

مطالعه تحلیلی خواص اپتیکی گرافیت

ندا پاکدل^۱، علیرضا صفارزاده^{۲و}

چکیده: در این مقاله، یک بررسی تحلیلی از خواص اپتیکی گرافیت در گستره ای از فوتون های کم انرژی بر اساس گذارهای الکترون π ارائه می شود. ساختار نواری گرافیت توسط روش تنگ-بست در تقریب نزدیک ترین همسایه، با چشم پوشی از برهم کنش داخلی میان لایه های مختلف گرافیت بررسی می شود. همچنین، عبارت ساده ای برای چگالی حالت های الکترونی و رسانندگی اپتیکی بدست می آید. سپس قسمت موهومنی ثابت دی الکتریک گرافیت را به روش عددی محاسبه کرده و مشاهده می شود که طیف اپتیکی به روش تحلیلی و رفتار بدست آمده از نتایج محاسبات عددی با طیف تجربی از توافق بسیار خوبی برخوردار است.

واژه های کلیدی: گرافیت، خواص اپتیکی، چگالی حالت های الکترونی، رسانندگی اپتیکی.

را بخوبی بیان می کنند. علاوه بر این، گرافیت به علت ساختار لایه ای اش، می تواند مشکل اصلی بررسی تحلیلی خواص اپتیکی را که همان محاسبه انتگرال های حجمی منطقه اول بریلوئن هستند را حل کند [۵]. ممکن است مدل های مختلف محاسبه نوارهای انرژی، برای نواحی فرابینفس که ویژگی های نوری گرافیت را در این محدوده بیان می کنند مناسب باشند، اما این مدلها برای نواحی فرو سرخ مناسب نیستند، زیرا در این نواحی، انتشار انرژی در امتداد سه بعد اهمیت می یابد [۳].

چون در این مقاله قصد داریم به بررسی تحلیلی خواص اپتیکی گرافیت در گستره ای از فوتون های کم انرژی بپردازیم، به همین منظور با استفاده از روش تنگ-بست در تقریب نزدیک ترین همسایه، نوارهای الکترونی گرافیت را توصیف می کنیم [۴]. همچنین، علاوه بر برهم کنش نوری، عبارت ساده ای برای چگالی حالت های الکترونی [۵] و رسانندگی اپتیکی [۶] گرافیت ارائه می دهیم. سپس به روش عددی، قسمت موهومنی ثابت دی الکتریک گرافیت را محاسبه کرده و نمودار آنرا بر حسب انرژی رسم و با منحنی تجربی مقایسه می کنیم [۵].

۱. مقدمه

در سال های اخیر، به بررسی خواص فیزیکی گرافیت توجه زیادی شده است. این بلور، ویژگی های الکترونی منحصر بفردی را از نقطه نظر تئوری و نیز تجربی از خود نشان می دهد [۱]. این ساختار لایه ای شکل، برای بررسی پدیده های دو بعدی، بسیار مناسب بوده و می توان با تزریق مولکولهای مختلف به آن بسیاری از ترکیبات جالب گرافیت را تشکیل داد. علاوه بر این، گرافیت با نانو لوله های کربنی که اخیراً مورد توجه بسیار زیاد محققین نانو قرار گرفته است بسیار مرتبط است [۲].

بررسی های اپتیکی، اطلاعاتی را در مورد وضعیت الکترون های تحریک شده بلور بدست می دهند. این بررسی ها، آزمایش خاصی برای هر مدل مورد نظر جهت بدست آوردن نوارهای انرژی الکترونی جامدات بشمار می رود. برای نوارهای انرژی گرافیت، چندین روش مختلف وجود دارد که مزیت ماهیت دو بعدی گرافیت

(۱) تهران، استاد نجات الهی، دانشگاه پیام نور مرکز تهران، گروه فیزیک pakdln@yahoo.com

(۲) تهران، فرمانیه، پژوهشگاه دانش های بنیادی-پژوهشکده علوم نانو a-saffar@tpnu.ac.ir

