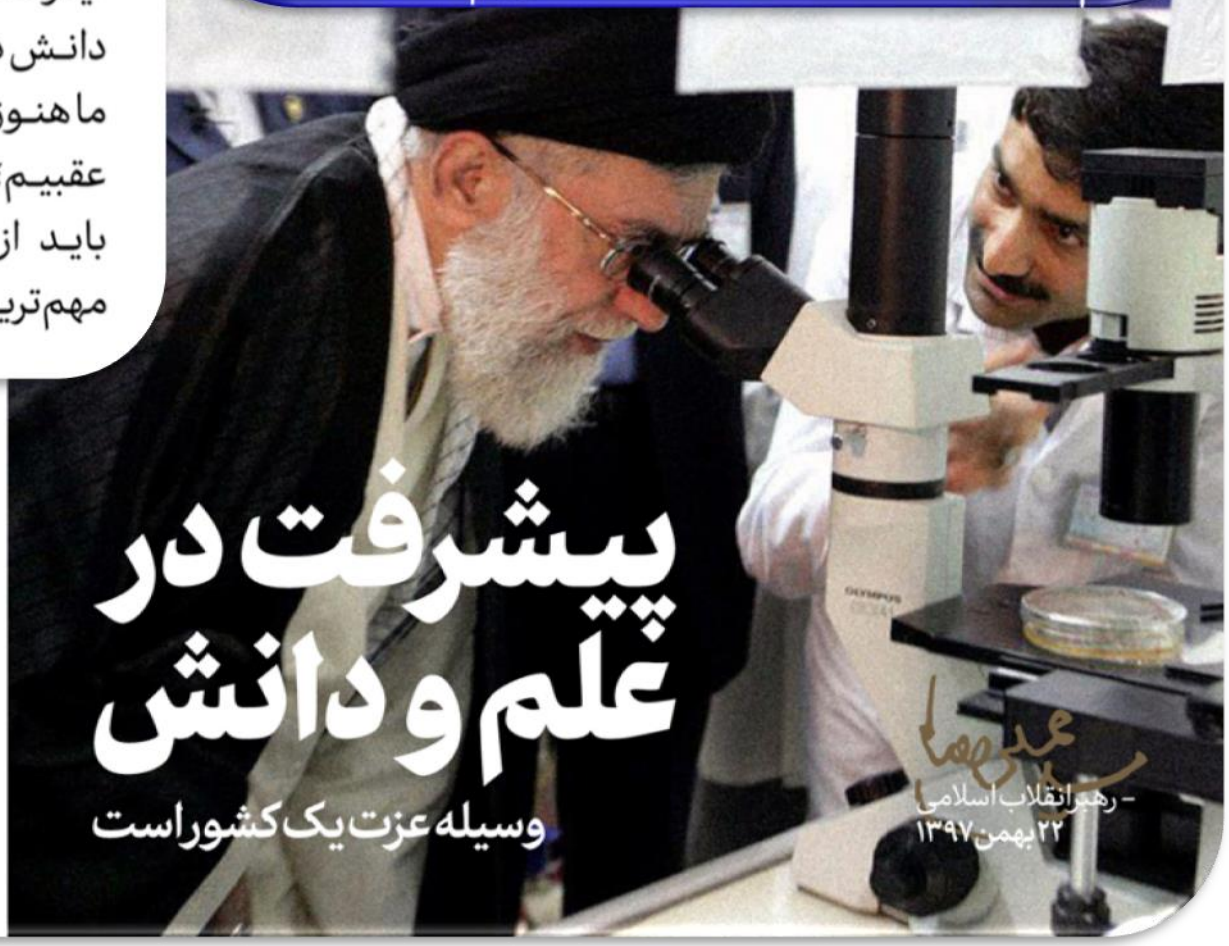
العلم سلطان من وجده صال ومن لم یجده صیل علیه

الامام علی علیه السلام



پیشرفت در علم و دانش

وسیله عزت یک کشور است

محمد رضا

- رهبر انقلاب اسلامی
۲۲ بهمن ۱۳۹۷

دانش، آشکارترین وسیله‌ی عزّت و قدرت یک کشور است. روی دیگر دانایی، توانایی است. مؤکّداً به نیاز کشور به جوشاندن چشمه‌ی دانش در میان خود اصرار میورزیم. ما هنوز از قلّه‌های دانش جهان بسیار عقبیم؛ باید به قلّه‌ها دست یابیم. باید از مرزهای کنونی دانش در مهم‌ترین رشته‌ها عبور کنیم.

