مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)

اثر بر هم کنش کولنی موضعی بین الکترونی روی خواص الکترونی اکسید بریلیوم

زیبا آقایی منش[۱]، حامد رضانیا[۲]، محمد بهلول [۱]، اکرم جوادی[۱]

[۱] گروه فیزیک ،دانشگاه پیام نور تهران
[۲] گروه فیزیک، دانشگاه رازی کرمانشاه

چکیده

در این مطالعه مدل هابارد برای توصیف خواص الکترونی اکسید بریلیوم تک لایه بکار رفته است و در یک تقریب میدان متوسط و حضور یک نظم بلند برد پادفرومغناطیس نحوه‌ی تغییرات خواص الکترونی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج بیانگر این است که افزایش عوامل بر همکنش کولنی باعث کاهش گاف انرژی موجود در ساختار اکسید بریلیوم وگذار فاز عایق باندی را نشان می‌دهد و با افزایش قدرت برهم‌کنش کولنی پهنای گاف در نمودار خواص الکترونی اکسید بریلیوم کاهش می‌یابد.

مقدمه

اکسید بریلیوم با فرمول شیمیایی BeO یک ترکیب شیمیایی معدنی نیمه رسانا است که ساختار بلوری آن ورتزیت، زینک بلند می‌باشد[1]. اکسید بریلیوم یک جامد بلوری بی رنگ است که جز عایق‌های الکتریکی خوب بشمار می‌رود.[2] محاسبات انجام شده روی قدرت برهم‌کنش کولنی در شکل‌های متفاوت شبکه شانه عسلی نشان داده است که مدل هابارد را می‌توان به عنوان یک مدل منطقی برای توصیف تحول الکترون‌های لایه ظرفیت این ترکیب لحاظ کرد.[3] بنابراین می‌توان به عنوان یک مسئله جالب توجه آثار جمله هابارد طیف بر انگیختگی اکسید بریلیوم تک لایه و ظهور طبیعت گذار فاز عایق باندی را در شبکه اکسید بریلیوم تک لایه را بررسی کرد.

محاسبات

مدل هابارد به عنوان مدل مناسب جهت توجیه گذار فاز فلز -عایق در جامدات براساس دو جمله مهم معرفی می شود:۱-جمله انرژی جنبشی الکترون‌ها و برهم‌کنش آنها با یون‌های شبکه ۲-جمله برهم‌کنش کولنی کوتاه برد الکترون-الکترون با این توضیحات هامیلتونی مدل هابارد برای شبکه شانه عسلی به صورت زیر معرفی می‌شود:

$$H = -\sum_{i,j} t_{ij}\, C^{+}_{i\alpha\sigma} C_{j\beta\sigma} + U_i \sum_{i\alpha} C^{+}_{i\alpha\uparrow} C_{i\alpha\uparrow}\, C^{+}_{i\alpha\downarrow} C_{i\alpha\downarrow} - \mu \sum_{i\alpha\sigma} C^{+}_{i\alpha\sigma} C_{i\alpha\sigma} \qquad (1)$$

که در اینجا($c_{i\alpha}$ $c^{\dagger}_{i\alpha}$ عملگر خلق وفنای الکترون روی سایت iام با اسپین σ و μ پتانسیل شیمیایی, U_i پتانسیل برهم کنش دافع موضعی بین الکترون‌ها با اسپین مخالف بوده و اتم A یا B می‌تواند α, β باشد و همچنین t=2.7= $t^{\alpha\beta}_{ij}$ دامنه پرش الکترون از پایه‌ی اتمی α وياخته iام همسایه با بردار R_i است. $\sum_{ij}$ جمع روی همه‌ی نزدیک‌ترین همسایگان سایت‌ها را نشان می‌دهد . شرط نیمه پری $\mu = \frac{U}{2}$ [4]در نظر گرفته شده است.

با استفاده از تقریب میدان متوسط هامیلتونی برهم‌کنش الکترون – الکترون در مدل هابارد به صورت زیرمعرفی می‌شود:

$$H_U^{MF} = U \sum_{\alpha} \langle n_{i\alpha\uparrow} \rangle n_{i\alpha\downarrow} + U \sum n_{i\alpha\uparrow} \langle n_{i\alpha\downarrow} \rangle \quad , \qquad (2)$$

$$\langle n_{j,\sigma} \rangle = \frac{n}{2} \pm \frac{m}{2} \begin{cases} + & j \in A \\ - & j \in B \end{cases} \quad ,$$

(3)

مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)

n و m به ترتیب غلظت ومغناطش می‌باشند که در این بررسی n=1 و m=0.8 قرار داده شده است.

