# محاسبه ساختار الکترونی و تابع دی الکتریک نانولوله کربنی دسته صندلی (8 و8) با استفاده از اصول اولیه

مولاروی، طیبه[۱،۲]؛ حسینی، سید محمد[۱]؛ کمپانی، احمد[۱]؛ شاه طهماسبی، ناصر[۱]؛ Claudia، Ambrosch-Draxl [3]

[۱]گروه فیزیک (آزمایشگاه مواد و الکتروسرامیک)، دانشگاه فردوسی مشهد- مشهد

[۲]گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود - شاهرود

[3]Leoben University, Austria

## چکیده

*در این پژوهش ساختار نواری و همچنین تابع دی الکتریک نانو لوله کربنی تک جداره (۸ و۸) با در نظر گرفتن سهم انتقالات درون نواری، با استفاده از اصول اولیه و به کمک روش نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. نتایج محاسبات ساختار نواری نشان می‌دهد که نانو لوله کربنی (۸ و۸) دارای خاصیت فلزی است. همچنین تابع دی الکتریک در وضعیتی که میدان در راستای محور نانولوله اعمال شده است (قطبش موازی) با در نظر گرفتن سهم انتقالات درون نواری، در انرژی صفر دارای تکینگی است. چنانچه از سهم انتقالات درون نواری صرفنظر شود اندازه تابع دی الکتریک الکترونی در این راستا برابر با ۵ خواهد بود.*

# Ab initio study of electronic structure and dielectric function of armchair (8-8) CNT

**Movlarooy,Tayebeh[1-2]; Hosseini, Seyed Mohammad[1]; Kompany,Ahmad[1]; Shahtahmasebi, Nasser[1]; Ambrosch-Draxl,Claudia[3]**

[1] *Department of Physics, (Materials and Electroceramics Laboratory), Ferdowsi University of Mashhad, Iran*

[2] *Department of Physics, Shahrood University of Technology, Iran*

[3] *Leoben University, Austria*

## Abstract

*In this work, the band structure and dielectric function of single walled (8-8) carbon nanotube were investigated, considering the intra band transition contribution and using DFT approach. The calculation was performed by full potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method. The calculated band structure reveals the (8-8) SWCNT has metallic behavior. It is also found that the dielectric function at zero energy, for the electric field applied along the nanotube axis (parallel polarization), has singularity if we add the intra band contribution, other wise it is found that the value of electronic dielectric function to be 5.0 in this direction.*

## مقدمه

یکی از معروف‌ترین، مهم‌ترین و پرکاربردترین نانولوله‌های کربنی، نانولوله‌های کربنی تک جداره(SWCNT) می‌باشند. این مواد دارای خواص الکتریکی، اپتیکی، مکانیکی و حرارتی جالب توجه و منحصر به‌فردی بوده و بدین جهت کاربرد گسترده‌ای در تمامی ابعاد زندگی بشری پیدا کرده‌اند[۱و۲]. تمام شکلهای هندسی ممکن از نانولوله‌های کربنی تک جداره از جمله زیگزاگ (n,0)، کایرال(n,m) و دسته صندلی(n,n) را می‌توان با استفاده از بردارهای کایرال به‌دست آورد. نانو لوله‌های کربنی با قطر کوچکتر

می‌توانند دارای خاصیت فلز و یا نیمرسانا باشند. درجه رسانایی آنها به بردار کایرال و ساختار مولکولی آنها بستگی دارد که منجر به‌ساختار نواری و گاف انرژی متفاوت می‌شود. تجربه نشان می‌دهد که یک نانولوله(n, m) هنگامی که n=m یا (n-m)=3k است دارای خاصیت فلزی و در غیر اینصورت نیمرسانا می‌باشد که در آن k یک عدد صحیح و n و m نماینده ابعاد نانولوله است.

