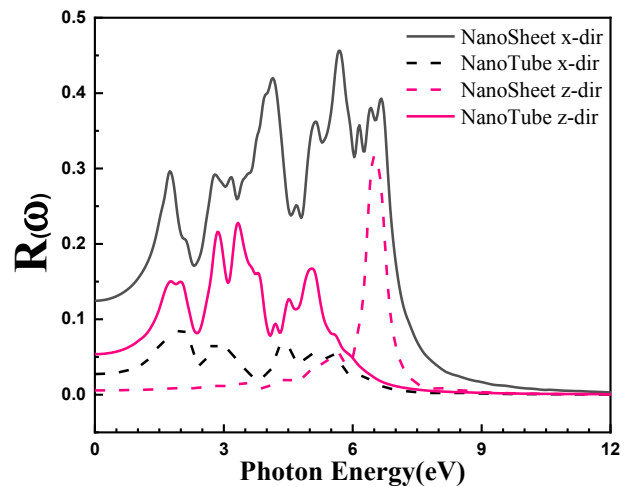
برای بهره‌مندی موثر از انرژی خورشیدی به فوتوکاتالیست‌ها نیاز است. از این رو، طیف جذب در دو راستای x و z برای نانورقه و نانولوله را در شکل ۱۰ بررسی شده است. بالاترین ضریب جذب در انرژی- فوتون 3.27 eV در جهت z و 4.29 eV در جهت x برای نانولوله As_2GeSe می‌باشد. برای نانورقه As_2GeSe بیشترین ضریب جذب در انرژی- فوتون 6.36 eV در جهت z و 3.90 eV در جهت x است. ضریب جذب نوری برای هر دو سامانه نانورقه، نانولوله و جهت مقایسه با ساختار مشابه As_2GeTe در جدول ۱ گزارش شده است.

در جهت x برای نانولوله As_2GeSe در انرژی- فوتون 4.27 eV دیده می‌شود که 1.0 eV بالاتر از جهت z است.

ضریب بازتاب

یکی دیگر از پارامترهای مهم نوری ضریب بازتابندگی است که انرژی بازتاب شده از قسمت فصل مشترک ماده را توصیف می‌کند. محاسبه ضریب بازتابندگی نور، تحت تابش عمودی بر روی یک ساختار بلوری اطلاعات جامعی را در مورد سامانه در اختیار قرار می‌دهد. ضریب بازتابندگی، تابعی مختلط است که در سطح بلور به صورت نسبت میدان الکتریکی بازتابیده به میدان الکتریکی فرودی تعریف می‌شود: ضریب خاموشی و ضریب شکست با رابطه زیر به ضریب بازتابندگی تحت تابش عمودی مربوط می‌شوند:

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (7)$$

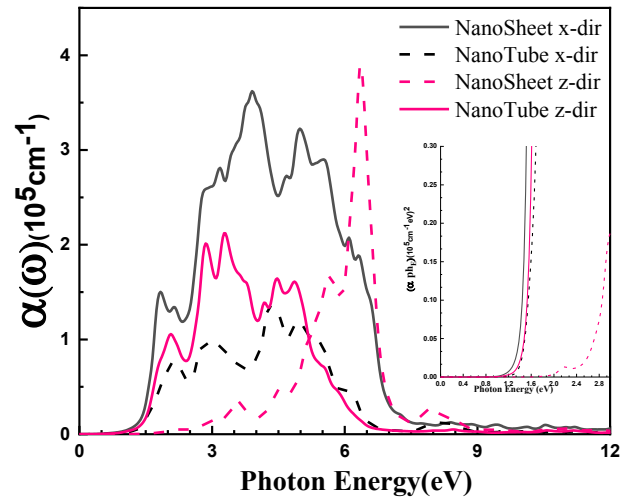


شکل ۹: ضریب بازتاب نانورقه و نانولوله

دسته‌صندلی (۶۶) As_2GeSe در راستای x و z

به منظور مقایسه ضریب بازتاب هر دو ساختار نانورقه و نانولوله در جهت‌های x و z در شکل ۹ آورده شده است. نتایج نشان می‌دهد که بیشترین بازتاب در جهت x برای تک لایه As_2GeSe در انرژی- فوتون 5.66 eV و برابر ۴۶ درصد است. به طور مشابه، در مورد نانولوله As_2GeSe این مقدار در جهت z برابر ۲۳ درصد با انرژی- فوتون 3.3 eV است. برای انرژی بیشتر از 7 eV ، بازتاب به طور قابل توجهی کاهش یافته و هر دو سامانه شفاف است. ضریب بازتاب ثابت R_0 و حداکثر ضریب بازتاب

می‌دهد، بیشترین بازتاب در جهت x برای تک لایه As_2GeSe در انرژی- فوتون 5.66 eV و برابر ۴۶ درصد است. که البته در مقایسه با ساختار مشابه، نانورقه As_2GeTe بازتابنده بهتری است. و برای هر دو سامانه ذکر شده از 6.5 eV به بعد بازتابندگی به شدت کاهش یافته و سامانه‌ها شفاف می‌شوند. علاوه بر این بیشینگی ضریب شکست در جهت x برای ساختار نانورقه As_2GeSe گزارش شد که در مقایسه با ساختار مشابه As_2GeTe تقریباً ضریب شکست یکسانی دارند. حداکثر ضریب شکست حدود 2.91 در محدوده‌ی انرژی نزدیک- مادون قرمز، طیف الکترومغناطیسی هستند. این مقدار بزرگ ضریب شکست، این سامانه‌ها را به عنوان کاندیدای بالقوه برای استفاده در دستگاه‌های نوری معرفی می‌کند. ضرایب جذب سامانه‌های مذکور از مرتبه 10^5 cm^{-1} که با ضریب جذب بلور سیلیکون در سلول‌های خورشیدی قابل مقایسه می‌باشد و همچنین مشاهده شد که این ساختارها دارای جذب نوری بالایی در محدود طول موج‌های مرئی تا فرو سرخ $200-800 \text{ nm}$ هستند. در پایان، بر طبق این پژوهش می‌توان این مواد را برای طراحی وسایل فتولتاییک و اپتوالکترونیک با کارایی بالا پیشنهاد کرد.



شکل ۱۰: ضریب جذب نانورقه و نانولوله

دسته‌صندلی $(6,6)$ As_2GeSe در راستای x و z

در شکل ۱۰، مشاهده می‌شود ضرایب جذب سامانه‌های مذکور از مرتبه 10^5 cm^{-1} که با ضریب جذب بلور سیلیکون در سلول‌های خورشیدی قابل مقایسه است [۱۲]. همچنین این ساختارها دارای جذب نوری بالایی در محدود طول موج‌های مرئی تا فرو سرخ $200-800 \text{ nm}$ هستند.

نتیجه گیری

در این مقاله، ویژگی نوری نانورقه و نانولوله دسته‌صندلی $(6,6)$ As_2GeSe با رهیافت نظریه تابعی چگالی بررسی گردیده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که رفتار تابع دی‌الکتریک برای هر دو سامانه ناهمسانگرد است. این رفتار ناهمسانگرد برای راستاهای درون صفحه‌ای در نانورقه و رشد نانولوله از انرژی‌های بسیار پایین تا حدود 6 eV است. از 6 eV به بعد در هر دو راستا سامانه‌ها کامل بر هم منطبق هستند. قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک نشان داد که بازه مهم برای فرایند انتقال‌های نوری حدوداً بین 1.0 eV تا 6 eV است. در نانورقه As_2GeSe قله‌های برجسته در راستای z در انرژی‌های بالاتری نسبت به راستای x واقع شده‌اند و در مورد نانولوله دسته‌صندلی $(6,6)$ ساختار ذکر شده این قله‌ها در راستای رشد لوله (z) در انرژی کمتری نسبت به راستای x قرار دارند که عمده این قله‌ها در هر دو سامانه به انتقال‌های نوری اوربیتال‌های p اتم‌های Ge، As و Se در زیر تراز فرمی و به اوربیتال‌های p اتم‌های As و Se در بالای تراز فرمی مربوط هستند. بررسی بازتابش نوری نشان

مراجع

- [1] A.K.Geim, K.S.Novoselov, "The rise of graphene," Nature materials, 6, 183-191, 2007.
- [2] A. N. Andriotis, E. Richter, and M. Menon, "Prediction of a new graphenelike Si_2BN solid," Phys. Rev. B 93(8), 81413-81424, 2016.
- [3] H. Salehi, Z. Javdani, P. Amiri, "Electrical and mechanical properties and thermoelectric efficiency enhancement of monolayer and bilayer Si_2BN : A first-principle study" Chemical Physics, 538, 110908, 2020.
- [4] Z. Javdani, H. Salehi, P. Amiri, "Effects of the HCN adsorption on the structural and electronic parameters of the Si_2BN : Density functional theory studies" Applied Surface Science, 527, 146941, 2020.
- [5] Q. Xie, J. Yuan, N. Yu, L. Wang, " Prediction of new group IV-V-VI nanosheet semiconductors

based on first principle Calculation,” *Comput Mater Sci*, 135, 160e4, 2017.

[6] Y.L. Zhu, J. H. Yuan, Y. Q. Song, K. H. Xue, S. Wang, and X. S. Miao, “Promising photocatalysts with high carrier mobility for water splitting in monolayer $\text{Ge}_2\text{P}_4\text{S}_2$ and $\text{Ge}_2\text{As}_4\text{S}_2$,” *International Journal of Hydrogen Energy*, 44, 21536-21545, 2019.

[7] پروین بهزادی؛ سید احمد کتابی؛ پیمان امیری “ بررسی ویژگی الکترونی نانو لوله دسته صندلی (6، 6) As_2GeSe ، بر اساس محاسبات اصول اولیه”، دومین همایش بین المللی علوم و فناوری نانو، دانشگاه تهران، مرداد ۱۴۰۰.

[8] P. Giannozzi, et al, “QUANTUM ESPRESSO: a modular and open source software project for quantum simulations of materials,” *J. Phys. Condens Matter*, 21, 395502, 2009.

[9] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, “Generalized gradient approximation made simple,” *Phys. Rev. Lett.* 77, 3865, 1996.

[10] J. H. Yuan, B. Gao, W. Wang, ”First principle calculations of the electronic structure and optical properties of Y-Cu Co-doped ZnO Acta,” *Physico-Chimica Sinica*, 31, 1302e8, 2015.

[11] P. Behzadi, S. A. Ketabi, P. Amiri, ”Electronic and Optical properties of two-dimensional As_2GeTe and P_2SiS monolayers: Density functional study, “*Chemical Physics*, 111215, No 547, 2021.

[12] P. Behzadi, S. A. Ketabi, P. Amiri, “First-principles investigation of the electronic and optical properties of As_2GeTe nanotubes,”*Solid State Communications*, 114421, No336,2021.

[13] H. Ding-An, Z. Ya-Guang, C. Wei-Cheng, D. Shao-Guang, ”Super-Luminal Phenomena in a Doubly Driven Four-Level System,” *Commun. Theor. Phys*, 55, 671–675, 2011.

[14] M. A. Green, M. J. Keevers, ”Optical properties of intrinsic silicon at 300 K,” *Prog Photovoltaics Res Appl*, 3, 189e92, 1995.

