



دانشگاه رازی

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته ی فیزیک

گرایش حالت جامد

عنوان پایان نامه

محاسبه ی ظرفیت گرمایی لایه های گرافین و بورون نیتراید

استاد راهنما:

دکتر حمزه موسوی

نگارش:

نشمین صدیقی

مهرماه ۱۳۹۱

تقدیم به:

پدر و مادر عزیز و مهربانم

همسر عزیزم

و

برادر خوبم

قبل از هر چیز لازم میدانم مراتب تشکر و قدردانی خود را از استاد گرامیم جناب آقای دکتر موسوی اعلام و از ایشان به خاطر راهنمایی های ارزشمند و دلسوزانه شان کمال تشکر را داشته باشم، از پدر و مادر عزیزم - که هرچه دارم بعد از خدا به دلیل حمایتها و تشویقهایشان است - به خاطر تمامی زحماتشان در طول تحصیل نهایت تشکر را دارم.

همچنین از همکلاسی خوبم جناب آقای محمدبراتی به خاطر راهنمایی هایشان کمال تشکر را دارم

چکیده

گرافین یکی از مهمترین مواد شناخته شده است و از آغاز کشف تا بحال بسیاری از مطالعات را به خود جذب کرده است.

اتم های بور، نیتروژن و کربن در یک ردیف از جدول تناوبی قرار دارند، پیوند اتم بور و نیتروژن در بورون نیتراید (h/BN) ساختار مشابهی با گرافین ایجاد می کند، بنابراین انتظار داریم که ترکیبات مختلف گرافین و h/BN خواص جالبی ایجاد کند، در این پایان نامه ظرفیت گرمایی h/BN ، گرافین و ترکیبات مختلف آنها با تعداد لایه ها و چینش های مختلف را با استفاده از تقریب تنگ بست و تئوری تابع گرین و با تقریب نزدیک ترین همسایه مورد بررسی قرار می دهیم.

سپس تاثیرات میدان الکتریکی ثابت را بر ظرفیت گرمایی این ترکیبات بررسی میکنیم.

نمودارهای بدست آمده نشان دهنده ی این موضوع است که افزایش لایه ها باعث کاهش ظرفیت گرمایی و رسانندگی گرمایی می شود، همچنین اعمال میدان الکتریکی در تمامی حالات ظرفیت گرمایی را کاهش می دهد، دلیل کاهش ظرفیت گرمایی با اعمال میدان الکتریکی این است که اعمال میدان باعث می شود به اتم ها انرژی (که مقدار آن به لایه ای که اتم در آن قرار گرفته، بزرگی و جهت میدان بستگی دارد) اضافه شود یعنی اینکه برای افزایش دما به اندازه ی یک درجه ی سانتیگراد مقدار کمتری انرژی لازم است.

ظرفیت گرمایی بورون نیتراید تک لایه و دولایه به ترتیب بیشتر از ظرفیت گرمایی یک و دو لایه گرافین است اما ظرفیت گرمایی سه لایه گرافین بیشتر از ظرفیت گرمایی سه لایه بورون نیتراید است.

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

فصل اول: فناوری نانو و اتم کربن

۲	۱-۱- فناوری نانو.....
۲	۱-۱-۱- روشهای ساخت در نانو فناوری.....
۳	۱-۲- اهمیت ابعاد نانو.....
۳	۱-۳- تفاوت فناوری نانو با فناوری های دیگر.....
۳	۱-۲- کربن.....
۵	۱-۳- ترکیب خطی اوربیتال های اتمی.....
۵	۱-۴- هیبریداسیون.....
۸	۱-۴-۱- اوربیتال مولکولی σ, σ^*
۱۰	۱-۴-۲- اوربیتال مولکولی π, π^*

فصل دوم: گرافین و بورون نیتراید

۱۳	۱-۲- گرافین.....
۱۵	۱-۱-۲- ویژگی های گرافین.....
۱۶	۱-۲- بورون نیتراید.....
۱۸	۱-۲-۲- تولید بورون نیتراید.....

فصل سوم: مدل تنگ بست

۲۱	۱-۳- معادله ی عمومی.....
۲۴	۱-۳-۲- ماتریس انتقال و ماتریس انتگرال هم پوشانی.....

فصل چهارم: تابع گرین مستقل از زمان

۲۷	۱-۴- فرمول بندی.....
۲۸	۱-۴-۲- استفاده از نمادگذاری کت و برا برای محاسبه ی تابع گرین.....
۳۲	۱-۴-۳- محاسبه ی چگالی حالات با استفاده از تابع گرین.....
۳۴	۱-۴-۴- خلاصه.....
۳۵	۱-۴-۵- مفهوم تابع گرین.....

