بسم الله الرحمن الرحيم
بسم الله الرحمن الرحيم
بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه آزاد اسلامی
واحد تهران مرکزی
دانشکده علوم پایه ، گروه فیزیک

پایان‌نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد (M.Sc)

گرایش: حالت جامد

عنوان :

بررسی پایداری و خواص الکترونی فولرین گونه‌های کربید سیلیکون به روش نظریه تابعی چگالی

استاد راهنما :

دکتر ضرغام باقری

استاد مشاور :

دکتر جواد بهشتیان

پژوهشگر :

طاهره غیاثی‌نژاد

زمستان ۱۳۹۰

تقدیم به:

پدر و مادر عزیز و بزرگوارم

تشکر و قدردانی:

خدای یگانه را شاکرم که مرا به مسیر آموختن رهنمون ساخت تا با ذره‌ای از عظمت بی پایانش آشنا شوم که بی‌شک آنچه از قلم حقیر در نگارش این پایان‌نامه تراویده است قطره‌ای از دریای بیکران علم و دانش است و نه چیز دیگر.

بر خود واجب می‌دانم مراتب سپاس و قدردانی خویش را نثار آنانی کنم که از هیچگونه راهنمایی‌های عالمانه و دقیق در پر بارکردن محتوای این پژوهش دریغ نورزیدند. امید است که توانایی پاس داشتن حرمت راهبران قلم خویش جناب آقای دکتر ضرغام باقری و دکتر جواد بهشتیان که با راهنمایی‌های ارزشمندشان بیشترین سهم را در تهیه این پایان نامه به عهده داشتند را داشته باشم.

همچنین از راهنمایی‌های جناب آقای دکتر ابوالحسنی و جناب آقای حقیقی مسئولین محترم مرکز ابرمحاسباتی دانشگاه علوم تحقیقات که محاسبات مربوط به این پژوهش با استفاده از سنتر مرکزی این مؤسسه انجام شده است کمال تشکر دارم.

در پایان از همسر عزیز و خواهر مهربانم که در تهیه و تنظیم پایان نامه دلسوزانه مرا مساعدت نموده‌اند نهایت قدردانی و سپاس را دارم. ان شاء الله که خداوند متعال یاری‌کننده این عزیزان در تمام مراحل زندگیشان باشد.

طاهره غیاثی‌نژاد

بسمه تعالی

تعهد نامه اصالت پایان نامه کارشناسی ارشد

اینجانب طاهره غیاثی نژاد دانشجوی کارشناسی ارشد رشته فیزیک حالت جامد با شماره دانشجویی ۸۸۰۶۵۱۱۵۸۰۰ اعلام می نمایم که کلیه مطالب مندرج در این پایان نامه با عنوان **بررسی پایداری و خواص الکترونی فولرین گونه‌های کربید سیلیکون به روش نظریه تابعی چگالی** حاصل کارپژوهشی خود بوده و چنانچه دستاوردهای پژوهشی دیگران را مورد استفاده قرار داده باشم ، طبق ضوابط و رویه‌های جاری ، آنرا ارجاع داده و در فهرست منابع و مآخذ ذکر نموده ام .علاوه برآنتاکید می نمایم که این پایان نامه قبلا برای احراز هیچ مدرک هم‌سطح ، پایین‌تر یا بالاتر ارائه نشده و چنانچه در هر زمان خلاف آن ثابت شود ، بدینوسیله متعهد می شوم ، در صورت ابطال مدرک تحصیلی‌ام توسط دانشگاه ، بدون کوچکترین اعتراض آنرا بپذیرم.

تاریخ و امضاء: بهمن ۱۳۹۰

بسمه تعالی

در تاریخ :۹۰/۱۱/۲۵

دانشجوی کارشناسی ارشد آقای / خانم طاهره غیاثی نژاد از پایان نامه خود دفاع نموده و

با نمره ۱۹ بحروف نوزده و با درجه عالی مورد

تصویب قرار گرفت .

امضاء استاد راهنما

بسمه تعالی

دانشکده .....

