

Research Paper

Effect of the Electric Field on the Electronic and Optical Properties of the Bilayer Graphene, Bilayer Boron Nitride and Graphene/Boron Nitride

Mohammad Hasani^{1*}, Raad Chegel²

Received: 2019.09.04

Accepted: 2020.01.25

Abstract

In this study, we have investigated the effect of the external electric field on the electronic and optical properties of the AB stacked bilayer graphene, bilayer boron nitride and bilayer graphene/boron nitride utilizing the DFT. The results have shown that in the presence of the external electric field, the electronic properties of all structures have been changed and their energy gaps are tunable in this way. Exerting the electric field on the bilayer graphene structure, its energy dispersion relation is changed and the parabolic shape of the bands at the K-point is changed to a new form called the "Mexican Hat". The presence of an electric field of magnitude 1 V/Å increases the energy band gap of this structure and ultimately reaches 0.28 eV. However, exerting field and increasing its intensity reduced the energy band gap of the boron nitride bilayer, such that in the presence of a field of intensity 3.5 V/Å, the energy band gap decreases by 88% and reaching about 0.53 eV. Also, we see the semiconductor-metal transition for this structure in the presence of stronger fields. Due to exerting the field, the band gap of the graphene/boron nitride bilayer increased with less intensity and the bands maintains their parabolic shape in the K point. Finally, the effect of electric field on the optical diagrams of these structures is investigated. Applying the external electric field on these structures changes the magnitude and location of the optical diagram peaks. To investigate this, we have applied only the perpendicular polarization. As a consequence of the presence of an external electric field, an increase in the static dielectric function is visible for all three structures. It is also observed that the application of the electric field also affects the plasmonic behavior of the systems.

Keywords: *Graphene, Boron Nitride, Electric Field, Gap Modulation, Dielectric Function.*

¹ PhD Student, Department of Physics, Faculty of Science, University of Malayer, Malayer, Iran. (Corresponding Author) Email: m.hasani60@gmail.com

² Associate Professor, Department of Physics, Faculty of Science, University of Malayer, Malayer, Iran. Email: raad.chegel@gmail.com

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران، دانشگاه الزهرا

سال نهم، پیاپی ۱۶، بهار ۱۳۹۸

مقاله پژوهشی

تأثیر میدان الکتریکی در خواص الکترونی و اپتیکی گرافین دولایه و بورون نیتريد دولایه و دولایه گرافین/بورون نیتريد^۱

محمد حسنی*^۲، رعد چگل^۳

تاریخ دریافت: ۱۳۹۸/۰۶/۱۳

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۱۱/۰۵

چکیده

در این مقاله با استفاده از نظریه تابعی چگالی، تأثیر میدان الکتریکی خارجی را در خواص الکترونی و اپتیکی گرافین دولایه و بورون نیتريد دولایه و دولایه گرافین/بورون نیتريد با چینش AB بررسی کرده ایم. بررسی ما نشان می دهد که ساختار الکترونی تمام این ساختارها در حضور میدان الکتریکی تغییر کرده، گاف انرژی آنان از این طریق کنترل پذیر می شود. با اعمال میدان الکتریکی بر ساختار گرافین دولایه، رابطه پاشندگی انرژی آن تغییر نموده و شکل سهموی نوارها در نقطه K به شکل جدیدی موسوم به «کلاه مکزیکی» تغییر می یابد. حضور میدان الکتریکی $1V/\text{Ang}$ موجب افزایش گاف انرژی این ساختار و نهایتاً رسیدن آن به مقدار 0.28 eV می شود. با این حال، اعمال میدان و افزایش شدت آن باعث کاهش گاف انرژی بورون نیتريد دولایه شده، به نحوی که در حضور میدانی با شدت $3.5V/\text{Ang}$ دچار کاهش ۸۸ درصدی شده و به حدوداً

¹ DOI: 10.22051/jap.2020.28102.1133

^۲ دانشجوی دکتری، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر، ایران (نویسنده مسئول).

m.hasani60@gmail.com

^۳ دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر، ایران. raad.chegel@gmail.com

۰/۵۳ eV می‌رسد. نهایتاً گذار نیم‌رسانا فلز را برای این ساختار در حضور میدان‌های قوی تر شاهد هستیم. گاف انرژی دولایه گرافین/بورون‌نیتريد نسبت به گرافین دولایه بر اثر اعمال میدان با شدت کمتری افزایش یافته، همچنین نوارها شکل سهموی خود را در نقطه K حفظ می‌کنند. در نهایت تأثیر میدان الکتریکی در نمودارهای اپتیکی این ساختارها بررسی شده است. اعمال میدان الکتریکی خارجی بر این سه ساختار موجب تغییر در شدت و محل قله‌های نمودارهای اپتیکی می‌شود. در بررسی این موضوع، صرفاً تابشی با قطبش متعامد را به کار گرفته‌ایم. به عنوان پیامد حضور میدان الکتریکی خارجی، افزایش تابع دی‌الکتریک استاتیک برای هر سه ساختار مشاهده می‌شود. همچنین مشاهده می‌شود که اعمال میدان الکتریکی بر رفتار پلاسمونی سیستم‌ها نیز اثرگذار است.

واژگان کلیدی: گرافین، بورون‌نیتريد، میدان الکتریکی، تنظیم گاف، تابع دی‌الکتریک.

۱. مقدمه

گرافین لایه‌ای با ضخامت یک اتم است که از زمان کشف تا به حال موضوع تحقیقات گسترده‌ای بوده است [۱، ۲]. به دلیل وجود تقارن میان دو زیرشبکه کربنی، گرافین تک و دولایه هر دو نیم‌رساناهایی با گاف انرژی صفر هستند [۳، ۴]. برخورداری از گاف انرژی صفر موجب محدودیت در کاربرد این مواد در صنعت الکترونیک شده است [۵]. از این رو، شیوه‌های مختلفی برای ایجاد گاف انرژی مخالف صفر در گرافین تک و دولایه پیشنهاد شده است [۴] که اعمال میدان الکتریکی متعامد خارجی از رایج‌ترین این شیوه‌ها به شمار می‌آید [۶]. البته این شیوه تأثیری در ساختار نواری گرافین تک‌لایه ندارد [۷] اما در حضور میدان الکتریکی ۱۷/nm، گاف انرژی گرافین دولایه با نحوه چینش AB، به مقدار ۰/۲۳۴eV می‌رسد [۸]. مشاهده شده است که گاف انرژی این ماده در محدوده میدان‌های الکتریکی ضعیف به طور خطی با میدان، افزایش می‌یابد [۹].

