

بررسی خواص الکتریکی و اپتیکی گرافن با زیرلایه BC_3

سمیه بهزاد*، رعد چگل

گروه فیزیک مهندسی، دانشگاه صنعتی کرمانشاه، کرمانشاه، ایران

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ملایر، ملایر، ایران

دریافت: 1396/05/11 ویرایش نهایی: 1396/07/11 پذیرش: 1396/08/10

چکیده

در این مطالعه، خواص الکتریکی و اپتیکی گرافن با زیر لایه BC_3 بررسی می‌شود. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل، بر پایه نظریه تابعی چگالی انجام شده است. محاسبه انرژی کل دو حالت برهم‌چینش AA و AB نشان می‌دهد که حالت AB پایدارتر از حالت AA است. محاسبه ساختار نواری نشان می‌دهد که گرافن با زیرلایه BC_3 دارای گاف نواری کوچک به اندازه $0/15 \text{ eV}$ در نقطه K است. گاف نواری ایجاد شده با تغییر فاصله بین لایه‌های گرافن و BC_3 قابل تغییر است. تابع دی‌الکتریک گرافن با زیر لایه BC_3 را می‌توان به صورت یک برهم نهی از تابع دی‌الکتریک گرافن ایزوله و نانو صفحه BC_3 تک‌لایه در نظر گرفت که برهم‌کنش بین لایه‌ها باعث جابه‌جایی مکان قله‌ها می‌شود. وجود گاف انرژی قابل کنترل در گرافن با زیرلایه BC_3 ، آن را به یک کاندیدای مناسب برای استفاده در ترانزیستورهای اثر میدانی تبدیل می‌کند.

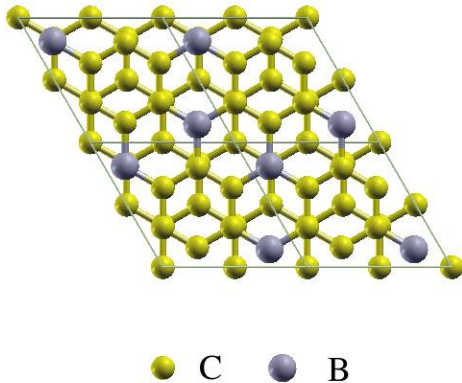
کلیدواژگان: گرافن، BC_3 تک لایه، نظریه تابعی چگالی، ساختار نواری، تابع دی‌الکتریک

مقدمه

کنون، ایجاد گاف نواری قابل کنترل در گرافن با استفاده از زیرلایه‌هایی مانند BN [7]، SiC [8]، $MoSe_2$ [9]، WS_2 [10] و SiO_2 [11] بررسی شده است. اخیراً ساختار شش گوشه‌ی دو بعدی BC_3 با استفاده از روش رشد همبافته بر روی صفحه $NbB_2(001)$ ساخته شده است [12] نانو صفحه‌ی دو بعدی BC_3 یک نیم‌رسانا با گاف انرژی $0/5-0/66 \text{ eV}$ است [13-15]. تغییر خواص الکتریکی نانو صفحه BC_3 به وسیله جذب هیدروژن، ایجاد نقص و تزریق ناخالصی، با استفاده از روش‌های تئوری بررسی شده است [16-18]. نانو نوارهای BC_3 دسته‌مبلی نیم‌رسانا هستند و نانو نوارهای BC_3 زیگزاگ نیم‌رسانا یا فلز هستند [۱۹،۲۰]. در این مقاله با استفاده از روش تابعی چگالی خواص الکتریکی و اپتیکی گرافن با زیرلایه BC_3 را بررسی می‌کنیم.