****

(این چکیده به منظور چاپ در پژوهش‌نامه دانشگاه تهیه شده است)

نام واحد دانشگاهی : تهران مرکزی کد واحد :۱۰۱	کد شناسایی پایان نامه:۱۰۱۳۰۲۱۱۹۰۱۰۱۵
عنوان پایان نامه:بررسی پایداری وخواص الکترونی فولرین گونه های کربید سیلیکون به روش نظریه تابعی چگالی	
نام و نام خانوادگی ئانشجو:طاهره غیاثی نژاد شماره دانشجویی:۸۸۰۶۵۱۱۵۸۰۰ رشته تحصیلی:فیزیک	تاریخ شروع پایان نامه:نیمسال دوم ۸۹-۹۰ تاریخ اتمام پایان نامه:۹۰/۱۱/۲۵
استاد / استادان راهنما:دکتر ضرغام باقری استاد / استادان مشاور:دکتر جواد بهشتیان	
آدرس و شماره تلفن:	

چکیده پایان نامه(شامل خلاصه، اهداف، روش‌های اجرا و نتایج به دست آمده) :

با کشف فولرین (C60) و سایر آلوتروپهای کربن مانند نانولوله‌های کربنی و گرافین و خواص ویژه آنها تمایل بسیاری برای ایجاد خواص دلخواه بوجود آمد. با جایگزینی و آلایش عناصر دیگر در این ساختارها می-توان ویژگی‌های مورد نظر را در آنها به وجود آورده و خواص فیزیکی، الکترونی و شیمیایی آنها را بسته به کاربردهای ویژه، مهندسی کرد. از این رو، سیلیکون (Si) به عنوان یکی از عناصر پرکاربرد در حوزه‌های گوناگون علمی و صنعتی مورد توجه قرار گرفت. در سالهای اخیر مطالعات نظری و تجربی گوناگونی در این حوزه انجام شده است. خوشه‌های کوچک SiC و خوشه‌های بزرگتر قفسی‌شکل یا فولرین‌گونه (Fullerene-Like) و نانولوله‌های این ترکیب نیز مورد کنکاش قرار گرفت.

در این پژوهش پایداری فولرین‌های کاربید سیلیسیم مورد مطالعه قرار گرفت. همچنین برخی از این فولرین‌ها تحت تاثیر ناخالصی‌های مختلف قرار داده شد و اثر آنها بر پایداری و ساختار الکترونی بررسی شد. برای بررسی پایداری فولرین ها، مقدار انرژی پیوندی هر اتم برای هر ساختار را با تغییر تعداد اتمهای Si و C محاسبه و براساس تقارن موجود در ساختار، ساختار بهینه سازی شده برای هر ترکیب بدست آمد. سپس خواص الکترونی مانند گاف انرژی نواری و چگالی حالت‌های انرژی برای ساختارهای بهینه سازی شده با استفاده از روش نظریه تابعی چگالی محاسبه گردید. نتایج حاصله نشان می‌دهد که فولرین‌های با تعداد مساوی اتم‌های سیلیسیم و کربن از پایداری بیشتری نسبت به سایر فولرین‌ها برخوردارند و همچنین با افزایش تعداد اتم‌ها و افزایش اندازه‌ی فولرین به میزان پایداری آنها افزوده می‌شود.

نظر استاد راهنما برای چاپ درپژوهش‌نامه دانشگاه مناسب است تاریخ و امضا :

مناسب نیست

فهرست مطالب

عنوان | صفحه

چکیده ۱

مقدمه ۲

فصل اول : روش‌های محاسباتی

۱-۱ روش‌های از اساس ۵

۱-۲ نظریه هارتری- فوک ۷

۱-۳ نظریه مولر- پلیست ۷

۱-٤ نظریه تابعی چگالی ۹

۱-۵ مدل‌هایی از توابع وابسته و متغیر ۱۷

۱-۵-۱ تخمین چگالی موضعی ۱۷

۱-۵-۲ تخمین گرادیان عمومی ۲۰

۱-۵-۳ تخمین چگالی هیبریدی ۲۱

۱-٦ روش B3LYP ۲۲

۱-۷ مجموعه‌های پایه ۲۳

۱-۷-۱ مجموعه پایه‌های منشعب ۲۳

۱-۷-۲ توابع پایه قطبشی ۲٤

۱-۷-۳ توابع پایه diffuse ۲۵

۱-۷-٤ مجموعه پایه double zeta ۲۵

۱-۷-۵ مجموعه پایه triple zeta ۲۵

فصل دوم :خوشه‌های سیلیکون و کربن

مقدمه ۲۸

۲-۱ خوشه‌ها ۲۹

۲-۲ فولرین‌ها ۳۰
۲-۳ راه‌های تغلیظ فولرین‌ها ۳۳
۲-٤ فولرین‌های ایندوهیدال ۳٤
۲-٤-۱ نمایش فولرین‌های ایندوهیدرال ۳٤
۲-٤-۲ فرم‌های فولرین‌های ایندوهیدرال ۳٤
۲-٤-۳ کاربردهای ایندوهیدرال فولرین‌ها ۳۵
۲-۵ فولرین C_{20} ۳٦
۲-٦ خوشه‌های کربن ۳۹
۲-۷ خوشه‌های سیلیکون ٤٦