با توجه به تأثیر میدان الکتریکی در ساختار نواری گرافین دولایه، سایر خواص آن نیز تحت تأثیر قرار گرفته و تحقیقات هم این موضوع را تأیید کرده است [۷، ۱۰، ۱۱]. برای مثال، قله ساختاری عمده موجود در نمودار تابع دی‌الکتریک گرافین دولایه تحت تأثیر میدان عملی دچار جابه‌جایی به سوی انرژی‌های کمتر شده، به طوری که محل این قله از ۱۱۰ meV در میدان الکتریکی ۱/۰۷/nm به ۲۴۰ meV در میدان الکتریکی ۳/۰۷/nm انتقال می‌یابد [۷].

بورون‌نیتريد تک‌لایه از ثابت شبکه‌ای نزدیک به گرافین برخوردار بوده، ولی برخلاف آن عابقی با گاف انرژی بزرگ می‌باشد که دلیل این موضوع، ناهمسانی دو اتم بورون و نیتروژن

موجود در سلول واحد است [۱۲]. این ماده زیرلایه مناسبی برای ناهمسان ساختن زیرشبکه‌های کربنی موجود در گرافین به شمار می‌رود [۱۳]. بورون‌نیتريد دولایه نیز عایقی با گاف انرژی در حدود $4/5\text{eV}$ می‌باشد [۱۴] و این گاف انرژی بزرگ از ماهیت یونی ناچیز پیوند شیمیایی میان دو اتم بورون و نیتروژن ناشی می‌شود [۱۵].

اگر گاف انرژی چندلایه‌های متشکل از ورقه‌های بورون‌نیتريد به محدوده انرژی‌های در شکل (c) ۶، در نمودار مربوط به دولایه گرافین/بورون‌نیتريد، افزایش میدان موجب افزایش شدت قله واقع در انرژی $4/0\text{eV}$ شده، قله غالب موجود در $12/7\text{eV}$ نیز دچار کاهش شدت و انتقال به سوی انرژی‌های کمتر می‌شود. افزایش شدت و انتقال به سوی انرژی‌های کمتر را نیز برای قله‌های موجود در $13/0\text{eV} < E < 18/0\text{eV}$ شاهدیم.

$1-2\text{eV}$ برسد آنگاه می‌توان این مواد را به عنوان نیم‌رساناهایی با گاف انرژی مناسب جهت ساخت ترانزیستورهای اثر میدانی FET به کار گرفت [۱۶]. گاف انرژی بورون‌نیتريد دولایه با اعمال میدان الکتریکی کاهش می‌یابد [۱۷]، به طوری که برای بورون‌نیتريد دولایه با چینش AB، اعمال میدان $3/60\text{V}/\text{Ang}$ موجب کاهش گاف انرژی تا حد صفر خواهد شد [۱۶].

مطالعات نشان داده‌اند که گرافین تک‌لایه بر روی زیرلایه بورون‌نیتريد، گاف نواری کوچکی در نقطه دیراک دارد [۱۳، ۱۸] و این گاف کوچک را نیز می‌توان با اعمال میدان الکتریکی تا حدی افزایش داد [۱۴]. وجود زیرلایه بورون‌نیتريد علاوه بر تغییر در خواص الکترونی گرافین، خواص اپتیکی آن را نیز متأثر می‌کند [۱۹]. در نمودار تابع دی‌الکتريک دولایه گرافین/بورون‌نیتريد دو قله در انرژی‌های $3/9\text{eV}$ و $5/6\text{eV}$ رخ داده که به ترتیب ناشی از گذارهای درون لایه گرافینی و درون لایه بورون‌نیتريد هستند [۲۰، ۲۱].

علی‌رغم پژوهش‌های صورت گرفته درباره تأثیر میدان الکتریکی متعامد خارجی در خواص الکترونی این مواد، در زمینه اثرات میدان بر خواص اپتیکی آنان پژوهشی صورت نگرفته است. ما در این مقاله، با استفاده از نظریه تابعی چگالی و کد محاسباتی سیستا، خواص الکترونی و اپتیکی گرافین و بورون‌نیتريد دولایه و نیز دولایه گرافین/بورون‌نیتريد با چینش AB را در حضور میدان الکتریکی متعامد خارجی متعامد بررسی خواهیم نمود.

۲. روش انجام محاسبات و شبیه‌سازی

محاسبات در قالب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از کد سیستا [۲۲] صورت گرفته است. نظریه تابعی چگالی به طور رسمی شیوه‌ای دقیق به شمار رفته، با این حال در محاسبات عملی باید انرژی همبستگی-تبادلی را به صورت یک تابعی از چگالی تقریب زد. از جمله این تقریب‌های استاندارد،

۳۰ / تأثیر میدان الکتریکی در خواص الکترونی و اپتیکی گرافین دولایه و بورون‌نیتريد دولایه و دولایه ...

تقریب چگالی موضعی (LDA) است [۲۳]. علی‌رغم سادگی، این تقریب در توصیف ساختار اتمی، خواص ارتعاشی و خواص کشسانی محدوده وسیعی از سیستم‌ها موفق بوده است. با این حال، LDA در محاسبه انرژی واکنش‌های شیمیایی به اندازه کافی دقیق نبوده و علی‌الخصوص به تخمین غلط انرژی‌های پیوند مولکول‌ها و جامدات می‌انجامد [۲۴، ۲۵]. با وجود این، با توجه به سازگاری بهتر تقریب LDA با نتایج تجربی و به منظور مقایسه نتایج با کارهای قبلی که غالباً با تقریب LDA صورت گرفته‌اند، ما نیز انرژی‌های همبستگی-تبادلی را با همین تقریب در نظر گرفته‌ایم.

در انجام محاسبات، مجموعه پایه (DZP) استفاده شده است و برای اجتناب از برهم‌کنش دولایه‌های مجاور، یک فاصله خلأ در حدود 30 \AA در امتداد محور Z در نظر گرفته‌ایم. تعداد نقاط Kی بهینه جهت محاسبه خواص الکترونی برابر $1 \times 30 \times 30$ و برای بررسی خواص اپتیکی برابر $3 \times 90 \times 90$ در نظر گرفته شد. تمام ساختارها در غیاب میدان الکتریکی به نحوی بهینه شده‌اند که نیروهای بین مولکولی کمتر از 0.1 eV/\AA باشد. جهت میدان الکتریکی خارجی را عمود بر دولایه‌ها، در جهت مثبت محور Z، در نظر گرفته‌ایم. فاصله بین لایه‌ای و پارامتر شبکه برای گرافین دولایه به ترتیب برابر 3.35 \AA [۹] و 2.488 \AA در نظر گرفته شده‌اند [۷]. برای دولایه گرافین/بورون‌نیتريد نیز این پارامترها را به ترتیب معادل 3.22 \AA و 2.475 \AA در نظر گرفته‌ایم [۱۵]. در مطالعه دولایه گرافین/بورون‌نیتريد، برای لایه گرافینی از ثابت شبکه مربوط به لایه بورون‌نیتريد بهره برده‌ایم [۲۶]. فاصله بین لایه‌ای و پارامتر شبکه برای بورون‌نیتريد دولایه نیز به ترتیب برابر 3.071 \AA و 2.490 \AA به حساب آورده شده‌اند [۱۵].

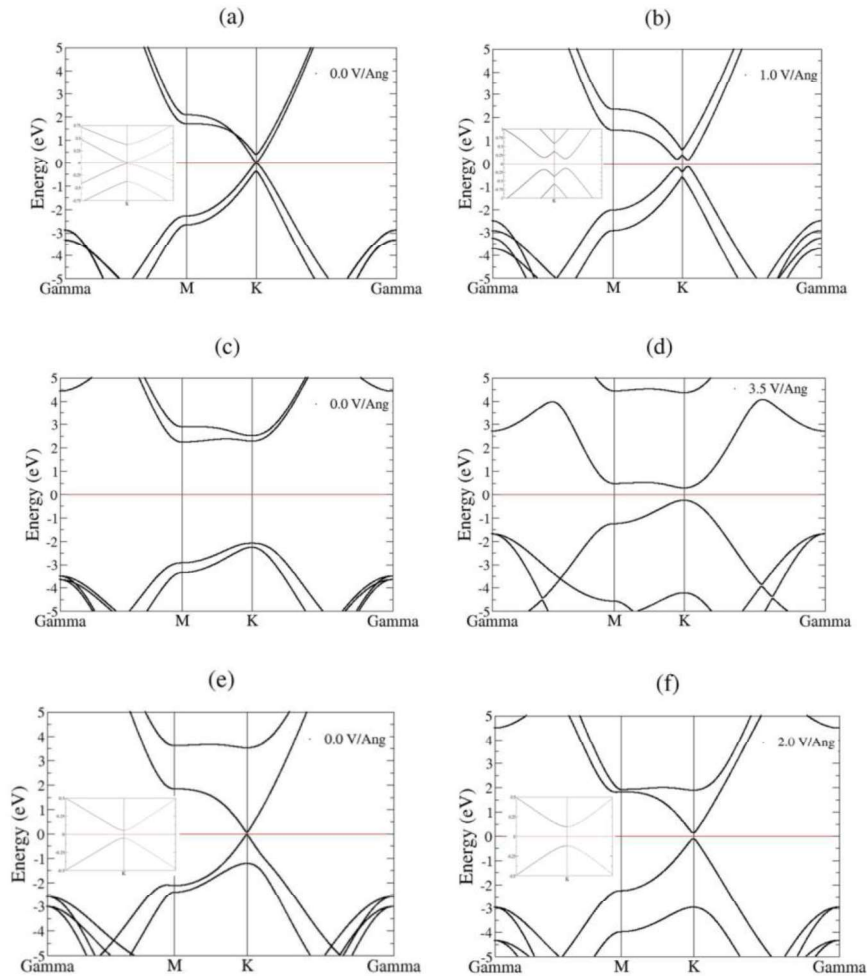
در این مقاله، ساختارهایی با چینش AB را بررسی می‌کنیم که در آنها یکی از دو اتم موجود در سلول واحد لایه بالایی روی اتمی از لایه پایین و دیگری در بالای مرکز هگزاگونالی از این لایه قرار می‌گیرد. در ساختار دولایه گرافین/بورون‌نیتريد نیز اتم‌های بورون دقیقاً در بالای اتم‌های کربن لایه زیرین و اتم‌های نیتروژن نیز در مراکز هگزاگونال این لایه واقع شده‌اند.

۳. نتایج

الف. خواص الکترونی

ساختار نواری دولایه‌های تحت بررسی در غیاب و همچنین در حضور میدان الکتریکی متعامد خارجی در شکل ۱ ارائه شده‌اند. همان‌طور که در شکل ۱(a) برای گرافین دولایه در غیاب میدان الکتریکی دیده می‌شود، بالاترین نوار ظرفیت و پایین‌ترین نوار رسانش در نقطه K با هم در تماس هستند. از این‌رو، این ساختار از گاف انرژی صفر برخوردار است. با توجه به شکل ۱(b)، رابطه

پاشندگی ساختار با اعمال میدان الکتریکی بر آن تغییر نموده و شکل سهموی نمودار در نقطه K به شکل جدیدی موسوم به «کلاه مکزیکی» تغییر می‌یابد [۹]. همچنین با افزایش شدت میدان، شدت تغییرات حاصل نیز افزایش می‌یابد.



شکل ۱ ساختار نواری (a) و (b): گرافین دولایه، (c) و (d) بورون‌نیتريد دولایه، (e) و (f) دولایه‌ای گرافین / بورون‌نیتريد در غياب و در حضور میدان الکتریکی.

ساختار نواری بورون‌نیتريد دولایه در غياب و در حضور میدانی با شدت $3/5 \text{ V/Ang}$ نیز به ترتیب در شکل‌های (c) و (d) ارائه شده‌اند. برای گاف انرژی این ماده در غياب میدان

الکتریکی مقدار $4/33 \text{ eV}$ به دست آمد که با نتایج قبلی در توافق است [۱۴, ۱۷]. محاسبات نشان می‌دهند که اعمال میدان موجب کاهش گاف انرژی ساختار شده، به نحوی که در حضور میدانی با شدت $3/5V/\text{Ang}$ دچار کاهش ۸۸ درصدی شده و به حدود $0/53 \text{ eV}$ می‌رسد که نسبت به گاف این ساختار در غیاب میدان بسیار کوچک است. نتایج ما راجع به کاهش گاف انرژی بورون‌نیتريد دولایه از طریق اعمال میدان با مطالعات قبلی در توافق است [۱۶].

