National Congress on
Chemistry and nano-chemistry,
from research to national development

کنگره ملی
شیمی و نانوشیمی، از پژوهش تا توسعه ملی

نمایه سازی پروسدینگ مقالات برتر در پایگاه Thomson Reuters
چاپ ۳۰ مقاله برتر کنگره تحت book chapters در پایگاه Springer

محل برگزاری
۳ شهریور ۱۳۹۶

حضور و مشارکت ۵۰ دانشگاه ،انجمن و رسانه فعال علمی در بزرگترین رویداد داخلی حوزه شیمی و نانو شیمی کشور

Selected papers will be peer-reviewed as accepted book chapters from various themes in one edited volume to be published in one of our Springer Book Series

شماره مجوز ISC
۹۶۱۷۰-۶۰۳۰۱

مطالعه اثر تغییرات طول کایرال نانولوله‌های کربنی زیگزاگ تک جداره بر چگالی حالت‌های آن با استفاده از مدل بستگی قوی

پایزبان، خورشید[۱]؛ اسمعیلی، اصغر[۲]

۱- گروه نانوفناوری، دانشگاه ارومیه، دانشکده علوم ، ارومیه
Email:khorshidpayezban@yahoo.com

۲- گروه فیزیک، دانشگاه ارومیه، دانشکده علوم، ارومیه
Email:a.esmaeili@urmia.ac.ir

خلاصه

ویژگی‌های الکترونی نانو مواد با تغییر هندسه و نوع اتم‌های آنها تغییر می‌کند و بردار کایرالیتی تابع هندسه و ساختار نانولوله‌های کربنی می‌باشد. در این مقاله اثر تغییرات طول کایرالیتی نانولوله‌های کربنی زیگزاگ تک جداره بر چگالی حالت‌های الکترونی آن مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از مدل بستگی قوی در تقریب نزدیک‌ترین همسایه‌ها انجام شدند. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که تغییر طول کایرالیتی باعث تغییر کلی در نقاط تکین، ساختار نواری و گاف انرژی می‌شود..

کلمات کلیدی: مدل بستگی قوی، نانولوله‌های کربنی زیگزاگ تک‌جداره، طول کایرال، سلول واحد، چگالی حالت‌ها

۱. مقدمه

نانولوله‌های کربنی که یک شکل جدید فولرن می باشند در سال ۱۹۹۱ توسط یکی از محققین ژاپنی به نام سویمر ایجیما کشف شد [۱]. در شبکه لانه زنبوری این صفحات که سلول واحد آن شامل دو اتم کربن است هر اتم کربن با پیوند کوالانسی به سه اتم کربن دیگر پیوند می خورد این سه پیوند در یک صفحه قرار دارند و زاویه بین آنها مساوی و برابر ۱۲۰ درجه هستند و اتم کربن چهارم توسط پیوند ضعیف π که عمود بر صفحه گرافن است اتصال یافته است که مسئول حمل الکترون از طریق نانولوله‌ها