پس از ساخته شدن گرافن در آزمایشگاه در سال 2004 به خاطر رفتار الکترونیکی جذاب این سیستم دو بعدی، مانند تحرک‌پذیری بالای حامل‌های بار، تحقیقات زیادی بر روی این ماده انجام شده است [1]. گرافن یک نیم‌رسانا با گاف صفر است. برای استفاده از گرافن در قطعات فوتونیک و الکترونیک مانند ترانزیستورهای اثر میدانی نیاز به ایجاد گاف انرژی در نوار انرژی آن است، زیرا گاف انرژی برای کنترل خواص الکتریکی در قطعات الکترونیک بسیار ضروری است. روش‌های مختلفی برای ایجاد گاف در گرافن وجود دارد مانند اعمال میدان الکتریکی و کرنش تک محوری، استفاده از زیرلایه مناسب، اضافه کردن ناخالصی‌های شیمیایی یا تغییر ساختار گرافن [2-6]. تا

که حالت AB پایدارترین حالت با فاصله بین لایه‌ای 3.5 \AA و ثابت شبکه‌ای 5.15 \AA می‌باشد.



شکل 1. ساختار نانو صفحه دو لایه گرافن با زیرلایه BC_3 با چینش AB.

شکل 2 ساختار نواری گرافن با زیرلایه BC_3 با چینش AB را که به لحاظ انرژی پایدارتر است نشان می‌دهد. برای بررسی تأثیر زیرلایه BC_3 بر روی خواص الکتریکی گرافن، ساختار نواری گرافن ایزوله و نانو صفحه تک لایه BC_3 نیز در شکل 2 نشان داده شده‌اند. نانو صفحه BC_3 تک لایه دارای گاف غیر مستقیم به اندازه 0.62 eV می‌باشد. مینیمم نوار رسانش در نقطه M و ماکزیمم نوار ظرفیت در نقطه Γ قرار دارد (شکل 2 الف). نتایج به دست آمده با نتایج پیشین کاملاً در توافق است [20 و 19، 15-13]. نوار رسانش و ظرفیت در گرافن در نقطه ویژه‌ای در فضای K به نام نقطه دیراک و در انرژی فرمی یکدیگر را قطع می‌کنند. همان‌طور که در شکل 2 ج نشان داده شده است، در نزدیکی این نقطه انرژی الکترون به صورت خطی به بردار موج وابسته است. به علت رابطه پاشندگی خطی

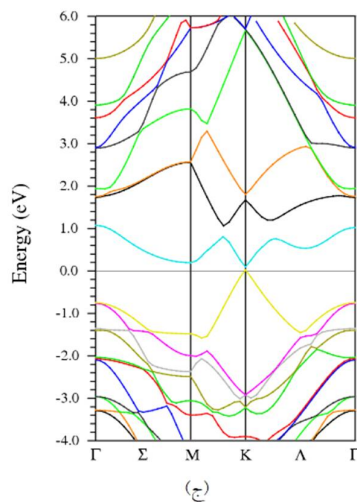
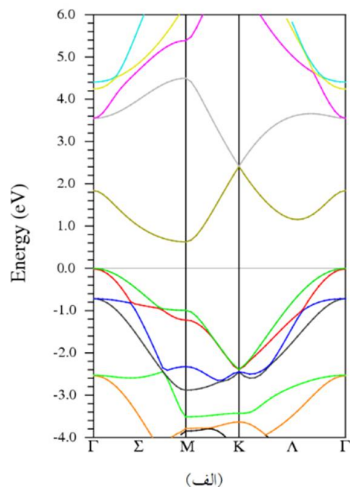
روش انجام محاسبات و شبیه سازی

انرژی کل و خواص الکتریکی با استفاده از روش تابعی چگالی و با استفاده از نرم افزار WIEN2K محاسبه شده است [21]. برای محاسبه انرژی تبدیلی-همبستگی از تقریب LDA استفاده شده است [22]. شعاع مافین-تین اتم‌های بورون و کربن برابر با $1/3 \text{ au}$ در نظر گرفته شده است. تعداد کل نقاط K در منطقه اول بریلوئن برابر 1500 است. برای شبیه سازی گرافن با زیرلایه BC_3 از یک سلول یکه شش گوشه استفاده شده است. برای حذف برهم کنش بین لایه‌ها در دو سلول یکه مجاور، فاصله عمودی بین لایه‌های مجاور در دو سلول یکه مجاور 12 \AA می‌باشد. سلول یکه گرافن با زیرلایه BC_3 شامل 2 اتم بورون و 14 اتم کربن می‌باشد. بهینه سازی مکان اتم‌ها در سلول یکه و همچنین بهینه سازی اندازه بردار شبکه به وسیله روش PORT¹ انجام شده است [21].

