

چکیده

بهره برداری کامل از قابلیت های ارائه شده توسط خواص نوین مواد دو بعدی نیازمند رویکردهای جدید فناورانه است. یک رویکرد امیدوارکننده، استفاده از حساسیت شدید ناشی از ابعاد کوچک این مواد به نیروهای مکانیکی خارجی و کرنش است. استفاده از ظرفیت فراهم شده توسط این روش به شناخت آثار کرنش در مواد دو بعدی مختلف وابسته است. برای مثال، کرنش در گرافین برای غلبه بر نسبت محدود سوئیچ خاموش/روشن ناشی از نبود پس تابش و انرژی گاف مناسب است. این در حالی است که در مورد دسته ای دیگر از مواد دو بعدی، کالکوژناید های فلزات واسطه، به دلیل برهم کنش مناسب نور- ماده، کرنش برای اصلاح خواص اپتیکی بسیار مناسب است.

در این رساله به بررسی اثر کرنش درون- صفحه بر خواص الکترونیکی و اپتیکی شبکه های دولایه و هیبریدی مبتنی بر گرافین و تک لایه ی کالکوژناید های فلزات واسطه می پردازیم. نشان خواهیم داد که این خواص به میزان چشم گیری با تغییرات ساختار شبکه ی مواد دو بعدی مورد مطالعه تغییر می کند و امکان بهره برداری فناورانه را در این مواد برای دستگاه های الکترونیکی و حسگرهای مبتنی بر کرنش فراهم می کند.

بر اساس محاسبات تئوری تابعی چگالی ما بر روی تغییرات ناشی از کرنش خواص الکترونیکی ابر شبکه های همساخت گرافین دولایه ی چرخیده و گرافین/بورون نایتراید، در می یابیم که برای هر دو شبکه، ترکیب چند درصدی کرنش درون- صفحه ای و ساختارهای موره، منجر به جابجایی قابل توجه دره ها، مدولاسیون انرژی گاف و افزایش بهنجارش سرعت فرمی ناشی از زیرلایه می شود. جالب اینکه، در هنگام اعمال کرنش درون- صفحه ای نامتقارن بر گرافین/بورون نایتراید، برای هر جهت دلخواه کرنش، جهت زیگزاگ گرافین، جهت مرجح تراپردی می شود. علاوه بر این، محاسبات ما نشان می دهد که برای کرنش های مرکب بزرگ، گرافین دولایه ی چرخیده، گذار مستقیم- نامستقیم انرژی گاف را به نمایش می گذارد.

در کالکوژناید های فلزات واسطه، محاسبات ما نشان می دهد که تغییرات ناشی از کرنش در پهنای خط طیف جذبی به تغییر نسبی انرژی حالات اکسیتونی وابسته است. نتایج نظری ما، مشاهدات تجربی اخیر مبنی بر تغییرات متمایز پهنای خطوط اکسیتونی کالکوژناید های فلزات واسطه در دمای اتاق را به خوبی توضیح می دهد. بعلاوه، ما رفتار پهنای خط تشدیدهای اکسیتونی را تحت کرنش فشاری و در دماهای پایین نیز پیش بینی می کنیم.

واژه های کلیدی: مواد دو بعدی، ساختارهای موره، کرنش، خواص الکترونیکی و اپتیکی