فصل سوم :کربید سیلیکون

مقدمه ۵۵
۳-۱ خوشه SiC ۵۷
۳-۲ خوشه SiC_2 ..... ۵۸
۳-۳ خوشه SiC_3 ..... ۵۹
۳-٤ خوشه SiC_4 ..... ٦۰
۳-۵ خوشه Si_2C ٦۱
۳-٦ خوشه Si_2C_2 ..... ٦۲
۳-۷ خوشه Si_2C_3 ..... ٦۳
۳-۸ خوشه‌های Si_3C_2 و Si_4C ٦٤
۳-۹ توزیع بار ٦٦

۳-۱۰ فولرین‌های کربید سیلیکون ٦٩
۳-۱۱ گوسین 03w ۸۱
۳-۱۱-۱ الگوریتم‌های بنیادی ۸۱
۳-۱۱-۲ انرژی‌ها ۸۲
۳-۱۱-۳ ضریب زاویه‌ها و هندسه‌های بهینه سازی شده ۸٤
۳-۱۱-٤ فرکانس‌ها و مشتقات دوم ۸۵
۳-۱۱-۵ خواص مولکولی ۸٦
۳-۱۱-٦ مدل‌های حلال ۸۷

فصل چهارم :بررسی پایداری فولرین‌های Si_nC_m

مقدمه ۹۰
C_8Si_{12} ۹۲
$C_{12}Si_8$ ۹٤
$Si_{16}C_{16}$ ۹۵
$C_{12}Si_{20}$ ۹۷
$Si_{24}C_{24}$ ۹۸
$Si_{28}C_{20}$ ۱۰۰
$Si_{32}C_{32}$ ۱۰۲
$Si_{36}C_{36}$ ۱۰٤
$Si_{40}C_{40}$ ۱۰۵
$Si_{48}C_{48}$ ۱۰۷

$Si_{64}C_{64}$ ۱۰۸

نتیجه گیری ۱۱۰

فصل پنجم : بررسی اثر ناخالصی بر پایداری فولرین $Si_{16}C_{16}$

مقدمه ۱۱۳

$Si_{16}C_{15}B$ ۱۱٤

$Si_{15}C_{16}B$ ۱۱٥

$Si_{16}C_{15}N$ ۱۱۷

$Si_{15}C_{16}N$ ۱۱۸

$Si_{16}C_{15}Mg$ ۱۲۰

$Si_{15}C_{16}Mg$ ۱۲۱

$Si_{16}C_{15}Al$ ۱۲۳

$Si_{15}C_{16}Al$ ۱۲٤

$Si_{16}C_{15}Ni$ ۱۲٥

$Si_{15}C_{16}Ni$ ۱۲۷

$Si_{15}C_{16}Fe$ ۱۲۹

$Si_{16}C_{15}Fe$ ۱۳۰

نتیجه‌گیری ۱۳۱

$C_{23}Si_{24}Al$ ۱۳٤

$C_{24}Si_{23}Al$ ۱۳٥

$C_{23}Si_{24}N$ ۱۳٦

$C_{24}Si_{23}Mg$ ۱۳۸

نتیجه گیری کلی ۱٤۱

پیشنهادات ۱٤۱

فهرست منابع و ماخذ ۱٤۳

فهرست جدول‌ها

عنوان | صفحه

۲-۱ انرژی برای خوشه‌های C_2، C_2^- و C_2^+ ٤٥

۲-۲ انرژی برای خوشه‌های C_3، C_3^- و C_3^+ ٤٥

۲-۳ انرژی برای خوشه‌های C_4، C_4^- و C_4^+ ٤٦

۲-٤ انرژی برای خوشه‌های Si_2، Si_2^- و Si_2^+ ٥٢

۲-٥ انرژی برای خوشه‌های Si_3، Si_3^- و Si_3^+ ٥٢

۲-٦ انرژی برای خوشه‌های Si_4، Si_4^- و Si_4^+ ٥٣

۳-۱ توزیع بار Mulliken برای حالت پایه خوشه‌های Si_mC_n ٦٧

۳-۲ مقایسه انرژی بستگی TB با DFT ٧١

۳-۳ مقایسه انرژی پیوستگی و پهنای انرژی برای خوشه‌های بهینه سازی شده $Si_{20}C_n$ ٧٩

