۱۳۰۷
دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی
دانشکده علوم

**پایان‌نامه دوره کارشناسی ارشد فیزیک–گرایش حالت جامد**

# بررسی خواص الکتریکی واپتیکی نانو ریبان‌های گرافین و اثر جایگزیدگی بور و نیتروژن بر روی آن

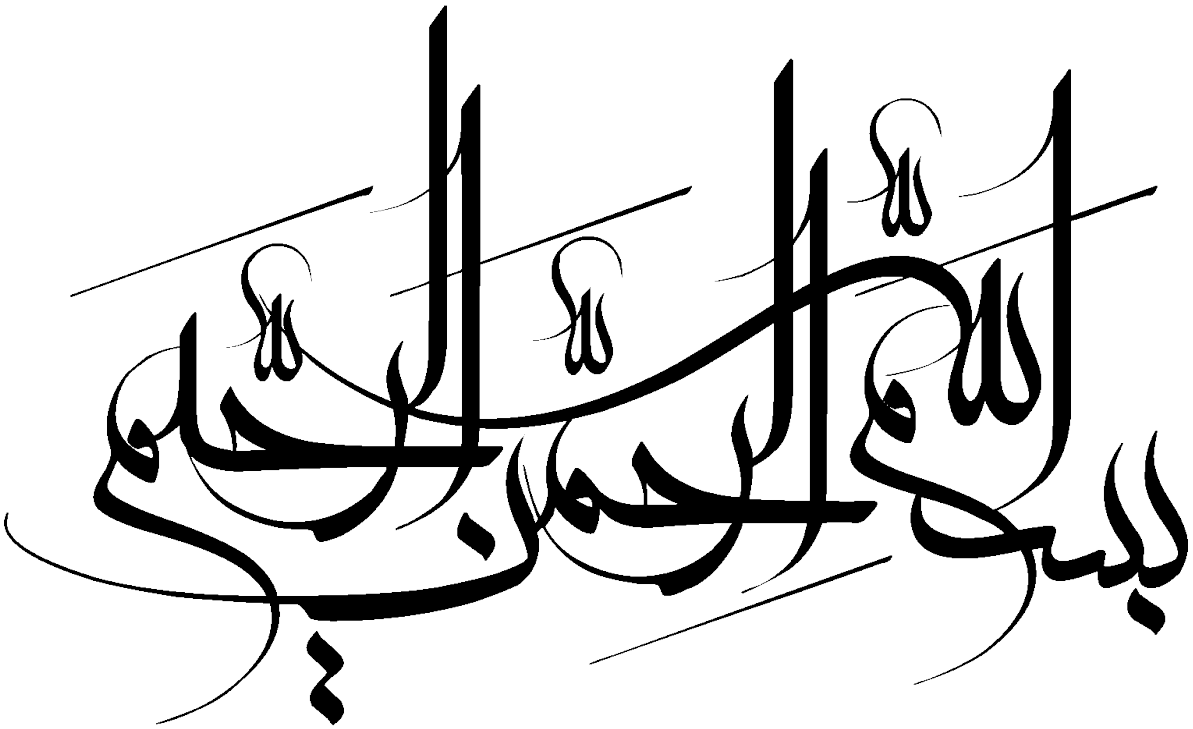
**استاد راهنما:**

دکتر محمود جعفری

**نگارش:**

محمد اسدپور

**زمستان ۱۳۹۱**


بسم الله الرحمن الرحيم

## تقدیم به مادر عزیزتر از جانم :

مادرم ،هستی من ز ،هستی توست تا ،هستم و ،هستی دارمت دوست

## تقدیم با بوسه بر دستان پدرم :

به او که نمی دانم از بزرگی اش بگویم یا مردانگی سخاوت، سکوت، مهربانی و .....