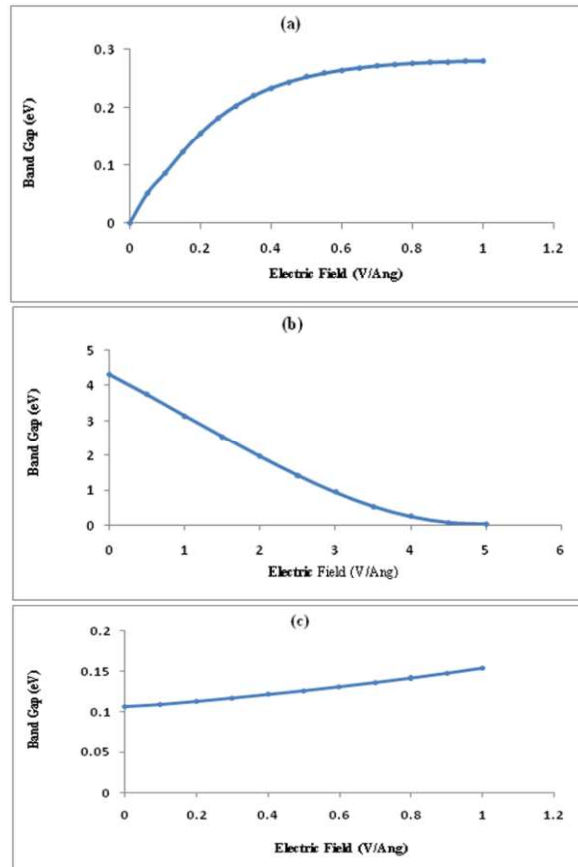
ساختار نواری دولایه گرافین/بورون‌نیتريد با چینش AB در غیاب و در حضور میدانی با شدت $2/0V/\text{Ang}$ نیز به ترتیب در شکل‌های (e) ۱ و (f) ۱ ارائه شده‌اند. گاف انرژی این ماده در غیاب میدان برابر 107 meV بوده که با نتیجه قبلی، 104 meV ، سازگاری خوبی دارد [۱۴]. ظهور این گاف ناچیز به عدم تقارن تحمیلی از زیرلایه نامتقارن بورون‌نیتريد بر لایه گرافین نسبت داده می‌شود. رفتار این ساختار در حضور میدان شباهت‌ها و تفاوت‌هایی با گرافین دولایه دارد. برای مثال، گاف انرژی آن نسبت به گرافین دولایه با شدت کمتری افزایش می‌یابد. مشاهده می‌شود که اعمال میدانی با شدت $1/0V/\text{Ang}$ موجب افزایش ناچیز گاف انرژی و رسیدن آن به مقدار 154 meV می‌شود. همچنین نوارهای انرژی شکل سهموی خود را در نقطه K حفظ می‌کنند.

نمودار تغییرات گاف انرژی ساختارهای مورد نظر بر حسب شدت میدان الکتریکی در شکل ۲ ارائه شده است. همان‌گونه که در شکل (a) ۲ برای گرافین دولایه تحت میدان‌های ضعیف مشاهده می‌شود، گاف انرژی با افزایش شدت میدان به طور خطی زیاد شده و نهایتاً در حضور میدانی به بزرگی $1/0V/\text{Ang}$ ، با مقداری در حدود $0/28 \text{ eV}$ اشباع می‌شود که این مقدار با نتیجه قبلی در توافق خوبی است [۹]. در نمودار مربوط به بورون‌نیتريد دولایه، شکل (b) ۲، نیز دیده می‌شود که مقدار گاف در میدان‌های ضعیف با افزایش شدت میدان به طور خطی کاهش یافته و نهایتاً در حضور میدان‌های بزرگ به صفر می‌گراید.

نمودار مشابه برای دولایه گرافین/بورون‌نیتريد نیز در شکل (c) ۲ ارائه شده است که رشد سهمی وار گاف انرژی را بر حسب شدت میدان الکتریکی نشان داده و از افزایش ناچیز آن بر اثر اعمال میدان حکایت دارد.

نمودارهای چگالی حالات نیز در شکل ۳ آورده شده‌اند. نمودار چگالی حالات مستقیماً با ساختار نواری سیستم در ارتباط است. قله‌های موجود در آن از وجود حالات بی‌شماری جهت اشغال در یک سطح انرژی خاص حکایت دارد. همان‌گونه که در نمودار چگالی حالات گرافین-دولایه، شکل (a) ۳، دیده می‌شود، اعمال میدان باعث گافتگی قله‌های موجود در طیف شده و این گافتگی با افزایش شدت میدان بیشتر می‌شود. در نمودار مربوط به بورون‌نیتريد دولایه، شکل (b) ۳، نیز دیده می‌شود که اعمال میدان باعث کاهش شدید گاف انرژی شده، به طوری که قله‌های

طیف در هر دو سمت تراز فرمی به سوی یکدیگر جابه‌جا شده و فاصله آنان کاهش می‌یابد. در نمودار چگالی حالات ساختار دولایه گرافین/بورون‌نیتريد، شکل (c) ۳، نیز شاهد رفتاری شبیه به گرافین دولایه بوده، به نحوی که اعمال میدان باعث تغییر شدت قله‌های طیف شده و تأثیر چندانی در گاف انرژی آن ندارد.



شکل ۲ تغییرات گاف انرژی (a): گرافین دولایه، (b): بورون‌نیتريد دولایه و (c): دولایه گرافین/بورون‌نیتريد برحسب شدت میدان الکتریکی.

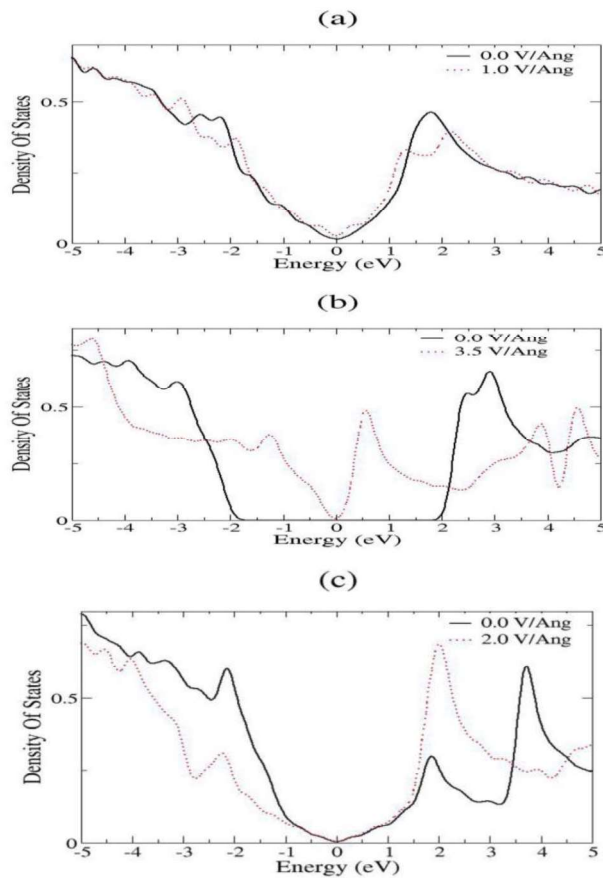
ب. خواص اپتیکی

در ادامه به بررسی رفتار اپتیکی این ساختارها پرداخته‌ایم. خواص اپتیکی را می‌توان در دو حالت قطبش متعامد و موازی بررسی کرد (میدان الکتریکی تابش عمود بر صفحه دولایه‌ها و یا موازی با آن باشد). به منظور اختصار، در این تحقیق صرفاً تابشی با قطبش متعامد را به کار گرفته‌ایم.