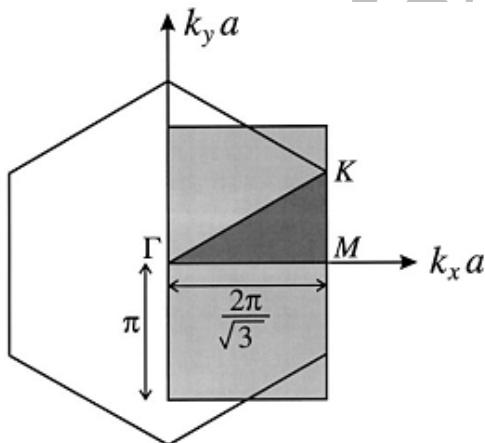
انتگرال روی k_z ناحیه بریلوئن را با $\frac{2\pi}{d}$ جایگزین کنیم که در آن $d = 3.35 \text{ \AA}$ ، فاصله بین لایه های مجاور است.

به علت تقارن در جهت های x و y ، برای ثابت دی الکتریک طولی خواهیم داشت:

$$\epsilon = \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} \rightarrow \epsilon = \frac{\zeta}{2} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \epsilon(\omega) &= 1 - \frac{e^2}{4\pi^2 \epsilon_0 \hbar^2 \omega^2 d} \\ &\times \int_{2DBZ} \sum_{j=v,c} \left\{ \frac{\partial^2 E_j}{\partial k_x^2} + \frac{\partial^2 E_j}{\partial k_y^2} \right\} f_0(E_j) d^2 k \\ &+ \frac{e^2 \hbar^2}{2\pi^2 \epsilon_0 m^2 d} \int_{2DBZ} \frac{|P_{vc}^x|^2 + |P_{vc}^y|^2}{E_{cv}[E_{cv}^2 - \hbar^2 \omega^2]} Z d^2 k \end{aligned}$$

انتگرال ها روی ناحیه بریلوئن دو بعدی که در شکل ۱ نشان داده شده، محاسبه می شوند. در حقیقت، انتگرال ها باید در ناحیه کاهش ناپذیر از منطقه بریلوئن که در شکل ۱ به صورت تیره نشان داده شده است محاسبه می شوند.



شکل ۱. منطقه بریلوئن دو بعدی گرافیت.

برای توصیف روش تنگ-بست گرافیت [۴]، انرژی الکترون در جایگاه هر اتم کربن را به عنوان نقطه صفر در نظر می گیریم. یعنی $E_p = 0$. آنگاه هامیلتونی برای نوارهای الکترونی π ، با برهمن کنش نزدیکترین همسایه، به شکل زیر بدست می آید:

۲. فرمول بندی مسئله

گرافیت، یک شبکه هگزاگونال سه بعدی از اتم های کربن است که اثرات برهمکنش بین لایه های در مقایسه با اثرات درون لایه ای، اندک است، زیرا فاصله لایه های گرافیت (3.35 \AA) خیلی بیشتر از فاصله نزدیکترین اتم های کربن همسایه در گرافیت ($a_{cc} = 1.42 \text{ \AA}$) است.

سه پیوند σ برای گرافیت دو بعدی در یک آرایش sp^2 هیبرید می شوند در حالیکه برای اربیتال های $2p_z$ ، که عمود بر صفحه xy هستند، پیوند های کووالانسی π را ایجاد می کنند.

در این مقاله، فقط نوار انرژی مربوط به حالت های π گرافیت دو بعدی را در نظر می گیریم، زیرا نوارهای π که پیوندهای کووالانسی را ایجاد می کنند، برای تعیین ویژگی های حالت جامد گرافیت بسیار مهم هستند [۴].

در ابتدا برای ثابت دی الکتریک مختلط یک بلور، شکل معادل عبارت اهریزیج-کوهن [۷] با نوار رسانش (c) و نوار والانس (v) را در نظر می گیریم:

$$\begin{aligned} \epsilon_{ii} &= 1 - \frac{e^2}{4\pi^3 \epsilon_0 \hbar^2 \omega^2} \int_{3DBZ} \sum_{j=v,c} \frac{\partial^2 E_j}{\partial k_i^2} f_0(E_j) d^3 k \\ &+ \frac{e^2 \hbar^2}{2\pi^3 \epsilon_0 m^2} \int_{3DBZ} \frac{|P_{vc}^i|^2 Z}{E_{cv}[E_{cv}^2 - \hbar^2 \omega^2]} d^3 k \end{aligned} \quad (1)$$