بحث و نتیجه گیری

برای نانو صفحه دو لایه گرافن با زیرلایه BC_3 دو حالت چینش AA و AB در نظر گرفته شده است. در حالت AA، اتم‌های کربن در لایه گرافن به طور مستقیم بالای اتم‌های کربن یا بورون در لایه BC_3 قرار می‌گیرند و برای چینش AB، نیمی از اتم‌های کربن در لایه گرافن دقیقاً بالای اتم‌های کربن یا بورون در لایه BC_3 قرار می‌گیرند و نیمی دیگر از اتم‌های کربن، بالای مرکز یکی از شبکه‌های شش ضلعی در لایه BC_3 قرار می‌گیرند. محاسبه انرژی کل این حالت‌ها نشان می‌دهد

¹ Port Method

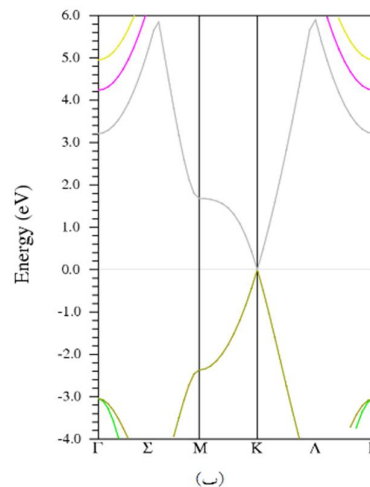


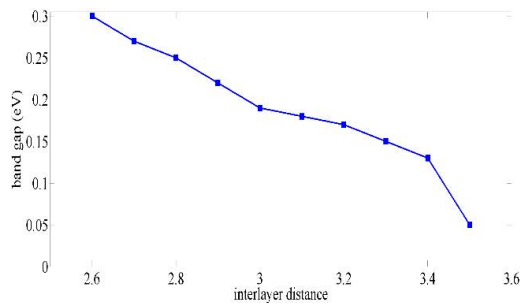
شکل 2. ساختار نواری (الف) نانو صفحه تک لایه BC_3 ، (ب) گرافن ایزوله و (ج) گرافن با زیرلایه BC_3 .

شکل‌های 3 الف و ب چگالی کل حالت‌های نانو صفحه دو لایه گرافن با زیرلایه BC_3 و چگالی حالت‌های جزئی اوربیتال‌های Pz گرافن تک لایه و نانو صفحه تک لایه BC_3 را نشان می‌دهد. چگالی حالت‌ها در نزدیکی تراز فرمی مربوط به اوربیتال‌های Pz اتم‌های کربن در گرافن است. از بالای تراز فرمی تا حدود 2eV ، اتم‌های بورون بیشترین سهم را در چگالی حالت‌ها دارا می‌باشند.

در گرافن سرعت فرمی الکترون‌های کم انرژی از مقدار انرژی آن مستقل است. بنابراین گرافن نیمه فلزی دارای گاف انرژی صفر است که ساختار نواری آن در منطقه بریلوین مخروطی شکل است.

در شکل 2 ج گذار فلز-نیم‌رسانا در گرافن به علت برهم‌کنش با زیرلایه BC_3 مشاهده می‌شود. مینیمم نوار رسانش گرافن در نقطه K، در حضور زیرلایه BC_3 ، به سمت انرژی‌های بالا جابجا می‌شود و گاف نواری مستقیم کوچک به اندازه 0.15 eV در نقطه K ایجاد می‌شود. نتایج محاسبه شده با نتایج قبلی در تطابق می‌باشند [23]. در حضور زیرلایه BC_3 نیز رابطه پاشندگی نوارها در نزدیکی نقطه K و در انرژی فرمی به صورت خطی است و خواص الکتریکی جالب گرافن در حضور زیرلایه BC_3 حفظ می‌شوند. ایجاد گاف نواری در گرافن با زیرلایه BC_3 به علت شکسته شدن تقارن زیر شبکه‌های کربن در گرافن است.