فصل پنجم: ظرفیت گرمایی (سهم الکترونی)

۳۸	۱-۵- ظرفیت گرمایی الکترون آزاد گاز فرمی
۳۸	۲-۵- ظرفیت گرمایی سهم الکترونی
۴۲	۳-۵- بحث کیفی
۴۴	۴-۵- ظرفیت گرمایی تجربی فلزات

فصل ششم: محاسبه ی ظرفیت گرمایی لایه های مختلف گرافین و بورون نیتراید

۴۸	۱-۶- محاسبات مربوط به شبکه ی مستقیم و وارون گرافین و h/BN
۵۰	۲-۶- محاسبه ی ظرفیت گرمایی یک لایه بورون نیتراید (h/BN)
۵۳	۳-۶- اعمال میدان الکتریکی بر دستگاه
۵۴	۴-۶- محاسبه ی ظرفیت گرمایی یک لایه گرافین
۵۴	۵-۶- محاسبه ی ظرفیت گرمایی دو لایه بورون نیتراید (h/BN) با ۵ چینش مختلف
۵۶	۶-۶- اعمال میدان الکتریکی به دستگاه دولایه
۵۷	۷-۶- محاسبه ی ظرفیت گرمایی یک و دولایه گرافین
۵۸	۸-۶- محاسبه ی ظرفیت گرمایی سه لایه گرافین
۶۰	۱-۸-۶- هامیلتونی دستگاه سه لایه ای گرافن ساده
۶۱	۲-۸-۶- هامیلتونی دستگاه سه لایه ای گرافن لوزوجهی (ABC)
۶۱	۳-۸-۶- هامیلتونی دستگاه سه لایه ی برنل (ABA)
۶۲	۹-۶- اعمال میدان الکتریکی بر دستگاه سه لایه ای گرافین
۶۲	۱-۹-۶- هامیلتونی دستگاه سه لایه ای گرافین ساده در حضور میدان
۶۲	۲-۹-۶- هامیلتونی دستگاه سه لایه ای گرافین لوزوجهی در حضور میدان
۶۳	۳-۹-۶- هامیلتونی دستگاه سه لایه ای گرافین برنل در حضور میدان
۶۳	۱۰-۶- محاسبه ی ظرفیت گرمایی سه لایه بورون نیتراید (h/BN)
۶۳	۱-۱۰-۶- هامیلتونی سه لایه بورون نیتراید h/BN در حالت ساده
۶۴	۲-۱۰-۶- هامیلتونی سه لایه بورون نیتراید h/BN در حالت ABA (برنل)
۶۴	۱۱-۶- محاسبه ی ظرفیت گرمایی سه لایه بورون نیتراید (h/BN) با اعمال میدان الکتریکی
۶۵	۱-۱۱-۶- هامیلتونی سه لایه بورون نیتراید h/BN در حالت ساده با حضور میدان الکتریکی
	۲-۱۱-۶- هامیلتونی سه لایه بورون نیتراید h/BN در حالت ABA (برنل) در حضور میدان الکتریکی
۶۵	الکتریکی

۳-۱۱-۶- هامیلتونی سه لایه بورون نیتراید h/BN در حالت ABC (لوزوجهی) در حضور میدان الکتریکی.....۶۵

۱۲-۶- محاسبه ی ظرفیت گرمایی دستگاه برای چهار لایه ای گرافین۶۵
 ۱-۱۲-۶- محاسبه ی ظرفیت گرمایی دستگاه چهار لایه ای گرافین ساده در حضور میدان الکتریکی
 ۶۸

فصل هفتم: نمودارها و نتایج

۱-۷- نمودارهای ظرفیت گرمایی بورون نیتراید.....۷۰
 ۱-۱-۷- مقایسه ظرفیت گرمایی دستگاههای چند لایه ای بورون نیتراید۷۲
 ۲-۷- نمودارهای ظرفیت گرمایی سطحی دستگاههای گرافین۷۵
 ۳-۷- مقایسه ی ظرفیت گرمایی سطحی لایه های مختلف گرافین۷۷
 ۴-۷- نمودارهای ظرفیت گرمایی دستگاههای مختلف گرافین- بورون نیتراید.....۷۹
 ۵-۷- نتایج.....۸۷

منابع.....۸۹

فهرست اشکال

شکل	صفحه
شکل ۱-۲: اوربیتال S	۴
شکل ۲-۲: اوربیتال P	۴
شکل ۱-۱: هیبریداسیون sp	۷
شکل ۴-۲: انواع اوربیتالها در گرافین	۷
شکل ۵-۲: هیبریداسیون sp^3	۸
شکل ۶-۲: نحوه ی تشکیل اوربیتال σ	۸
شکل ۷-۲: نحوه ی تشکیل اوربیتال مولکولی σ^*	۹
شکل ۸-۲: نحوه ی تشکیل اوربیتال مولکولی π	۱۰
شکل ۹-۲: نحوه ی تشکیل اوربیتال مولولی	۱۰
شکل ۱۰-۲: پیوندهای موجود در گرافین	۱۱
شکل ۱-۳: گرافین [8]	۱۳
شکل ۲-۳: بورون نیتراید شش گوشه (h/BN)	۱۷
شکل ۳-۳: سه لایه بورون نیتراید که مشابه صفحات گرافیت بر روی هم قرار گرفته اند	۱۷
شکل ۵-۲: کره ی فرمی	۴۲
شکل ۲-۶:	۴۴
شکل ۳-۶: نمودار ظرفیت گرمایی واحد دما بر حسب مجذور دما	۴۴
شکل ۳-۶: ساختار گرافیت	۴۷
شکل ۴-۶: ساختار شش گوشه با دو اتم در یاخته ی واحد	۴۸
شکل ۳-۶: شبکه ی مستقیم و وارون ساختار لانه زنبوری	۴۹
شکل ۴-۶: ساختار شبکه ی شش گوشه با دو اتم در یاخته ی پایه را نشان می دهد و بردارهای a_1 و a_2	۵۰
شکل ۵-۶: ۵ حالت ممکن برای دستگاه دولایه ای بورون نیتراید [21]	۵۵
شکل ۶-۶: ساختار گرافین سه لایه ای با ساختار ساده ی AAA و ساختار لوزوجهی ABC	۵۸