که در آن، E_j انرژی نوار و f_0 تابع فرمی، $P_{vc}^i = E_c - E_v$ انرژی گذار (انتقال) و $i \in \{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\}$ می باشد. ماتریسی اندازه حرکت است که $\{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\}$ می باشد. سامانه مختصاتی را که برای انتگرال های رابطه (۱) در نظر می گیریم، سامانه مختصاتی است که محور c ساختار هگزاگونال در امتداد محور \hat{z} است. بنابراین با صرف نظر کردن از جفت شدگی لایه های گرافیت، می توان وابستگی عناصر ماتریس گذار و نیز انرژی های نوار را به k_z نادیده گرفت. در این صورت می توان

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right)^2 = \frac{1}{3} + \frac{\nabla^2 F}{F} \quad (8)$$

که در آن $\nabla^2 F = \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial y^2}$ بنا براین با جایگذاری روابط (۷) و (۸)، رابطه (۲) را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\omega) = 1 + \frac{C}{3} \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\sqrt{3}}} \frac{FZ}{4F^2 - \Omega^2} dx dy \\ + \frac{4C}{\Omega^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\sqrt{3}}} \frac{ZF^2 \nabla^2 F}{4F^2 - \Omega^2} dx dy \end{aligned} \quad (9)$$

$C = \frac{e^2}{2\pi^2 \epsilon_0 d\gamma_0}$ که $\Omega \equiv \frac{\hbar\omega}{\gamma_0}$ اندزی فوتون فرودی، یک ثابت بدون بعد و به علت تقارن، را هم می‌توان به همین شکل محاسبه کرد.

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = \frac{-3}{16} F + \frac{3}{16F^3} (1 + 2 \cos y)^2 \quad (10)$$

با در نظر گرفتن رابطه ریاضی زیر، یعنی

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \text{Im} \left(\frac{1}{E^2 - \hbar^2(\omega + i\gamma)^2} \right) = \pi \delta(E^2 - \hbar^2 \omega^2) \quad (11)$$

می‌توان قسمت موهومی ثابت دی الکتریک را به راحتی محاسبه کرد. با تغییر $i\gamma \rightarrow \Omega + i\gamma$ در حد $0 \rightarrow \gamma$ و همچنین رابطه (۱۱) در انتگرال‌های رابطه (۹)، فقط سهم تشدید دقیق $F = \frac{\Omega}{2}$ حفظ می‌شود. بنابراین Ω از انتگرال‌ها بیرون آمده و می‌توانیم قسمت موهومی رابطه (۹) را بدست آوریم:

$$\begin{aligned} \varepsilon''(\omega) = & \frac{-C\Omega}{48} \text{Im} \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\sqrt{3}}} \frac{Z}{4F^2 - \Omega^2} dx dy \\ & + \frac{3C}{\Omega^3} \text{Im} \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\sqrt{3}}} \frac{Z}{4F^2 - \Omega^2} dx dy \\ & + \frac{12C}{\Omega^3} \text{Im} \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\sqrt{3}}} \frac{Z \cos y}{4F^2 - \Omega^2} dx dy \\ & + \frac{12C}{\Omega^3} \text{Im} \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\sqrt{3}}} \frac{Z \cos^2 y}{4F^2 - \Omega^2} dx dy \end{aligned}$$

$$H = \begin{bmatrix} 0 & -\gamma_0 f(x, y) \\ -\gamma_0 f(x, y) & 0 \end{bmatrix} \quad (3)$$

که در آن $y = k_y a$ و $x = k_x a$ مؤلفه‌های بردار موج بلور در ثابت شبکه $a = \sqrt{3} \times 1.42 \text{ \AA}$ می‌باشند. γ_0 پارامتر پرش بین جایگاهها و $f(x, y)$ عبارت است از:

$$f(x, y) = \exp\left(i \frac{x}{\sqrt{3}}\right) + 2 \exp\left(-i \frac{x}{2\sqrt{3}}\right) \cos\left(\frac{y}{2}\right) \quad (4)$$

سپس با حل $|H - EI| = 0$ ، حالتهای انرژی و ویژه مقادیر انرژی عبارت اند از:

$$\begin{aligned} |v, c\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |\alpha\rangle \mp e^{-i\varphi} |\beta\rangle \right\} \\ E_{v,c} &= \pm \gamma_0 F(k_x a, k_y a) \end{aligned} \quad (5)$$