۳۴ / تأثیر میدان الکتریکی در خواص الکترونی و اپتیکی گرافین دولایه و بورون‌نیتريد دولایه و دولایه ...

بنابراین، چون دولایه‌ها موازی با صفحه xy می‌باشند، میدان الکتریکی تابش در امتداد محور z خواهد بود. در بررسی تأثیر میدان در خواص اپتیکی دولایه‌ها، نمودارهای قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، ϵ_{re} و ϵ_{im} ، و نمودار تابع رسانندگی اپتیکی، σ ، را در شکل‌های ۴ و ۵ ارائه کرده‌ایم. تابع دی‌الکتریک که حاوی اطلاعات اپتیکی ارزنده‌ای از سیستم است، عبارت است از:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{re}(\omega) + i\epsilon_{im}(\omega) \quad (1)$$



شکل ۳ نمودار چگالی حالات برای (a): گرافین دولایه، (b): بورون‌نیتريد دولایه و (c): دولایه گرافین/بورون‌نیتريد در غیاب و در حضور میدان الکتریکی.

قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک را می‌توان به صورت زیر، با استفاده از عناصر ماتریس تکانه در پایه توابع موج اشغال شده و اشغال نشده، تعریف کرد [۲۷]،

$$\varepsilon_{im}^{aa}(\omega) = \frac{4\pi^2}{\Omega\omega^2} \sum_{i \in IB} \sum_{k \in CB} w_k |P_{ij}^a|^2 \delta(\omega_{kj} - \omega) \quad (2)$$

بر مبنای رابطه کرامرز-کرونیگ، ε_{re} را نیز می توان بر حسب ε_{im} به صورت زیر به دست آورد [۲۷]

$$\varepsilon_{re}(\omega) = 1 + \frac{4}{\pi} P \int_0^{\infty} d\omega' \frac{\omega' \varepsilon_{im}(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (3)$$

رسانندگی اپتیکی تعمیم رسانندگی الکتریکی است. رسانندگی الکتریکی را معمولاً در حضور میدان های الکتریکی مستقل از زمان و رسانندگی اپتیکی را نیز معمولاً در حضور تابش الکترومغناطیسی بررسی می کنند. در حالی که رسانندگی الکتریکی نارساها بسیار ناچیز است، رسانندگی اپتیکی آنان در یک محدوده فرکانس مقداری متناهی به خود می گیرد که آغاز این بازه را گاف نوری سیستم می نامند. رسانندگی اپتیکی نیز به تابع دی الکتریک سیستم وابسته است [۲۸]

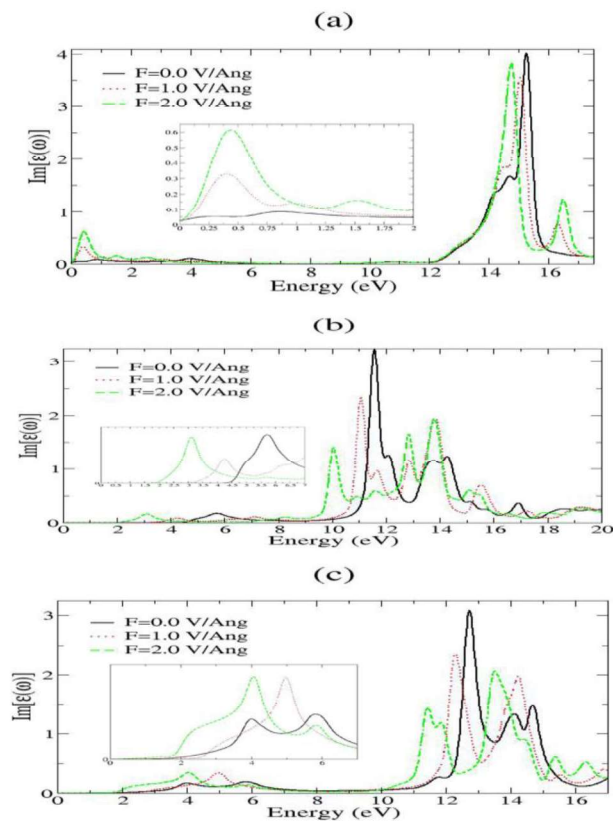
$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma(\omega) \quad (4)$$

از نمودار ε_{im} برای گرافین دولایه، شکل ۴(a)، مشاهده می شود که افزایش شدت میدان موجب ایجاد و رشد قله کوچکی در محدوده $E < 2$ eV می شود. این موضوع به گاف انرژی ناچیزی نسبت داده می شود که بر اثر اعمال میدان ایجاد شده است. قله غالب طیف نیز با اندکی کاهش در شدت، به سوی انرژی های کمتر جابه جا شده است. همچنین شاهد ظهور و رشد یک قله در مجاورت قله غالب هستیم. در نمودار ε_{im} برای بورون نیتريد دولایه، شکل ۴(b)، شاهد جابه جایی قله موجود در بازه $E < 6$ eV به سوی انرژی های کمتر هستیم که ناشی از کاهش گاف انرژی ساختار است. مکان قله غالب نیز از $11/6$ eV در غیاب میدان به $10/0$ eV در حضور میدان $2/0$ V/Ang انتقال یافته و از شدت آن نیز کاسته شده است. در نمودار ε_{im} برای دولایه گرافین/بورون نیتريد، شکل ۴(c)، نیز دیده می شود که با افزایش شدت میدان، قله ناچیزی در محدوده 2 eV $< E < 4$ eV در حال شکل گیری می باشد. جابه جایی قله های کوچک و تغییر شدت آنان در محدوده انرژی های 4 eV $< E < 6$ eV نیز دیده می شود. همچنین کاهش شدت و جابه جا شدن قله غالب به سمت انرژی های کمتر را نیز شاهد هستیم.

