



کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات و

نوآوری های ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه

متعلق به دانشگاه رازی است.



دانشگاه رازی
دانشکده علوم
گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته ی فیزیک

گرایش حالت جامد

عنوان پایان نامه

بررسی ویژگی های الکترونی و اپتیکی نانو نوارهای اکسید بریلیوم

استاد راهنما:

دکتر علی فتحعلیان

نگارش:

پگاه مسکنه

مهر ماه ۱۳۹۲



پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته ی فیزیک

گرایش حالت جامد

دانشجو:

پگاه مسکنه

تحت عنوان

بررسی ویژگی های الکترونی و اپتیکی نانو نوارهای اکسید بریلیوم

در تاریخ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه به تصویب نهایی رسید.

امضاء	با مرتبه ی علمی استادیار	دکتر علی فتحعلیان	۱- استاد راهنما
امضاء	با مرتبه ی علمی استادیار	دکتر حمزه موسوی	۲- استاد داور داخل گروه
امضاء	با مرتبه ی علمی استادیار	دکتر حامد رضانیا	۳- استاد داور داخل گروه

تخت خداوند متعال را به خاطر همه‌ی داده‌ها، نداده‌ها و گرفته‌هایش ساگر و پاسکزارم.

بر خود لازم میدانم از استاد گرامی ام جناب آقای دکتر علی فتحعلیان که در تمام مراحل اجرایی این پروژه باره‌سنایی‌های سودمند خود مرا یاری کرده‌اند، پاسکزاری کنم.

همچنین کجک‌های بی‌شائبه‌ی مشاور کراتقدرم جناب آقای جعفر جلیلیان و همینطور زحمات بی‌دریغ جناب آقای دکتر شاپور ولدبیکلی را پاس می‌گویم، چرا که اگر نبود رهنمایی‌ها، صبوری‌ها و بمحکری‌های ایشان، کار به سختی انجام می‌گرفت.

سپس کجک‌ها، مهربانی‌ها و شکیبایی‌های پدر و مادر عزیز و برادران دلسوزم که وجودشان دل‌انگیزترین ترنم آوازی زندگیست پاس می‌گویم. بی‌شک زبان و قلم در توصیف زحمات‌های ایشان قاصرند و نمی‌توانند حق مطلب را آن‌گونه که باید ادا کنند.

در نهایت از دوستان خوبم به ویژه بمحکری و مشورت‌های سازنده‌ی آقای دکتر معودشاهرخنی مشکرمی کنم.

به پاس عاطفه سرشار و گرمای امید بخش وجودشان که در این سردترین روزگار بهترین پشتیبان است،

به پاس قلب های بزرگشان که فریادس است،

و به پاس محبت های بی دریغ شان که هرگز فروکش نمی کند.

ما حاصل زحمات و تلاش هایم را که اثر می است کوچک، به یاد عهد قدیم و رسم ادب، پیشکش می کنم به پدر و

مادرم. این فرشتگان زمینی که نبض خاطر اتم هر لحظه به یادشان می زند و تمام هستی ام در یک نگاه مهربان آنان

خلاصه می شود.

چکیده

گرافن یکی از نانوساختارهای پرکاربرد در زمینه‌های مختلفی از جمله حسگری، الکترونیک و غیره می‌باشد. اخیراً ترکیبات نیمه‌رسانای دیگری مانند نیتريدبور، کربید سیلیسیم و اکسید برلیوم نیز در این ساختار کریستالی مورد بررسی‌های تجربی و تئوری دانشمندان قرار گرفته است.

در این پروژه با استفاده از محاسبات اصول اولیه در قالب نظریه تابعی چگالی به بررسی خواص الکترونی و اپتیکی تک لایه گرافنی اکسید برلیوم (BeO) و همچنین نانونوارهای آن با دو حالت لبه زیگزاگ و آرمچیر پرداخته شده است. معادله بس ذره‌ای کوهن-شم را با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی همراه با پتانسیل کامل و اوربیتال موضعی (FPLAPW+10) بسط داده شده است و همچنین پتانسیل سیستم بس الکترونی به صورت کامل (Full Potential) در نظر گرفته شده است. برای بسط جمله تبدالی همبستگی از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) استفاده کرده‌ایم.

نتایج محاسبات الکترونی نشان می‌دهند که تک لایه اکسید برلیوم دارای یک گاف انرژی به اندازه ۵/۸ الکترون ولت است که با نتایج تئوری دیگران در تطابق قابل قبولی قرار دارد. منحنی چگالی حالات الکترونی نشان می‌دهد که نانونوار اکسید برلیوم در حالت لبه آرمچیر نیمه‌رسانا بوده و گاف الکترونی آن تقریباً بی‌تأثیر از پهناي نانونوار می‌باشد. اما برای نانونوار لبه زیگزاگ نتایج متفاوتی به دست آمد، طوریکه در این حالت سیستم دارای قطبش اسپینی در سطح فرمی بوده و دارای خاصیت فرومغناطیسی می‌باشد. در بخش دوم به بررسی خواص اپتیکی سیستم‌های مورد نظر مانند تابع موهمومی و حقیقی تابع دی‌الکتریک، طیف جذب اپتیکی، طیف بازتابش، تابع افت انرژی الکترون، ضریب شکست و رسانایی اپتیکی پرداخته شده است. نانونوارهای لبه آرمچیر از لحاظ اپتیکی مانند یک نیمه رسانا رفتار کرده و دارای یک گاف انرژی از مرتبه ۳/۵ الکترون ولت می‌باشند. اما طیف‌های اپتیکی نانونوارهای لبه زیگزاگ به علت وجود باندهای آویزان و خاصیت فرومغناطیسی سیستم شبیه به یک فلز بوده و تابع دی‌الکتریک آن در محدوده انرژی‌های پایین به علت وجود گذارهای درون نواری دارای مجانب بوده.

