

رفتارهای الکترونوری نانو ساختارهای کربنی بر مبنای نظریه تابع چگالی

www.ketab.ir

مؤلف:

حمیدرضا البرزیا

سرشناسه:	البرز نیا، حمیدرضا، ۱۳۵۹ -
عنوان و نام مؤلفان:	رفتارهای الکترونوری نانو ساختارهای کربنی بر مبنای نظریه تابع چگالی / حمیدرضا البرز نیا
مشخصات نشر:	تهران: دانشگاه پدافند هوایی خاتم الانبیا، (ص)، انتشارات، ۱۴۰۰
ویراستار علمی:	سیدتقی محمدی - علی شیرپای
مشخصات ظاهری:	۱۲۴ ص.: مصور، نمودار
شابک:	۹۷۸-۶۲۲-۷۲۸۷-۳۵-۶
وضعیت فهرست نویسی:	فیا
یادداشت:	کتابنامه
موضوع:	ترکیب های کربن
موضوع:	Carbon compounds
موضوع:	توابع چگالی
موضوع:	Density functionals
شناسه افزوده:	دانشگاه پدافند هوایی خاتم الانبیا، (ص)، انتشارات،
رده بندی کنگره:	QC۲۵۱/۳
رده بندی دیویی:	۵۴۷
شماره کتاب شناسی ملی:	۸۴۳۱۲۸۱



عنوان کتاب: رفتارهای الکترونوری نانو ساختارهای کربنی بر مبنای نظریه تابع چگالی

پدیدآورنده: حمیدرضا البرز نیا

ویراستار: سیدتقی محمدی - علی شیرپای

طراح جلد و صفحه آر: امیررضا مقیمیگلو

شابک: ۹۷۸-۶۲۲-۷۲۸۷-۳۵-۶

شمارندگان: ۱۰۰۰

قطع: وزیری

قیمت: ۲۵۰۰۰۰ ریال

ناشر: انتشارات دانشگاه پدافند هوایی خاتم الانبیا، (ص)

چاپ اول: ۱۴۰۰

حق چاپ و نشر برای ناشر محفوظ می باشد و هرگونه چاپ، تکثیر، یا باز نشر اثر بدون مجوز ناشر به هر شکل، اعم از افست، ریسوگراف یا زیراکس به صورت متن کامل یا خلاصه شده تحت هر عنوان اعم از کتاب، جزوه یا وسیله کمک آموزشی در فضای واقعی یا مجازی ممنوع و موجب پیگرد قانونی است.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	پیشگفتار
۱	فصل اول: مقدمه‌ای بر معرفی ساختارهای کربنی
۱	۱-۱ مقدمه
۲	۲-۱ ساختارهای هیبریدی در پیوندهای کربنی
۵	فصل دوم: آلتروپ‌های کربنی متداول و خواص فیزیکی آن‌ها
۵	۱-۲ انواع آلتروپ‌های کربنی متبلور
۵	۱-۲-۱ فولرن
۶	۱-۲-۲ نانوالیاف کربنی
۷	۱-۲-۳ نانولوله‌های کربنی
۸	۱-۲-۴ گرافن
۱۱	۱-۲-۵ گرافیت
۱۲	۱-۲-۶ گرافیت پیرولیتی با نظم بسیار بالا
۱۳	۱-۲-۷ الماس
۱۴	۲-۲ انواع آلتروپ‌های کربنی غیرمتبلور
۱۴	۱-۲-۲ کربن آمورف
۱۵	۲-۲-۲ کربن شیشه‌ای
۱۷	۳-۲-۲ کربن سیاه
۱۷	۴-۲-۲ کربن‌های متخلخل
۲۰	۵-۲-۲ کربن مایع
۲۱	۳-۲ گرافن پایه ساختارهای مهم کربنی
۲۱	۱-۳-۲ تاریخچه‌ی کشف گرافن
۲۶	۲-۳-۲ ساخت گرافن
۲۸	۳-۳-۲ خواص گرافن
۲۹	۴-۳-۲ تعیین خواص گرافن

۳۱.....	۵-۳-۲ کاربردهای گرافن
۳۳.....	فصل سوم: نظریه تابعی چگالی و روش محاسباتی
۳۳.....	۱-۳ مقدمه
۳۳.....	۲-۳ مسئله بس ذره‌ای
۳۷.....	۳-۳ بررسی مختصر DFT
۳۸.....	۱-۳-۳ نظریه هوهنبرگ-کوهن
۴۱.....	۲-۳-۳ معادلات کوهن-شم
۴۷.....	۳-۳-۳ مقدار Exc
۵۷.....	۴-۳ کدهای محاسباتی
۶۱.....	فصل چهارم: بررسی جنبه‌های الکترونوری چند آلترپ جدید کربن
۶۱.....	۱-۴ مقدمه
۶۲.....	۲-۴ پنتا گرافن
۶۲.....	۱-۲-۴ فرضیات محاسباتی پنتا گرافن
۶۳.....	۲-۲-۴ خصوصیات ساختاری پنتا گرافن
۶۵.....	۳-۲-۴ خواص الکترونیکی پنتا گرافن
۶۷.....	۴-۲-۴ خواص اپتیکی پنتا گرافن
۷۲.....	۳-۴ تترا هگزا کربن
۷۲.....	۱-۳-۴ روش‌های محاسباتی تترا هگزا کربن
۷۳.....	۲-۳-۴ خواص ساختاری و پایداری تترا هگزا کربن
۷۷.....	۳-۳-۴ خواص الکترونیکی تترا هگزا کربن
۸۰.....	۴-۳-۴ خواص اپتیکی تترا هگزا کربن
۸۵.....	۴-۴ تی-کربن
۸۶.....	۱-۴-۴ فرضیات محاسباتی تی-کربن
۸۶.....	۲-۴-۴ خصوصیات ساختاری تی-کربن
۹۰.....	۳-۴-۴ خواص الکترونیکی تی-کربن
۹۲.....	۴-۴-۴ خواص اپتیکی تی-کربن

امروزه مطالعات علمی و صنعتی در حوزه نانو ساختارها از اهمیت بسزایی برخوردار گردیده است. خواص فیزیکی این نانو ساختارها، به ویژه جنبه‌های اپتیکی و الکترونیکی این ساختارها بستگی به رفتار و حالت‌های الکترونی و نوری آن‌ها دارد. بدین سبب، مطالعه حالت‌های الکترونی و تعیین ساختار نوار انرژی این نانو ساختارها از موضوعات مهم پژوهشی در زمینه تئوری و تجربی در فیزیک ماده چگال و اتمی و مولکولی می‌باشد. به علت خواص الکترونی و اپتیکی بسیار جذاب نانو ساختارهای صورت‌های کربنی، آن‌ها به طور گسترده‌ای در حوزه‌های تجربی و نظری مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. هدف اصلی این کتاب ضمن معرفی آلترپ‌های کربنی متداول، بررسی رفتارها و ویژگی‌های الکترونیکی و نوری برخی از نانو ساختارهای کربنی نوین با استفاده از نظریه تابع چگالی و با شبیه‌سازی این نانو ساختارها با نرم‌افزار و کدهای محاسباتی Wien2k، تحت شرایط ویژه از قبیل اعمال فشارهای هیدرو استاتیکی، تأثیر کماتش، تنش و کرنش پارامترهای شبکه این نانو ساختارها می‌باشد. پایداری دینامیکی این نانو ساختارها با محاسبه انرژی همبستگی و محاسبه نمودار پاشندگی فونونی به وسیله نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو انجام گرفت تا امکان رشد این ساختارها به صورت تجربی جهت کاربردهای متنوع این آلترپ‌ها در آتی بهتر فراهم گردد.

در فصل اول این کتاب سعی گردیده است به اهمیت عنصر کربن به عنوان یک عنصر استثنائی در جدول تناوبی و معرفی ترکیبات کربنی و آلترپ‌های کربنی متداول، بپردازیم. گسترده وسیعی از علم شیمی به این ترکیبات کربنی می‌پردازد. به نحوی که یکی از گرایش‌های این رشته با عنوان شیمی آلی به طور کامل به بررسی ترکیبات این عنصر از جدول تناوبی می‌پردازد. پیوند کووالانسی هر اتم کربن با انواع دیگر اتم‌ها یا اتم‌های کربن دیگر، ساختارهای نامحدود و بسیار متنوع را ایجاد می‌نماید. از جهت دیگر بسیاری از ترکیباتی که در طبیعت طی روش‌های طبیعی سنتز می‌شوند نیز از خانواده ترکیبات آلی (کربنی) هستند. گستره وسیعی از ترکیبات، شامل ترکیبات متنوع نفتی تا مشتقات دارویی و بسیاری آلی زیرمجموعه ترکیبات کربن قرار می‌گیرند. در نانوفناوری نیز، ترکیبات کربنی دسته مهم و مشخصی را به خود اختصاص می‌دهند که با عنوان نانو ساختارهای کربنی خوانده می‌شوند.