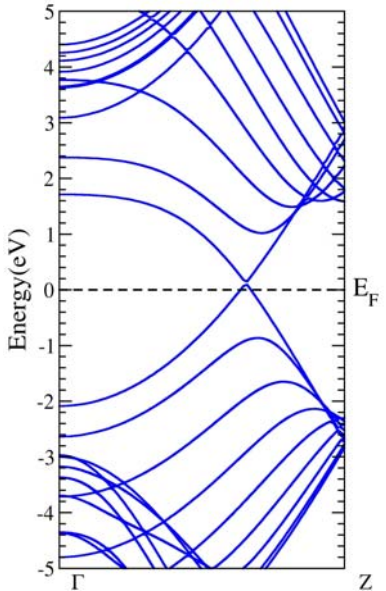
## روش محاسبات

محاسبات این مقاله با استفاده از اصول اولیه و با تقریب گرادیان تعمیم یافته GGA به روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی(FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی DFT هوهنبرگ، کوهن شم با استفاده از نرم افزار wien2k انجام گرفته است. شعاع کره‌های مافین تین برای اتم‌های کربن $R_{MT}$=1.28a.u در نظر گرفته شده است [۳،٤،٥].

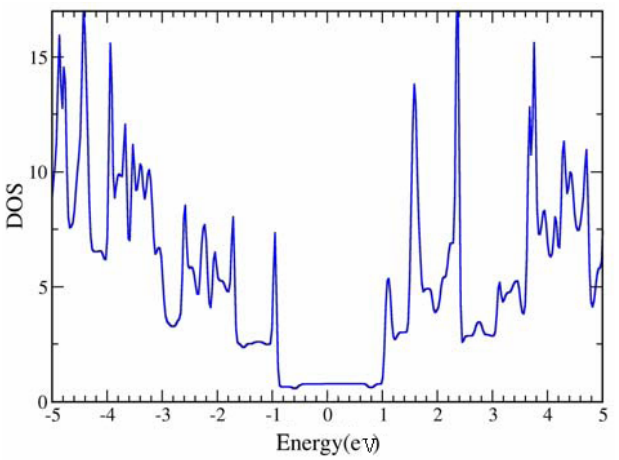
## بحث و نتایج

### ۱- ساختار نواری

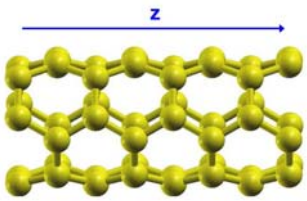
نانولوله کربنی تک جداره (۸، ۸)، از خانواده نانولوله‌های کربنی دسته صندلی (Armchair) می‌باشد که دارای خاصیت فلزی است. ساختار نوارهای انرژی و چگالی حالتهای کل (DOS) محاسبه شده نانولوله کربنی دسته صندلی (8,8) در شکلهای ۱ و۲ آورده شده است، با توجه به این ساختار نواری و چگالی حالتها مشاهده می‌شود که نوارهای ظرفیت و رسانش در سطح انرژی فرمی ($E_f$=0) همدیگر را قطع نموده‌اند و در نتیجه این نوع نانولوله دارای خاصیت فلزی می‌باشد. برای محاسبه خواص اپتیکی مطابق شکل۳ بردار قطبش را در جهت محور نانولوله کربنی (8,8) در راستای محور- z اختیار می‌شود در این حالت که نانو لوله دارای خاصیت فلزی است علاوه بر انتقالات بین نواری سهم انتقالات درون نواری را نیز باید در محاسبه خواص اپتیکی این نانولوله در نظر گرفت.




شکل ۱: ساختار نواری نانو لوله دسته صندلی (8,8).




شکل۲: چگالی حالتهای کل نانولوله کربنی(8-8). **سطح تراز فرمی در انرژی صفر درنظر گرفته شده است.**



شکل۳: نانولوله کربنی دسته صندلی (8-8) محور نانولوله در راستای محور-z است.

## ۲- تابع دی الکتریک

تابع دی‌لکتریک برای توصیف پاسخ ماده به‌میدان الکترومغناطیسی به‌کار برده می‌شود. در دهه اخیر، طیف نمایی اپتیکی به‌عنوان مهمترین وسیله تجربی برای تعیین ساختار نواری و تعیین خواص اپتیکی مواد گسترش زیادی یافته است. در حالت کلی تابع دی الکتریک تانسوری از مرتبه ۲ است که مؤلفه‌های مختلف D و E را به‌هم مربوط می‌سازد. تانسور دی‌الکتریک مختلط را برحسب قسمتهای حقیقی و موهومی می‌توان به‌صورت زیر نوشت.