- شکل ۶-۷: ساختارگرافین سه لایه ای برنل (ABA) برخی از پارامترهای جهش مشخص شده اند..... ۵۹
- شکل ۶-۸: سه لایه گرافن با ساختارهای لوزوجهی، برنل و ساده..... ۵۹
- شکل ۶-۹: دستگاه چهارلایه ای گرافین (AAAA)..... ۶۶
- شکل ۷-۴: چهار لایه گرافین که در حالت ABAB بر روی هم قرار دارند..... ۶۷
- شکل ۷-۵: نمودار ظرفیت گرمایی سطحی یک لایه بورون نیتراید بر حسب دما..... ۷۰
- شکل نمودار ظرفیت گرمایی دولایه بورون نیتراید بدون اعمال میدان الکتریکی (نمودار قرمز رنگ)..... ۷۱
- شکل ۷-۶: نمودار ظرفیت گرمایی سه لایه بورون نیتراید بدون اعمال میدان الکتریکی (نمودار قرمز رنگ)..... ۷۱
- شکل ۷-۷: نمودار ظرفیت گرمایی سطحی چهارلایه بورون نیتراید بدون اعمال میدان الکتریکی (نمودار ۷۲
- شکل ۷-۸: نمودارهای ظرفیت گرمایی سطحی مربوط به دستگاه یک لایه، دو لایه، سه لایه..... ۷۲
- شکل این نمودار ظرفیت گرمایی ویژه ی دو، سه و چهارلایه که در شکل بالا است را..... ۷۳
- شکل نمودارهای ظرفیت گرمایی سطحی مربوط به دستگاه یک لایه، دو لایه،..... ۷۳
- شکل ۷-۹: این نمودار ظرفیت گرمایی ویژه ی دو، سه و چهارلایه که در شکل بالا است..... ۷۴
- شکل نمودارهای ظرفیت گرمایی سطحی مربوط به دستگاه یک لایه، دو لایه،..... ۷۴
- شکل ۷-۱۰: نمودار ظرفیت گرمایی سطحی یک لایه گرافین بر حسب دما..... ۷۵
- شکل ۷-۱۱: ظرفیت گرمایی سطحی دو لایه گرافین بر حسب دما..... ۷۵
- شکل ۷-۱۲: نمودار ظرفیت گرمایی سطحی سه لایه گرافین..... ۷۶
- شکل ۷-۱۳: نمودار ظرفیت گرمایی سطحی چهار لایه گرافین (..... ۷۶
- شکل ۷-۱۴: نمودار ظرفیت گرمایی سطحی دولایه گرافین با چینش های AA و AB بر حسب دما..... ۷۷
- شکل ۷-۱۵: نمودار ظرفیت گرمایی سطحی دو سه و چهارلایه گرافین..... ۷۷
- شکل نمودار ظرفیت گرمایی یک دو سه و چهارلایه گرافین بر حسب دما..... ۷۸
- شکل ۷-۱۶: نمودار ظرفیت گرمایی دو، سه و چهارلایه گرافین بر حسب دما در حضور میدان الکتریکی..... ۷۸
- شکل نمودار ظرفیت گرمایی یک دو سه و چهارلایه گرافین بر حسب..... ۷۹
- شکل ۷-۱۷: نمودار ظرفیت گرمایی دستگاه دولایه ای گرافین و بورون نیتراید در..... ۷۹
- شکل نمودار ظرفیت گرمایی دستگاه دولایه ای گرافین و بورون نیتراید..... ۸۰

- شکل ۷-۱۸: نمودار ظرفیت گرمایی دستگاه دولایه ای بورون نیتراید-گرافین بر حسب دما. ۸۰
- شکل ۷-۱۹: نمودار ظرفیت گرمایی یک لایه گرافین بین دولایه بورون نیتراید. ۸۱
- شکل ۷-۲۰: نمودار ظرفیت گرمایی یک لایه گرافین بین دو لایه بورون نیتراید در حضور. ۸۲
- شکل نمودار ظرفیت گرمایی دو لایه گرافین و دو لایه بورون نیتراید که یک. ۸۲
- شکل نمودار ظرفیت گرمایی سطحی ترکیبات مختلف گرافین-بورون نیتراید بر حسب دما. ۸۳
- شکل ۷-۲۱: مقایسه ی ظرفیت گرمایی چینش AAA و ABC یک لایه گرافین بین دو لایه. ۸۴
- شکل ۷-۲۲: نمودار ظرفیت گرمایی سطحی یک لایه گرافین و یک لایه بورون نیتراید بر حسب. ۸۵
- شکل ۷-۲۳: ظرفیت گرمایی سطحی چینش AA دو لایه گرافین و چینش AA. ۸۵
- شکل ۷-۲۴: نمودار ظرفیت گرمایی سطحی یک لایه گرافین و یک لایه بورون نیتراید بر حسب. ۸۶
- شکل نمودار ظرفیت گرمایی سطحی چینش AA چهار لایه گرافین و چینش. ۸۶

