

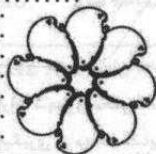
بسم الله الرحمن الرحيم

آموزش نرم افزار شبیه سازی ATK

مؤلفین:

دانیال ظریفی

مهدی حاجی زاده



انتشارات شبازی



سرشناسه	: ظریفی، دانیال، ۱۳۶۷ -
عنوان و نام پدیدآور	: آموزش نرم افزار شبیه سازی ATK / مولفین دانیال ظریفی، مهدی حاجی زاده.
مشخصات نشر	: تهران: انتشارات شهبازی، ۱۳۹۹.
مشخصات ظاهری	: ۲۷۰ ص.: مصور، جدول، نمودار.
شابک	: 978-622-629544-4 : ۶۵۰۰۰۰ ریال
وضعیت فهرست نویسی	: فیا
موضوع	: نرم افزار اتک (ATK) Atomistix ToolKit
موضوع	: نانو ساختارها -- داده پردازي Nanostructures -- Data processing
شناسه افزوده	: حاجی زاده، مهدی، ۱۳۶۴ -
رده یکن کنگر	: QC۱۷۶/۸
بندی یویی	: ۶۲۰/۵
شماره کتابشناسی ملی	: ۷۷۷۱۷۱۳

عنوان کتاب:	آموزش نرم افزار شبیه سازی ATK
مؤلفین:	دانیال ظریفی، مهدی حاجی زاده
ناشر:	انتشارات شهبازی
مدیر مسئول انتشارات:	دکتر جواد شهبازی کرمی
ناظر فنی:	حامد رحیمی
حروفچینی و صفحه آرایی:	قاسمی (رها)
طراحی جلد:	محمد فرجی
چاپ و صحافی:	چاپ روز
نوبت چاپ:	اول ۱۳۹۹
شمارگان:	۱۰۰۰ جلد
قیمت:	۶۵۰۰۰ ریال
شابک:	ISBN: 978-622-629544-4

تلفن: ۶۶۴۰۳۰۰۹ همراه: ۹۱۲۱۸۳۴۱۴۴

نمایندگی فروش: تهران خیابان انقلاب، روبروی درب اصلی دانشگاه تهران، پلاک ۱۲۱۲، طبقه اول، انتشارات شهبازی، کدپستی: ۱۳۱۴۷۵۴۶۱۴

ایمیل: ShahbaziPub@gmail.com وب سایت: www.ShahbaziPub.ir

توجه: کلیه حقوق مادی و معنوی چاپ و نشر، طرح روی جلد و عنوان کتاب با توجه به قانون حمایت حقوق مؤلفان، مصنفان و هنرمندان، مصوب سال ۱۳۴۸ برای انتشارات شهبازی محفوظ است. هرگونه استفاده بدون مجوز کتبی از ناشر تخلف بوده و بر اساس بند (۵) ماده ۲۳ قانون قابل پیگیری در محاکم قضایی می باشد.

مقدمه مؤلفین:

سالها از ورود رایانه به زندگی روزمره‌ی انسان‌ها می‌گذرد؛ از اولین ماشین‌های حسابی که فقط توانایی انجام اعمال ساده‌ی ریاضی داشته‌اند تا به الان که رایانه‌های خانگی توانایی محاسبه و پردازش کارهای زیادی را دارند. از طرفی همان طو که از جمله معروف انیشتین درباره دقت و سرعت کامپیوترها و ترکیب آن با هوش انسانی، استفاده از کامپیوتر در همه امور موجب سرعت بخشیدن به کارها و بالا رفتن دقت خواهد شد.

از این رو دانش راد و بررسی فیزیکی و شیمیایی ساختارهای مولکولی نیز از این قاعده مستثنی نخواهند بود. در این کتاب به بررسی یکی از بهترین ابزارهای شبیه سازی محاسبات مربوط به ساختارهای نانویی به نام Atanix V tual Nano Lab که به اختصار ATK نامیده می‌شود خواهیم پرداخت و کلیه مبانی نظری آن را شامل مبانی کوانتومی، تئوری تابعی، جگالی بررسی خواهیم کرد. سپس به مثال‌های کاربردی در ATK خواهیم پرداخت و نحوه شبیه سازی آن‌ها را بررسی خواهیم کرد که خواننده می‌تواند همگام با کتاب مثال‌ها را در نرم افزار شبیه سازی نماید.

همچنین در فصل پنجم به صورت کامل یک کار تحقیقی، همراه تحلیل‌های آن که توسط ATK انجام شده است را آورديم تا خوانندگان تازه کار با نحوه کار، صورت کار جهت انجام تحقیقات آشنا شوند. فصلی نیز به مبانی پایتون پرداخته شده تا بتوان کدهای تولید شده توسط نرم افزار را نیز تحلیل نمود.

در انتها از کلیه همکاران و دانشجویان عزیزى که در نگارش این کتاب، ترجمه همکاری کرده‌اند علی‌الخصوص جناب آقای محمد باقرى به دلیل تست و بازبینی شبیه سازی و کتاب، باسگزاریم؛ همچنین از خانواده‌های عزیزمان که همواره در مسیر فراگیری و آموزش علم و دانش کنار ما بودند کمال تشکر را داریم.