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \varepsilon'_{\alpha\beta}(\omega) + i\varepsilon''_{\alpha\beta}(\omega) \qquad (۱)$$

قسمتهای حقیقی، $\varepsilon'_{\alpha\beta}$، و موهومی، $\varepsilon''_{\alpha\beta}$، این تانسور دی‌الکتریک از روابط زیر محاسبه می‌شود [٦]:

$$\varepsilon'_{\alpha\beta}(\omega) = \mathrm{Re}\,\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} P\int_0^\infty \frac{\omega' \,\mathrm{Im}\,\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \qquad (۲)$$

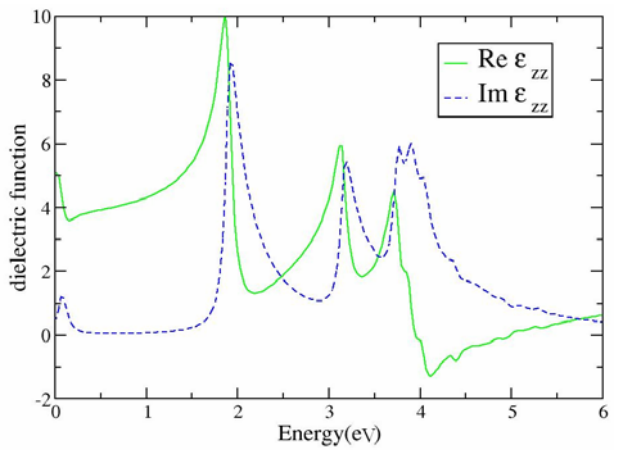
$$\varepsilon''_{\alpha\beta}(\omega) = \mathrm{Im}\,\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{4\pi e^2}{m^2\omega^2}\sum_{c,v}\int dk \langle c_k|p^\alpha|v_k\rangle\langle v_k|p^\beta|c_k\rangle \delta(\varepsilon_{ck} - \varepsilon_{vk} - \omega) \qquad (۳)$$

که در آن P بیانگر بخش کوشی انتگرال و $|c_k\rangle$ و $|v_k\rangle$ بیانگر حالت الکترون در نوارهای ظرفیت و نوار هدایت است. برای حالت فلزی مواد با در نظر گرفتن سهم انتقالات درون نواری، قسمتهای حقیقی و موهومی تانسور دی الکتریک از روابط زیر بدست می آید[۷]:

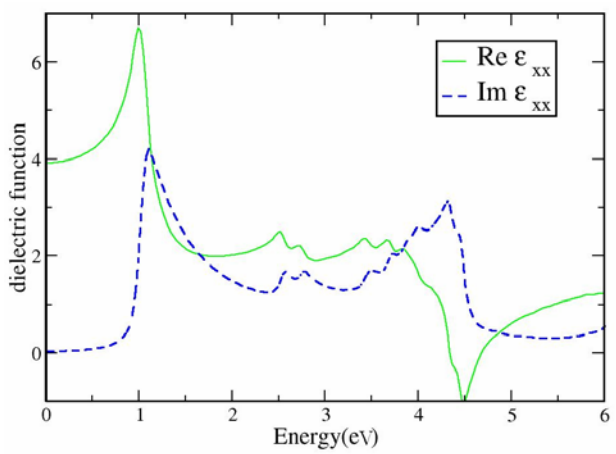
$$\mathrm{Re}\,\varepsilon_{\alpha\beta}^{[intra]}(\omega) = 1 - \frac{\omega_{Pl,\alpha\beta}^2}{\omega(\omega^2 + \Gamma^2)} \qquad (٤)$$

$$\mathrm{Im}\,\varepsilon_{\alpha\beta}^{[intra]}(\omega) = \frac{\Gamma\omega_{Pl,\alpha\beta}^2}{\omega(\omega^2 + \Gamma^2)} \qquad (٥)$$

