



## بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

محاسبات نظری طیف جذب نور برای نانو نوار صندلی گرافن

عنوان انگلیسی مقاله :

Theoretical Calculation of Optical Absorption Spectrum  
for Armchair Graphene Nanoribbon



توجه !

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.



## بخشی از ترجمه مقاله

### 3. Results and Discussion

First we have calculated the band structure and energy gap for the graphene nanoribbon with armchair edge and by including the edge deformation; we have used the tight-binding model that explained in previous section. There are three distinct families for A-GNRs. For the perfect A-GNRs (without considering edge deformation), in the case of  $N=3m+2$ , energy gap is zero and A-GNR is metallic, but in other two families energy gap appears and A-GNR classified as a semiconductor structure. The energy gap of  $N=3m+1$  case is bigger than  $N=3m$  case. By including the edge deformation Hamiltonian to the Hamiltonian of system (deformation is localized near two edges) and by solving the Schrödinger equation we have find the band structure of system. Results show that all A-GNRs become semiconductor. For example we can compare the energy gaps of A-GNRs with  $N=8, 9$  and  $10$ . For perfect A-GNRs widths of ribbon. Figure shows the decrease of energy gap by increasing the ribbon width. However to detuning the energy gap of system for optical applications, we should optimize the shape and the width of graphene nanoribbon.

### 3. نتایج و بحث

در ابتدا ساختار باند و شکاف انرژی برای نوار نوار گرافن با لبه صندلی را با در نظر گرفتن تغییر شکل لبه محاسبه کردیم. از مدل tight-binding که در بخش قبلی توضیح داده شد استفاده کردیم. سه خانواده A-GNR مجزا وجود دارد. برای A-GNRهای کامل (بدون در نظر گرفتن تغییر شکل لبه)، در حالت  $N=3m+2$  شکاف انرژی صفر است و A-GNR فلزی می باشد اما در دو خانواده دیگر، شکاف انرژی وجود دارد و A-GNR بصورت ساختار نیمه هادی طبقه بندی می شود. شکاف انرژی  $N=3m+1$  بیشتر از حالت  $N=3m$  می باشد. با تغییر شکل هامیلتونی به هامیلتون سیستم (تغییر شکل در نزدیک لبه است) و با حل معادله شرودینگر، ساختار باند سیستم را پیدا می کنیم. نتایج نشان می دهند که همه A-GNRها نیمه هادی هستند. به عنوان مثال، می توانیم شکاف انرژی A-GNRها با  $N=8,9,10$  را با هم مقایسه کنیم. شکل کاهش شکاف انرژی با افزایش عرض نوار را نشان می دهد. با اینحال، برای تنظیم مجدد شکاف انرژی سیستم برای برنامه های نوری، باید شکل و عرض نوار گرافن را بهینه سازی کنیم.



## توجه!

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت

ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.

برای جستجوی جدیدترین مقالات ترجمه شده، [اینجا](#) کلیک نمایید.