٤-۱ نمایش تغییرات انرژی پیوند و گاف انرژی برای فولرین‌های $(SiC)_n$ ١١٠

٥-۱ تغییرات انرژی پیوند و شکاف انرژی در اثر ناخالصی های مختلف روی $Si_{16}C_{16}$ ١٣٢

٥-۲ تغییرات طول و زاویه پیوند تحت تاثیر ناخالصی روی فولرین $Si_{16}C_{16}$ ١٣٣

٥-۳ تغییرات انرژی پیوند و شکاف انرژی تحت تاثیر ناخالصی روی فولرین $Si_{24}C_{24}$ ١٣٩

٥-٤ تغییرات طول و زاویه پیوند تحت تاثیر ناخالصی های مختلف برروی فولرین $Si_{24}C_{24}$ ١٤٠

فهرست نمودارها

عنوان | صفحه

۳-۱ انرژی بستگی هر اتم بر حسب شمار اتم‌ها در خوشه ٦٨

۳-۲ انرژی تفکیک پیوند بر حسب شمار اتم‌ها در خوشه ٦٨

۳-۳ پهنای HOMO-LUMO بر حسب شمار اتم‌ها در خوشه ٦٩

۳-٤ پتانسیل یونیزاسیون و الکترون‌خواهی عمودی بر حسب شمار اتم‌ها در خوشه ٦٩

۳-٥ مقایسه انرژی‌های TB بدست آمده توسط وانگ و همکارانش ٧٢

۳-٦ پهنای شکاف انرژی، VIP، VEA و BE هر اتم بر حسب شمار اتم‌های کربن در Si_{20} ٨٠

٤-١ طیف چگالی حالت‌ها(DOS) برای فولرین C_8Si_{12} ٩٣

٤-٢ طیف چگالی حالت(DOS) برای فولرین $C_{12}Si_8$ ٩٥

٤-٣ طیف چگالی حالت(DOS) برای فولرین $Si_{16}C_{16}$ ٩٦

٤-٤ طیف چگالی حالت برای ساختار فولرینی $C_{12}Si_{20}$ ٩٨

٤-٥ طیف چگالی حالت(DOS) برای فولرین $Si_{24}C_{24}$ ٩٩

٤-٦ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{28}C_{20}$ ١٠١

٤-٧ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{32}C_{32}$ ١٠٣

٤-٨ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{36}C_{36}$ ١٠٥

٤-٩ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{40}C_{40}$ ١٠٦

٤-١٠ طیف چگالی حالت‌های فولرین $Si_{48}C_{48}$ ١٠٨

٤-١١ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{64}C_{64}$ ١٠٩

٤-١٢ تغییرات انرژی پیوند بر حسب تعداد اتم‌ها در فولرین‌های $(SiC)_n$ ١١١

٤-١٣ تغییرات گاف انرژی بر حسب تعداد اتم‌ها در فولرین‌های $(SiC)_n$ ١١١

۵-۱ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{16}C_{15}B$ ۱۱۵
۵-۲ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{15}C_{16}B$ ۱۱۶
۵-۳ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{16}C_{15}N$ ۱۱۸
۵-٤ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{15}C_{16}N$ ۱۱۹
۵-۵ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{16}C_{15}Mg$ ۱۲۱
۵-٦ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{15}C_{16}Mg$ ۱۲۲
۵-۷ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{16}C_{15}Al$ ۱۲٤
۵-۸ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{15}C_{16}Al$ ۱۲۵
۵-۹ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{16}C_{15}Ni$ ۱۲۷
۵-۱۰ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{15}C_{16}Ni$ ۱۲۸
۵-۱۱ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{15}C_{16}Fe$ ۱۳۰
۵-۱۲ طیف چگالی حالت فولرین $Si_{16}C_{15}Fe$ ۱۳۱
۵-۱۳ نمودار طیف چگالی حالت فولرین $C_{23}Si_{24}Al$ ۱۳۵
۵-۱٤ طیف چگالی حالت فولرین $C_{24}Si_{23}Al$ ۱۳٦
۵-۱۵ طیف چگالی حالت فولرین $C_{23}Si_{24}N$ ۱۳۷
۵-۱٦ طیف چگالی حالت فولرین $C_{24}Si_{23}Mg$ ۱۳۹