فصل اول

فناوری نانو و اتم کربن

۱-۱- فناوری نانو^۱

به طور کلی فناوری نانو عبارت است از کاربرد ذرات در ابعاد نانو، نانومتر یک واحد اندازه گیری طول برابر 10^{-9} متر است و اشیا و موادی که اندازه ی آنها در حد ۱ تا ۱۰۰ نانومتر است، اشیا و مواد نانومقیاس نامیده می شوند.

جذابیت مقیاس نانو نیز مربوط به خواص مواد در این ابعاد است، یافته های دانشمندان نشان می دهد که خواص مواد در مقیاس نانو بسیار متفاوت از مقیاس میکرو است، به عبارت دیگر اگر ذرات یک ماده ی خاص را در حد چند نانومتر کوچک کنیم، این ذرات ویژگی های متفاوتی با ذرات بزرگ اولیه خواهند داشت، و این در حالی است که کوچک کردن ابعاد ذرات یک تغییر فیزیکی است و ما انتظار نداریم ویژگی های اصلی ماده تغییر کند و این امر باعث شده که مقیاس نانو بیش از سایر مواد مورد توجه قرار گیرد.

تحقیقات نشان می دهد که این فناوری به میزان گسترده و در محدوده ی متنوعی از زمینه های فنی، ظرفیت فوق العاده ای را برای تاثیر در پیشرفت های چشمگیر آینده از تولید مواد مستحکم تر و سبک تر تا کوتاه کردن زمان رساندن داروهای نانو ساختار به جریان گردش خون بدن، افزایش ظرفیت ذخیره ی نوارهای مغناطیسی و یا فراهم کردن سوئیچ های سریعتر در رایانه ها دارا می باشد [1].

۱-۱-۱- روشهای ساخت در نانو فناوری:

به طور کلی به دو روش می توان به این ابعاد دست یافت.

سیر دسترسی از بالا به پایین:

یعنی یک قطعه بزرگ را با تراشیدن و خورد کردن یا حل کردن بخش های اضافی در اسید و... آنقدر کوچک کنیم تا به قطعه ی نهایی برسیم، خود چینی عبارتست از جذب اتم ها و مولکول های مواد به طور [2] هوشمندانه توسط خود آنها و به صورت خود به خودی به منظور ایجاد ساختارهای بهم پیوسته و منظم.

طراحی و ساخت از پایین به بالا:

منظور از طراحی پایین به بالا چینی اتم به اتم و مولکول به مولکول از یک ماده در کنار هم و به

¹ - nano technology

صورت دلخواه، جهت ایجاد و ساخت مواد جدید نانومتری می باشد، در این روش مواد جدید با چینش اتمی خاص و منحصر به فردی می توانند ساخته شوند.

۱-۱-۲- اهمیت ابعاد نانو

(۱) ویژگی های مواد در ابعاد نانو دچار تغییراتی می شود، بنابراین با طراحی مواد در مقیاس نانو تغییر در خصوصیات ماکروسکوپی و میکروسکوپی مانند رنگ، خواص مغناطیسی دمای ذوب و... بدون تغییر شیمیایی ممکن شود.

(۲) از جمله خصوصیات مواد بیولوژیکی، ساماندهی منظم آنها در ابعاد نانومتری است و توسعه در زمینه ی نانو فناوری به ما اجازه می دهد که وسایل نانو ابعادی ساخت بشر را در داخل سلولهای زنده قرار دهیم و برای انتقال مواد به داخل سلولهای زنده و یا روی سطح آنها به عنوان نانوپیت استفاده می شوند.

(۳) ترکیب های نانومتری دارای نسبت سطح به حجم بسیار بزرگی هستند، لذا استفاده از آنها در مواد کامپوزیتی، دارورسانی به بدن و ذخیره ی انرژی به شکل شیمیایی بسیار ایده آل خواهد بود.

(۴) سیستم های ماکروسکوپی ساخته شده از نانو ساختارها می توانند چگالی بسیار بیشتری نسبت به مواد ساخته شده از میکروساختارها داشته باشند، همچنین هدایت الکتریکی بهتری دارند [1].

با استفاده از نانو ساختارها در ابزارهای الکترونی، مدارهای کوچکتتر، سریعتر، با کارایی پیشرفته و مصرف برق بسیار کمتر پدید می آید.

۱-۱-۳- تفاوت فناوری نانو با فناوری های دیگر:

در فناوری نانو تنها کوچک بودن ماده مد نظر نیست، بلکه زمانی که اندازه ی مواد در این مقیاس قرار می گیرند خصوصیات ذاتی آنها از جمله رنگ، استحکام، مقاومت در برابر خوردگی و... تغییر می یابد.

