بسم الله الرحمن الرحيم

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 چگالی حالت ها و ظرفیت گرمایی نانو نوارهای آرمچیر گرافینی، بورون نیترایید، سیلیکون کربن و اکسیدبریلیوم با استفاده از رهیافت تابع گرین

استاد راهنما:

دکتر حمزه موسوی

نگارش:

زهرا یارمحمدی

شهریور ماه ۱۳۹۲

دانشکده علوم
گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته ی فیزیک گرایش حالت جامد

نام دانشجو

زهرا یارمحمدی

تحت عنوان

بررسی چگالی حالت ها و ظرفیت گرمایی نانو نوارهای آرمچیر گرافینی، بورون نیترایدِ، سیلیکون کربن و اکسیدبریلیوم با استفاده از رهیافت تابع گرین

در تاریخ ۱۳۹۲/۶/۲۰ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه عالی به تصویب نهایی رسید.

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

تشکر و قدردانی

در ابتدا از زحمات استاد گرانقدرم جناب آقای دکتر حمزه موسوی کمال تشکر و قدردانی را دارم که راهنمای بسیار خوبی برای من در تمامی مراحل پایان نامه بودند و همواره با صبر و خوش رویی پاسخگوی سوالات من بودند. همچنین از تمامی اساتید دانشکده علوم دانشگاه رازی که در طول دوران کارشناسی ارشد افتخار شاگردی آنها را داشته ام ممنون و سپاسگزارم.

تقدیم به پدر و مادر عزیزم

خدای را بسی شاکرم که از روی کرم، پدر و مادری فداکار نصیبم ساخته تا در سایه درخت پربار وجودشان بیاسایم و از ریشه آنها شاخ و برگ گیرم و از سایه وجودشان در راه کسب علم و دانش تلاش نمایم. والدینی که بودنشان تاج افتخاری است بر سرم و نامشان دلیلی است بر بودنم چرا که این دو وجود پس از پروردگار مایه هستی ام بوده اند.

آموزگارانی که برایم زندگی؛ بودن و انسان بودن را معنا کردند.

حال این برگ سبزی است تحفه درویش تقدیم آنان...

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

به پاس قلب های بزرگشان که فریادرس است و سرگردانی و ترس در پناهشان به شجاعت می گراید

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

باشد که حاصل تلاشم، نسیم گونه غبار خستگیتان را بزداید.

و تقدیم به خواهر و برادر عزیزم:

به همسفران مهربان زندگیم مریم و علی نازنینم

که در کنار هم آموختیم و به امید هم به آینده چشم می دوزیم. قلبم لبریز از عشق به شماست و خوشبختی تان منتهای آرزویم.

چکیده

در این پایان نامه به بررسی چگالی حالتها و ظرفیت گرمایی نانو نوارهای آرمچیر گرافینی، بورن نیترايد، سیلیکون کربن و بریلیوم اکساید می پردازیم. برای این کار ابتدا با استفاده از تقریب تنگ بست هامیلتونی سیستم را در کوانتش دوم محاسبه می‌کنیم و سپس به کمک رهیافت تابع گرین، معادله و نمودار چگالی حالتهای نانونوارهای آرمچیر را برای عرض های مختلف می‌نویسیم و به کمک آن، معادله ظرفیت گرمایی را نیز بدست می‌آوریم و در این مرحله نیز نمودارها و نتایج را مورد بررسی و مقایسه قرار می‌دهیم. در مرحله‌ی بعد به لبه‌ی نانو نوار گاز هیدروژن اضافه می‌کنیم و اثرات حضور گاز را بر روی نانو نوارهای آرمچیر مختلف از طریق نمودار چگالی حالت وظرفیت گرمایی مورد بررسی و مقایسه قرار می‌دهیم.