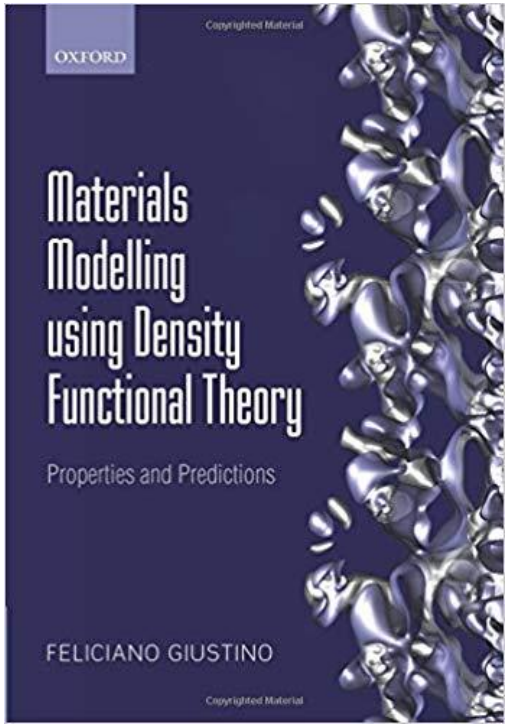
۱۳۹۷

معرفی درس

ساختار الکترونی پیشرفته مواد (۳ واحد)

Materials Modeling using Density Functional Theory

F. Giustino, Oxford, 2014



میان ترم: ۴۰٪ پایان ترم: ۴۰٪

تکالیف کلاسی (اختیاری) : ۱۰ ٪

تکالیف محاسباتی: ۲۰٪

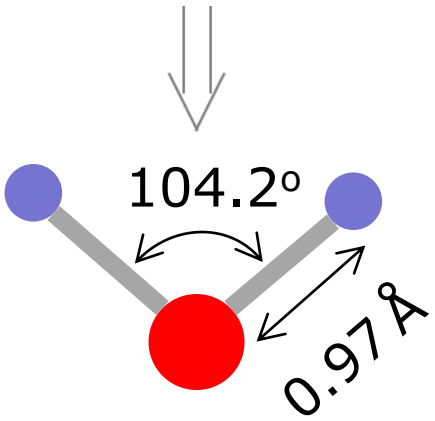
فهرست مباحث درس

1. Computational materials modeling from first principles
2. Many-body Schrodinger equation
3. Density functional theory + Supplementary (Kohanoff)
4. Equilibrium structures of materials: fundamentals
5. Equilibrium structures of materials: calculations vs. experiment
6. Elastic properties of materials
7. Vibrations of molecules and solids
8. Phonons, vibrational spectroscopy and thermodynamics
9. Band structures and photoelectron spectroscopy
10. Dielectric function and optical spectra
11. Density functional theory and magnetic materials

۱- مدل‌سازی محاسباتی مواد به روش ابتدا به ساکن

محاسبه خواص مواد، بدون نیاز به داده‌های آزمایشگاهی

H + H + O



EXP: 0.98 Å, 107.2°

JCP **42**, 1147 (1965)

توانمندی‌ها

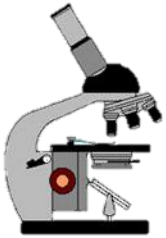
- درک و تکمیل نتایج آزمایشگاهی
- پشتیبانی از محاسبات مدل
- جستجوی مواد و ساختارهای جدید