شکل 4. تغییرات اندازه گاف نواری با تغییر فاصله بین گرافن و نانو صفحه BC_3 .

در ادامه به بررسی خواص اپتیکی نانو صفحه دو لایه گرافن با زیرلایه BC_3 می پردازیم. خواص اپتیکی با محاسبه قسمت موهومی تابع دی الکتریک $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ و تابع اتلاف انرژی الکترون بررسی می شوند.

قسمت موهومی تابع دی الکتریک با محاسبه عناصر ماتریس تکانه بین توابع موج اشغال شده و اشغال نشده و بر طبق فرمول زیر محاسبه می شود [24]:

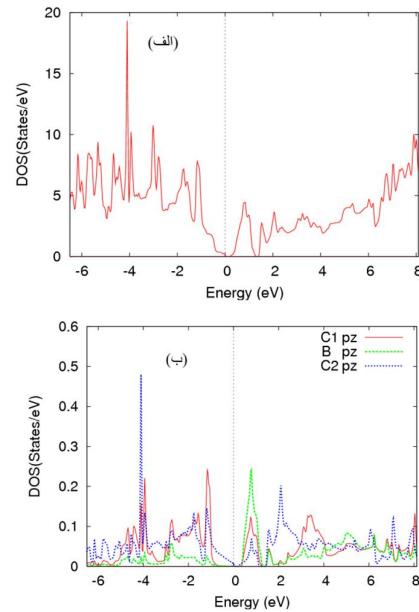
$$\text{Im } \epsilon_{\alpha\beta}^{\{inter\}}(\omega) = \frac{\hbar^2 e^2}{\pi m^2 \omega^2} \sum_n \int dk \langle \psi_k^{c_n} | P^\alpha | \psi_k^{v_n} \rangle \langle \psi_k^{c_n} | P^\beta | \psi_k^{v_n} \rangle \delta(E_K^{c_n} - E_K^{v_n} - \omega)$$

رابطه بین تابع دی الکتریک و تابع اتلاف انرژی الکترون به صورت زیر است:

$$L(\omega) = -\text{Im} \left(\frac{1}{\epsilon(\omega)} \right) = \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)}$$

قسمت موهومی تابع دی الکتریک و تابع اتلاف انرژی در دو راستای میدان اعمالی موازی (راستای x) و عمود (راستای z) بر صفحه گرافن با زیرلایه BC_3 محاسبه می شوند.

شکل 5 قسمت موهومی تابع دی الکتریک گرافن با زیرلایه BC_3 را نشان می دهد. قسمت موهومی تابع دی الکتریک گرافن ایزوله و نانو صفحه تک لایه BC_3 نیز در شکل 5 نشان داده شده اند.



شکل 3. چگالی کل حالت های گرافن با زیرلایه BC_3 و صفحه تک لایه BC_3 . (ب) چگالی حالت های جزئی اوربیتال های Pz اتم های کربن (C2) در گرافن و اتم های کربن (C1) و بورون در صفحه BC_3 .

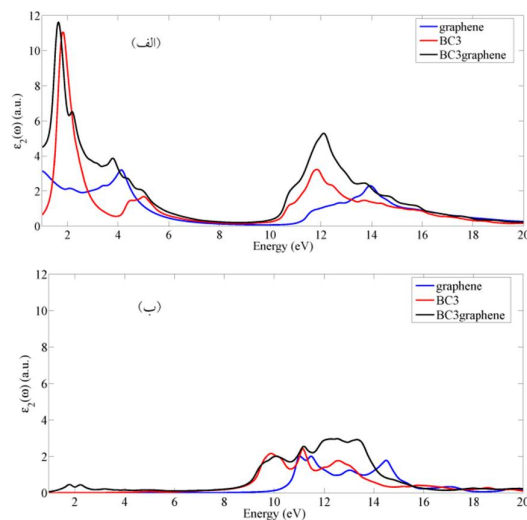
شکل 4 تغییرات اندازه گاف نواری ایجاد شده با تغییر فاصله بین لایه ای گرافن و BC_3 را نشان می دهد. مقدار گاف نواری ایجاد شده با افزایش (کاهش) فاصله بین لایه ای کاهش (افزایش) می یابد، زیرا کاهش (افزایش) فاصله بین لایه ای باعث افزایش (کاهش) برهم کنش گرافن و زیرلایه BC_3 می شود. با تغییر فاصله بین لایه ای از $2/6 \text{ \AA}$ به $3/5 \text{ \AA}$ مقدار گاف نواری ترکیب از $0/3 \text{ eV}$ به $0/05 \text{ eV}$ تغییر می کند. بنابراین با تغییر فاصله بین لایه ای می توان اندازه گاف نواری ایجاد شده را تغییر داد.