که علامت پایینی و بالایی به ترتیب معادل نوارهای طرفیت و رسانش هستند. f را به صورت $f = Fe^{i\varphi}$ با فاز φ و ضریب F که با استفاده از رابطه زیر بدست می‌آید، در نظر می‌گیریم:

$$F(x, y) = \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}x}{2}\right) \cos\left(\frac{y}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{y}{2}\right)} \quad (6)$$

حال عنصر ماتریسی اندازه حرکت را برای گذار میان نوارها محاسبه می‌کنیم. چون فقط اوریتال‌های π در نظر گرفته می‌شوند، عبارت شامل انتقالات غیرمستقیم نمی‌باشد، هیچ سهم درون اتمی نداریم [۹]. بنابراین عملگر اندازه حرکت، مثلاً در جهت x ، با استفاده از رابطه $\left(\frac{m}{\hbar}\right) \frac{\partial H}{\partial k_x}$ مولفه ماتریسی زیر را بدست می‌دهد:

$$P_{v,c}^x = \langle v | P^x | c \rangle = -\frac{m\gamma_0 a}{i\hbar} \frac{\partial \varphi}{\partial x} F(x, y) \quad (7)$$

عبارت مشابهی هم برای $P_{v,c}^y$ می‌توان بدست آورد. برای ساده کردن نتایج، یک رابطه ریاضی میان F و φ به شکل زیر بهینه سازی می‌کنیم:

$$= \frac{4}{\sqrt{3}\sqrt{A^2 - B^2}} \left[\arctan \frac{(A-B)\tan(\pi/2)}{\sqrt{A^2 - B^2}} - \arctan \frac{(A-B)\tan 0}{\sqrt{A^2 - B^2}} \right]$$

بهینه سازی می کنیم. در این صورت داریم:

$$G_n(\Omega) = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \times \text{Im} \left[\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos^n y dy}{\sqrt{(2\cos y - \Omega/4 + \Omega + 1)(2\cos y - \Omega/4 - \Omega + 1)}} \right]$$

براین اساس، انتگرال ها را می توان به مجموع انتگرال های بیضوی کامل $E(z)$ و $K(z)$ تفکیک کرد. برای حالت های $n = 0, 1, 2$ ، روابط G_2, G_1, G_0 به صورت زیر ساده می شوند:

$$G_0(\Omega) = \frac{\pi}{\sqrt{6\Omega}} \text{Re}[K(z)] \quad (17)$$

$$G_1(\Omega) = \frac{\pi}{\sqrt{6\Omega}} \frac{\Omega^2 - 12}{24} \text{Re}[K(z)] \quad (18)$$

$$G_2(\Omega) = \frac{\pi}{\sqrt{6\Omega}} \times \text{Re} \left[\frac{48 + 96\Omega - 16\Omega^2 + \Omega^4}{192} K(z) - \Omega E(z) \right] \quad (19)$$

که در آن

$$z = \frac{(6 - \Omega)(2 + \Omega)^3}{128\Omega}$$

$$K(z) = \int_0^1 [(1 - x^2)(1 - zx^2)]^{1/2} dx \quad (20)$$

$$E(z) = \int_0^1 \left[\frac{1 - zx^2}{1 - x^2} \right]^{1/2} dx$$

بنابراین، $\varepsilon''(\omega)$ به صورت زیر در می آید:

$$\begin{aligned} \varepsilon''(\omega) &= \frac{C\pi}{\sqrt{6\Omega^2}} \text{Re} \left[\frac{(8\Omega^3 - 96\Omega + 115)K(z)}{193} - 12E(z) \right] \\ &\quad + \Omega_p^2 \pi \delta(\Omega^2) \end{aligned} \quad (21)$$

و با در نظر گرفتن $z = \text{خواهیم داشت}:$

$$\begin{aligned} \varepsilon''(\omega) &= \frac{3C}{\Omega^3} \{G_0(\Omega) + 4G_1(\Omega) + 4G_2(\Omega)\} \\ &\quad - \frac{C\Omega}{48} G_0(\omega) + \Omega_p^2 \pi \delta(\Omega^2), \end{aligned} \quad (12)$$