مبانی نظری – مکانیک کوانتمی

نانو

10^{-9} m

میکرو



10^{-6} m

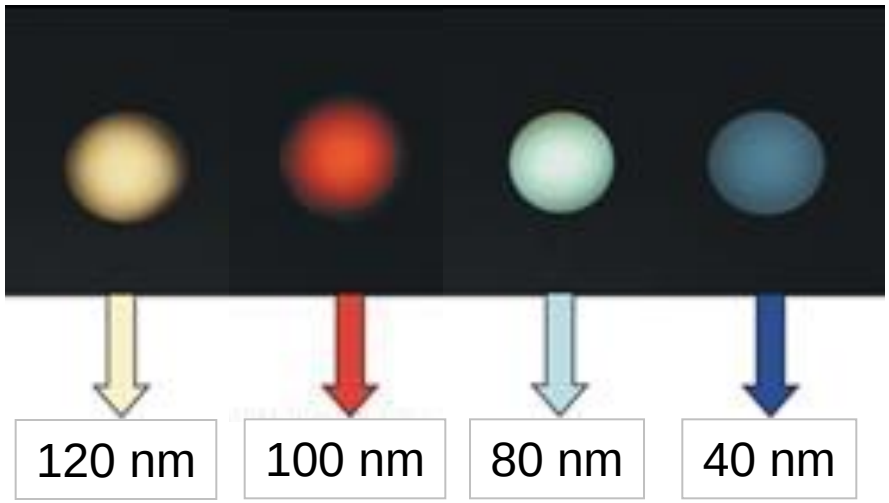
ماکرو

$\geq 10^{-3}$ m

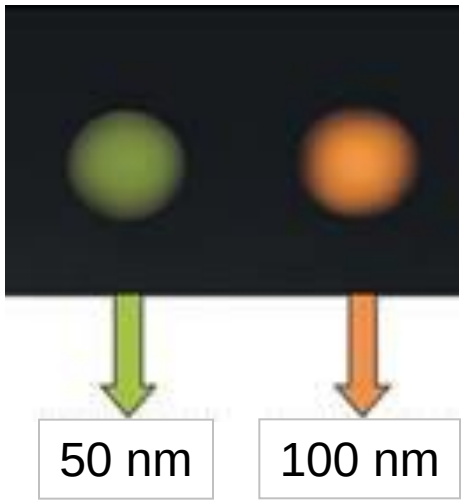
رفتار کوانتمی	رفتار نیمه کلاسیک	کلاسیک
هامیلتونی	نیرو ، جرم موثر ، سرعت گروه	نیرو ، گرما
معادله‌ی شرودینگر	قوانین نیوتن	قوانین نیوتن
تابع موج (اوربیتال)	بسته موج	بردار مکان

رفتار کوانتمی در ابعاد نانو

نانو ذرات نقره



نانو ذرات طلا



رنگ: ناشی از برهم‌کنش کوانتمی نور با ماده ← برهم‌کنش الکترون با فوتون

به دلیل تغییر خواص کوانتمی مواد در ابعاد نانو،
بسیاری از خواص نانوذرات از جمله رنگ آنها تغییر می‌کند

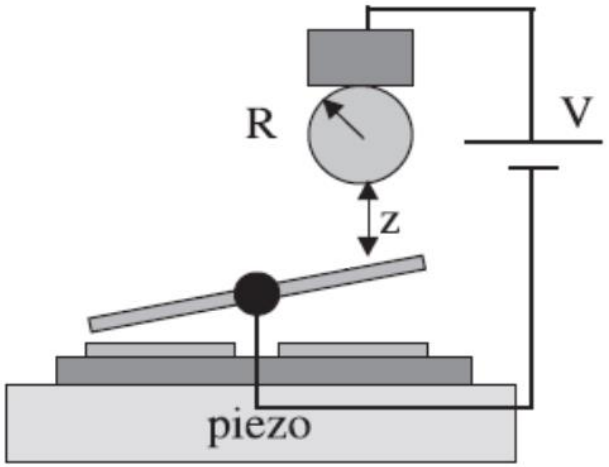
http://www.discovernano.northwestern.edu/whatis/index_html/sizematters_html