**بسمه تعالی**

| | | |
|---|---|---|
| تاسیس ۱۳۰۷<br>دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی | **تأییدیه هیأت داوران** | **شماره:**<br>**تاریخ:** |

هیأت داوران پس از مطالعه پایان‌نامه و شرکت در جلسه دفاع از پایان‌نامه تهیه شده تحت عنوان :

**بررسی خواص الکتریکی و اپتیکی نانو ریبان های گرافین و اثر جایگزیدگی بور و نیتروژن بر روی آن**

توسط آقای **محمد اسدپور** صحت و کفایت تحقیق انجام شده را برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

رشته **فیزیک** گرایش **حالت جامد** در تاریخ **۱۳۹۱/۱۱/ ۳۰** مورد تأیید قرار می‌هند.

| | | | |
|---|---|---|---|
| **۱- استاد راهنمای اول** | **جناب آقای** | **دکتر محمود جعفری** | امضاء |
| **۲- استاد راهنمای دوم** | **--------** | | امضاء |
| **۲- استاد مشاور** | **---------** | | امضاء |
| **۳- ممتحن داخلی** | **جناب آقای** | **دکترمهدی واعظ زاده** | امضاء |
| **۴- ممتحن خارجی** | **جناب آقای** | **دکتر هوشنگ عراقی** | امضاء |
| **۵- نماینده تحصیلات تکمیلی دانشکده** | **جناب آقای** | **دکترمهدی واعظ زاده** | امضاء |

**بسمه تعالی**

| | | |
|---|---|---|
| تاسیس ۱۳۰۷<br>دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی | **اظهارنامه دانشجو** | **شماره:**<br>**تاریخ:** |

اینجانب **محمد اسدپور** دانشجوی کارشناسی‌ارشد رشته **فیزیک** گرایش **حالت جامد**

دانشکده علوم دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی گواهی می‌نمایم که تحقیقات ارائه شده در پایان‌نامه با عنوان

**بررسی خواص الکتریکی و اپتیکی نانو ریبان های گرافین و اثر جایگزیدگی بور و نیتروژن بر روی آن**

با راهنمایی استاد محترم جناب آقای **دکتر محمود جعفری** توسط شخص اینجانب انجام شده و صحت واصالت مطالب نگارش شده در این پایان‌نامه مورد تأیید می‌باشد، و در مورد استفاده از کار دیگر محققان به مرجع مورد استفاده اشاره شده است. بعلاوه گواهی می‌نمایم که مطالب مندرج در پایان نامه تا کنون برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی توسط اینجانب یا فرد دیگری در هیچ جا ارائه نشده است و در تدوین متن پایان‌نامه چارچوب (فرمت) مصوب دانشگاه را بطور کامل رعایت کرده‌ام.

**امضاء دانشجو:**

**تاریخ:** ۱۳۹۱/۱۱/۳۰

**بسمه تعالی**

| | | |
|---|---|---|
| تاسیس ۱۳۰۷<br>دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی | **حق طبع و نشر و مالکیت نتایج** | شماره:<br>تاریخ: |

**۱- حق چاپ و تکثیر این پایان‌نامه متعلق به نویسنده آن می‌باشد. هرگونه کپی برداری بصورت کل پایان‌نامه یا بخشی از آن تنها با موافقت نویسنده یا کتابخانه دانشکده علوم دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی مجاز می‌باشد.**

**ضمناً متن این صفحه نیز باید در نسخه تکثیر شده وجود داشته باشد.**

**۲- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی می‌باشد و بدون اجازه کتبی دانشگاه به شخص ثالث قابل واگذاری نیست.**

**همچنین استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مراجع مجاز نمی‌باشد.**

*** توجه:**

این فرم می‌بایست پس از تکمیل، در نسخ تکثیر شده قرار داده شود.

باسپاس بیکران از استاد فرهیخته جناب آقای دکتر محمود جعفری که با نکته‌های دلاویز و گفته‌های بلند، همواره راهنما و راه‌گشای نگارنده در اتمام و اکمال پایان نامه بوده است.

با سپاس بی دریغ خدمت دوستان گران مایه ام آقایان فقیه نصیری، مولانی و خانم سهرابی کیا که با راهنمایی هایشان مرا صمیمانه و مشفقانه یاری داده اند و با امتنان بیکران از مساعدت های بی شائبه ی پسرخاله عزیزم، نیما.