در واقع اگر بخواهیم تفاوت این فناوری را با فناوری های دیگر بیان کنیم، میتوانیم وجود عنصر پایه را به عنوان یک معیار ذکر کنیم.

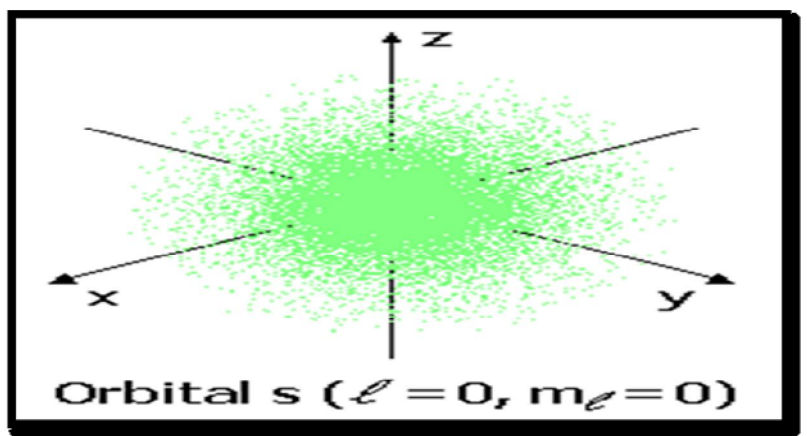
عناصر پایه در حقیقت همان عناصر نانومقیاسی هستند که خواص آنها در حالت نانومقیاس با خواصشان در مقیاس بزرگتر فرق میکند.

۱-۲- کربن:

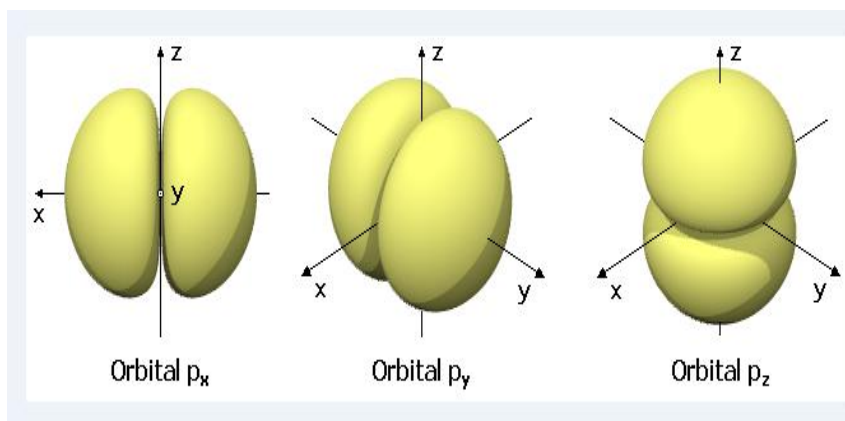
کربن با عدد اتمی ۶، عنصری غیرفلزی بوده و در طبیعت به فراوانی یافت می شود، کربن عنصری چهار ظرفیتی است که شکل الکترونی آن به صورت $1s^2 2s^2 2p^2$ می باشد که از دو الکترون در لایه ی K

و چهار الکترون در لایه ی L تشکیل شده است.

در حالت پایه اوربیتال S اتم کربن تقارن کروی دارد و اوربیتال P به صورت دمبلی شکل است که حول محور تقارن دارد.



شکل ۱-۲: اوربیتال S



شکل ۲-۲: اوربیتال P

در نتیجه اوربیتال S جهت مشخصی ندارد و اوربیتال P دارای خواص جهتی است.

دو الکترون اوربیتال های 2P ی اتم کربن، الکترونهاى ظرفیت هستند، آرایش حالت الکترونی باید به گونه ای تغییر کند تا بیش از دو الکترون به صورت الکترون لایه ی والانس قابل استفاده باشند، این تغییر آرایش الکترونی به وسیله ی فرایند شناخته شده ی هیبریداسیون صورت می گیرد.

نظریه ی ترکیب خطی اوربیتال های اتمی که با توجه به نارسایی نظریه ی پیوند ظرفیت، هوندا در

سال ۱۹۲۸ و مولیکن در سال ۱۹۳۱ نظریه ی دیگری بر اساس مدل موج اتم در مورد چگونگی تشکیل پیوند کووالانسی ارائه دادند که نظریه ی اوربیتال مولکولی نام گرفت.

به کمک روش اوربیتالهای مولکولی بسیاری از خواص مغناطیسی، ترازهای انرژی، خواص طیفی و... را به روشنی میتوان توجیه کرد.

در این نظریه برعکس نظریه ی پیوند- که فقط دخالت لایه ی ظرفیت اتم ها را در تشکیل پیوند در نظر گرفته میشود - تمام اوربیتالهای اتم می توانند در تشکیل اوربیتالهای مولکولی شرکت داشته باشند.

یکی از روشها در نظریه ی اوربیتال مولکولی روش ترکیب خطی اوربیتالهای اتمی^۲ است.