نتایج حاصل از این پروژه می‌تواند کاربردهای بسیار مفیدی در صنعت ساخت قطعات الکترونی در مقیاس نانو و همچنین نانو اسپینترونیک باشد.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول: مقدمه‌ای بر نانو فناوری	
۱-۱- مقدمه.....	۲
۲-۱- آلوتروپ‌های کربن.....	۳
۱-۲-۱- الماس.....	۴
۲-۲-۱- گرافین.....	۵
۳-۲-۱- نانولوله کربنی.....	۵
۴-۲-۱- نانو سیم‌ها.....	۶
۵-۲-۱- فولرین.....	۶
۳-۱- اکسید بریلیوم.....	۷
۴-۱- سه فاز بلوری اکسید بریلیوم.....	۹
۱-۴-۱- نانولوله اکسید بریلیوم.....	۱۱
۵-۱- سرچشمه مغناطش.....	۱۲
۶-۱- فرومغناطیس در حضور میدان.....	۱۴
فصل دوم: بررسی نظری دستگاه‌های بس ذره‌ای	
۱-۲- مقدمه.....	۱۸
۲-۲- مطالعه سیستم‌های بس ذره‌ای.....	۱۸
۱-۲-۲- روش کلاسیک.....	۱۹
۲-۲-۲- روش کوانتومی.....	۱۹
۳-۲- هامیلتونی سیستم N الکترونی.....	۲۰
۴-۲- نظریه‌ی تابعی چگالی.....	۲۱
۱-۴-۲- فرمولبندی کوهن-شم.....	۲۲
۲-۴-۲- روش‌های حل انرژی تبادلی-همبستگی $E_{xc}(\rho)$	۲۵
۱-۲-۴-۲- تقریب چگالی موضعی LDA.....	۲۶
۲-۲-۴-۲- تقریب گرادیان تعمیم یافته GGA.....	۲۶
۳-۴-۲- روش‌های حل معادلات کوهن-شم.....	۲۷
۱-۳-۴-۲- روش حل امواج تخت بهبود یافته APW.....	۲۸
۲-۳-۴-۲- روش حل امواج تخت بهبود یافته خطی LAPW.....	۲۹
۳-۳-۴-۲- روش حل امواج تخت بهبود یافته خطی +اوربیتال‌های جایگزیده APW+LO.....	۲۹
فصل سوم: ویژگی‌های اپتیکی مواد	
۱-۳- انتشار نور در ماده.....	۳۱

۳۱	۱-۱-۳- معرفی ثابت‌های اپتیکی
۴۱	۲-۱-۳- انتشار نور در فلزات
۴۴	۲-۳- روابط کرامرز-کرونیگ
۴۵	۳-۳- فرآیند گذارهای درون نواری و بین نواری
۴۶	۱-۳-۳- گذارهای بین نواری

فصل چهارم: بررسی ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی نانو نوار اکسید بریلیوم

۵۰	۱-۴- مقدمه
۵۱	۲-۴- تک لایه اکسید بریلیوم
۵۱	۳-۴- بررسی ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و مغناطیسی نانو نوارهای اکسید بریلیوم
۶۸	۴-۴- بررسی ویژگی‌های اپتیکی تک لایه اکسید بریلیوم
۷۴	۵-۴- بررسی ویژگی‌های اپتیکی نانو نوارهای اکسید بریلیوم با لبه آر‌مچیر
۸۰	۶-۴- بررسی سازوکارهای مختلف جذب در محیط رسانا
۸۱	۷-۴- بررسی ویژگی‌های اپتیکی نانو نوارهای اکسید بریلیوم با لبه زیگزاگ
۸۸	نتیجه گیری
۹۰	منابع