با توجه به شکل ۵ می بینیم که با افزایش شدت میدان، تابع دی الکتریک استاتیک دولایه ها زیاد می شود. مقادیر تابع دی الکتریک استاتیک را که همان مقدار ε_{re} در فرکانس صفر است، برای دولایه ها محاسبه و در جدول ۱ ارائه کرده ایم. در نمودار ε_{re} برای گرافین دولایه، شکل ۵(a)،

۳۶ / تأثیر میدان الکتریکی در خواص الکترونی و اپتیکی گرافین دولایه و بورون‌نیتريد دولایه ...

مشاهده می‌شود که مقدار تابع دی‌الکتریک استاتیک آن اندکی افزایش یافته است. قله اول نمودار نیز که در غیاب میدان در انرژی ۰ eV واقع بود، با افزایش شدت میدان و بنابراین افزایش گاف انرژی ساختار، به سوی انرژی‌های بالاتر جابه‌جا شده است، به نحوی که در حضور میدانی با شدت ۲/۰ V/Ang در انرژی ۰/۱۸ eV پدیدار می‌شود. قله موجود در انرژی ۱۳/۹ eV نیز به ۱۴/۳ eV جابه‌جا شده و افزایش شدت نیز پیدا کرده است. همچنین، بازه $16/0 \text{ eV} < E < 15/3 \text{ eV}$ نیز که در آن ϵ_{re} منفی است، در حضور میدان ۲/۰ V/Ang به بازه $15/3 \text{ eV} < E < 14/8 \text{ eV}$ تغییر کرده است. مقادیری از انرژی که به ازای آنان، نمودار ϵ_{re} محور افقی را در حین تغییر از مقادیر منفی به مثبت قطع می‌کند، با قله‌های پلاسمونی سیستم متناظرند. این مقدار خاص انرژی که در غیاب میدان برابر ۱۶/۰ eV بود، در حضور میدانی به بزرگی ۲/۰ V/Ang به ۱۵/۳ eV انتقال یافته است.



شکل ۴ نمودار قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک برای (a): گرافین دولایه، (b): بورون‌نیتريد دولایه و (c): دولایه گرافین/بورون‌نیتريد در غیاب و در حضور میدان الکتریکی با شدت‌های ۰، ۱/۰ و ۲/۰ V/Ang.

جدول ۱ توابع دی الکتریک استاتیک ساختارهای تحت بررسی در حالت قطبش متعامد.

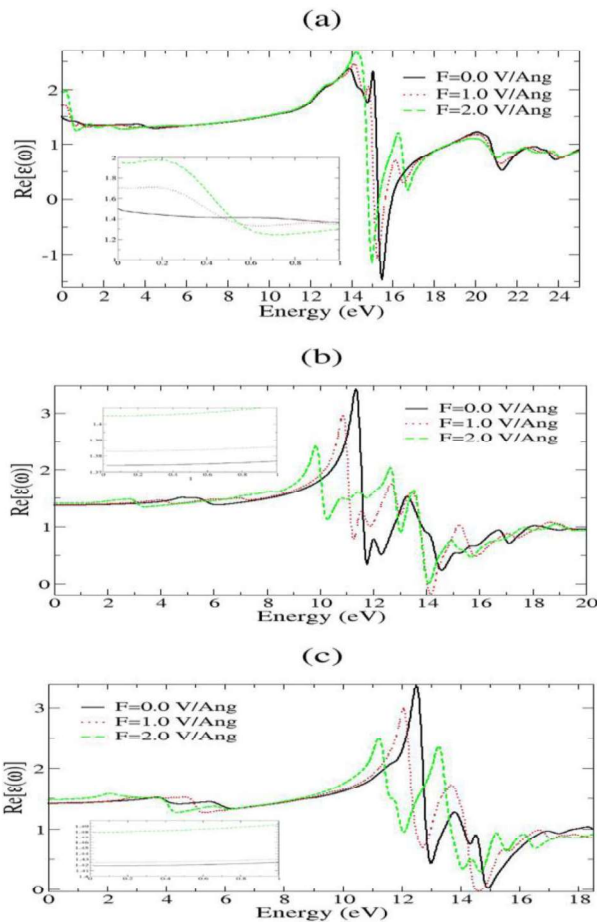
تابع دی الکتریک استاتیک (قطبش متعامد)			نام ساختار
$۲/۰ V/Ang$	$۱/۰ V/Ang$	$۰/۰ V/Ang$	
۱/۹۵	۱/۷	۱/۵	گرافین دولایه
۱/۴	۱/۳۸	۱/۳۷	بورون نترید دولایه
۱/۴۸	۱/۴۲	۱/۴۱	گرافین/بورون نترید

در نمودار ϵ_{re} برای بورون نترید دولایه، شکل (b) ۵، تغییر چندانی را در مقدار تابع دی الکتریک استاتیک شاهد نیستیم، با این حال، با اعمال میدانی به بزرگی $۲/۰ V/Ang$ شاهد کاهش شدت و جابه جایی قله های موجود در انرژی های $۴/۸ eV$ و $۱۱/۳ eV$ به ترتیب به انرژی های $۲/۸ eV$ و $۹/۹ eV$ هستیم. همچنین مقدار تابع ϵ_{re} در بازه $۱۴/۱۱ eV < E < ۱۴/۰۹ eV$ منفی شده است. ضمناً در حضور این میدان، مقداری از انرژی که به ازای آن نمودار ϵ_{re} محور افقی را در حین تغییر از مقادیر منفی به مثبت قطع می کند، برابر $۱۴/۱۱ eV$ می باشد. در نمودار ϵ_{re} برای دولایه گرافین/بورون نترید، شکل (c) ۵، در حضور یک میدان الکتریکی به بزرگی $۲/۰ V/Ang$ ، قله واقع در $۱/۵۱ eV$ به $۲/۱ eV$ و قله واقع در $۱۲/۵ eV$ نیز با کاهش شدت، به $۱۱/۲ eV$ انتقال یافته است. همچنین در حضور میدان الکتریکی به بزرگی $۱/۰ V/Ang$ شاهد منفی شدن ϵ_{re} در محدوده $۱۴/۷ eV < E < ۱۴/۵ eV$ هستیم. تابع دی الکتریک استاتیک نیز با افزایش میدان، اندکی افزایش یافته است. مقداری از انرژی نیز که به ازای آن نمودار ϵ_{re} محور افقی را در حین تغییر از مقادیر منفی به مثبت قطع می کند، برابر $۱۴/۱۱ eV$ می باشد.

