

Tính toán một số thông số đặc trưng cho tính chất điện tử của vật liệu nano diamondoids (C₁₀H₁₆-C₈₇H₇₆) bằng phương pháp ab initio / Nguyễn Hoàng Tuyền ; Nghd. : TS. Nguyễn Mạnh Tuấn . - H. : ĐHCN, 2010 . - 70 tr. + CD-ROM

Tóm tắt: Nghiên cứu, xác định phiếm hàm trao đổi tương quan và bộ cơ sở phù hợp với các tính toán trên vật liệu nano diamondoids. Nghiên cứu các tính chất bao gồm: cấu trúc, độ rộng vùng cấm, ái lực điện tử, thế ion hóa, và năng lượng exciton của các hạt nano diamondoids dạng cầu, dạng que và các cấu trúc xoắn. Khảo sát ảnh hưởng của các tạp chất lên cấu trúc và các tính chất trên của diamondoids

MỤC LỤC

Trang

Trang phụ bìa	
Lời cảm ơn	
Mục lục	i
Danh mục các ký hiệu, các chữ viết tắt	iii
Danh mục các bảng	iv
Danh mục các hình vẽ, đồ thị	v
MỞ ĐẦU	ì
Chương Ì - TỔNG QUAN	3
1.1 Giới thiệu	3
1.1.1 Fullerenes	4
1.1.2 Ống nano carbon	6

1.1.3	Graphene	7
1.2	Vật liệu Diamondoids	9
1.2.1	Cấu trúc của diamondoids	11
1.2.2	Danh pháp diamondoids	15
1.2.3	Nguồn gốc và một vài phương pháp tổng hợp diamondoids	17
1.2.4	Những ứng dụng và khả năng ứng dụng của diamondoids	19
Chương 2 - PHƯƠNG PHÁP TÍNH TOÁN		24
2.1	Phương pháp ab initio và các phương pháp tính toán khác.....	24
2.2	Lý thuyết phiếm hàm mật độ	26
2.2.1	Phiếm hàm năng lượng Kohn-Sham	27
2.2.2	Phương trình Kohn-Sham	27
2.3	Phiếm hàm trao đổi tương quan	28
2.3.1	Gần đúng mật độ cục bộ LDA	28

2.3.2	Gần đúng hiệu chỉnh gradient và phiếm hàm lai	30
2.4	Bộ cơ sở	30
2.4.1	Bộ cơ sở sóng phẳng	30
2.4.2	Bộ cơ sở cục bộ	31
2.5	Phương pháp tính toán	32
Chương 3 - KẾT QUẢ VÀ BÀN LUẬN		34
3.1	Các hạt nano diamondoids	34
3.1.1	Khảo sát cấu trúc	35
3.1.2	Các mức HOMO, LUMO và độ rộng vùng cấm	39
3.1.3	Ái lực điện tử, thế ion hóa, độ âm điện	45
3.1.4	Giá hạt, năng lượng exciton	50
3.2	Các que nano và tính xoắn của diamondoids	52
3.2.1	Các que nano diamondoids	52
3.2.2	Tính xoắn của diamondoids.....	55
3.3	Ảnh hưởng của tạp chất lên cấu trúc, độ rộng vùng cấm và ái lực điện tử	57
Chương 4 - KẾT LUẬN		62
TÀI LIỆU THAM KHẢO		64
PHỤ LỤC		70