فهرست شکل‌ها

صفحه	عنوان
۴.....	شکل ۱-۱- ساختارهای کربنی
۸.....	شکل ۲-۱- سهم چگالی بار در طول پیوند Be-O بلوراکسید بریلیوم
۹.....	شکل ۳-۱- سه فاز بلوری اکسید بریلیوم
۱۰.....	شکل ۴-۱- نمودار انرژی بر حسب حجم برای سه فاز بلوری اکسید بریلیوم
۱۵.....	شکل ۵-۱- چگالی حالات الکترون‌های اسپین بالا و اسپین پایین هنگام اعمال اسپین خارجی B
۱۵.....	شکل ۶-۱- چگالی حالات اسپین بالا و اسپین پایین که بدون اعمال میدان.....
۱۶.....	شکل ۷-۱- مقادیر پارامتر استونر
۳۴.....	شکل ۱-۳- قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک به فرکانس
۳۵.....	شکل ۲-۳- وابستگی قطبش به فرکانس
۳۶.....	شکل ۳-۳- نمودار تابع دی‌الکتریک حقیقی و موهومی بر حسب انرژی
۳۸.....	شکل ۴-۳- وابستگی طیفی در n و k
۴۰.....	شکل ۵-۳- وابستگی طیفی در بازتابش
۴۳.....	شکل ۶-۳- وابستگی طیفی ϵ_1 و ϵ_2 برای یک فلز با الکترون آزاد
۴۳.....	شکل ۷-۳- وابستگی طیفی n و k برای یک فلز با الکترون آزاد
۴۴.....	شکل ۸-۳- وابستگی طیفی بازتابش برای یک فلز با الکترون آزاد
۴۶.....	شکل ۹-۳- فرآیند گذار بین نواری
۵۱.....	شکل ۱-۴- ساختار نواری تک لایه‌ی اکسید بریلیوم
۵۲.....	شکل ۲-۴- نانو نوار لبه آرمچیر
۵۳.....	شکل ۳-۴- نانو نوار لبه زیگزاگ
۵۴.....	شکل ۴-۴- تغییرات گاف انرژی بر حسب پهناي نانونوار لبه آرمچیر
۵۴.....	شکل ۵-۴- چگالی حالات کلی نانونوار اکسید بریلیوم لبه آرمچیر
۵۵.....	شکل ۶-۴- چگالی حالات موضعی نانونوار لبه آرمچیر اکسید بریلیوم با پهناي 8.145 \AA
۵۵.....	شکل ۷-۴- چگالی حالات جزئی اوربیتال S و P نانونوار لبه آرمچیر با پهناي 8.145 \AA
۵۶.....	شکل ۸-۴- چگالی ابر الکترونی نانونوار لبه آرمچیر با پهناي 8.145 \AA
۵۷.....	شکل ۹-۴- چگالی حالات موضعی نانونوار لبه آرمچیر اکسید بریلیوم با پهناي 10.877 \AA
۵۷.....	شکل ۱۰-۴- چگالی حالات جزئی اوربیتال S و P نانونوار لبه آرمچیر با پهناي 10.877 \AA
۵۸.....	شکل ۱۱-۴- چگالی ابر الکترونی نانونوار لبه آرمچیر با پهناي 10.877 \AA
۵۸.....	شکل ۱۲-۴- چگالی ابر الکترونی پیوند π ، نانونوار لبه آرمچیر با پهناي 10.877 \AA
۵۹.....	شکل ۱۳-۴- چگالی حالات موضعی نانونوار لبه آرمچیر اکسید بریلیوم با پهناي 13.598 \AA
۵۹.....	شکل ۱۴-۴- چگالی حالات جزئی اوربیتال S و P نانونوار لبه آرمچیر با پهناي 13.598 \AA
۶۰.....	شکل ۱۵-۴- چگالی ابر الکترونی نانونوار لبه آرمچیر با پهناي 13.598 \AA
۶۱.....	شکل ۱۶-۴- چگالی حالات کلی نانونوار اکسید بریلیوم لبه زیگزاگ
۶۲.....	شکل ۱۷-۴- چگالی حالات موضعی نانونوار لبه زیگزاگ اکسید بریلیوم با پهناي 11.99 \AA
۶۲.....	شکل ۱۸-۴- چگالی حالات جزئی اوربیتال S و P نانونوار لبه آرمچیر با پهناي 11.99 \AA