۱-۳- ترکیب خطی اوربیتالهای اتمی^۳:

ترکیب خطی اوربیتالهای اتمی روشی برای محاسبه اوربیتالهای مولکولی است. در مکانیک کوانتوم، آرایش الکترونی اتم بوسیله تابع موج شرح داده می شود و چنانچه دو یا چند اتم در یک واکنش شیمیایی شرکت و با هم پیوند بدهند، آرایش الکترونی دگرگون می شود و الکترونهای پس از پیوند را باید در اوربیتالهای مولکولی بجای اوربیتالهای اتمی در نظر گرفت.

از آنجا که اوربیتالهای مولکولی، از اوربیتالهای اتمی ساخته می شوند، از دیدگاه ریاضی می توان

نوشت:

$$\begin{aligned} \phi_i &= c_{1i}\chi_1 + c_{2i}\chi_2 + c_{3i}\chi_3 + \dots + c_{ni}\chi_n \\ \phi_i &= \sum_r c_{ri}\chi_r \end{aligned} \quad (1-1)$$

طبق روش LCAO اوربیتالهای مولکولی از ترکیب خطی اوربیتالهای اتمی به دست می آید [3].

۱-۴- هیبریداسیون^۴

ترکیب اوربیتالهای اتمی 2s و 2p هیبریداسیون نامیده می شود.

در نتیجه ی هیبریداسیون یکی از دو الکترون اوربیتال 2s جدا می شود و اوربیتال هیبریدی که ترکیبی از اوربیتال 2s و 2p می باشد را به وجود می آورد.

این هیبریداسیون تعداد الکترونهای والانس را از ۲ به ۴ تغییر می دهد.

²-linear combination of atomic orbitals

³- LCAO

⁴- Hybridization

ترکیب یک اوربیتال 2S با n اوربیتال 2P، $n = (1,2,3)$ هیبریداسیون sp^n نامیده می شود نامیده می شود [4].

اگر اوربیتال هیبریدی از یک اوربیتال 2S و یک اوربیتال 2P تشکیل شده باشد، اوربیتال sp تشکیل خواهد شد، اوربیتالهای sp خطی است، در این حالت چهار الکترون والانس بوسیله ی دو الکترون آزاد که در اوربیتال 2P قرار دارد و دو اوربیتال هیبریدی sp ایجاد می شود، اوربیتالهای sp ایجاد شده را با $|sp_a\rangle$ و $|sp_b\rangle$ نشان می دهیم، این اوربیتالهای ایجاد شده را می توان به صورت ترکیب خطی از تابع موجهای $|2s\rangle$ و $|2p_x\rangle$ اتم کربن نوشت:

$$\begin{aligned} |sp_a\rangle &= C_1|2s\rangle + C_2|2p_x\rangle \\ |sp_b\rangle &= C_3|2s\rangle + C_4 \end{aligned} \quad (2-1)$$

C_i ها در رابطه ی (2-1) ضرایب هستند که باید تعیین شوند.

با استفاده از شرایط تعامد و نرمال به یک بودن:

$$\langle sp_a | sp_b \rangle = 0 \quad \text{و} \quad (3-1)$$

$$\langle sp_a | sp_a \rangle = 1 \quad \langle sp_b | sp_b \rangle = 1$$

میتوان رابطه ی بین ضرایب را بدست آورد.

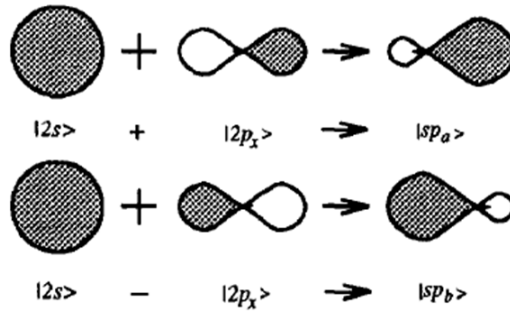
$$C_1 C_3 + C_2 C_4 = 0 \quad C_1^2 + C_2^2 = 1 \quad (4-1)$$

$$C_3^2 + C_4^2 = 1 \quad C_1^2 + C_2^2 = 1$$

رابطه ی (4-1) با استفاده ازین حقیقت که جمع روی مولفه های $|2s\rangle$ برابر واحد است، بدست آمده است.

با استفاده از رابطه های بالا می توان نتیجه گرفت:

$$\begin{aligned} |sp_a\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle + |2p_x\rangle) \\ |sp_b\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle - |2p_x\rangle) \end{aligned} \quad (5-1)$$

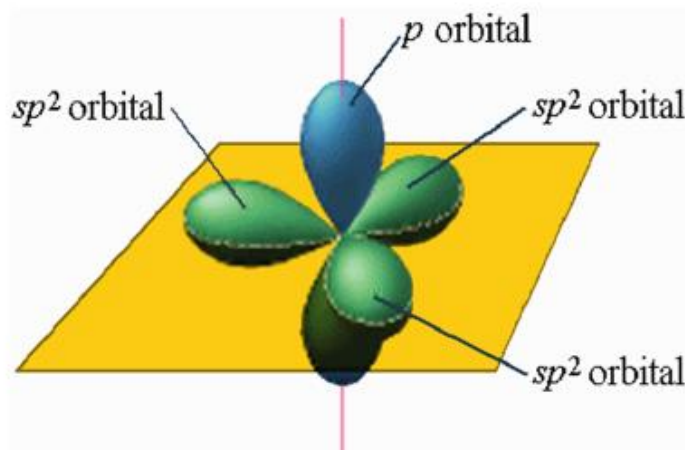


شکل ۳-۱: هیبریداسیون sp

قسمتهای تاریک شکل ۳-۱ سرهای مثبت تابع موج و قسمتهای روشن سرممنفی تابع موج را نشان میدهد. [5].