مهدی حاجی‌زاده/دانیل ظریفی

تابستان ۱۳۹۹

فهرست مطالب

۱۰	فصل اول
۱۰	۱-۱- مقدمه
۱۰	۱-۲- نظریه تابعی چگالی
۱۲	۱-۳- آنساتز کوهن-شم
۱۴	۱-۴- تقریبهای LDA و GGA
۱۷	۱-۵- حل معادلات کوهن-شم
۱۹	۱-۶- امواج تخت و روش محاسباتی شبه پتانسیل
۲۰	۱-۷- بریه تابعی چگالی اختلالی
۲۰	۱-۸- دینامیک شبکه ای
۲۳	۱-۹- بره کشت حبرین-فونون و نظریه های ابررسانایی فونونی
۲۹	۱-۱۰- نظریه توپا-فرمی
۳۰	۱-۱۱- تاریخچه نظریه ابررسانایی فونونی
۳۳	۱-۱۲- معیارهای ابررسانایی فونونی

۳۸	فصل دوم
۳۸	۲-۱- تاریخچه
۳۹	۲-۲- مدل کوانتومی اتم
۴۰	۲-۳- نارسایی های مدل اتمی رادرفورد
۴۱	۲-۴- نارساییهای مدل اتمی بور
۴۱	۲-۵- پیدایش فیزیک کوانتوم
۴۳	۲-۶- مقدمه ای کوتاه درباره مکانیک آماری

۴۶	فصل سوم
۴۶	۳-۱- معادله شرودینگر
۴۶	۳-۲- اثر ناپیوستگی تابع موج و مشتق آن
۴۸	۳-۳- بهنجارسازی تابع موج و کامل بودن
۴۸	۳-۴- تقارن معکوس در پتانسیل
۵۳	۳-۵- حل عددی معادله شرودینگر

- ۳-۶- شار جریان ۵۵
- ۳-۸- تیهگنی ماحصل تقارن ۵۸
- ۳-۹- سد پتانسیل متقارن با پتانسیل محدود ۵۸

- فصل پنجم ۷۳
- ۴-۱- محاسبه ساختار الکترونی یک کریستال ۷۳
- ۴-۲- اتصال Zn/ZnO/Zn ۸۵

- فصل ششم ۱۰۵
- ۵-۱- تاریخچه ۱۰۵
- ۵-۲- انواع آلوتروپ ۱۰۵
- ۵-۳- گرافداین ۱۰۸
- ۵-۴- نانونوارهای گرافداین ۱۰۹
- ۵-۵- مروری بر کار گذشتگان ۱۱۱
- ۵-۶- خواص الکترونیکی و مکانیکی گرافداین ۱۱۳
- ۵-۷- گاف انرژی ۱۱۳
- ۵-۸- گاف انرژی در گرافداین ۱۱۴
- ۵-۹- تناسب گاف انرژی نانونوارهای گرافداین با عرض آن ۱۱۵
- ۵-۱۰- تحرک حامل بار در گرافداین ۱۱۶
- ۵-۱۱- گاف انرژی و تحرک حامل بار در نانونوارهای گرافداین ۱۱۹
- ۵-۱۲- اثر کشش بر صفحات گرافداین ۱۲۲
- ۵-۱۳- اثر کشش بر نانونوارهای گرافداین ۱۲۲
- ۵-۱۴- نوارهای گرافداین در معرض میدان الکتریکی ۱۲۴
- ۵-۱۵- اثر دما بر صفحات گرافداین ۱۲۵
- ۵-۱۶- استفاده از گرافداین در ترانزیستورهای اثر میدان ۱۲۶
- ۵-۱۷- پیوند گرافداین با فلزات ۱۲۷
- ۵-۱۸- ساختار باند گرافداین در پیوند با فلزات ۱۲۸
- ۵-۱۹- ترانزیستور اثر میدان با کانال گرافداین ۱۲۹

۱۳۰	۲۰-۵- عملکرد FET با کانال گرافداین
۱۳۱	۲۱-۵- بررسی نقص تهی جا در ترانزیستورهای گرافنی
۱۳۲	۲۲-۵- نقص تهی جا و انواع آن
۱۳۳	۲۳-۵- تأثیر نقص تهی جا بر ساختار باند
۱۳۵	۲۴-۵- اثرات نقص تهی جا بر گرافداین
۱۳۸	۲۵-۵- اثرات نقص تهی جا بر ترانزیستور اثر میدان گرافنی
۱۴۱	۲۷-۵- اثر نقص تهی جا بر مشخصه های انتقال
۱۴۴	۲۸-۵- نتیجه گیری
۱۴۵	۲۹-۵- روش شبیه سازی و ساختار افزاره
۱۴۶	۳۰-۵- شبیه سازی و واسطه آرامش
۱۴۷	۳۱-۵- مباحث و ابج

۱۶۵	فصل ششم
۱۶۵	۱-۶- مقدمه
۱۶۷	۲-۶- مقاومت الکتریکی از دیدگاه اتمی
۱۶۷	۳-۶- دیاگرام تراز انرژی
۱۷۴	۴-۶- مدل ساده خازنی مبتنی بر پتانسیل لاپلاس
۱۷۵	۵-۶- روش خودسازگار Self-Consistent
۱۸۱	۶-۶- پهن شدگی تراز ناشی از کتاکت
۱۸۷	۷-۶- ساختار باند Band structure
۱۹۱	۸-۶- روش شبیه سازی مخصوص ترانزیستورهای CNTFET
۱۹۶	۹-۶- شبیه سازی انتقال کوانتومی بالستیک در نانو کربنی

۱۹۹	فصل هفتم
۱۹۹	۱-۷- مقدمه
۲۰۲	۲-۷- آشنایی با حالت Script
۲۰۳	۳-۷- Identifier در پایتون
۲۰۳	۴-۷- کلمات کلیدی زبان پایتون