کلمات کلیدی : گرافین، بورن نیترايد، سیلیکون کربن ، بریلیوم اکساید، تقریب تنگ بست، تابع گرین،چگالی حالتها، ظرفیت گرمایی، **نانو نوار**

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول : مقدمه ای بر نانو ساختارها

۱-۱- فناوری نانو..... ۲

۱-۲- ساختارهای کربن..... ۳

۱-۲-۱- گرافیت..... ۵

۱-۲-۲- دوده..... ۶

۱-۲-۳- فولرین..... ۶

۱-۲-۴- الماس..... ۷

۱-۲-۵- نانو لوله های کربنی..... ۸

۱-۳- گرافین..... ۹

۱-۴- بورون نیترواید..... ۱۲

۱-۴-۱- بورون نیترواید هگزاگونال..... ۱۲

۱-۴-۲- بورون نیترواید مکعبی..... ۱۳

۱-۵- سیلیکون ۱۴

کربن.....
۱-۶- بریلیوم ۱۵
اکساید.....
.....
۱-۷- نانو ۱۵
نوارها.....
.....
فصل دوم : معرفی مدل های بس ذره ای و تقریب تنگ بست
۲-۱- ۱۹
مقدمه.....
.....
۲-۲- جملات هامیلتونی در بلور یک جسم ۱۹
جامد.....
۲-۳- قضیه ۲۱
بلاخ.....
.....
۲-۴- مدل الکترون های بدون برهمکنش ۲۳
بلاخ.....
۲-۵- تقریب تنگ ۲۶
بست.....
۲-۶- هامیلتونی تنگ بست در کوانتش ۳۰
دوم.....
فصل سوم : معرفی تابع گرین و محاسبه‌ی چگالی حالت ها
۳-۱- ۳۲
مقدمه.....
.....
۳-۲- مقدمه ای از مکانیک ۳۲
کوانتوم.....
۳-۳- نظریه‌ی پاسخ ۳۴
خطی.....
۳-۴- مقدمه ای بر تابع ۳۶
گرین.....
۳-۵- تابع گرین در نظریه‌ی بس ذره ۳۷

ای.....
۳-۶- معادله حرکت برای تابع گرین..... ۳۸
فصل چهارم : بررسی چگالی حالت ها و ظرفیت گرمایی نانو نوارها
۴-۱- مقدمه..... ۴۷
۴-۲- نمایش ماتریسی نانو نوارهای آرمچیر..... ۴۸
۴-۳- ظرفیت گرمایی..... ۵۹
فصل پنجم : رسم نمودارها، بحث و نتیجه گیری
۵-۱- مقدمه..... ۶۳
۵-۲- رسم نمودارها..... ۶۴
۵-۲-۱- نمودار چگالی حالتهای نانو نوارهای آرمچیر گرافینی بدون اضافه کردن گاز به لبه‌ی نانو نوار..... ۶۴
۵-۲-۲- نمودار چگالی حالتهای نانو نوارهای آرمچیر بورون نیتراید بدون اضافه کردن گاز به لبه‌ی نانو نوار..... ۶۸
۵-۲-۳- نمودار چگالی حالتهای نانو نوارهای آرمچیر سیلیکون کربن بدون اضافه کردن گاز به لبه‌ی نانو نوار..... ۷۲
۵-۲-۴- نمودار چگالی حالتهای نانو اکساید بدون اضافه کردن گاز به لبه‌ی نوارهای آرمچیر بریلیوم نانو ۷۶

نوار.....
.....
۵-۲-۵- بحث و نتیجه گیری نمودارهای چگالی حالت ها..... ۸۰
۵-۲-۶- نمودار چگالی حالتهای نانو نوارهای آرمچیر گرافینی با اضافه کردن گاز به لبه-ی نانو نوار..... ۸۱
.....
۵-۲-۷- نمودار چگالی حالتهای نانو نوارهای آرمچیر بورون نیترید با اضافه کردن گاز به لبه‌ی نانو نوار..... ۸۳
.....
۵-۲-۸- نمودار چگالی حالتهای نانو نوارهای آرمچیر سیلیکون کربن با اضافه کردن گاز به لبه‌ی نانو نوار..... ۸۴
.....
۵-۲-۹- نمودار چگالی حالتهای نانو نوارهای آرمچیر بریلیوم اکساید با اضافه کردن گاز به لبه‌ی نانو نوار..... ۸۶
.....
۵-۲-۱۰- مقایسه نمودار چگالی حالتهای نانو نوارهای آرمچیر گرافینی بدون اضافه کردن گاز به لبه‌ی نانو نوار با نانو نوار با لبه‌ی دارای گاز هیدروژن..... ۸۷
۵-۲-۱۱- مقایسه نمودار چگالی حالتهای نانو نوارهای آرمچیر بورون نیترید بدون اضافه کردن گاز به لبه‌ی نانو نوار با نانو نوار با لبه‌ی دارای گاز هیدروژن..... ۸۹
۵-۲-۱۲- مقایسه نمودار چگالی حالتهای نانو نوارهای آرمچیر سیلیکون کربن بدون اضافه کردن گاز به لبه‌ی نانو نوار با نانو نوار با لبه‌ی دارای گاز هیدروژن..... ۹۰
۵-۲-۱۳- مقایسه نمودار چگالی حالتهای نانو نوارهای آرمچیر بریلیوم اکساید بدون اضافه کردن گاز به لبه‌ی نانو نوار با نانو نوار با لبه‌ی دارای گاز هیدروژن..... ۹۲
۵-۲-۱۴- بحث و نتیجه گیری نمودارهای چگالی حالت های نانو نوارها با گاز ۹۳