رفتار کوانتمی در ابعاد زیر میکرون

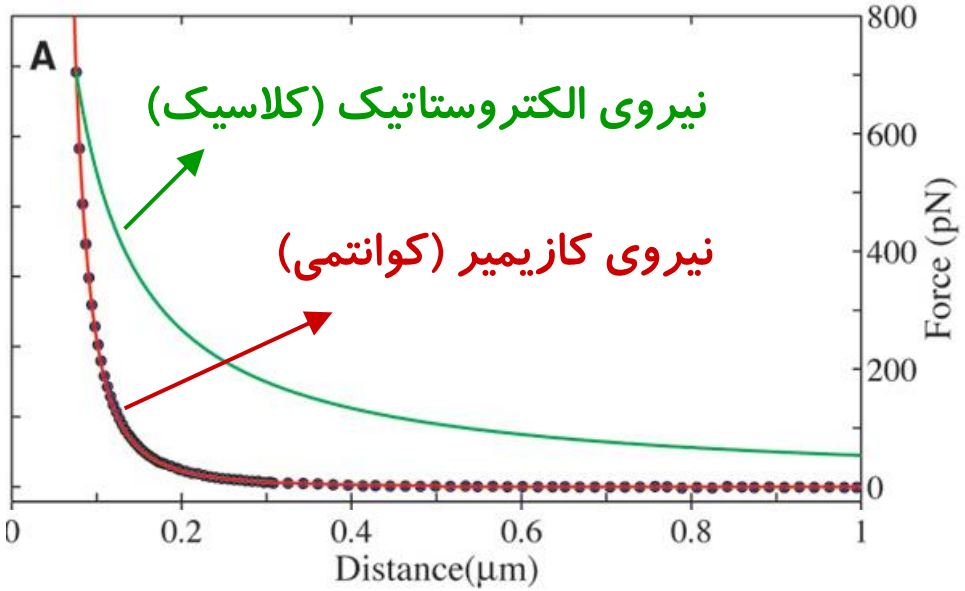
Science
AAAS

Quantum Mechanical Actutation of MEMS by the Casimir Force
H.B. Chan, et al., Science 291, 1941 (2001)

Microelectromechamical Sytems: (MEMS)