با جایگزینی معادله (2)در معادله (1)هامیلتونی به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$H = -\sum_{i,j,\alpha,\sigma} t_{ij}^{\alpha\beta} C_{i\alpha\sigma}^{+} C_{j\beta\sigma} + U\sum \frac{n-\sigma m}{2} n_{i\alpha\downarrow} + U\sum \frac{n+\sigma m}{2} n_{i\alpha\uparrow} , \qquad (4)$$

مکان کوتاه‌ترین بردارهای شبکه به شکل زیر است.

$$\vec{a}_1=\left(\frac{\sqrt{3}a}{2},\frac{a}{2},0\right) \quad ، \quad \vec{a}_2=\left(\frac{\sqrt{3}a}{2},\frac{-a}{2},0\right) \qquad (5)$$

ماتریس هامیلتونی با در نظر گرفتن بردارهای انتقال شبکه به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = \begin{pmatrix} u\left(\frac{n-\sigma m}{2}\right) - \mu + \varepsilon_{Be} & \emptyset_k \\ \emptyset_k^* & u\left(\frac{n+\sigma m}{2}\right) - \mu + \varepsilon_O \end{pmatrix} , \qquad (6)$$

در اکسید بریلیوم تک لایه انرژی درون سایتی ε_{Be} =1.6t و ε_O =-1.6t می‌باشد. [4]و در این ماتریس Φ_κ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$|\Phi_\kappa| = \pm t\sqrt{3 + 2\cos(ak_y) + 3\cos\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}K_x\right)\cos\left(\frac{a}{2}K_y\right)} \quad , \qquad (7)$$

که (k_x, k_y)متعلق به منطقه اول بریلوئن می‌باشد.

با در نظر گرفتن رابطه هامیلتونی (6) وسپس حل معادله مشخصه $det|H - \lambda I| = 0$ ویژه مقادیر مجاز انرژی به صورت زیر به دست می‌آید.

$$E(\vec{k}) = \frac{un-2\mu}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{um\sigma}{2}\right)^2 + |\Phi_\kappa|^2} \qquad (8)$$

چگالی حالات یک هامبلتونی به صورت زیر بیان می‌شود[5] .

$$D(E) = -\frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to 0^+} ImTr\frac{1}{E+i\varepsilon-H}) \qquad (9)$$

چگالی حالات الکترونی اکسید بریلیوم تک لایه در منطقه اول بریلوین به صورت زیر به دست می‌آید:

$$D(E) = -\frac{1}{\pi} \times Im\sum_{\kappa\in B_z} \frac{2E+2i0^+ +2\mu-un-\varepsilon_{n-}\varepsilon_b}{\left(E+i0^+ +\mu-U\left(\frac{n-\sigma m}{2}\right)-\varepsilon_n\right)\left(E+i0^+ +\mu-U\left(\frac{n+\sigma m}{2}\right)-\varepsilon_b\right)-|\emptyset_k|^2} \qquad (10)$$

نتایج و مباحث:

نمودار چگالی حالات‌ها را برای اکسید بریلیوم تک لایه با حضور برهم‌کنش الکترون –الکترون طبق رابطه (۱۰) با جمع‌زنی روی بردارهای موج Kبررسی می‌کنیم. ولی همان‌طورکه در شکل(1) می‌بینیم در حالت u/t=0 بدون لحاظ کردن اثر برهم‌کنش کولنی اکسید بریلیوم تک لایه عایق است زیرا در نمودار یک گاف دیده می‌شود ولی با لحاظ کردن بر هم‌کنش کولنی u/t=0.4 u/t=0.2, پهنای گاف ایجاد شده در نمودار کاهش می‌یابد. همانطور که در نمودار (۲)مشاهده می‌شود و همچنین با لحاظ

کردن اثر برهم‌کنش ما دو پیک را مشاهده می‌کنیم که منشا این پیک‌ها می‌تواند به دلیل اکسیتون‌ها ایجاد شود. مطابق جدول ۱پهنای گاف ایجاد شده درچگالی حالات اکسید بریلیوم را با افزایش قدرت بر همکنش کولنی بدست آمده است.

نتیجه:

نتایج به دست آمده از نمودارها نشان می‌دهد که افزایش برهم‌کنش کولنی باعث کاهش پهنای گاف موجود درساختار چگالی حالات اکسید بریلیوم تک لایه و گذار عایق باندی می‌شود. نتیجه‌ی مهم‌تر این مطالعه کاهش گاف انرژی برانگیختگی‌های تک ذره‌ای دستگاه با افزایش قدرت برهم‌کنش هابارد دراکسید بریلیوم تک لایه است. با لحاظ کردن اثر برهم‌کنش ما دو پیک را مشاهده می‌کنیم که منشا این پیک‌ها می‌تواند به دلیل اکسیتون‌ها ایجاد شود.