- شکل ۴-۱۹- چگالی ابر الکترونی اسپین بالا و پایین نانونوار لبه زیگزاگ با پهنای 11.99 \AA ۶۳
- شکل ۴-۲۰- چگالی ابر الکترونی پیوند π نانونوار لبه زیگزاگ با پهنای 11.99 \AA ۶۳
- شکل ۴-۲۱- چگالی حالات موضعی نانونوار لبه زیگزاگ اکسید بریلیوم با پهنای 16.521 \AA ۶۴
- شکل ۴-۲۲- چگالی حالات جزئی اوربیتال S و p نانونوار لبه زیگزاگ با پهنای 16.521 \AA ۶۴
- شکل ۴-۲۳- چگالی ابر الکترون اسپین بالا و پایین نانونوار لبه زیگزاگ با پهنای 16.521 \AA ۶۵
- شکل ۴-۲۴- چگالی ابر الکترونی پیوند π ، اسپین بالا و پایین نانونوار لبه زیگزاگ با پهنای 16.521 \AA ۶۵
- شکل ۴-۲۵- چگالی حالات موضعی نانونوار لبه زیگزاگ اکسید بریلیوم با پهنای 21.9 \AA ۶۶
- شکل ۴-۲۶- چگالی حالات جزئی اوربیتال S و P نانونوار لبه زیگزاگ با پهنای 21.9 \AA ۶۶
- شکل ۴-۲۷- چگالی ابر الکترون اسپین بالا و پایین نانونوار لبه زیگزاگ با پهنای 21.9 \AA ۶۷
- شکل ۴-۲۸- چگالی ابر الکترونی پیوند π ، اسپین بالا و پایین نانونوار لبه زیگزاگ با پهنای 21.9 \AA ۶۸
- شکل ۴-۲۹- تابع دی الکتریک حقیقی (پایین) و موهومی (بالا) تک لایه‌ی اکسید بریلیوم ۶۹
- شکل ۴-۳۰- نمودار ضریب جذب تک لایه‌ی اکسید بریلیوم ۷۰
- شکل ۴-۳۱- ضریب شکست (بالا) و ضریب خاموشی (پایین) تک لایه‌ی اکسید بریلیوم ۷۱
- شکل ۴-۳۲- نمودار ضریب بازتابش تک لایه‌ی اکسید بریلیوم ۷۲
- شکل ۴-۳۳- نمودار تابع افت انرژی فوتون نانونوار ۷۳
- شکل ۴-۳۴- نمودار رسانندگی الکتریکی حقیقی تک لایه‌ی اکسید بریلیوم ۷۴
- شکل ۴-۳۵- تابع دی الکتریک حقیقی و موهومی نانونوار لبه آرچیر ۷۵
- شکل ۴-۳۶- ضریب جذب نانونوار لبه آرچیر ۷۶
- شکل ۴-۳۷- ضریب شکست (بالا) و ضریب خاموشی (پایین) نانونوار لبه آرچیر ۷۷
- شکل ۴-۳۸- طیف بازتابش نانونوار لبه آرچیر ۷۸
- شکل ۴-۳۹- تابع افت انرژی فوتون نانونوار لبه آرچیر ۷۹
- شکل ۴-۴۰- رسانندگی الکتریکی حقیقی نانونوار لبه آرچیر ۸۰
- شکل ۴-۴۱- تابع دی الکتریک حقیقی و موهومی نانونوار لبه زیگزاگ ۸۲
- شکل ۴-۴۲- ضریب جذب نانونوار لبه زیگزاگ ۸۳
- شکل ۴-۴۳- ضریب شکست و ضریب خاموشی نانونوار لبه زیگزاگ ۸۴
- شکل ۴-۴۴- ضریب بازتابش نانونوار لبه زیگزاگ ۸۵
- شکل ۴-۴۵- تابع افت انرژی نانونوار لبه زیگزاگ ۸۶
- شکل ۴-۴۶- رسانندگی اپتیکی حقیقی نانونوار لبه زیگزاگ ۸۷

فهرست جدول‌ها

صفحه	عنوان
۶۷.....	جدول ۴-۱- تکانه مغناطیسی کل نانونوار لبه زیگزاگ
۶۷.....	جدول ۴-۲- تکانه مغناطیسی جزئی اتم‌های لبه نانونوار لبه زیگزاگ
۷۸.....	جدول ۴-۳- ثابت‌های دی‌الکتریک نانونوار لبه آرمچیر
۸۴.....	جدول ۴-۴- بسامدهای پلاسمونی نانونوار لبه زیگزاگ در راستای محور y

فصل اول

مقدمه‌ای بر نانوفناوری

۱-۱- مقدمه

فناوری نانو از مباحث عمده مجامع علمی امروز است که نوید پیشرفت‌های سریع در تمام زمینه‌های علمی و صنعتی را می‌دهد. روند رو به رشد کنونی نشان می‌دهد که این فناوری در حال پیشی گرفتن از رقیبان سرسخت خود است و می‌خواهد یکه‌تاز عرصه‌ی انقلاب صنعتی سوم باشد. نانو به عنوان یک فناوری کاربردی از همگرایی علوم فیزیک، شیمی و زیست به وجود آمده‌است و یک رویکرد جدید در تمامی رشته‌هاست. این فناوری توانایی کنترل در سطح ملکولی و اتمی و استفاده از خواصی که در آن سطوح ظاهر می‌شوند و همچنین ایجاد ساختارهایی که نظم ملکولی جدیدی دارند، ترکیبات جدید را شکل دهی می‌کند و به تولید مواد، ابزارها و سیستم‌های جدید می‌پردازد.

اصطلاح نانوفناوری اغلب بر روی اندازه‌ی ساختار و تفاوت میان روش دستیابی کلی استوار است. نانوساختارها موادی با ابعاد پایین هستند و یک نانومتر یک میلیاردم متر ($10^{-9} m$) یعنی حدوداً ۴ برابر قطر یک اتم است. یک تعریف گسترده از ساختارهای نانو، ساختارهایی با یک بعد کوچکتر از ۱۰۰ نانومتر و یک بعد کوچکتر از $1 \mu m$ را در بر می‌گیرد [1] که این مقیاس کوچک از ماده تحولات عظیمی در توسعه‌ی علوم پزشکی، الکترونیک، فناوری زیستی و... داشته‌است. علت اینکه روی این مقیاس طول تاکید می‌کنیم این است که خواص موجگونه‌ی ناشی از الکترون‌های داخل ماده و برهم‌کنش متقابل اتم‌ها با یکدیگر از جابجایی مواد در مقیاس نانومتر تاثیر می‌پذیرد. مطالعات نظری و مشاهدات تجربی در برهم‌کنش موج الکترومغناطیسی با مواد نشان داده است که در مقایسه با مواد توده‌ای نانوساختارها با توجه به مساحت سطح بزرگ و اثرات محدودیت کوانتومی، خواص گرمایی، شیمیایی، الکترونی و اپتیکی متفاوتی از خود نشان می‌دهند.