اگر اوربیتال هیبریدی از یک اوربیتال $2s$ و دو اوربیتال $2p$ تشکیل شده باشد، آنگاه سه اوربیتال هیبریدی sp^2 خواهیم داشت، در این حالت آرایش الکترونی کربن شامل آرایش الکترونی پوسته K است، بدون تغییر باقی می ماند و به جای پوسته L که قبلاً داشتیم، سه اوربیتال هیبریدی $2sp^2$ و یک الکترون آزاد و غیر هیبریدی، که در اوربیتال $2p$ باقی می ماند، خواهیم داشت.

در این حالت هر کدام از سه الکترون اوربیتال هیبریدی $2sp^2$ یک آرایش مثلثی دارند که در یک صفحه Y دو بعدی قرار می گیرد و جز در راستای گسترش با هم تفاوتی ندارند.



شکل ۴-۲: انواع اوربیتالها در گرافین

$$|sp_a^2\rangle = C_1|2s\rangle - \sqrt{1 - C_1^2}|2p_y\rangle \quad (۶-۱)$$

$$|sp_b^2\rangle = C_2|2s\rangle + \sqrt{1 - C_2^2} \left\{ \frac{\sqrt{3}}{2}|2p_x\rangle + \frac{1}{2}|2p_y\rangle \right\}$$

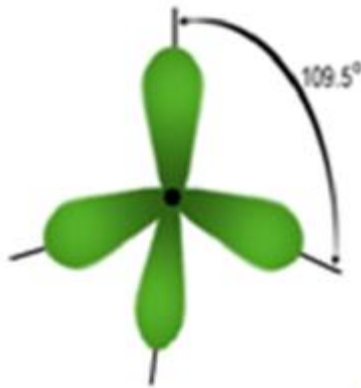
$$|sp_c^2\rangle = C_3|2s\rangle + \sqrt{1 - C_3^2} \left\{ -\frac{\sqrt{3}}{2}|2p_x\rangle + \frac{1}{2}|2p_y\rangle \right\}$$

ضرایب در رابطه ی (۶-۱) را همانند روش قبل میتوان بدست آورد:

$$C_3 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad C_1 = C_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad (۷-۱)$$

همچنین نوع سومی از اوربیتالهای هیبریدی، یعنی اگر اوربیتال هیبریدی از یک اوربیتال $2s$ و سه اوربیتال $2p$ تشکیل شده باشد، آنگاه چهار اوربیتال هیبریدی sp^3 ایجاد می شود، در این حالت آرایش الکترونی کربن شامل آرایش الکترونی پوسته ی K است که بدون تغییر باقی مانده و به جای پوسته ی اصلی L که قبلا داشتیم، چهار اوربیتال هیبریدی $2sp^3$ خواهیم داشت.

هر اوربیتال هیبریدی $2sp^3$ در چهار گوشه ی یک چهار وجهی قرار می گیرند [5].



شکل ۲-۵: هیبریداسیون sp^3

(۸-۱)

$$|sp_a^3\rangle = \frac{1}{2} \{ |2s\rangle + |2p_x\rangle + |2p_y\rangle + |2p_z\rangle \}$$

$$|sp_b^3\rangle = \frac{1}{2} \{ |2s\rangle - |2p_x\rangle - |2p_y\rangle + |2p_z\rangle \}$$

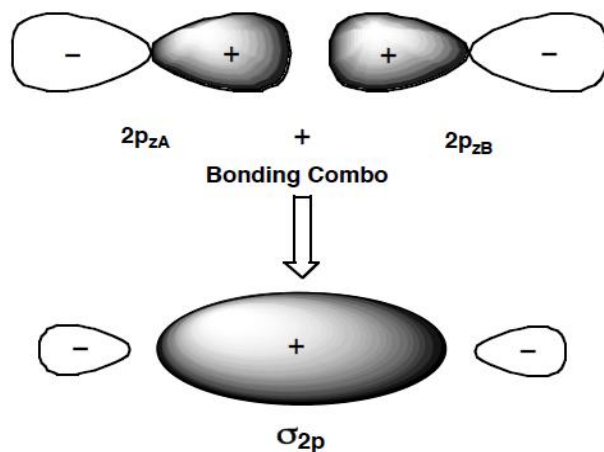
$$|sp_c^3\rangle = \frac{1}{2} \{ |2s\rangle - |2p_x\rangle + |2p_y\rangle - |2p_z\rangle \}$$

$$|sp_d^3\rangle = \frac{1}{2} \{ |2s\rangle + |2p_x\rangle - |2p_y\rangle - |2p_z\rangle \}$$