مراجع:

[1] Hazen,R.M.and Finge,L.W.;J.Appl.Pky.59(11)372-3733(1986)

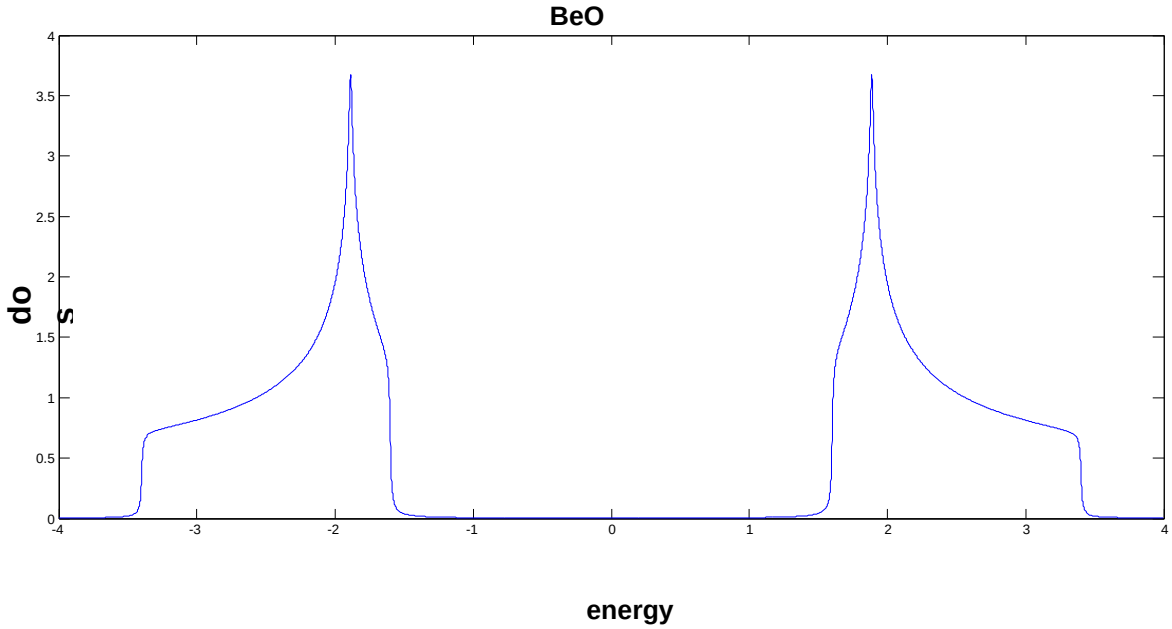
[2] Joshi, K.B; Jain,;Pandya,R.K;Ahuja,B.L.and Sharam ,B.K.;J.Chem,Phys11113(1999)

[3] *T.O.Weihong and etal, phy .Rev lett 806 ,236805(2011*

[4]. P.Fazekas,Lecture Notes on Electron correlation and Magnetism, world scientific ,Singapore,2003

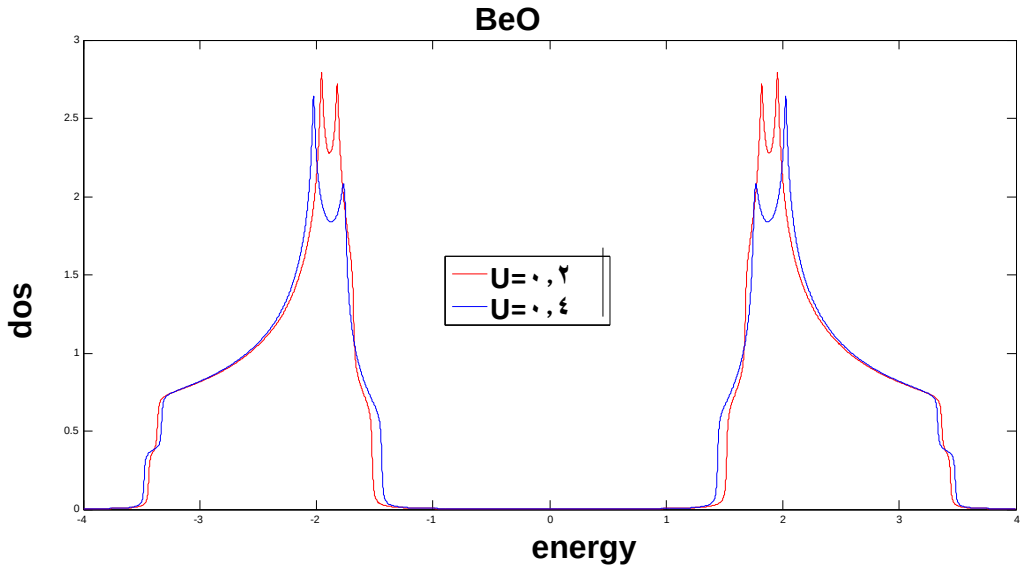
[5] X. Blase, A. Rubio, S.G. Louie, M.L. Cohen: Europhys. Lett. 28, 335(1994); Phys. Rev. B 51, 6868 (1995)

[6] Grosso, G., and Parravicini, G. P. Solid State Physics , Academic Press, (2000)



شکل۱: نمودار چگالی حالت انرژی اکسید بریلیوم بدون لحاظ کردن اثر برهمکنش کولنی u/t=0

مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)



شکل۲: نمودار چگالی حالت انرژی اکسید بریلیوم با لحاظ کردن اثر برهمکنش کولنی u/t=.2و u/t=.4

/t	U_g
۰	۱,٥۳٦
۰,۲	۱,٤۱۲
۰,٤	۱,۲۸۸
۰,٦	۱,۱۰۸
۰,۸	۰,۹٦۲

جدول ۱: پهنای گاف ایجاد شده در چگالی حالات اکسید بریلیوم با افزایش قدرت بر هم کنش کولنی