وجود تقارن در این مقیاس بندی در این ساختارها در مقایسه با تقارن انتقالی که در بسیاری از ساختارهای توده‌ای وجود دارد سبب جایگزیدگی و برانگیختگی‌های دوقطبی در نواحی کوچکی (نقاط داغ) در نانوساختارها می‌شود، حال آنکه این برانگیختگی‌ها در ساختارهای توده‌ای در کل نمونه توزیع می‌شوند [2]. نانوساختارها می‌توانند آزادانه وجود داشته باشند یا درون یک محیط یا ماده‌ای محدود شوند یا اینکه در مواد دیگر جاسازی شوند. بررسی ساختار الکترونی موادی که اندازه محدود دارند در فهم قطعات الکترونی و اپتوالکترونی و... اهمیت دارد.

با تولید ساختارهایی در مقیاس نانومتر امکان کنترل خواص ذاتی مواد از جمله دمای ذوب، خواص مغناطیسی، ظرفیت بار و حتی رنگ مواد بدون تغییر در ترکیب شیمیایی به وجود می‌آید. استفاده از این پتانسیل به محصولات و تکنولوژی‌های جدیدی با کارایی بالا منتهی می‌شود که پیش از این میسر نبود.

در سال ۲۰۰۴ یک گروه فیزیکدان از دانشگاه منچستر انگلستان، که توسط آندره گیم^۱ و کنستانتین نووسلوف^۲ سرپرستی می‌شدند برای نخستین بار نشان دادند که شبکه‌ای از اتم‌های کربن در یک شکل مسطح خاص ویژگی‌های بسیار متفاوتی دارد که ریشه در خصوصیات کوانتومی دارد. آنها به شیوه‌ای کاملاً متفاوت و طبیعی گرافین را ساختند و تحولی در بررسی‌های مربوط به کربن به وجود آوردند. آنها از گرافیت سه بعدی شروع کردند و ورقه‌ای تک‌لایه را با روشی که شکاف میکرومکانیکی نامیده می‌شود، استخراج کردند[3]،[4].

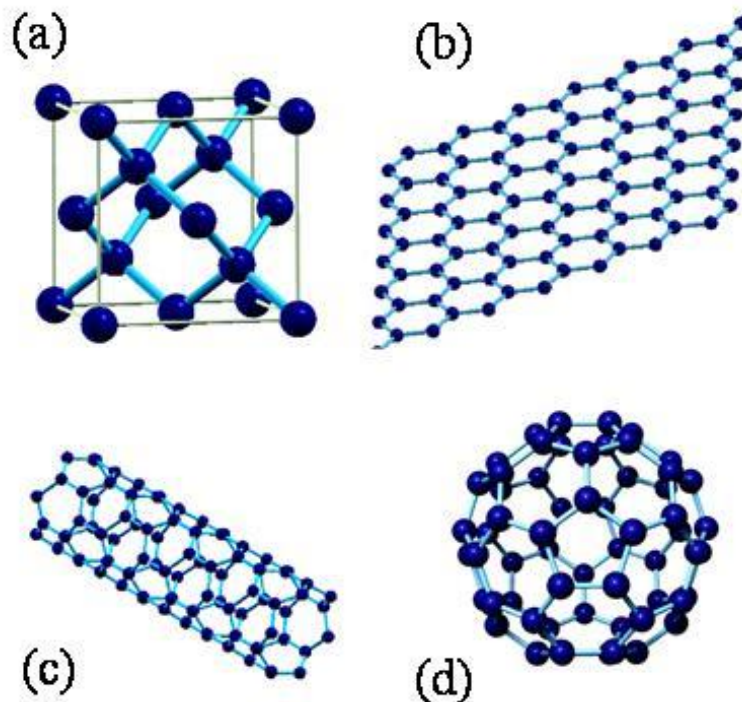
۲-۱ - آلوتروپ‌های کربن

کربن با عدد اتمی ۶ عنصری غیر فلزی است که دارای ۴ الکترون ظرفیت است. کربن با هیبریدهای SP ، SP^2 ، SP^3 می‌تواند طیف گسترده‌ای از ساختارهای کربنی را داشته باشد. این توانایی هیبریدی در کربن باعث شده که کربن دارای ساختارهای ۰، ۱، ۲ و ۳ بعدی باشد.