فهرست شکل‌ها

عنوان | صفحه

۱-۱ شمایی از یک اوربیتال گوسین و اسلتر ٦
۱-۲ شکل سه روش تغلیظ فولرین‌ها ۳۳
۲-۲ ساختار حلقه‌ای،کاسه‌ای شکل و فولرینی از خوشه طبیعی C_{20} ۳۸
۲-۳ ساختار خوشه‌های C_2، C_2^- و C_2^+ ٤٤
۲-٤ شکل ساختاری خوشه‌های C_3، C_3^- و C_3^+ ٤٤
۲-٥ ساختار خوشه‌های C_4، C_4^- و C_4^+ ٤٤
۲-٦ ساختار خوشه‌های Si_2، Si_2^- و Si_2^+ ٥١
۲-۷ ساختار خوشه‌های Si_3، Si_3^- و Si_3^+ ٥١
۲-۸ ساختار خوشه‌های Si_4، Si_4^- و Si_4^+ ٥۲
۳-۱ خوشه طبیعی SiC ٥۸
۳-۲ خوشه‌های طبیعی SiC_2 ..... ٥۹
۳-۳ خوشه‌های طبیعی SiC_3 ..... ٦۰
۳-٤ خوشه‌های طبیعی SiC_4 ..... ٦۱
۳-٥ خوشه‌های طبیعی Si_2C ٦۲
۳-٦ خوشه‌های طبیعی Si_2C_2 ..... ٦۳
۳-۷ خوشه‌های طبیعی Si_2C_3 ..... ٦٤
۳-۸ خوشه‌های طبیعی Si_3C_2 ..... ٦٥
۳-۹ خوشه‌های طبیعی Si_4C ٦٥

۳–۱۰ نمایش قفس‌های $(SiC)_n$ ۷۲

۳–۱۱ ساختارهای بهینه‌شده خوشه‌های $Si_{20}C_n$ ۷۷

٤–۱ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین C_8Si_{12} ۹۲

٤–۲ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $C_{12}Si_8$ ۹٤

٤–۳ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{16}C_{16}$ ۹۵

٤–٤ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $C_{12}Si_{20}$ ۹۷

٤–۵ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{24}C_{24}$ ۹۸

٤–٦ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{28}C_{20}$ ۱۰۰

٤–۷ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{32}C_{32}$ ۱۰۲

٤–۸ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{36}C_{36}$ ۱۰٤

٤–۹ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{40}C_{40}$ ۵۸

٤–۱۰ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{48}C_{48}$ ۱۰۷

٤–۱۱ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{64}C_{64}$ ۱۰۸

۵–۱ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{16}C_{15}B$ ۱۱٤

۵–۲ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{15}C_{16}B$ ۱۱۵

۵–۳ ساختار بهینه‌سازی شده‌ی فولرن $Si_{16}C_{15}N$ ۱۱۷

۵–٤ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{15}C_{16}N$ ۱۱۸

۵–۵ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{16}C_{15}Mg$ ۱۲۰

۵–٦ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{15}C_{16}Mg$ ۱۲۱

۵–۷ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{16}C_{15}Al$ ۱۲۳

۵–۸ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{16}C_{15}Al$ ۱۲٤
۵–۹ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{16}C_{15}Ni$ ۱۲٦
۵–۱۰ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{15}C_{16}Ni$ ۱۲۷
۵–۱۱ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{15}C_{16}Fe$ ۱۲۹
۵–۱۲ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $Si_{16}C_{15}Fe$ ۱۳۰
۵–۱۳ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $C_{23}Si_{24}Al$ ۱۳٤
۵–۱٤ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $C_{24}Si_{23}Al$ ۱۳۵
۵–۱۵ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $C_{23}Si_{24}N$ ۱۳٦
۵–۱٦ ساختار بهینه‌سازی شده فولرین $C_{24}Si_{23}Mg$ ۱۳۸