که Ω_p ، فرکانس پلاسمایی بهنجار شده (اینگونه بدست می آید):

$$\Omega_p^2 = -C \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\sqrt{3}}} Z \nabla^2 F dxdy \quad (13)$$

$$G_n(\Omega) = \text{Im} \left[\int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\sqrt{3}}} \frac{\cos^n y}{4F^2 - \Omega^2} dxdy \right] \quad (14)$$

چون انتگرال فرکانس پلاسمایی، اغلب توسط سهم نقاط نزدیک به نقطه K با مختصات $(x_K, y_K) = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}}, \frac{2\pi}{3} \right)$ مشخص می شود، بنابراین تابع F را حول نقطه K بسط می دهیم؛

$$F \approx \frac{1}{2} \sqrt{3(x - x_K)^2 + 3(y - y_K)^2}$$

سپس با قرار دادن $\nabla^2 F$ و Z در انتگرال فرکانس پلاسمایی خواهیم داشت:

(15)

$$\Omega_p^2 \approx 4\pi \ln(2) C \frac{k_B T}{\gamma_0}$$

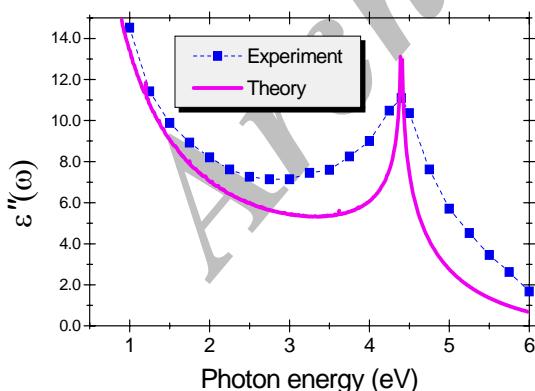
بنابراین با توجه به این رابطه، فرکانس پلاسمایی به صورت ریشه مربعی دما، تغییر می کند. در صورتیکه $\Omega = \frac{\hbar\omega}{\gamma_0}$.

در ادامه برای اینکه عبارتی ساده برای قسمت موهومی ثابت دی الکتریک بدست آوریم، ابتدا رابطه $G_n(\Omega)$ را با استفاده از رابطه ریاضی زیر، یعنی:

$$\frac{2}{\sqrt{3}} \int_0^\pi \frac{dt}{A + B \cos t} \quad (16)$$

همانطور که در نمودار دیده می شود، چگالی
حالت های الکترونی در $\hbar\omega = 2\gamma_0$ دارای تکینگی است
که به گذارهای نقطه M منطقه بریلوین مربوط است
که در آنجا نوارها دارای یک نقطه زینی هستند [۳].
در شکل ۳، با استفاده از رابطه (۲۱) و برنامه نویسی
به زبان فورترن، قسمت موهومنی ثابت دی الکتریک
گرافیت را بر حسب انرژی، رسم نموده ایم و با طیف
اپتیکی تجربی مقایسه کردہ ایم. مشاهده می شود که
رفتار این دو طیف نزدیک بهم هستند و در انرژی
حدود ۴.۴ eV در هر دو طیف تحلیلی و تجربی تشدید
اتفاق می افتد. بنابراین با توجه به نمودار $D(\omega)$ ، به
دلیل تکینگی در $2\frac{\hbar\omega}{\gamma_0}$ مقدار $2.2 \text{ eV} = \gamma_0$ بدست
می آید.

با بدست آوردن $\gamma_0 = 2.2 \text{ eV}$ ، می توانیم ثابت C
را نیز محاسبه کنیم. مقدار بدست آمده برابر $C = 1.24$
می باشد. در این صورت با استفاده از رابطه (۱۵) مقدار
عددی فرکانس پلاسمایی در دمای اتاق محاسبه می
شود، $\hbar\omega_p = 0.77 \text{ eV}$ ، که خیلی کمتر از مقدار
تعیین شده توسط جانسون و درسل هاووس
است [۳].



شکل ۳. مقایسه نتیجه تحلیلی و طیف تجربی برای قسمت
موهومنی ثابت دی الکتریک گرافیت.