با سنتز آلوتروپ‌های کربن از جمله الماس (SP^3) و گرافیت (SP^3) به صورت سه بعدی، گرافین (SP^2) به صورت دوبعدی، نانولوله‌های کربنی (SP^2)، نانونوارها و نانوسیم‌ها به صورت یک بعدی و همچنین فولرین (SP^2) به صورت صفر بعدی با خواص متفاوت به وجود می‌آیند[5] که در شکل (۱-۱) بعضی از آنها نشان داده شده‌اند.

¹ A. Geim

² C. Novosolov



شکل ۱-۱- (a) ساختار سه بعدی الماس (b) ساختار دو بعدی گرافن (c) ساختار تک بعدی نانو لوله (d) ساختار صفر بعدی فولرین

۱-۲-۱- الماس

در برهم نهی اوربیتال S با سه اوربیتال P هیبریداسیون SP^3 بدست می‌آید. وقتی کربن مایع تحت فشار خیلی بالا با هیبریداسیون SP^3 چگالیده می‌شود، آلوتروپ کربن به صورت الماس درمی‌آید که سخت‌ترین ترکیبی است که از کربن خالص تشکیل شده است. شبکه‌ی الماس شامل دو شبکه‌ی مکعبی مرکز سطحی در هم نفوذ کرده با فاصله شبکه‌ای 0.357 nm می‌باشد که در آن هر اتم کربن با چهار اتم دیگر پیوند دارد. چون الکترون‌ها در الماس به شکل پیوندهای σ کووالانسی هستند و نه پیوندهای متمرکز شده‌ی π ، بنابراین الماس از لحاظ الکتریکی عایق است و دارای یک گاف نواری بزرگ در حدود 5.47 الکترون ولت می‌باشد. اگرچه اجزای سازنده گرافیت و الماس، کربن است اما گرافیت از لایه‌های گرافین که با پیوند پای روی یکدیگر قرار گرفته‌اند تشکیل شده و به علت همین ساختار لایه‌ای، ماده‌ی بسیار نرمی است در حالیکه تمام پیوندها در الماس کووالانسی است. الماس یکی از سخت‌ترین مواد طبیعی است و در طبیعت چنین ماده‌ای فقط در عمق 150 یا 200 کیلومتری سطح زمین یافت می‌شود [6]. الماس همچنین بالاترین انکسار و شکست نور را دارد که باعث می‌شود یک قطعه الماس بزرگ، یک کریستال بی‌نظیر و درخشان باشد [7].

۱-۲-۲-گرافین

گرافین یک لایه‌ی تک اتمی متشکل از اتم‌های کربن است که این اتم‌ها در یک شبکه‌ی دوبعدی و کندو مانند به هم متصل شده‌اند. به دلیل ضخامت کم، این ماده را به عنوان نازک‌ترین ماده‌ی جهان نیز می‌شناسند. در یک صفحه‌ی گرافین، هر اتم کربن با ۳ اتم کربن دیگر پیوند می‌دهد. این ۳ پیوند در یک صفحه قرار دارند و زوایای بین آن‌ها با یکدیگر مساوی و برابر ۱۲۰ درجه است. پیوند بین اتم‌های کربنی در اینجا کووالانسی بوده و بسیار محکم است، بنابراین گرافین استحکام بسیار زیادی دارد [8,9]. گرافین دارای یک گاف نواری صفر است که در آن حامل‌های بار برای انرژی‌های کوچک از معادله‌ی نسبیتی دیراک با جرم صفر پیروی می‌کنند [3]. در گرافین خواص جدید الکترونی و تراپردی زیادی وجود دارد، برای مثال مشاهده‌ی اثر کوانتومی نیمه صحیح هال [4]، تحریک‌پذیری زیاد حامل‌ها [10]، اثر ایتیک غیرخطی [11]، عبور کامل برای فرود عمود از سد پتانسیل با هر ارتفاع و پهنایی که همان پارادوکس کلاین است.

نتایج به دست آمده نشان داده‌اند این نانو ماده رسانش گرمایی بالا و ویژگی‌های مکانیکی بسیار خوبی دارد. در اندازه‌گیری‌های انجام شده به وسیله طیف‌سنجی رامان در نزدیک دمای اتاق اندازه‌ی ضریب رسانش گرمایی گرافین بسته به ابعاد آن مقداری در حدود $3000 - 5000 \text{ W/Km}$ گزارش شده است [12]. روش دیگر محاسباتی، بر پایه‌ی اصول آغازین^۱ است که با این روش در دمای 300° K برای هر دو گرافین تک لایه و دولایه مقدار $K = 2200 \text{ W/Km}$ به دست آمده است [13].

از دید مکانیکی اندازه‌گیری‌های تجربی و محاسبات نظری هر دو نشان داده‌اند که گرافین به سختی الماس است. با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) لی مدول یانگ را 1 TPa و قدرت ذاتی پارگی، یعنی بیشینه تنشی که گرافین می‌تواند تحمل کند و دچار پارگی نشود را 0.23 TPa به دست آورد [14]. همچنین با استفاده از طیف‌سنجی رامان، فراری و همکارانش مدول یانگ را $2 \pm 0.5 \text{ TPa}$ محاسبه کرده‌اند.