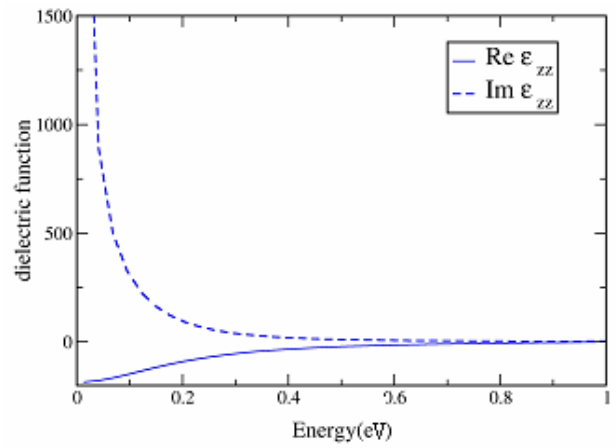
که در آن $\omega_{pl}$ فرکانس پلاسمون و $\Gamma$ طول عمر پهن شدگی(lifetime broadening) می‌باشد. قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک نانو لوله کربنی (8-8) محاسبه شده در راستای میدان اعمالی موازی با محور نانولوله (قطبش موازی) و همچنین در راستای قطبش عمودی، بدون در نظر گرفتن سهم انتقالات درون نواری و تنها با در نظر گرفتن انتقالات بین نواری به‌ترتیب در شکل‌های ٤ و ٥ نشان داده شده است. با مقایسه شکل‌های ٤و ٥ مشاهده می‌شود که تابع دی الکتریک در راستای قطبش اعمالی موازی با محور نانولوله نسبت به قطبش اعمالی عمودی، ناهمسانگردتر می‌باشد.




شکل٤ : قسمت حقیقی و موهومی تانسور دی الکتریک نانولوله کربنی (8-8)در راستای میدان اعمالی موازی با محور نانو لوله بدون در نظر گرفتن سهم انتقالات درون نواری.




شکل۵ : قسمت حقیقی و موهومی تانسور دی الکتریک نانولوله کربنی (8-8)در راستای میدان اعمالی عمود بر محور نانو لوله بدون در نظر گرفتن سهم انتقالات درون نواری.




شکل٦ : قسمت حقیقی و موهومی تانسور دی الکتریک نانولوله کربنی(8-8) در راستای میدان اعمالی موازی با محور نانو لوله با در نظر گرفتن سهم انتقالات درون نواری

نتایج محاسبات قسمتهای حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک با افزودن سهم انتقالات درون نواری و استفاده از روابط ٤ و ٥ در شکل ٦ نشان داده شده است، تابع دی الکتریک در انرژی صفر دارای تکینگی است در حالیکه بدون در نظر گرفتن انتقالات درون نواری، مقدار تابع دی الکتریک الکترونی در راستای محور قطبش برابر با ٥ و درجهت عمود بر محور قطبش تقریبا مساوی با ٤ بدست آمده است.

.

## نتیجه گیری

نتایج محاسبات نشان می‌دهد که نانولوله کربنی با شکل دسته صندلی(8-8) دارای خاصیت فلزی است. این نتایج با توجه به‌ساخت نوارهای انرژی محاسبه شده که نوارهای ظرفیت و رسانش همدیگر را در سطح انرژی فرمی قطع می‌کنند، حاصل شده است. در این نوع نانولوله‌های فلزی که قطبش موازی با محور نانولوله است، چنانچه در محاسبات سهم انتقالات درون نواری در نظر گرفته شود، تابع دی الکتریک در انرژی صفر دارای تکینگی است. با صرفنظر کردن از سهم درون نواری مقدار ثابت دی الکتریک الکترونی برابر با ٥ برای قطبش موازی و مساوی با ٤ برای قطبش عمود بر محور نانولوله بدست آمده است.

## مراجع

[1] I. V. Stankevich, M. V. Nnikerov, and D. A. Bochvar, Russ. Chem. Rev.,**53**, , (984)640.

[2] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, and R. E. Smalley, Nature, **318**, (1985)162.

[3] P. Blaha, D. Singh, P. I. Sorantin and K. Schwarz, Phys. Rev. B**46**, (1992)1321-1325.

[4] P. Blaha and K. Schwarz, Wien2k. Vienna University of Technology Austria (2002).

[5] K. Schwarz, P. Blaha and G. K. H. Madsen, Computer Physics Communications, (2002)1-6.

[6] F. Wooten, “Optical properties of solids”, Academic press, New York (1972).

[7] C. Ambrosch-Draxl and J. O. Sofo, Computer Physics Communications, **175**, (2006)1-14.