نمودار رسانندگی اپتیکی برای ساختارهای مد نظر نیز در شکل ۶ ارائه شده است. مقدار گاف اپتیکی در غیاب میدان برای گرافین دولایه و بورون نترید دولایه و همچنین دولایه گرافین/بورون نترید به ترتیب معادل صفر و $۳/۸ eV$ و $۰/۰۲ eV$ و در حضور میدانی با شدت $۱/۰ V/Ang$ نیز به ترتیب معادل $۰/۰۲ eV$ و $۱/۳ eV$ و $۰/۰۲ eV$ محاسبه شدند. در شکل (a) ۶ برای گرافین دولایه مشاهده می شود که افزایش شدت میدان موجب انتقال قله غالب موجود در $۱۵/۳ eV$ به سوی انرژی های کمتر و اندکی کاهش در شدت آن شده است. در مجاورت قله غالب، در بازه $۱۷ eV < E < ۱۶ eV$ ، قله ای پدیدار و شدت آن با افزایش شدت میدان زیاد شده است. در شکل (b) ۶، نمودار مربوط به بورون نترید دولایه ارائه شده است. محل قله اول نمودار از انرژی $۵/۷ eV$ در غیاب میدان به $۳/۱ eV$ در حضور میدانی با شدت $۲/۰ V/Ang$ انتقال یافته، از شدت آن نیز اندکی کاسته شده است. قله غالب واقع در $۱۱/۶ eV$ ، با افزایش شدت میدان به سوی انرژی های کمتر

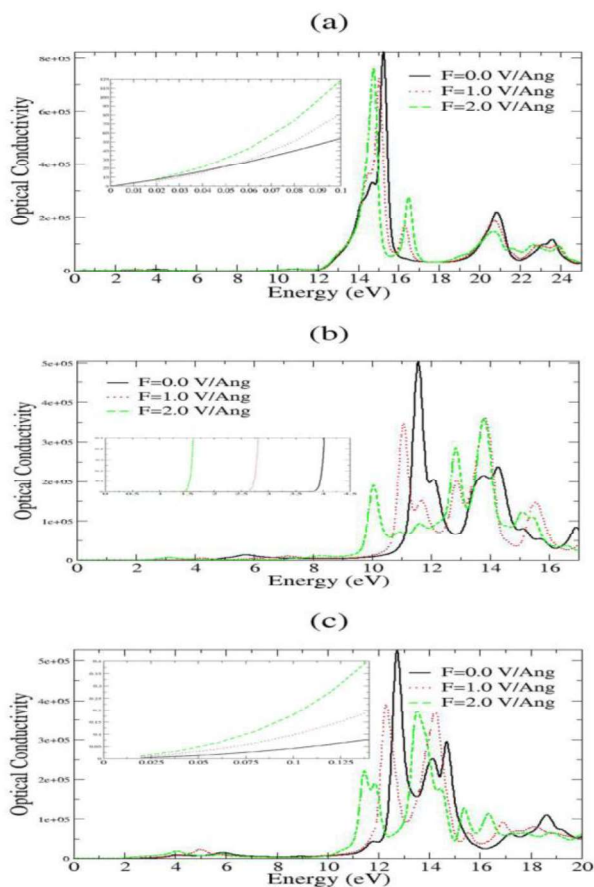
۳۸ / تأثیر میدان الکتریکی در خواص الکترونی و اپتیکی گرافین دولایه و بورون نیتريد دولایه و دولایه ...

انتقال یافته، شدت آن نیز به میزان چشمگیر کم شده است. در مجاورت قله عمده، در انرژی $12/7 \text{ eV}$ ، $12/9$ ، نیز شاهد ظهور و رشد یک قله جدید هستیم.



شکل ۵ نمودار قسمت حقیقی تابع دی الکتریک برای (a): گرافین دولایه، (b): بورون نیتريد دولایه و (c): دولایه گرافین/بورون نیتريد در غیاب و در حضور میدان الکتریکی با شدت های $0/0$ ، $1/0$ و $2/0 \text{ V/Ang}$.

نهایتاً در شکل (c)۶، در نمودار مربوط به دولایه گرافین/بورون نیتريد، افزایش شدت میدان موجب افزایش شدت قله واقع در انرژی $4/0 \text{ eV}$ شده، قله غالب موجود در $12/7 \text{ eV}$ نیز دچار کاهش شدت و انتقال به سوی انرژی های کمتر می شود. افزایش شدت و انتقال به سوی انرژی های کمتر را نیز برای قله های موجود در $13/0 \text{ eV} < E < 18/0 \text{ eV}$ شاهدیم.



شکل ۶ نمودار رسانندگی اپتیکی برای (a): گرافین دولایه، (b): بورون‌نیتريد دولایه و (c): دولایه گرافین/بورون-نیتريد در غياب و در حضور میدان الکتریکی با شدت‌های ۰،۰/۱، ۰،۰/۲ V/Ang.

۴. نتیجه گیری

در این مقاله، تأثیر میدان الکتریکی خارجی را در خواص الکترونی و اپتیکی گرافین دولایه و بورون‌نیتريد دولایه و دولایه گرافین/بورون‌نیتريد با نحوه چینش AB بررسی کرده‌ایم. مشاهده شد که ساختار نواری این دولایه‌ها با اعمال میدان دستخوش تغییر شده، کنترل گاف انرژی محقق می‌شود. خصوصاً اعمال میدان متعامد بر بورون‌نیتريد دولایه گذار نیم‌رسانا فلز را موجب می‌شود. میدان بر نمودارهای اپتیکی نیز اثر گذاشته، شدت و محل قله‌های آنان را تغییر می‌دهد. افزایش تابع دی‌الکتریک استاتیک برای هر سه ساختار نیز به‌عنوان پیامدی از اعمال میدان مشاهده شد. اعمال میدان الکتریکی بر رفتار پلاسمونی سیستم‌های تحت مطالعه نیز اثر گذاشته و جابه‌جایی محل ظهور قله‌های پلاسمونی را به همراه دارد.