۱-۲-۳- نانولوله کربنی

ساختار هندسی نانولوله‌های کربنی شبیه گرافین است و با تعیین بردار کایرال که با یک جفت عدد صحیح مشخص می‌شود به دست می‌آید. نانولوله کربنی می‌تواند از رول کردن تک لایه‌ی گرافین مثل یک استوانه توخالی به دست آید که بر حسب آرایش اتم‌های مقطع لوله سه دسته نانولوله داریم. نانولوله زیگزاگ، نانولوله دسته صندلی (آرمچیر) و نانولوله کایرال و این سه دسته دارای خواص متفاوتی هستند.

^۱ Ab initio

نانولوله‌ی کربنی بر حسب زاویه‌ی پیچش‌شان رفتار فلزی یا نیم رسانایی از خود نشان می‌دهند. در حالت کلی تمام نانولوله‌های آرمچیر کربنی فلز هستند و در مورد نانولوله‌های زیگزاگ بر حسب تعداد پایه‌های نانولوله رسانا یا نیم رسانا هستند. نانولوله کربنی به دلیل داشتن خواصی چون هدایت گرمایی و الکتریکی بالا و همینطور استحکام بالا در علوم و فناوری جدید نقش مهمی ایفا می‌کند و در سنسور شیمیایی، دستگاه اشعه‌ی X، کلکتورهای خورشیدی، ذخیره سازی انرژی در ابرخازن‌ها و باتری‌های ثانویه، قطعات اسپینترونیک کاربردهایی دارند.

۱-۲-۴- نانوسیم‌ها

مفهوم سیم‌ها و نقاط کوانتومی اولین بار در سال ۱۹۷۰ توسط ایزاکی و تی سو ارائه شده [15]. کاهش شدید ابعاد و کنترل دقیق هندسه‌ی سطح نانوساختارها خواص جدید و منحصر بفردی از جمله خواص مغناطیسی، الکتریکی و مکانیکی و... را آشکار کرد. در میان سیستم‌های نانومتری نانوساختارهای یک بعدی در مقایسه با ذرات و سیستم‌های دوبعدی جهت مطالعه‌ی پدیده‌ی انتقال، ذخیره‌ی اطلاعات و سرعت انتقال داده‌ها سیستم‌های ایده‌آلی می‌باشند [21]. نانوسیم‌ها از جمله نانوساختارهای تک بعدی هستند که در این ابعاد اثرات کوانتومی سطح قابل اهمیت است و می‌توان با ساخت آنها به مشخصه‌هایی دست یافت که در مواد توده وجود ندارد [16]. نانوسیم‌ها کاربردهای متفاوتی از جمله کاتالیست‌ها با قابلیت بالا [17]، غشاهای بیومواد [18]، حسگرهای مغناطیسی، سلول‌های حافظه، دیودهای انتشار نور، جذب کننده‌ی امواج میکرونی با فرکانس بالا [19]، فوتو ولتاها و محیط‌های نوری [20] دارند.

روش‌های مختلفی برای تولید نانوسیم‌های مختلف وجود دارد که از آن جمله می‌توان به لیتوگرافی، اپیتاکسی پرتو ملکولی (MBE)، ساخت با استفاده از تمپیت اشاره کرد [22].

۱-۲-۵- فولرین

آلوتروپ صفر بعدی کربن، فولرین، در سال ۱۹۸۵ توسط رابرت کرل^۱، هارولد کروتو^۲ و ریچارد اسمالی^۳ کشف شد [23]. نماینده‌ی شاخص این دسته، ملکول C_{60} است که در آن اتم‌های کربن از یک لایه‌ی گرافینی با هیبرید sp^2 که به شکل کره در آمده‌است، به وجود می‌آید. فولرین‌ها به شکل ملکول‌های بسته‌ای هستند که از ضخامت گرافنی خمیده ساخته شده‌اند. برای ساخت فولرین‌ها صفحات گرافینی را باید انحنای

¹ R. Kurl

² H. Kroto

³ R. Smalley

دهند و این باعث می‌شود که علاوه بر حلقه‌های شش ضلعی، حلقه‌های پنج ضلعی هم به وجود آید که باعث جمع شدن و در نهایت شکل‌گیری کره‌ی گرافینی می‌شود، اینگونه ساختارها باکی‌بال^۱ نیز نامیده می‌شوند. فولرین به شکل کره فراوان است. فولرین C_{60} شامل ۲۰ حلقه‌ی شش ضلعی و ۱۲ حلقه‌ی پنج ضلعی می‌باشد و فولرین C_{70} با اضافه کردن یک حلقه‌ی ۱۰ اتمی به فولرین C_{60} تولید می‌شود. از خواص فولرین‌ها می‌توان خاصیت رسانایی و نیم رسانایی بالا، مقاومت سطحی و کششی بسیار زیاد، قابلیت ذخیره‌سازی گازهایی مانند آرگون و هیدروژن و نیز خاصیت الکتروستاتیکی آن‌ها را نام برد.