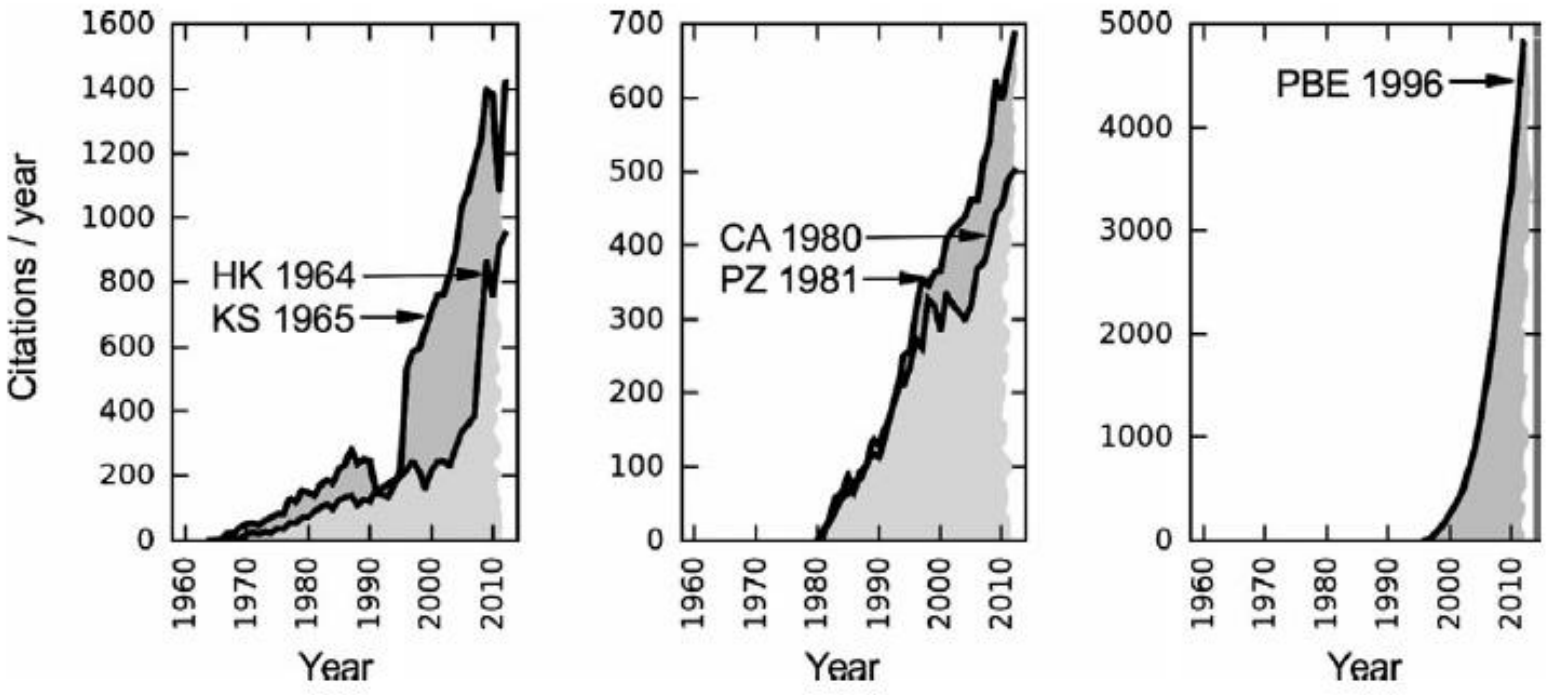


نیروی اندازه گیری شده بین صفحه و کره باردار



مبانی نظری – نظریه تابعی چگالی (DFT)

بازنویسی معادله شرودینگر برای سامانه‌های بس‌ذره‌ای (بلورها و مولکول‌ها)