در شکل ۴، قسمت موهومنی ثابت دی الکتریک
گرافیت را به روش عددی، با استفاده از رابطه (۹) و

۳. نتایج و بحث

با توجه به اینکه، ساختار تشیدیدی طیف اپتیکی را
می توان از تابع چگالی حالت های الکترونی بدست آورد،
بنابراین در ادامه $D(\omega)$ را محاسبه می کنیم:
تابع چگالی حالت ها برای یک جامد دو بعدی در
منطقه اول بریلوین به صورت زیر است [۱۰]:

$$D(\omega) = \int_{2DBZ} \delta(E_{cv} - \hbar\omega) d^2k$$

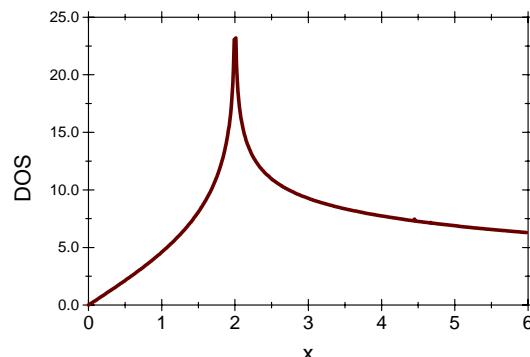
بادر نظر گرفتن رابطه (۱۷)، تابع چگالی حالت های
گرافیت به صورت زیر بدست می آید:

$$D(\omega) = \frac{4\hbar\omega}{\pi a^2 \gamma_0^2} G_0(\Omega)$$

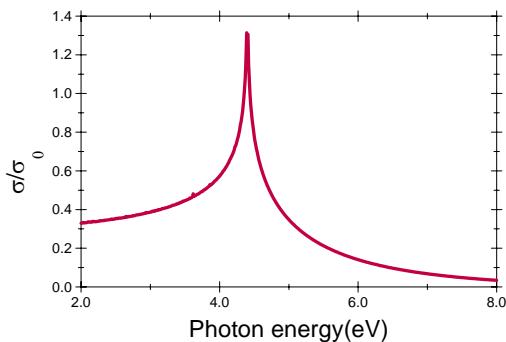
$$= \frac{4}{a^2 \gamma_0} \sqrt{\frac{\Omega}{6}} \operatorname{Re} \left\{ K \left[\frac{(6-\Omega)(2+\Omega)^3}{128\Omega} \right] \right\} \quad (۲۲)$$

انتگرال $D(\omega)$ در گستره $0 \leq \hbar\omega \leq 6\gamma_0$ از
انرژی های گذار، شرط $\int_0^{6\gamma_0} D(\omega)d(\hbar\omega) = \frac{8\pi^2}{\sqrt{3}a^2}$
را ارضاء می کند. یعنی، این شرط با مساحت منطقه
بریلوین دو بعدی معادل است. بعلاوه، $D(2\omega)$ تابع
چگالی حالت ها را نشان می دهد، زیرا نوارها متقارن اند.
در شکل ۲ با استفاده از برنامه کامپیوتی فورترن

تابع $D(\omega)$ را بر حسب $\frac{\hbar\omega}{\gamma_0}$ رسم نموده ایم.



شکل ۲. تابع چگالی حالت های گرافیت، $D(\omega)a^2\gamma_0$.
بر حسب انرژی فوتونها $x = \hbar\omega/\gamma_0$.



شکل ۵. نمودار نتایج تحلیلی رسانندگی گرافیت
بر حسب انرژی فوتون $\frac{\sigma(\omega)}{\sigma_0}$ (eV).

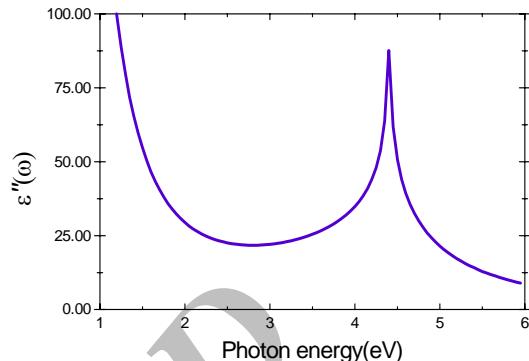
در نمودار ۵، $\frac{\sigma}{\sigma_0}$ که به روش تحلیلی محاسبه شده بر حسب انرژی رسم کردہ‌ایم. در این نمودار، تکینگی ایجاد شده در انرژی ۴.۴ eV، نشان می‌دهد که این نتیجه با نتایج قبل مطابقت دارد.