**چکیده:**

در این تحقیق، خواص الکتریکی و اپتیکی نانو ریبان زیکزاک و آرمچیر گرافین که با نیتروژن و بور جایگزیده شده است، در دو جایگاه هیبرید اتمی مختلف مطالعه شده است. همه محاسبات بر پایه تئوری تابعی چگالی شکل گرفته و از نرم افزار کوانتوم اسپرسو استفاده شده است. نتایج نشان میدهد هر دو ساختار زیکزاک و آرمچیر، گاف انرژی در حدود یک الکترون ولت دارند و بنابراین آنها نیمرسانا هستند. طبق انتظار، با جایگزیدگی ناخالصی روی این ساختارها در ۸ حالت جدید نانو ریبان گرافین، گاف انرژی کاهش می‌یابد. اثر ناخالصی نوع n ونوع p روی نانو ساختارها بررسی شد و مشاهده شد که جایگاه جایگزیدگی اتم ناخالصی، نقش مهمی در خواص الکترونیکی و اپتیکی مانند ضرایب جذب و بازتاب، تابع اتلاف انرژی و تابع دی الکتریک دارد. همچنین انرژی تشکیل ساختارهایی که با اتم ناخالصی جایگزیده شده اند محاسبه شده است. نتایج نشان می‌دهد در نانو ریبان‌های زیکزاک و آرمچیر گرافین پایین ترین انرژی تشکیل مربوط به جایگزیدگی بور در جایگاه هیبریدی sp2 است.

**کلمات کلیدی:** نانو ریبان‌ها، تئوری تابعی چگالی، گرافین، گرافدین، تابع اتلاف انرژی

## فهرست مطالب

مقدمه..... ۱

فصل اول

تئوری تابعی چگالی (DFT) ..... ۴

۱-۱ مقدمه ..... ۵

۱-۲ توماس فرمی ..... ۷

۱-۲-۱ معادله اصلی توماس- فرمی ..... ۷

۱-۲-۲ محاسبه انرژی به روش توماس- فرمی ..... ۹

۱-۲-۳ تابع توزیع فرمی دیراک ..... ۹

۱-۳ تقریب هارتری ..... ۱۱

۱-۴ تقریب هارتری- فوک ..... ۱۵

۱-۵ تقریب بورن- اوپنهایمر (بی دررو) ..... ۱۸

۱-۶ قضیه هوهنبرگ- کوهن ..... ۲۱

۱-۷ معادلات کوهن- شم ..... ۲۲

۱-۷-۱ تقریب چگالی موضعی (LDA) ..... ۲۸

۱-۷-۲ مشکلات تقریب چگالی موضعی ..... ۲۸

۱-۷-۳ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) ..... ۲۹

۱-۸ رهیافت شبه پتانسیل ..... ۳۰

۱-۸-۱ شرایط لازم برای یک شبه پتانسیل مرغوب ..... ۳۳

۱-۸-۲ انواع شبه پتانسیل ..... ۳۴

۱-۸-۳ شبه پتانسیل های نرم پایسته و فوق نرم ..... ۳۶

فصل دوم

ساختار نانو ریبان گرافین و خواص مورد بررسی ..... ۴۰
۲-۱ مقدمه ..... ۴۱
۲-۲ مقدمهای بر کربن، نیتروژن و بور ..... ۴۱
۲-۲-۱ کربن ..... ۴۱
۲-۲-۲ نیتروژن و بور ..... ۴۳
۲-۳ نانو ساختارهای گرافدین و گرافین ..... ۴۳
۲-۴ نانو ریبان‌ها ..... ۴۵
۲-۴-۱ جدا سازی نانو ریبان‌ها از نظر شکل لبهای ساختار ..... ۴۵
۲-۴-۲ جدا سازی نانو ریبان‌ها از نظر عرض ساختار ..... ۴۶
۲-۵ ساختار نانو ریبان گرافین مورد بررسی ..... ۴۷
۲-۶ شبیه سازی و نحوه انجام محاسبات ..... ۴۸
۲-۷ خواص مورد بررسی ..... ۵۲
۲-۷-۱ ساختار نواری و چگالی حالتها ..... ۵۲
۲-۷-۲ خواص اپتیکی ..... ۵۳
۲-۷-۲-۱ تابع دی الکتریک ..... ۵۳
۲-۷-۲-۲ تابع اتلاف انرژی ..... ۵۴
۲-۷-۲-۳ ضرایب شکست n و خاموشی k ..... ۵۴
۲-۷-۲-۴ بازتابندگی اپتیکی ..... ۵۵
۲-۷-۳ انرژی تشکیل ساختارها ..... ۵۵

فصل سوم

بررسی خواص الکتریکی و اپتیکی ساختارها ..... ۵۶
۳-۱ مقدمه ..... ۵۷
۳-۲ خواص الکترونی ..... ۵۷
۳-۲-۱ ساختار نواری و چگالی حالتها ..... ۵۷
۳-۲-۲ چگالی الکترونی ..... ۶۳
۳-۳ خواص اپتیکی ..... ۶۷
۳-۳-۱ تابع اتلاف انرژی ..... ۶۷
۳-۳-۲ تابع دی الکتریک حقیقی ..... ۷۱
۳-۳-۳ ضرایب شکست n و خاموشی k ..... ۷۳
۳-۳-۴ بازتابندگی اپتیکی ..... ۷۶
۳-۴ انرژی تشکیل ساختارها ..... ۷۸

نتیجه گیری ..... ۷۹

پیوست

آشنایی با برنامه کامپیوتری Quantum ESPRESSO ..... ۸۰
۱- مقدمه ..... ۸۱
۲- توانایی‌های کد PWscf ..... ۸۱
۳- برنامه‌های موجود در کد PWscf ..... ۸۲
۴- حل خود سازگار سیستم در کد PWscf ..... ۸۴
۴-۱ قسمت CONTROL ..... ۸۵

(الف) پارامترهای ضروری ..... ۸۵
(ب) پارامترهای غیر ضروری ..... ۸۶
۴-۲ قسمت system ..... ۸۶
۴-۳ قسمت ELECTRONS ..... ۸۹
۴-۴ قسمت ATOMIC-SPECIES ..... ۹۰
۴-۵ قسمت ATOMIC-POSITIONS ..... ۹۰
۴-۶ قسمت K_POINT ..... ۹۰

پیشنهادهایی برای ادامه کار ..... ۹۲
مراجع ..... ۹۳

فصل اول

شکل ۱-۱ تفکیک الکترون های اتم Si، به الکترون های مغزه و ظرفیت. ..... ۳۱
شکل۱-۲ نمایشی از شبه پتانسیل و شبه تابع موج در مقایسه با پتانسیل و تابع موج اصلی الکترون ها. . ۳۲
شکل ۱-۳ چند تابع موج الکترونی و شبه تابع موج اتم Si که با روش نرم پایسته به دست آمده است.. ۳۷
شکل۱-۴ تابع موج و شبه تابع موج نرم پایسته (چپ) و فوق نرم (راست) اتم Cu برای اندازه حرکت های زاویه ای $l = 0s, 1p, 2(d)$ ..... ۳۹

فصل دوم

شکل۲- ۱ گرافدین ..... ۴۴
شکل۲- ۲ گرافین از نظر شکل لبه ..... ۴۵
شکل۲- ۳ نانو ریبان‌های گرافین از نظر عرض ..... ۴۶
شکل۲- ۴ سه نوع کربن متفاوت در ساختار نانو ریبان زیکزاک گرافین ..... ۴۷
شکل۲- ۵ شبکه وارون ORTORHOMBIC ..... ۴۸
شکل۲- ۶ سلول واحد گرافین زیکزاک و آرمچیر..... ۴۹
شکل۲- ۷ نانو ساختارهای زیکزاک و آرمچیر گرافین، بعد از جایگزیدگی ناخالصی..... ۵۰
شکل۲- ۸ نامگذاری پیوندهای متفاوت گرافین زیکزاک و آرمچیر..... ۵۱