در طرحهای پیوندی، زمانی که همپوشانی صورت میگیرد، بسته به نحوه ی نزدیک شدن اوربیتالهای اتمی اوربیتالهای مولکولی مختلفی تشکیل می شود که مهمترین آنها عبارتند از:

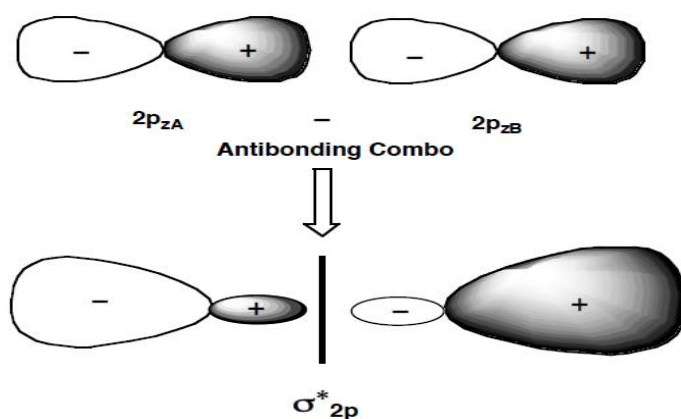
۱-۴-۱- اوربیتال مولکولی σ, σ^* :

اگر در تشکیل یک مولکول دو اتمی، دو اوربیتال اتمی از روبرو (دوسر) بهم نزدیک شوند و هم پوشانی مثبت (اگر اوربیتالهای دو اتم از طریق لب های هم نام با یکدیگر هم پوشانی کنند، همپوشانی مثبت است). داشته باشند، اوربیتال مولکولی بوجود آمده از نوع σ میباشد.



شکل ۲-۶: نحوه ی تشکیل اوربیتال σ

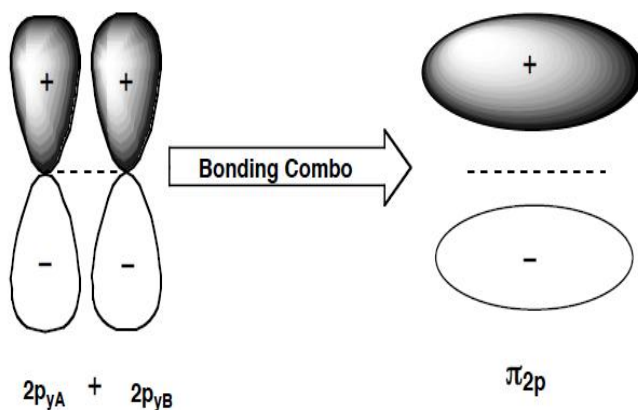
اگر در تشکیل یک مولکول دو اتمی، دو اوربیتال اتمی از روبرو (دوسر) بهم نزدیک شوند و هم پوشانی منفی (اگر اوربیتالهای دو اتم از طریق لب های نام نام با یکدیگر هم پوشانی کنند، همپوشانی منفی است). داشته باشند، اوربیتال مولکولی بوجود آمده از نوع σ^* میباشد.



شکل ۲-۷: نحوه ی تشکیل اوربیتال مولکولی σ^*

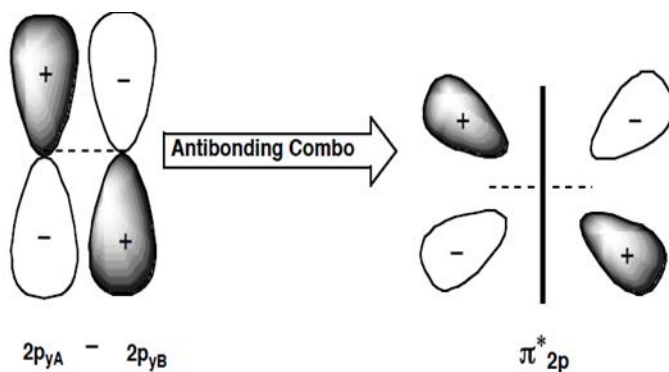
۱-۴-۲- اوربیتال مولکولی $\pi\pi^*$:

اگر در تشکیل یک مولکول دو اتمی، دو اوربیتال اتمی از پهلو بهم نزدیک شوند و هم پوشانی + داشته باشند، اوربیتال مولکولی بوجود آمده از نوع π می باشد.



شکل ۲-۸: نحوه ی تشکیل اوربیتال مولکولی π

اگر در تشکیل یک مولکول دو اتمی، دو اوربیتال اتمی از پهلو بهم نزدیک شوند و هم پوشانی - داشته باشند، اوربیتال مولکولی بوجود آمده از نوع π^* می باشد.



شکل ۲-۹: نحوه ی تشکیل اوربیتال مولکولی π^*

در کل می توان گفت: در هیبریداسیون sp^{n+1} ، $n+1$ الکترون اتم کربن، اوربیتال π و $4 - (n+1)$ الکترون هم اوربیتال π را اشغال میکنند. [5].