چکیده

با کشف فولرین (C60) و سایر آلوتروپهای کربن مانند نانولوله‌های کربنی و گرافین و خواص ویژه آنها تمایل بسیاری برای ایجاد خواص دلخواه بوجود آمد. با جایگزینی و آلایش عناصر دیگر در این ساختارها می‌توان ویژگی‌های مورد نظر را در آنها به وجود آورده و خواص فیزیکی، الکترونی و شیمیایی آنها را بسته به کاربردهای ویژه، مهندسی کرد. از این رو، سیلیکون (Si) به عنوان یکی از عناصر پرکاربرد در حوزه‌های گوناگون علمی و صنعتی مورد توجه قرار گرفت. در سالهای اخیر مطالعات نظری و تجربی گوناگونی در این حوزه انجام شده است. خوشه‌های کوچک SiC و خوشه‌های بزرگتر قفسی‌شکل یا فولرین‌گونه (Fullerene-Like) و نانولوله‌های این ترکیب نیز مورد کنکاش قرار گرفت.

در این پژوهش پایداری فولرین‌های کاربید سیلیسیم مورد مطالعه قرار گرفت. همچنین برخی از این فولرین‌ها تحت تاثیر ناخالصی‌های مختلف قرار داده شد و اثر آنها بر پایداری و ساختار الکترونی بررسی شد. برای بررسی پایداری فولرین ها، مقدار انرژی پیوندی هر اتم برای هر ساختار را با تغییر تعداد اتمهای Si و C محاسبه و براساس تقارن موجود در ساختار، ساختار بهینه سازی شده برای هر ترکیب بدست آمد. سپس خواص الکترونی مانند گاف انرژی نواری و چگالی حالت‌های انرژی برای ساختارهای بهینه سازی شده با استفاده از روش نظریه تابعی چگالی محاسبه گردید. نتایج حاصله نشان می‌دهد که فولرین‌های با تعداد مساوی اتم‌های سیلیسیم و کربن از پایداری بیشتری نسبت به سایر فولرین‌ها برخوردارند و همچنین با افزایش تعداد اتم‌ها و افزایش اندازه‌ی فولرین به میزان پایداری آنها افزوده می‌شود.

کلمات کلیدی: فولرین، نظریه تابعی چگالی، چگالی حالت‌های انرژی، انرژی پیوند و گشتاور دوقطبی

مقدمه

خوشه‌های نیمه‌هادی هم به صورت تجربی و هم تئوری از اهمیت زیادی برخوردار هستند. دستکاری خواص آنها به وسیله تغییر اندازه، شکل و ترکیب آنها، قابلیت انعطاف‌پذیری و دیگر خواص مورد نظر را می‌تواند بدهد. در این بین سیلیکون مهمترین و گسترده‌ترین ماده استفاده شده برای کاربردهای صنعتی است. کربن و سیلیکون متعلق به یک ستون از جدول تناوبی هستند و به شکل قابل توجه‌ای خواص پایه‌ی فیزیکی و شیمیایی متفاوت دارند. خوشه‌های هر دوی این مواد در مراحل سوخت و پژوهش کاتالیزی بکار می‌روند.

خوشه‌های کربید سیلیکون به دلیل اینکه پتانسیل قابل استفاده‌ای در نانوعلوم و نانوتکنولوژی برای توسعه مواد جدید دارند و از آنجا که مطالعه خواص آنها به شناختن خوشه‌های دیگر اتمی منجر می شود و همچنین به علت پایداری فوق‌العاده بالایشان مورد توجه هستند. . ترکیبات کربونیوم(کربید سیلیکون) در پلی‌تایپ‌های متفاوت و در فاز کریستالی در موارد تکنولوژی مهم استفاده می‌شود. ساختارهایی از ایزومرهای $Si_m C_n$ با پایین‌ترین انرژی و با طول پیوند در حد آنگستروم بدست آمده است.

اکثرا هدف شیمی محاسباتی محاسبه اوربیتال‌های مولکولی (MOs) برای مولکول‌های داده شده است. اگر ما بتوانیم برای یک مولکول اوربیتال‌های مولکولی را محاسبه کنیم سپس می‌توانیم چیزهای زیادی در مورد آن مولکول شامل انرژی، چگالی الکترون، پتانسیل الکتروستاتیکی، حالت گذار و فرکانس و غیره را بدست آوریم. محاسبه اوربیتال‌های مولکولی کار ساده‌ای نیست اگر چه کامپیوتر این کار را برای ما انجام دهد ولی به هرحال شیمی‌دانان باید اول یک سری اطلاعات به کامپیوتر