

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

فصل اول: معرفی نانو ساختارهای دو بعدی ژرمنن، سیلیکن، گرافن

۲	مقدمه
۴	۱-۱ گرافن
۵	۱-۱-۱ خواص ساختاری گرافن
۶	۱-۱-۲ اوربیتال های اتمی گرافن
۷	۲-۱ سیلیکن
۹	۱-۲-۱ ساختار هندسی سیلیکن
۱۰	۲-۲-۱ اوربیتال های اتمی سیلیکن
۱۱	۳-۱ ژرمنن
۱۱	۱-۳-۱ ساختار هندسی ژرمنن
۱۳	۲-۳-۱ اوربیتال های اتمی ژرمنن

فصل دوم: نانوخازن ها

۱۹	مقدمه
۱۹	۱-۲ خازن
۱۹	۲-۲ انواع خازن
۲۱	۱-۲-۲ انواع ابر خازن ها
۲۲	۳-۲ روش مدل سازی

فصل سوم: نظریه ی تابعی چگالی

۲۸	مقدمه
۲۹	۱-۳ بررسی سیستم های بس ذره ای
۲۹	۱-۱-۳ تقریب بورن - اپنهایمر
۳۰	۲-۱-۳ تقریب هارتری
۳۱	۳-۱-۳ تقریب هارتری-فوک-اسلیتر
۳۲	۲-۳ نظریه تابعی چگالی DFT
۳۲	۳-۳ قضایای هوهنبرگ - کوهن

۳۲	۳-۳-۱ نظریه اول: چگالی الکترونی به عنوان متغیر اصلی
۳۳	۳-۳-۲ نظریه دوم: اصل تغییر
۳۳	۳-۴ معادلات کوهن - شم
۳۷	۳-۵ انواع تقریب‌های انرژی همبستگی = تبادلی
۳۷	۳-۵-۱ تقریب چگالی موضعی (LDA)
۳۷	۳-۵-۲ تقریب چگالی اسپین الکترونی موضعی (LSDA)
۳۸	۳-۵-۳ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)
۳۸	۳-۶ روش‌های حل معادلات کوهن - شم
۳۹	۳-۷ روش شبه پتانسیل
۴۱	۳-۷-۱ انتخاب شعاع مغزه r_c

فصل چهارم: محاسبه ظرفیت نانو خازن‌ها و تحلیل نتایج

۴۶	مقدمه
۴۷	۴-۱ روش انجام محاسبات الکترونی:
۵۰	۴-۲ نتایج و تحلیل نمودارها
۵۰	۴-۲-۱ اختلاف بار صفحات نانو خازن
۵۳	۴-۲-۲ تغییرات بار هر صفحه از نانو خازن با افزایش میدان الکتریکی
۵۴	۴-۲-۳ گشتاور دو قطبی
۵۶	۴-۲-۴ بار ذخیره شده در نانو خازن
۵۷	۴-۲-۵ انرژی ذخیره شده در صفحات نانو خازن
۵۸	۴-۲-۶ ظرفیت نانو خازن
۵۹	۴-۲-۷ چگالی حالت‌های کلی
۶۱	۴-۲-۸ تغییرات گاف انرژی
۶۲	۴-۲-۹ چگالی حالت‌های جزئی
۶۶	نتیجه‌گیری
۶۸	پیشنهادهات: