

به نام خدا

پتانسیل امواج تخت بهبود یافته خطی و
ممینت کارلو در نانو ذرات نقره

محقق:
اکرم آتبی رجنی

سرشناسه	:	اقبالى بروجنى، اكرم، ۱۳۵۸ -
عنوان و نام پديدآور	:	پتانسيل امواج تخت بهيوديافته خطى و مونت كارلو در نانو ذرات نقره / مؤلف: اكرم اقبالى بروجنى.
مشخصات نشر	:	مشهد: انتشارات ۱۱۰ صد و ده، ۱۳۹۵.
مشخصات ظاهري	:	۱۱۶ ص.: مصور، جدول، نمودار.
شابك	:	978-600-5358-56-8
وضعيت فهرست نويسى	:	فيا
يادداشت	:	كتابخانه: ص. ۱۱۳-۱۱۵.
موضوع	:	نانوذرات - خواص نوري
موضوع	:	Nanoparticles - Optical properties
موضوع	:	نقره
موضوع	:	Silver
موضوع	:	روش مونت كارلو
موضوع	:	Monte Carlo method
موضوع	:	نانوذرات
موضوع	:	Nanopartivles
موضوع	:	توليع جگالى
موضوع	:	Density functionals
موضوع	:	ساختر الكترونى
موضوع	:	Electronic structure
رده بندى كنكر	:	۱۳۹۵ الف ۷/۲ ن ۴۱۸/۹
رده بندى ديويى	:	۵۳۵/
شماره كتابشناسى ملي	:	۴۳۰۸۷۷



ناشر: انتشارات ۱۱۰، ۱۱۰ و ۱۱۰

نام كتاب: پتانسيل امواج تخت بهيوديافته خطى و مونت كارلو در نانو ذرات نقره

مؤلف: اكرم اقبالى بروجنى

صفحه آرايى: نفيسه اسماعيلى

چاپ: مقرب

نوبت چاپ: اول / ۱۳۹۵

تعداد صفحات: ۱۱۶

قطع: رقعى

تيراژ: ۵۰۰ نسخه

قيمت: ۹۰۰۰ تومان

شابك: ۹۷۸-۶۰۰-۵۳۵۸-۵۶-۸

شماره ناشر: مشهد: ۹۱۵۷۳۹۲۸۱۴

فهرست مطالب

۷	چکیده
۹	فصل اول: مقدمه
۱۳	فصل دوم: نظریه تابعی چگالی
۱۳	۱-۱- مقدمه
۱۶	۱-۲- تقریب‌ها
۱۶	۱-۳- تقریب هارتری
۱۶	۲-۱- تقریب هارتری فوک
۱۶	۲-۲- تقریب راسل - فرمی
۱۷	۲-۳- نظریه تابعی چگالی
۱۸	۳-۱- معادلات کوهن - شم
۲۲	۴-۱- محاسبه انرژی تبادل و همبستگی
۲۲	۵-۱- سیستم‌های مغناطیسی
۲۳	۶-۱- بررسی چند تقریب
۲۳	۱-۲- تقریب LDA و LSDA
۲۵	۲-۲- تقریب GGA
۲۷	۷-۱- روش حل معادلات کوهن - شم
۲۹	۸-۱- امواج تخت بهبود یافته
۳۴	۹-۱- روش امواج تخت بهبود یافته خطی
۳۷	۸-۲- روش امواج تخت بهبود یافته خطی همراه با پتانسیل کامل
۳۹	۱۱-۱- حالت‌های نیمه مغزه
۴۰	۱۲-۱- روش امواج تخت بهبود یافته همراه اربیتال‌های موضعی
۴۱	۱۳-۱- روش مونت کارلو
۴۴	۱۴-۱- مبانی روش مونت کارلو

۴۷	۱۵-۲- ترابرد ذرات توسط روش مونت کارلو
۴۹	۱۶-۲- مکان ذرات چشمه
۴۹	۱-۱۶-۲- دستگاه مختصات کارترین
۵۰	۲-۱۶-۲- دستگاه مختصات استوانه‌ای
۵۰	۳-۱۶-۲- دستگاه مختصات کروی
۵۱	جهت حرکت ذره
۵۱	۱۷-۲- انرژی ذرات چشمه
۵۲	محل پراکنش ذره
۵۳	نوع پرمکنش ذره
۵۴	۱-۲- پراکنش از پرمکنش پراکندگی
۵۵	۱۹-۲- آمار معاسبات ذرات کارلو
۵۶	۲۰-۲- دقت و درستی محاسبات مونت کارلو
۵۷	۲۱-۲- روش‌های کاهش خطا
۶۰	۲۲-۲- معرفی سایر کد های مونت کارلو