هیدروژن.....
۵-۳- رسم نمودارهای ظرفیت ۹۴
گرمایی.....
۵-۳-۱- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوارهای آرمچیر گرافینی بدون اضافه کردن گاز به ۹۴
لبه‌ی نانو
نوار.....
.....
۵-۳-۲- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوارهای آرمچیر بورون نیترابد بدون اضافه کردن ۹۶
گاز به لبه‌ی نانو
نوار.....
.....
۵-۳-۳- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوارهای آرمچیر سیلیکون کربن بدون اضافه کردن ۹۷
گاز به لبه‌ی نانو
نوار.....
.....
۵-۳-۴- نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوارهای آرمچیر بریلیوم اکساید بدون اضافه کردن ۹۹
گاز به لبه‌ی نانو
نوار.....
.....
۵-۳-۵- مقایسه نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوارهای آرمچیر گرافینی، بورون ۱۰۰
نیترابد،سیلیکون کربن و بریلیوم اکساید بدون اضافه کردن گاز به لبه‌ی نانو نوار در
یک عرض مشخص.....
۵-۳-۶- مقایسه نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوارهای آرمچیر بدون اضافه کردن گاز به ۱۰۲
لبه‌ی نانو نوار در عرض های مختلف برای یک ماده‌ی
مشخص.....
۵-۳-۷- مقایسه نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوارهای آرمچیر گرافینی بدون اضافه ۱۰۴
کردن گاز به لبه ی نانو نوار با نانو نوار با لبه‌ی دارای گاز
هیدروژن.....
۵-۳-۸- مقایسه نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوارهای آرمچیربورون نیترابد بدون اضافه ۱۰۵
کردن گاز به لبه‌ی نانو نوار با نانو نوار با لبه‌ی دارای گاز
هیدروژن.....
۵-۳-۹- مقایسه نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوارهای آرمچیرسیلیکون کربن بدون ۱۰۷
اضافه کردن گاز به لبه‌ی نانو نوار با نانو نوار با لبه‌ی دارای گاز

هیدروژن.....
۵-۳-۱۰- مقایسه نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوارهای آرمچیر بریلیوم اکساید بدون اضافه کردن گاز به لبه‌ی نانو نوار با نانو نوار با لبه‌ی دارای گاز هیدروژن..... ۱۰۸
۵-۳-۱۱- مقایسه نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوارهای آرمچیر گرافینی، بورون نیتراید،سیلیکون کربن و بریلیوم اکساید با وجود گاز هیدروژن در لبه‌ی نانو نوار در یک عرض مشخص..... ۱۱۰
۵-۳-۱۲- مقایسه نمودار ظرفیت گرمایی نانو نوارهای آرمچیر با گاز هیدروژن در لبه‌ی نانو نوار در عرض های مختلف برای یک ماده‌ی مشخص..... ۱۱۱
۵-۳-۱۳- بحث و نتیجه گیری نمودارهای ظرفیت گرمایی..... ۱۱۳
منابع..... ۱۱۵
.....

فصل اول

مقدمه ای بر نانو ساختارهای کربن، بورون نیترایید، سیلیکون کربن و اکسید بریلیوم

۱-۱- فناوري نانو

فناوری نانو یا نانو تکنولوژی رشته‌ای از دانش کاربردی و فناوری است که موضوعات گسترده‌ای را پوشش می‌دهد. اساس نانو فناوری توانائی بدست گرفتن کنترل ماده در ابعاد نانومتری (کمتر از یک میلیاردم متر) و بهره‌برداری از خواص و پدیده های این بعد در مواد، ابزارها و سیستم های نوین است. اولین جرقه فناوری نانو (البته در آن زمان به این نام شناخته نشده بود) درسال ۱۹۵۹ توسط ریچارد فاینمن[1] متخصص کوانتوم نظری در سخنرانی معروف خود با عنوان "فضای زیادی در سطوح پایین وجود دارد " زده شد و پس از آن ایده نانوتکنولوژی را برای اولین بار اریک درکسلر[2] به دنیا عرضه نمود. در واقع نانو تکنولوژی فهم و به کارگیری خواص جدیدی از مواد و سیستم هایی در ابعاد نانو است که اثرات فیزیکی جدیدی- عمدتاً متاثر از غلبه خواص کوانتومی بر خواص کلاسیک- از خود نشان می‌دهند. هدف اصلی اکثر تحقیقات نانو تکنولوژی شکل‌دهی ترکیبات جدید، با ایجاد تغییراتی در مواد موجود است. در فناوری نانو تنها کوچک بودن اندازه مد نظر نیست بلکه زمانی که اندازه مواد در این مقیاس قرار می‌گیرد، خصوصیات ذاتی آن ها 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 نماییم، می‌توانیم وجود " عناصر پایه " را به عنوان یک معیار ذکر کنیم. عناصر پایه در حقیقت همان عناصر نانو مقیاسی هستند که خواص آنها در حالت نانو مقیاس با خواص‌شان در مقیاس بزرگتر فرق می‌کند. مهارت مورد نظر در این تکنولوژی، دستکاری اتم ها بطور جداگانه و جای دادن دقیق آن ها درمکانی است که برای رسیدن به ساختار دلخواه و ایده‌آل مورد نظر می-باشد. علم میان رشته ای نانو تقریبا" تمامی علوم مهندسی و پزشکی را در برگرفته است. تاکنون بیشترین کاربرد را درصنایع سنگین، بهداشت، نساجی و کشاورزی داشته و در صنایعی نظیر رنگ، اتومبیل، کامپیوتر، شیمی، تصفیه آب و غیره نیز در حال توسعه است. ساخت، دستکاری و آنالیز نانو سیستم ها، توابع مختلفی راکه قبلا" از وجود آن بی خبر بوده ایم آشکار و استفاده مفید و عرضه آنها به بشر باعث پیشرفت‌های ارزنده ای در استانداردهای زندگی می شود. ایجاد توانایی های علمی در علوم مهندسی و پزشکی از قبیل نمایش و تطبیق نیروهای مکانیکی و تعیین مشخصات آنها درسطح نانو، شروع و خاتمه تثبیت و پیگیری انجام کارهای مختلف در نانو ثانیه ها، بررسی پیشرفت تکنیک های آنالیتیکی مانند: آنالیزهای شیمیایی در ابعاد نانو و از

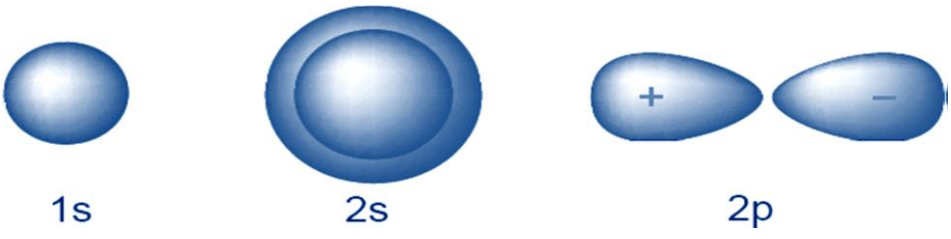
1-Richard Faynman
2-Eric Dkslr

طرفی، فرصت دستیابی علوم مهندسی به نانوسنسورها، عناصرحافظه و تجهیز دستگاه‌های جدید و موثر درعلم پزشکی از دستاوردهای این فناوری است.

وقتی اندازه‌ی ذرات از یک مقدار بحرانی کمتر می‌شود خواصی مانند ساختار الکترونی، رسانایی، واکنش پذیری،دمای ذوب و خواص مکانیکی آن ذره ها تغییر می‌کنند. این وابستگی رفتار به محقق اجازه می‌دهد که خواص آن ذرات را اداره کند. نانوفناوری علم پیوند دهنده دنیای امروز با آینده خوانده می‌شود، چرا که در حال حاضر این حوزه محور ابداعات و اختراعات علمی روز دنیا قرار گرفته است بطوریکه بهره گیری از خواص ماده درمقیاس نانو، نویدبخش فواید و منافعی می باشد که موجب تحولات اساسی در زندگی انسان همچون صرفه جوئی در مصرف انرژی، صرفه جویی اقتصادی، صرفه جویی در زمان، تامین محصول بیشتر باهزینه کمتر، افزایش کیفیت محصول و درنتیجه افزایش کیفیت و استانداردهای زندگی، ایجاد زندگی سالم، کاهش وابستگی های اقتصادی به سایر تکنولوژی های پیشرفته و افزایش درآمدهای ملی می‌شود. تحلیل گران بر این باورند که فناوری زیستی (Biotechnology) فناوری اطلاعات (IT) و فناوری نانو سه قلمرو علمی هستند که انقلاب سوم صنعتی را شکل می‌دهند[۱].

۱-۲- ساختارهاي كربن[1]

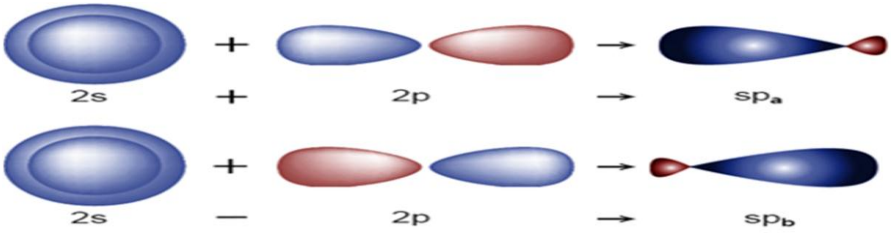
کربن ششمین عنصر از جدول تناوبی می‌باشد. بیشتر به صورت ترکیب در زغال سنگ، گازطبیعی و نیز درموجودات زنده گیاهی و حیوانی وجود دارد. بطور کلی کربن بلوک سازنده‌ی تمام مولکول های آلی می‌باشد. همچنین این عنصر در ساختارهای کربن دار گوناگونی مانند الماس، گرافیت (متشکل از چند لایه گرافین)، فولرین (کربن۶۰)، دوده (کربن بی شکل یا آمورف)، نانو لوله ها و نانو نوارها یافت می-شود[۲].کربن عنصری چهارظرفیتی است که آرایش الکترونی آن به صورت $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$ می‌باشد. شکل اوربیتال های کربن در شکل (۱-۱) آورده شده است.



شکل (۱-۱) : اوربيتال هاي اتم كربن

1-Carbon allotropes

درحالت پایه اوربیتال s اتم کربن یک تقارن کروی دارد و اوربیتال p دمبلی شکل است که حول محورها تقارن دارد. خواص فیزیکی ساختارهای کربنی به چگونه‌گی پیوندهایی که اتم های کربن درآن ها برقرار می‌کنند، بستگی دارد. برای اینکه این پیوندها تشکیل شوند آرایش حالت الکترونی کربن باید به گونه ای تغییر کند که بیش از دو الکترون به صورت الکترون والانس قابل استفاده باشد، این تغییر حالت آرایش الکترونی بوسیله فرایند شناخته شده ی هیبریداسیون[1] صورت می گیرد. برهم نهی کوانتومی حالت $|2s\rangle$ با n حالت $|2p_j\rangle$ هیبریداسیون sp^n نامیده می‌شود، که نقش ضروری را در تشکیل پیوندهای کووالانسی کربن ایفا می کند.



شکل (۱-۲) : اوربیتال های هیبریدی sp

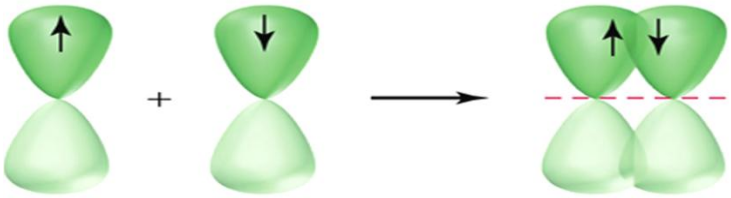
هنگامی که اتم های کربن در مجاورت یکدیگر قرار می‌گیرند، پتانسیل اتم های مجاور باعث ایجاد آشفتگی در اوربیتال های اتمی 2s و 2p شده و با ترکیب خطی این اوربیتال ها، اوربیتال های مولکولی پیوندی و غیرپیوندی تشکیل می‌شوند. در حالت عادی، اوربیتال های پیوندی بین اتم های مجاور بارهای الکترونی را در فضای بین اتم ها توده می‌کنند زیرا این ناحیه جایی است که پتانسیل های جاذبه‌ی اتمی قویترین و بیشترین هم پوشانی را دارند. چنین پیوندهایی را پیوند σ می‌نامند که از قوی ترین گونه های پیوند کوالانسی است [۳]. این نوع پیوند کوالانسی از همپوشا نی محوری اوربیتال های هیبریدی با یکدیگر حاصل می‌شود.

شکل(۱-۳) : توزیع چگالی پیوند σ

ازطرفی دیگر این امکان نیز وجود دارد که دو اتم مجاور از طریق توده کردن بارها در مناطق بالا و پائین خط جدایش دو اتم، پیوند تشکیل دهند که به چنین پیوند هایی، پیوند π می گویند. این پیوند توانایی

1-hybridization

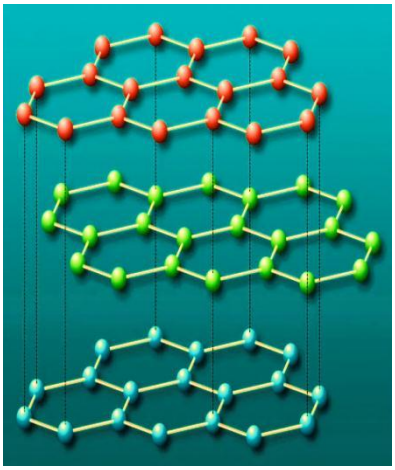
دوران را ندارد زیرا در صورت دوران، آرایش موازی اجزای اوربیتال p نابود می‌شود. و از پیوندهای σ ضعیف ترند.



شکل(۱-۴) : توزیع چگالی پیوند π

۱-۲-۱- گرافیت

کربن،بشکل گرافیت بیشتر بصورت پودر است که بخش اصلی موادی مثل ذغال چوب را تشکیل می-دهد. اتم کربن با استفاده از اوربیتال های پیوندی π که عمود بر راستای اتصال دو اتم مجاور هستند می‌تواند ساختار دو بعدی لایه ای گرافیت را تشکیل دهد.درگرافیت هراتم کربن با سه اتم دیگر بصورت حلقه‌های شش وجهی به هم متصل شده‌اند هردو گونه شناخته شده از گرافیت، آلفا (شش ضلعی) و بتا (منشور شش وجهی که سطوح آن لوزی است) خصوصیات فیزیکی همانند دارند تنها تفاوت آن ها درساختار بلوریشان می‌باشد.گرافیت نوع آلفا بوسیله روش های مکانیکی قابل تبدیل به نوع بتا می‌باشد. ولی گرافیت نوع بتا در دمای ۱۳۰۰ درجه سانتی گراد به نوع آلفا تبدیل می‌شود[۴]. گرافیت سیاه و شکننده است و به آسانی با کشیدن روی یک سطح (به صورت توده ای) ازهم جدا می‌شود. گرافیت ساختار لایه لایه ای دارد در هر لایه اتم های کربن دریک شبکه شش گوش قرار گرفته اند. فاصله بین اتم ها ی کربن ۱/۴۲nm است و فاصله بین لایه ها ۰/۵۳۳nm می باشد[۵]. به همین دلیل از این ترکیب برای «روان کاری» و «روغن کاری» استفاده می‌شود.



شکل (۱-۵) : ساختار گرافیت