فصل سوم

شکل ۳- ۱ چگالی حالتها و ساختار نواری نانو ریبان زیکزاک گرافین ..... ۶۰
شکل ۳- ۲ چگالی حالتها و ساختار نواری نانو ریبان آرمچیر گرافین..... ۶۱
شکل ۳- ۳ مقایسه چگالی های الکترونی گرافین زیکزاک و آرمچیر ..... ۶۳
شکل ۳- ۴ مقایسه چگالی های الکترونی گرافین زیکزاک برای حالت های مختلف جایگزیدگی..... ۶۴
شکل ۳- ۵ مقایسه چگالی های الکترونی گرافین آرمچیر برای حالت های مختلف جایگزیدگی ..... ۶۵
شکل ۳- ۶ تابع اتلاف انرژی گرافین زیکزاک و آرمچیر ..... ۶۷

شکل ۳- ۷ تابع اتلاف انرژی برای ساختارهای زیکزاک با وجود ناخالصی ..... ۶۹
شکل ۳- ۸ تابع اتلاف انرژی برای ساختارهای آرمچیر با وجود ناخالصی..... ۷۰
شکل ۳- ۹ تابع دی الکتریک حقیقی و مقایسه آن برای جایگاه $sp$ و $sp2$ ..... ۷۲
شکل ۳- ۱۰ ضریب شکست گرافین زیکزاک و آرمچیر، مقایسه جایگاه $sp$ و $sp2$ ..... ۷۴
شکل ۳- ۱۱ ضریب خاموشی گرافین زیکزاک و آرمچیر، مقایسه جایگاه $sp$ و $sp2$ ..... ۷۵
شکل ۳- ۱۲ بازتابندگی گرافین زیکزاک و آرمچیر، مقایسه جایگاه $sp$ و $sp2$ ..... ۷۷

فصل دوم

جدول۲- ۱ میزان تغییرات طول پیوندهای اطراف اتم جایگزیده نانو ریبان گرافین ..... ۵۲

فصل سوم

جدول ۳- ۱ مقادیر گاف انرژی نانو ساختارهای گرافین ..... ۵۹
جدول ۳- ۲: انرژی فرمی نانو ساختارهای گرافین ..... ۶۲
جدول ۳- ۳: بیشترین مقدار چگالی الکترونی نانو ساختارهای گرافین ..... ۶۳
جدول ۳- ۴ انرژی فرکانس پلاسمونی نانو ساختارهای گرافین ..... ۶۸
جدول ۳- ۵ ثابت دی الکتریک نانو ساختارهای گرافین ..... ۷۱
جدول ۳- ۶ ضریب شکست نانو ساختارهای گرافین ..... ۷۳
جدول ۳-۷ انرژی تشکیل نانو ساختارهای گرافین با اتم ناخالصی جایگزیده ..... ۷۸

**مقدمه:**

با پیشرفت علوم و تکنولوژی، بشر به ساخت دستگاه‌ها و قطعات با ابعاد کمتر و کارایی بالاتر روی آورد و بنا بر این توجه جوامع علمی و اقتصادی جهان بر شاخه‌ای از علم که به فن آوری نانو[۱] معروف است، جلب شد. در این بین نانو ساختارهای کربنی به دلیل خواص منحصر به فرد الکتریکی و مکانیکی که از خود نشان داده اند توجه بسیاری از دانشمندان را به خود جلب کردند. در قدم گذاشتن بشر به عصر نوین دیجیتال و فیزیک و الکترونیک نوین، نیمرساناها[۲] نقش اساسی ایفا کرده‌اند. این مواد در درون دستگاه‌های گوناگونی یافت می شوند. اساس ساخت پردازشگرها و ریز پردازنده‌ها و دستگاه‌هایی که به نحوی اطلاعات و عملیاتی را پردازش می‌کنند، نیمه رساناست. همه دستگاه‌های پخش کننده، کامپیوترها، صفحات نوری و دستگاه‌های عکسبرداری از نیمه رساناها استفاده می‌کنند.

آزمایش‌های گوناگون نشان می‌دهد که مقدار جریان الکتریکی در نیمه‌رسانا بیشتر از آن است که فقط با عبور الکترون‌ها ایجاد شده باشد. این پدیده ایده‌ی وجود ذرات دیگری را به عنوان حامل بار الکتریکی مطرح می‌کند. به عبارت دیگر ذراتی با بار مثبت نیز در رسانایی الکتریکی نیمه رساناها نقش دارند.

جفت الکترون‌های موجود در پیوندهای بین اتم‌ها، خواص رسانایی متفاوتی برای ساختارها ایجاد می‌کنند. جفت الکترون پیوندی، جفت الکترونی است که در تشکیل پیوند بین دو اتم شرکت دارد و از به اشتراک گذاشتن الکترون‌های دو اتم حاصل می‌شود. چون جفت الکترون‌های پیوندی مستقیما تحت تاثیر دو هسته قرار می‌گیرند، تحرک کمتری دارند. جفت الکترون آزاد (ناپیوندی) در واقع الکترن‌هایی از لایه والانس هستند که در پیوند کووالانسی شرکت نکرده‌اند و بصورت جفت الکترون تنها روی اتم قرار گرفته‌اند و چون

---

[۱] *Nanotechnology*
[۲] *semiconductor*

جفت الکترون‌های ناپیوندی بیشتر تحت تاثیر یک هسته قرار می‌گیرند، تحرک بیشتری نسبت به جفت الکترون‌های پیوندی دارند و فضای بزرگتری را اشغال می‌کنند.

نانو ساختارهای کربنی به دلیل قابلیت رسانش ویژه جای مواد سیلیکونی را در تراشه‌های نسل آینده خواهند گرفت. در راستای این تحقیقات ما به بررسی خواص الکتریکی و اپتیکی نانوریبان‌های[۳] کربنی گرافین[۴] پرداخته‌ایم. این کار با استفاده از نرم افزار شبیه سازی کوانتوم اسپرسو[۵] انجام یافته است. این صفحات از اتم های کربن شکل می‌یابند. محاسبات برای عرض مشخصی از حالت زیکزاک و آرمچیر این نانو ریبان‌ها انجام گرفته است و نتایج حاکی از آن است که ساختار مورد بررسی نیمرسانا است.

به نیمه‌رسانایی که ناخالصی نداشته باشد، نیمه‌رسانای ذاتی می‌گوییم. در نیمه‌رسانای ذاتی تعداد الکترون‌های موجود در نوار رسانش با تعداد حفره‌های موجود در نوار ظرفیت با هم برابرند. با افزایش دما می‌توان تعداد حاملان بار الکتریکی و در نتیجه رسانایی الکتریکی را در مواد نیمه‌رسانا افزایش داد. علاوه بر افزایش دما، با اضافه کردن مقادیر کمی ناخالصی به ماده‌ی نیمه‌رسانا نیز می‌توان تعداد حاملان بار الکتریکی را به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش داد. منظور از ناخالصی، اتم‌های غیرهم‌جنس با اتم‌های نیمه‌رسانا است.

بنابراین ما در شبیه سازی‌های انجام شده عنصر ناخالصی به نیمرسانا اضافه کرده‌ایم تا تاثیر آن را بر روی تغییرات خواص الکترونیکی و اپتیکی بررسی کنیم. اتم ناخالصی که از جنس نیتروژن یا بور بوده را با نسبت یک اتم به ازای نود و شش اتم وارد ساختار نموده ایم.

---

[۳] *Nano ribbons*
[۴] *Graphyne*
[۵] *Quntum espresso*

این پایان نامه در سه فصل تهیه شده است که فصل اول آن تئوری تابعی چگالی[۶] را بیان می‌کند. در فصل دوم به بررسی ساختار نانو ریبان مورد نظر و چگونگی شبیه سازی ساختارها و جایگزیدگی ناخالصی و نحوه محاسبات پرداخته شده‌است. در فصل انتهایی، بیان نتایج بدست آمده و تحلیل و بررسی آنها و مقایسه خصوصیات الکترواپتیکی بین ساختارهای شکل گرفته انجام یافته. دستورهای اجرایی برنامه محاسباتی کوانتوم اسپرسو نیز در انتها بصورت پیوست آورده شده‌اند.

[۶] *local density approximation*

# فصل اول
# تئوری تابعی چگالی (DFT)