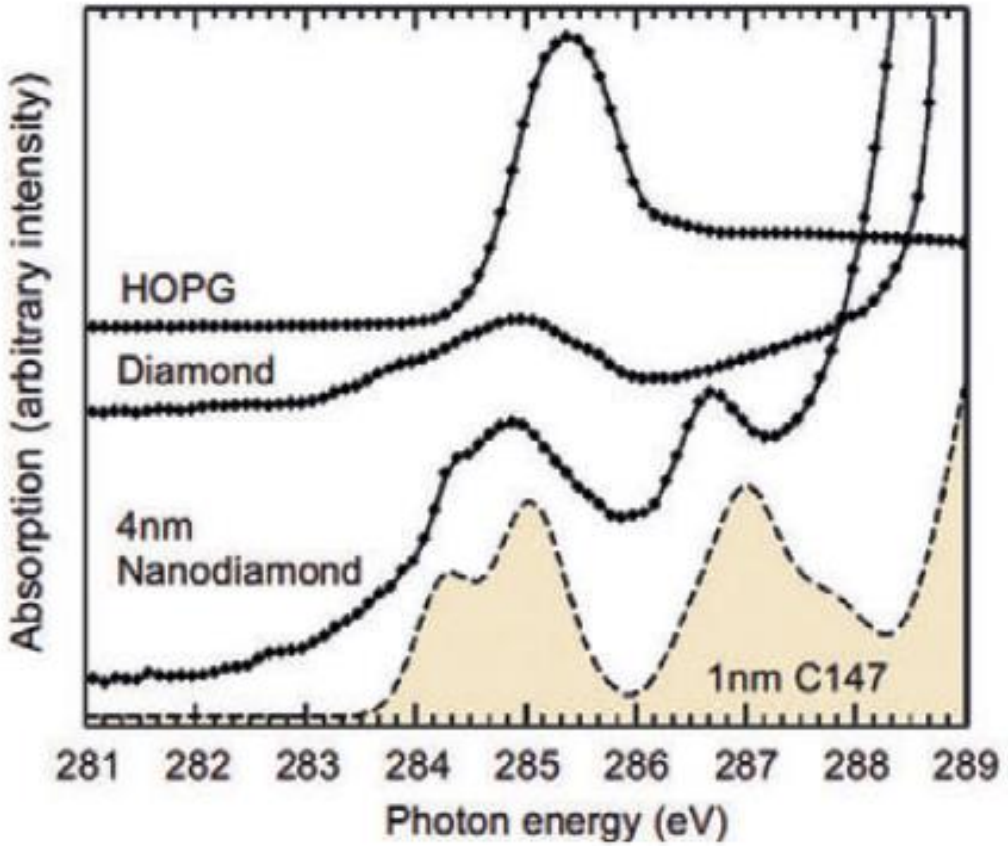


نمودار رشد ارجاعات به مقالات اصلی نظریه تابعی چگالی

ده مقاله برتر مجلات Physical Review

عنوان	ارجاعات
GGA functional (1995), Perdew, Burke, Ern	27,787
Colle-Salvetti correlation-energy (1988), Lee, Yang,Parr	27,008
Kohn-Sham Equations (1965), Kohn, Sham	19,812
Density-functional exchange-energy (1988), Becke	16,048
Inhomogeneous Electron Gas (1964), Hohenberg , Kohn	15,865
PAW method (1999), Kresse, Joubert	11,677
PAW method (1994), Blöchl	11,101
Analytic representation of correlation energy (1992), Perdew, Wang	9,442
Self-interaction correction to DFT (1981), Perdew, Zunger	9,376
Applications of GGA (1992), Perdew	9,120

کاربرد محاسبات DFT: نانوالماس



نانوالماس:

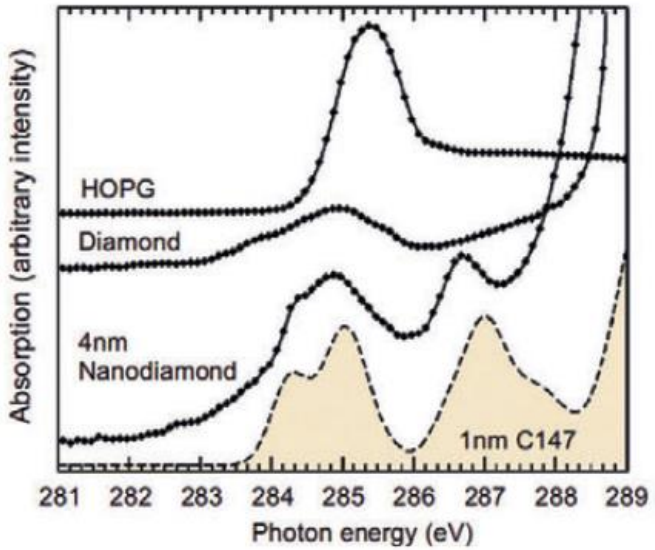
شهاب‌سنگ‌ها، الماس انفجاری،

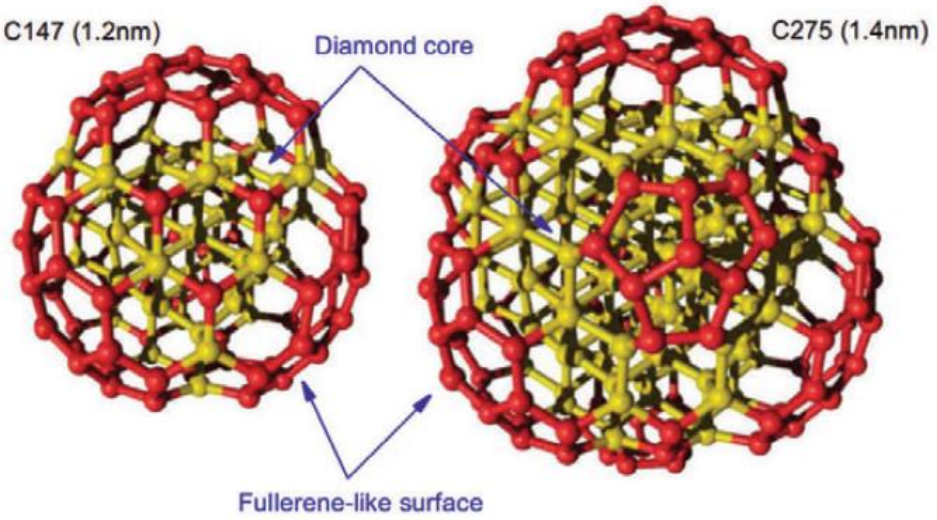
لایه‌نشانی تبخیر شیمیایی

کاربردهای پزشکی و صنعتی

طیف پراش ایکس نانوالماس
با الماس فرق دارد !!!

کاربرد محاسبات DFT: نانوالماس





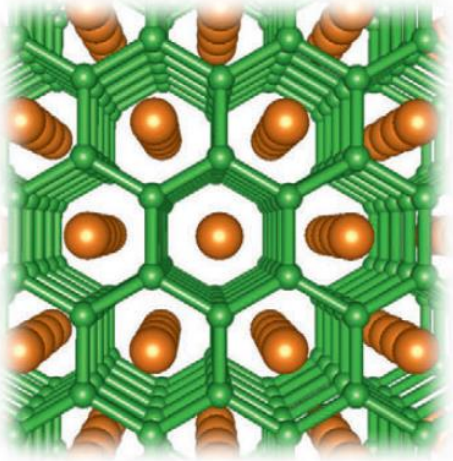
نتیجه شبیه‌سازی: نانوالماس، پوسته گرافیتی دارد.

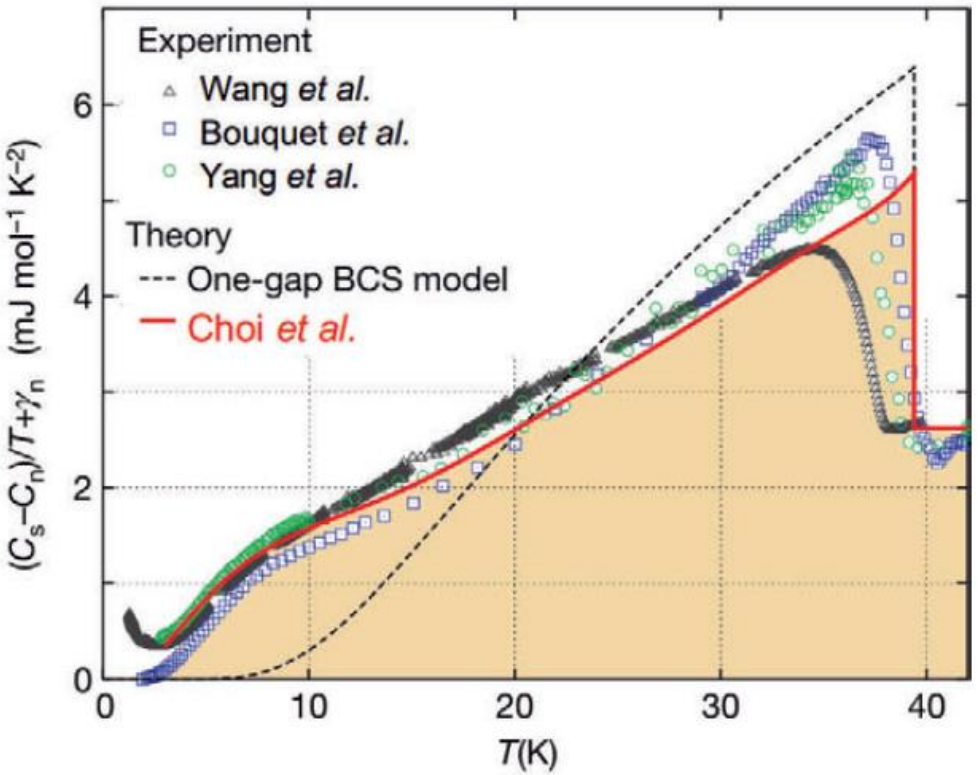
محاسبات DFT، مکمل آزمایش های تجربی.