۱-۳- اکسید بریلیوم

علاوه بر نانو ساختارهای کربنی، نانو ساختارهایی از ترکیبات متفاوت نظیر اکسید بریلیوم شناخته شده است. اکسید بریلیوم در سال ۱۷۹۸ به صورت اکسید بریلیا توسط بوسی و وهله کشف شد [24]. تنها ترکیب با پیوند Be-O یک ترکیب معدنی با فرمولاسیون اکسید بریلیوم (BeO) است که در طبیعت از سنگ معدن برومیت^۲ به وجود می‌آید. رسانش گرمایی این جامد بی‌رنگ از هر عایق دیگری به استثنای الماس بیشتر است [24]، [25]. علاوه بر رسانایی گرمایی حدود $330 W/Km$ یک عایق الکتریکی خوب نیز هست و به عنوان گریس‌های گرمایی برای انتقال حرارت بین دو قطعه‌ی الکترونیکی می‌توان از آن استفاده کرد [26]. این ماده در بین عایق‌های الکتریکی دارای قدرت دی‌الکتریک الایی است [27].

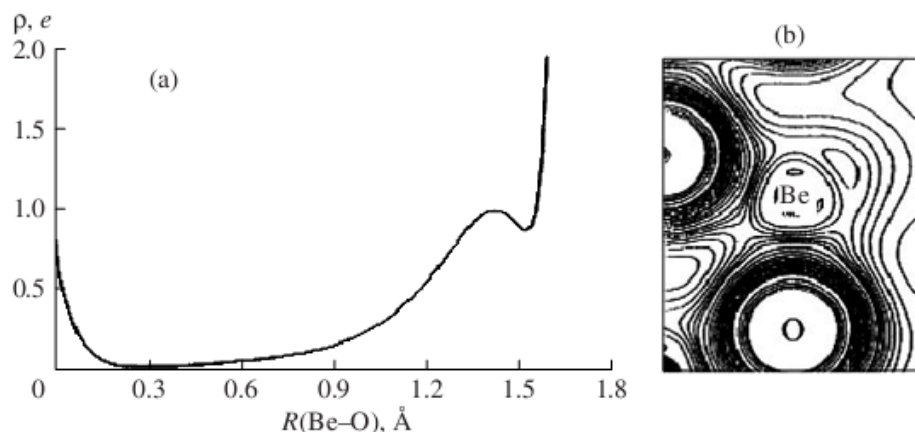
اکسید بریلیوم اکثراً به صورت یک پودر آمورف سفیدرنگ حاصل می‌شود [28]. سرامیک‌های اکسید بریلیوم دارای خواص پیزو شیمیایی منحصر بفردی هستند [25, 29]. خصوصیت پیوندی اکسید بریلیوم سبب بروز خواص فیزیکی و مکانیکی مناسب، از جمله سختی بالا، نقطه ذوب و رسانایی گرمایی به خوبی ثابت‌های الاستیکی بزرگ می‌شود [31]. نقطه‌ی ذوب و سختی بالایش باعث کاربرد آن در جداره‌ی موتورهای موشک و همچنین در روکش دندان و لمینیت‌ها شده است [27]. بیشتر مواد اکسید بریلیوم پلی کریستالین هستند. ثابت‌های الاستیکی اغلب با استفاده از روش Voight-Reuss-Hill تخمین زده می‌شوند [31]. اکسید بریلیوم یک ماده‌ی اپتیکی جاذب است که عبور زیادی را در یک رنج طیفی پهن برای V-UV ($0.120 \mu m$) در سراسر IR ($9 \mu m$) ارائه می‌کند [32-33].

با بررسی ساختار نواری توسط Xu و Ching [34]، نتایج گزارش شده برای بلور اکسید بریلیوم در شکل ۱-۲ نشان داده شده، این شکل سهم چگالی بار در طول پیوند Be-O را در صفحه‌ی xz بلور اکسید بریلیوم نشان

¹ Bucky ball

² Bromellite

می‌دهد. در تابع موج‌های یون‌های Be و O یک همپوشانی جزئی دیده می‌شود که به این موضوع اشاره دارد که پیوند Be-O نسبتاً کووالانسی است.



شکل ۱-۲- (a) سهم چگالی بار در طول پیوند Be-O (b) سهم چگالی بار در طول پیوند Be-O را در صفحه‌ی xz بلوراکسید بریلیوم [35]

طبق Xu و Ching [34] چگالی اتمی موثر برای اتم‌های اکسیژن و بریلیوم برابر مقادیر $Q(O) = 6.24e$ و $Q(Be) = 1.76e$ است. FIC پارامتری است که می‌تواند کسری از کاراکتر یونی پیوند را تخمین بزند و از صفر برای بلورهای کاملاً کووالانسی تا 100% برای ترکیبات کاملاً یونی تغییر می‌کند.

$$FIC = \frac{|Q(Be) - Q(O)|}{Q(Be) + Q(O)}$$

مقدار FIC برای اکسید بریلیوم 56% به دست آمده است [35].

اکسید بریلیوم به عنوان یک عضو از مجموعه‌ی اکسیدهای قلیایی خاکی تنها ماده‌ایست که در شبکه ورتزیت بیشتر از شبکه نمکی متبلور می‌شود که این می‌تواند به ترکیب کووالانسی قابل توجه این ماده نسبت داده شود [30].