منابع

- [1] Zhao, Z., and Qiu, J., "Graphene: Synthesis, Properties, and Applications," *Carbon Nanomaterials*, pp. 16-61: CRC Press, 2013.
- [2] Choi, W., Lahiri, I., Seelaboyina, R., and Kang, Y. S. Synthesis of Graphene and Its Applications: A Review. *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*. **35**. 52-71, 2010.
- [3] Falkovsky, L., "Optical Properties of Graphene." p. 012004.
- [4] Chegel, R. Influence of Bias on the Electronic Structure and Electrical Conductivity and Heat Capacity of Graphene and Boron Nitride Multilayers. *Synthetic Metals*. **223**. 172-183, 2017.
- [5] Tang, S., Wu, W., Xie, X., Li, X., and Gu, J. Band Gap Opening of Bilayer Graphene by Graphene Oxide Support Doping. *RSC Advances*. **7**. 9862-9871, 2017.
- [6] Guo, Y., Guo, W., and Chen, C. Tuning Field-Induced Energy Gap of Bilayer Graphene Via Interlayer Spacing. *Applied Physics Letters*. **92**, p. 243101, 2008.
- [7] Mohan, B., Kumar, A., and Ahluwalia, P. A First Principle Study of Interband Transitions and Electron Energy Loss in Mono and Bilayer Graphene: Effect of External Electric Field. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. **44**. 1670-1674, 2012.
- [8] Tao, W., Qing, G., Yan, L., and Kuang, S. A Comparative Investigation of an Ab-and Aa-Stacked Bilayer Graphene Sheet under an Applied Electric Field: A Density Functional Theory Study. *Chinese Physics B*. **21**, p. 067301, 2012.
- [9] Wang, R.-N., Dong, G.-Y., Wang, S.-F., Fu, G.-S., and Wang, J.-L. Intra-and Inter-Layer Charge Redistribution in Biased Bilayer Graphene. *AIP Advances*. **6**, p. ۰۳۵۲۱۳, ۰۲۰۱۶.
- [10] Ho, Y., Wu, J., Chiu, Y., Wang, J., and Lin, M. Electronic and Optical Properties of Monolayer and Bilayer Graphene. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. **368**. 5445-5458, 201۰.
- [11] Meshginqalam, B., Jameil, A. K., Ahmadi, M. T., and Centeno, A. Investigation on Optical and Electrical Properties of Bilayer Graphene. *DIYALA JOURNAL OF ENGINEERING SCIENCES*. **8**. 538-545, 2015.
- [12] Ribeiro, R., and Peres, N. Stability of Boron Nitride Bilayers: Ground-State Energies, Interlayer Distances, and Tight-Binding Description. *Physical Review B*. **83**, p. 235312, 2011.
- [13] Giovannetti, G., Khomyakov, P. A., Brocks, G., Kelly, P. J., and Van Den Brink, J. Substrate-Induced Band Gap in Graphene on Hexagonal Boron Nitride: Ab Initio Density Functional Calculations. *Physical Review B*. **76**, p. 073103, 2007.
- [14] Balu, R., Zhong, X., Pandey, R., and Karna, S. P. Effect of Electric Field on the Band Structure of Graphene/Boron Nitride and Boron Nitride/Boron Nitride Bilayers. *Applied Physics Letters*. **100**, p. 052104, 2012.

- [15] Zhong, X., Yap, Y. K., Pandey, R., and Karna, S. P. First-Principles Study of Strain-Induced Modulation of Energy Gaps of Graphene/Bn and Bn Bilayers. *Physical Review B*. **83**, p. 193403, 2011.
- [16] Tang, K., Ni, Z., Liu, Q., Quhe, R., Zheng, Q., Zheng, J., Fei, R., Gao, Z., and Lu, J. Electronic and Transport Properties of a Biased Multilayer Hexagonal Boron Nitride. *The European Physical Journal B*. **85**, p. 301, 2012.
- [17] Yang, Z., and Ni, J. Modulation of Electronic Properties of Hexagonal Boron Nitride Bilayers by an Electric Field: A First Principles Study. *Journal of Applied Physics*. **107**, p. 104301, 2010.
- [18] Sławińska, J., Zasada, I., and Klusek, Z. Energy Gap Tuning in Graphene on Hexagonal Boron Nitride Bilayer System. *Physical Review B*. **81**, p. 155433, 2010.
- [19] Lin, X., Xu, Y., Hakro, A. A., Hasan, T., Hao, R., Zhang, B., and Chen, H. Ab Initio Optical Study of Graphene on Hexagonal Boron Nitride and Fluorographene Substrates. *Journal of Materials Chemistry C*. **1**. 1618-1627, 2013.
- [20] Yan, J., Jacobsen, K. W., and Thygesen, K. S. Optical Properties of Bulk Semiconductors and Graphene/Boron Nitride: The Bethe-Salpeter Equation with Derivative Discontinuity-Corrected Density Functional Energies. *Physical Review B*. **86**, p. 045208, 2012.
- [21] Behzad, S. Monolayer Boron Nitride Substrate Interactions with Graphene under in-Plane and Perpendicular Strains: A First-Principles Study. *Journal of Electronic Materials*. **47**. 2209-2018, 2214-
- [22] Soler, J. M., Artacho, E., Gale, J. D., García, A., Junquera, J., Ordejón, P., and Sánchez-Portal, D. The Siesta Method for Ab Initio Order-N Materials Simulation. *Journal of Physics: Condensed Matter*. **14**, p. 2745, 2002.
- [23] Jones, R. O., and Gunnarsson, O. The Density Functional Formalism, Its Applications and Prospects. *Reviews of Modern Physics*. **61**, p. 689, 1989.
- [24] Grossman, J. C., Mitas, L., and Raghavachari, K. Structure and Stability of Molecular Carbon: Importance of Electron Correlation. *Physical review letters*. **75**, p. 3870, 1995.
- [25] Zupan, A., Blaha, P., Schwarz, K., and Perdew, J. P. Pressure-Induced Phase Transitions in Solid Si, SiO₂, and Fe: Performance of Local-Spin-Density and Generalized-Gradient-Approximation Density Functionals. *Physical Review B*. **58**, p. 11266, 1998.
- [26] Farooq, M. U., Hashmi, A., and Hong, J. Thickness Dependent Optical Properties of Multilayer Bn/Graphene/Bn. *Surface Science*. **634**. 25-30, 2015.
- [27] Guo, G., Chu, K., Wang, D.-s., and Duan, C.-g. Linear and Nonlinear Optical Properties of Carbon Nanotubes from First-Principles Calculations. *Physical Review B*. **69**, p. 205416, 2004.
- [28] Ashcroft, N. W., and Mermin, N. D., "Solid State Physics [by] Neil W. Ashcroft [and] N. David Mermin," New York: Holt, Rinehart and Winston, 1976.