۴. نتیجه گیری

در این مقاله، یک بررسی تحلیلی از ثابت دی الکتریک گرافیت در گستره‌ای از فوتون‌های کم انرژی که توسط گذار الکترون‌های π مشخص می‌شود، را ارائه دادیم که برای توصیف نوارهای انرژی گرافیت از روش تنگ-بست در تقریب نزدیکترین همسایه استفاده کردیم. علاوه بر محاسبه قسمت موهومنی ثابت دی الکتریک گرافیت، عبارات ساده‌ای برای چگالی حالت‌های الکترونی و نیز رسانندگی اپتیکی گرافیت بدست آوردیم. نتایج حاکی از وجود یک تکینگی در طیف اپتیکی است. نتایج تحلیلی که در این مقاله ارائه شده است، از توافق بسیار خوبی با طیف تجربی برخوردار است.

نتایج بدست آمده برای ثابت دی الکتریک، بررسی تحلیلی طیف اپتیکی هر ماده‌ی کپه‌ای را با استفاده از ساختار نواری امکان پذیر می‌سازد. همچنین، این نتایج که برای لایه‌های گرافینی منفرد ارائه شده، برای ریز لوله‌های کربنی با قطر بزرگ نیز مناسب است.

برنامه نویسی به زبان فورترن محاسبه و بر حسب انرژی فوتون فرودی رسم کرده‌ایم.



شکل ۶. نتایج عددی برای قسمت موهومنی ثابت دی الکتریک گرافیت $\epsilon(\omega)$ بر حسب انرژی فوتون $\hbar\omega$.

همانطور که در شکل ۶ مشاهده می‌شود، رفتار طیف تحلیلی و رفتار نمودار حاصل از محاسبات عددی با طیف تجربی سازگاری دارند. همچنین در ۴.۴ eV که تشیدی به صورت یک تکینگی در منحنی تجربی ظاهر می‌شود، با نتایج به دست آمده به روش عددی در تطابق بسیار خوبی است.

در انتهای می‌خواهیم به بررسی رسانندگی گرافیت با استفاده از نتایج تحلیلی قبلی بپردازیم. با استفاده از رابطه مربوط به قسمت موهومنی ثابت دی الکتریک یک جامد، و قسمت حقیقی رسانندگی آن، رسانندگی گرافیت را به صورت زیر بدست می‌آوریم:

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2}{\sqrt{24} \pi \hbar d \Omega^2} \times \text{Re} \left[\frac{144 - 12\Omega + \Omega^3}{24} K(z) - 12E(z) \right] + \Omega_p^2 \pi \delta(\Omega^2) \quad (23)$$

عبارت (۲۳) در حد بسامد صفر، منجر به یک رسانندگی اپتیکی حداقل، با مقدار $\sigma = \sigma_0 = \frac{e^2}{4\hbar}$ می‌شود.

مراجع

- [1] Taft E.A. and Philipp H.R., *Optical properties of graphite*, Phys. Rev. **138**, 1964, PP. 197.
- [2] Lin M.F., Huang C. S., and Chuu D. S., *Plasmons in graphite and stage-1 graphite intercalation compounds*, Phys. Rev. B **55**, 1997, PP.13961.
- [3] Johnson L. G. and Dresselhaus G., *Optical properties of graphite*, Phys. Rev. B **7**, 1973, PP. 2275.
- [4] Saito R., Dresselhaaus G. and Dresselhaus M. S., *Physical properties of carbon nanotube*, London: Imperial, College Press, 1998.
- [5] Thomas G. Pedersen, *Analytic calculation of the optical properties of graphite*, Phys. Rev. B **67**, 2003, PP. 113106.
- [6] Thomas G. Pedersen, Flindt C., Pedersen J., Jauho A. P., Mortensen N.A., and Pedersen K., *Optical properties of graphene antidote lattices*, Phys. Rev. B **77**, 2008, PP.245431.
- [7] Ehrenreich H. and Cohen M.H., *Self-consistent field approach to the many-electron problem*, Phys. Rev. **115**, 1959, PP.789.
- [8] Wallace P. R., *The band theory of graphite*, Phys. Rev. **71**, 1947, PP.622.
- [9] Pedersen T. G., Pedersen K., and Kristensen T. B., *Optical matrix elements in tight-binding calculation*, Phys. Rev. B **63**, 2001, PP. 201101.