ویژگی های الکتریکی خاص گرافن با زیرلایه BC_3 از جمله تحرک پذیری بالای حامل های بار و وجود گاف نواری آن را به یک کاندید بسیار مناسب برای استفاده در ترانزیستورهای اثر میدانی تبدیل می کند.

$\pi \rightarrow \pi^*$ در راستای M-K و در مجاورت نقطه M است. در بازه انرژی 7 تا 11eV، قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک تقریباً برابر صفر است. در انرژی‌های بیشتر از 11eV تابع دی‌الکتریک دارای قله جذبی در انرژی 13.9eV است که ناشی از گذارهای $\sigma \rightarrow \sigma^*$ در مجاورت نقطه M است. قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک گرافن ایزوله در راستای z، در انرژی‌های کمتر از 10eV برابر با صفر است و در انرژی‌های بیشتر از 10eV، دارای یک قله دوگانه حول 11.2eV و قله جذبی در 14.5eV است. تابع دی‌الکتریک گرافن با زیرلایه BC₃ را می‌توان به صورت برهم‌نهی از تابع دی‌الکتریک گرافن ایزوله و نانو صفحه تک لایه BC₃ در نظر گرفت که برهم‌کنش بین گرافن و زیرلایه BC₃ باعث جابه‌جایی قله‌ها می‌شود. قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک گرافن با زیرلایه BC₃ در راستای x، بیشترین جذب را حول 12.1eV و 1.7 نشان می‌دهد و در بازه انرژی بین 5 تا 10 eV هیچ قله جذبی وجود ندارد.

نمودار $\epsilon_2(\omega)$ گرافن با زیرلایه BC₃ در راستای z، شامل چندین قله جذب در بازه انرژی بین 9 تا 15eV است. همچنین، تابع دی‌الکتریک گرافن با زیرلایه BC₃ جذب نوری قویتری را در مقایسه با تابع دی‌الکتریک گرافن ایزوله و نانو صفحه تک لایه BC₃ نشان می‌دهد زیرا برهم‌کنش بین دو لایه در گرافن با زیرلایه BC₃ موجب ایجاد همپوشانی حالت‌های الکترونیکی می‌شود و الکترون‌ها می‌توانند بین لایه‌ها برانگیخته شوند. تابع اتلاف انرژی الکترون متناسب است با احتمال اینکه الکترون‌های عبوری از حجم ماده انرژی خود را از دست دهند. قله‌هایی که در نمودار تابع اتلاف دیده می‌شوند توصیف کننده پارامترهای مربوط به پاسخ پلاسما می‌باشند.

شکل 5 نشان می‌دهد که تابع دی‌الکتریک گرافن با زیرلایه BC₃ در دو راستای x و z ناهمسانگرد است. شدت تابع دی‌الکتریک در راستای x بیشتر از راستای z است.



شکل 5. قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک گرافن با زیرلایه BC₃، گرافن ایزوله و BC₃ تک لایه در راستای (الف) x و (ب) z.

از قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک برای بررسی انتقال‌های بین نواری استفاده می‌شود. با توجه به شکل 5 دو ناحیه جذب در نمودار $\epsilon_2(\omega)$ نانو صفحه تک‌لایه BC₃ در راستای x مشاهده می‌شود، ناحیه با جذب بالا بین 0.5 تا 5eV و ناحیه با جذب پایین بین 10 تا 13 eV که صفحه BC₃ عبور بالایی را نشان می‌دهد. در ناحیه بین 5.0 تا 10eV هیچ قله جذبی وجود ندارد. در ناحیه با جذب بالا، تابع دی‌الکتریک BC₃ تک لایه بیشترین جذب را حول 1.9eV نشان می‌دهد. اولین قله جذب در نمودارهای $\epsilon_2(\omega)$ ، که قله جذب نیز می‌باشد، مربوط به اولین گذار اپتیکی است. نمودار $\epsilon_2(\omega)$ نانو صفحه تک لایه BC₃ در راستای z هیچ قله جذبی را در انرژی‌های کمتر از 9eV نشان نمی‌دهد. در راستای x، گرافن ایزوله دارای قله جذبی در انرژی 4.2 eV است. این قله مربوط به گذارهای

مراجع

[1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. Dubonos, I.Grigorieva, A. Firsov, *Science* **306** (2004) 666-669.

[2] S.Y. Zhou, G.H. Gweon, A.V. Fedorov, P.N. First, W.A. de Heer, D.H. Lee, F. Guinea, A.H. Castro Neto, A. Lanzara, Substrate-induced band gap opening in epitaxial graphene, *Nature Materials* **6** (2007) 770-775

[3] Y.W. Son, M.L. Cohen, S.G. Louie, Energy Gaps in Graphene Nanoribbons, *Physical Review Letters* **97** (2006) 216803

[4] V.M. Pereira, A.H. Castro Neto, N.M.R. Peres, A tight-binding approach to uniaxial strain in graphene, *Physical Review B* **80** (2009) 045401

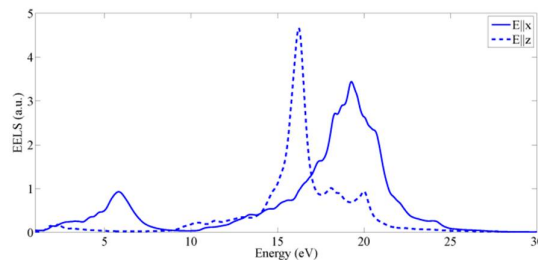
[5] F. Xia, D.B. Farmer, Y. Lin, P. Avouris, Graphene field-effect transistors with high on/off current ratio and large transport band gap at room temperature, *Nano Letters* **10** (2010) 715

[6] Y. Zhang, T. Tang, C. Girit, Z. Hao, M. C. Martin, A. Zettl, M.F. Crommie, Y.R. Shen, F. Wang, Direct observation of a widely tunable band gap in bilayer graphene, *Nature* **459** (2009) 820

[7] Y. Fan, M. Zhao, Z. Wang, X. Zhang, H. Zhang, Tunable electronic structure of graphene/boron nitride hetro bilayers, *Applied Physics Letters* **98** (2011) 083103.

[8] E.Rollings, G.-H.Gweon, S.Y.Zhou, B.S.Mun, J.L.McChesney, B.S.Hussain, A.V.Fedorov, P.N.First, W.A.de Heer, A.Lanzara, Synthesis and characterization of atomically thin graphite films on a silicon carbide substrate, *The Journal of Physics and Chemistry of Solids* **67** (2006) 2172–2177.

[9] Y. Ma, Y. Dai, W. Wei, C. Niu, L. Yu, B. Huang, First-Principles Study of the Graphene@MoSe₂Heterobilayers, *The*



شکل 6: نمودار اتلاف انرژی گرافن با زیرلایه BC₃ در راستای x و z.

شکل 6 طیف اتلاف انرژی گرافن با زیرلایه BC₃ را نشان می‌دهد. طیف اتلاف انرژی الکترون در راستای x، شامل یک قله کوچک در 5/8 eV و یک قله پهن و بزرگ در 19/3 eV است. طیف اتلاف انرژی الکترون در راستای z، دارای بیشینه‌ای در 16/2 eV است.