جدول ۱: تابع دی‌الکتریک استاتیکی $\epsilon_1(0)$ ، ریشه‌های قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک (eV) roots، پهنای بازه انرژی ممنوعه Δ (eV)، گاف نواری نوری E_{gap} (eV)، ثابت n_0 و ماکزیمم ضریب شکست n_{max} ثابت R_0 و ماکزیمم ضریب بازتاب R_{max} ، ماکزیمم ضریب جذب نوری α_{max} (10^5cm^{-1}) در انرژی فوتونی مربوطه E_{ph} (eV) برای هر دو سامانه نانولوله دسته‌صندلی، نانورقه As_2GeSe و جهت مقایسه با ساختار مشابه As_2GeTe در جهت x و z .

index	نانورقه As_2GeSe				نانولوله دسته‌صندلی (6×6) As_2GeSe			
	x-dir		z-dir		x-dir		z-dir	
$\epsilon_1(0)$	کار حاضر	کارتتوری [۱۱]	کار حاضر	کارتتوری [۱۱]	کار حاضر	کارتتوری [۱۲]	کار حاضر	کارتتوری [۱۲]
	۴,۳۷	۴,۴۸	۱,۳۸	۱,۴۰	۱,۹۵	۱,۶۵	۲,۵۷	۲,۲۴
First roots (eV)	۳,۱۲, ۳,۲۷	۲,۹۴, ۳,۳۰	۶,۰۶, ۶,۶۴	۶,۰۶, ۶,۶۰	-	-	۳,۲۴, ۳,۵۴	۳,۳۳, ۲,۸۸
Δ_1 (eV)	۰,۱۵	۰,۳۶	۰,۵۸	۰,۵۴	-	-	۰,۳۰	۰,۴۵
Second roots (eV)	۳,۲۹, ۶,۵۱	۳,۲۴, ۶,۰۰	-	-	-	-	-	-
Δ_2 (eV)	۳,۲۲	۲,۷۶	-	-	-	-	-	-
E_{gap}	۱,۰۵	۱,۱۰	۲,۰۰	۱,۸۰	۱,۲۰	۱,۲۳	۱,۱۷	۱,۱۲
$n(0)$	۲,۰۹	۲,۱۱	۱,۱۷	۱,۱۸	۱,۴۰	۱,۲۸	۱,۶۰	۱,۵۰
n_{max}	۲,۹۳	۲,۹۱	۱,۳۵	۱,۴۹	۱,۶۶	۱,۴۸	۲,۰۹	۱,۸۷
R_0 %	۱۲	۲۱	۶	۷	۳	۱,۵	۵	۴
R_{max} %	۴۶	۵۱	۳۲	۴۰	۸	۶	۳۳	۲۰
$\alpha_{max} : E_{ph}$	۳,۶۲ : ۳,۹۰	۳,۷۰ : ۴,۳۵	۳,۸۹ : ۶,۳۶	۴,۳۰ : ۶,۱۲	۱,۳۶ : ۴,۲۹	۰,۹ : ۲,۹۴	۲,۱۲ : ۳,۲۷	۲,۸۵ : ۱,۶۹



Investigation of optical properties of As_2GeSe nanosheet and nanotube based on first-principles calculations

P. Behzadi¹, P. Amiri^{2*}, S.A. Ketabi¹, A. Aliakbari²

¹ School of Physics, Damghan University, Damghan

² Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran

Abstract: In this paper, the optical properties of nanosheet and (6,6) armchair nanotube of As_2GeSe compound (the real and imaginary part of dielectric function, spectrum of energy loss, refractive index, extinction coefficient, and absorption coefficient) are investigated based on the density functional theory and pseudo-potential technique. The results obtained from the optical properties of the nanosheet show the anisotropy of this compound, especially at low and middle energies. The behavior of the dielectric function of this material is like a semiconductor material. The main peaks of the imaginary part of dielectric function for in-plane and nanotube growth directions start from low energies up to about 6 eV. The optical transmissions below the Fermi level are associated with the p-orbitals for the As, Ge, and S atoms and above the Fermi level to the p-orbitals of the Se and As atoms. Our results show that the highest reflectance for both in-plane direction at the energy of 5.66 eV is 46%.

Keywords: Optical properties, Nanosheet, Nanotube, As_2GeSe compound, Density functional theory