فصل سوم: خواص ساختاری و الکترونی ابرساز نقره

۶۱	۱-۳- مقدمه
۶۲	۲-۳- خصوصیات فلز نقره
۶۳	۳-۳- خواص شیمیایی نقره
۶۴	۴-۳- موارد کاربرد نقره
۶۵	۵-۳- ساختار انبوه نقره
۶۶	۶-۳- منحنی انرژی بر حسب حجم
۶۷	الف- پارامتر تعادلی
۶۷	ب- سختی بلور B
۶۷	ج- اثر فشار
۶۹	۷-۳- فایل‌های اصلی در wien2k
۶۹	۱-۷-۳- فایل ساختاری
۷۰	۲-۷-۳- آماده سازی

۷۴	۸-۳ ساختار ابرسلول
۷۸	۹-۳ مقدار خلاء مناسب
۷۸	۹-۳-۱-۳ منحنی انرژی - ضخامت خلاء
۷۹	۹-۳-۲-۳ منحنی نیرو - مقادیر خلاء
۸۱	۱۰-۳ تعداد لایه‌های مناسب
۸۱	۱۰-۳-۱-۳ منحنی DOS
۸۷	۱۰-۳-۲ محاسبه انرژی سطح
۸۸	۱۰-۳-۳ انرژی متوسط هر اتم
۹۱	فصل چهارم: روش ساخت و مونتاژ
۹۱	۱-۴ مقدمه
۹۱	۱-۴-۱-۴ روش سرد کردن و نگهداری لایه نشانی تبخیر حرارتی و اجزا سازنده آن
۹۲	۲-۴-۱-۴ حفظه و استیل
۹۳	۲-۴-۲-۴ ماده‌های سیم‌های
۹۳	۳-۴ معرفی دام سرد دیگر
۹۵	۴-۴ فشارسنج پیرانی ایتو فیا ۸۱۰۸
۹۵	۴-۴ فشارسنج یونش کاتد سرد
۹۶	۶-۴ میز کار سیستم
۹۷	۷-۴ فلاتج
۹۸	۸-۴ مشخصات الکترودهای مسی
۹۹	۹-۴ ضخامت سنج کریستالی
۹۹	Mo. 100 (Quartz Crystal Holder and Film Thickness)
۱۰۰	۱۰-۴ توضیحات شاتر نمونه
۱۰۰	۱۱-۴ مشخصات نگهدارنده زیر لایه
۱۰۰	۱۲-۴ گرم کننده تابشی
۱۰۰	۱۳-۴ کلیات و طرح مسئله
۱۰۲	۱۴-۴ دستگاه تبخیر حرارتی و لایه نشانی شیمیایی CVD
۱۰۵	۱۵-۴ بررسی روش پوشش دهی با استفاده از CVD

۱۶-۴- روش مونته کارلویی در محاسبات فیزیکی..... ۱۰۶

۱۷-۴- روش مونته کارلو در تراپرد ذرات..... ۱۰۷

۱۸-۴- برخورد تصادفی ذرات..... ۱۰۸

۱۹-۴- روش کار..... ۱۰۹

۲۰-۴- برون یابی و محاسبه سایر ضخامت ها با استفاده از کد مونته کارلو... ۱۱۱

۴. مل پنجم: خلاصه نتایج..... ۱۱۳

مراجع..... ۱۱۵

چکیده

امروزه فناوری نانو، نه تنها در پژوهش محققان، بلکه در زندگی روزمره مردم جایگاه ویژه‌ای دارد. یکی از اهداف مهم در فناوری نانو، نانو ذرات هستند.

مره یک از پر کاربردترین نانو ذراتی است که تا کنون چندین محصول مبتنی بر خواص نانو ذرات نقره در دنیا و در داخل کشور به انبوه رسیده است.

هدف ما در این پژوهش بررسی روشهای مختلف سنتز نانو ذرات و آنالیز میکروسکوپی عبوری بررسی خواص آنتی باکتریال نقره و در نهایت بررسی و مقایسه خواص مغناطیسی، این نانو ذرات توسط ۲ کد مونت کارلو و wien2k است.

محاسبات ما بر بنای اصول اولیه کوانتوم در چارچوب نظریه تابعی چگالی و همچنین در بنای کد مونت کارلو، روش بررسی مسائل فیزیک و ریاضی با استفاده از فرایندهای تصادفی است. این ندها سولا شبیه سازی است.