نتیجه گیری

در این مقاله ویژگی‌های الکتریکی و اپتیکی گرافن با زیرلایه BC₃، با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. ساختار نواری محاسبه شده بیانگر وجود یک گاف نواری مستقیم کوچک در ترکیب است. در حضور زیرلایه BC₃ نیز رابطه پاشندگی نوارها در نزدیکی سطح فرمی به صورت خطی است و خواص جالب الکتریکی گرافن در حضور زیرلایه BC₃ حفظ می‌شوند. مقدار گاف نواری ایجاد شده با افزایش (کاهش) فاصله بین لایه‌ای کاهش (افزایش) می‌یابد. قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک گرافن با زیرلایه BC₃ بیشترین جذب را حول 1/7 eV نشان می‌دهد. این نتایج می‌تواند در طراحی قطعات الکترواپتیکی جدید مورد استفاده قرار گیرند.

- Ni-doped BC₃ honeycomb structure, *Journal of Applied Physics* **111** (2012) 03430.
- [19] S. Dutta, K. Wakabayashi, Anomalous energy-gap behavior of armchair BC₃ ribbons due to enhanced p-conjugation, *The Journal of Materials Chemistry* **22** (2012) 20881.
- [20] S. Dutta, K. Wakabayashi, Edge state induced metallicity in zigzag BC₃ ribbons, *The Journal of Materials Chemistry C* **1** (2013) 4854–4857.
- [21] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, WIEN2k code, Vienna University of Technology, Inst. of Physical and Theoretical Chemistry, Getreidemarkt 9/156, A-1060 Vienna/Austria.
- [22] J.P. Perdew, A. Zunger, Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, *Physical Review B* **23** (1981) 5048-5079.
- [23] S.-s. Li, C.-w. Zhang, W.-x. Ji, F. Li, P.-j. Wang, Tunable electronic properties induced by a defect-substrate in graphene/BC₃ heterobilayers, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **16** (2014) 22861-22866.
- [24] G.Y. Guo, K.C. Chu, D.-s. Wang, C.-g. Duan, Linear and nonlinear optical properties of carbon nanotubes from first-principles calculations, *Physical Review B*, **69** (2004) 205416.
- Journal of Physics and Chemistry of Solids C* **115** (2011) 20237–20241.
- [10] S.S. Li, C.W. Zhang, First-principles study of graphene adsorbed on WS₂ monolayer *Journal of Applied Physics* **114** (2013) 183709.
- [11] M. Ishigami, J.H. Chen, W.G. Cullen, M.S. Fuhrer, E.D. William, Atomic Structure of Graphene on SiO₂, *Nano Letters* **7** (2007) 1643–1648.
- [12] H. Yanagisawa, T. Tanaka, Y. Ishida, E. Rokuta, S. Otani, C. Oshima, Phonon dispersion curves of stable and metastable BC₃ honeycomb epitaxial sheets and their chemical bonding: Experiment and theory, *Physical Review B* **73** (2006) 045412.
- [13] D. Tomanek, R.M. Wentzcovitch, S.G. Louie, M.L. Cohen, Calculation of electronic and structural properties of BC₃, *Physical Review B* **37** (1988) 3134.
- [14] Y. Miyamoto, A. Rubio, S.G. Louie, M.L. Cohen, Electronic properties of tubule forms of hexagonal BC₃, *Physical Review B* **50** (1994) 18360
- [15] Y. Ding, Y. Wang, J. Ni, Electronic structures of BC₃ nanoribbons, *Applied Physics Letters* **94** (2009) 073111
- [16] Y. Ding, J. Ni, Tuning Electronic Properties of Hydro-Boron–Carbon Compounds by Hydrogen and Boron Contents: A First Principles Study, *The Journal of Physical Chemistry C* **113** (2009) 18468.
- [17] Y. Ding, Y. Wang, J. Ni, Structural, Electronic, and Magnetic Properties of Defects in the BC₃ Sheet from First Principles, *The Journal of Physical Chemistry C* **114** (2010) 12416-12421.
- [18] X. Lin, J. Ni, Electronic and magnetic properties of substitutionally Fe-, Co-, and