کاربرد محاسبات DFT: ابررسانایی

MgB_2

بیشترین دمای گذار (39K) در بین ابرساناهای معمولی



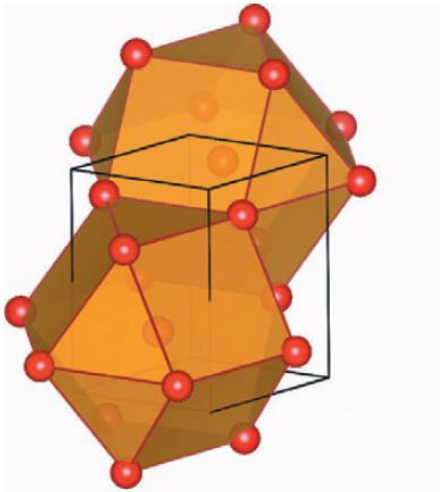


ترکیب محاسبات DFT با نظریه میگدال-الیاشبرگ: توصیف دقیق گذار ابرسانایی

محاسبات DFT، قابل اعتماد و دقیق

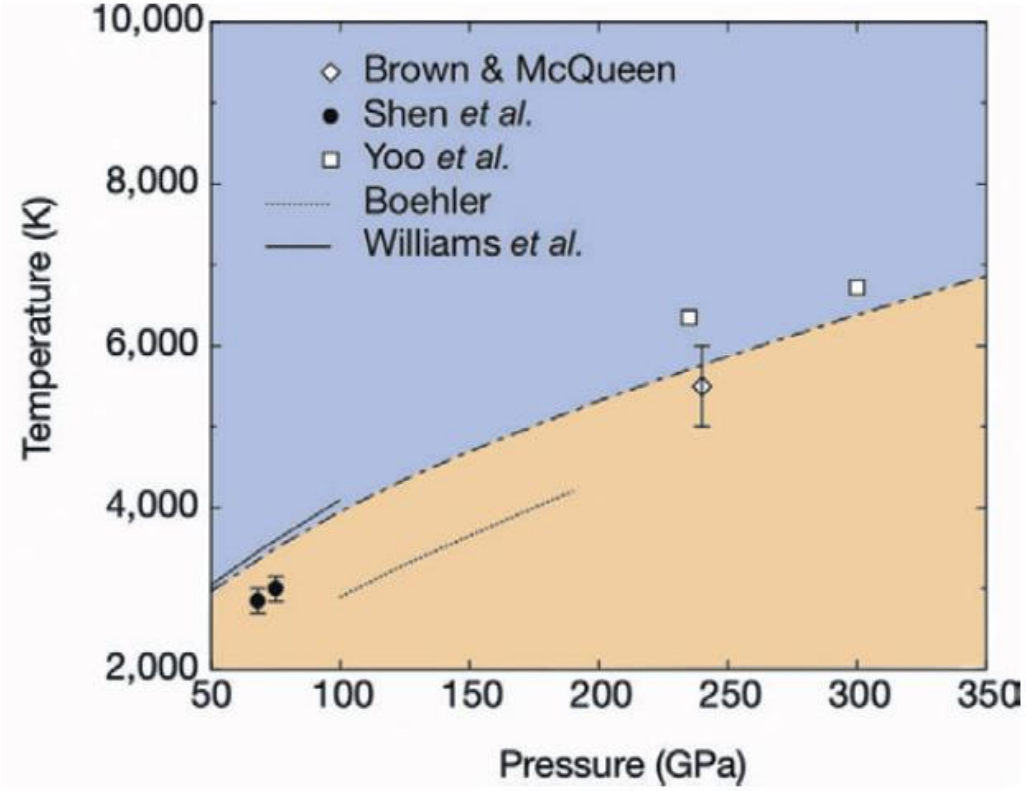
کاربرد محاسبات DFT: شرایط محیطی غیرعادی

ε-Fe (hcp)

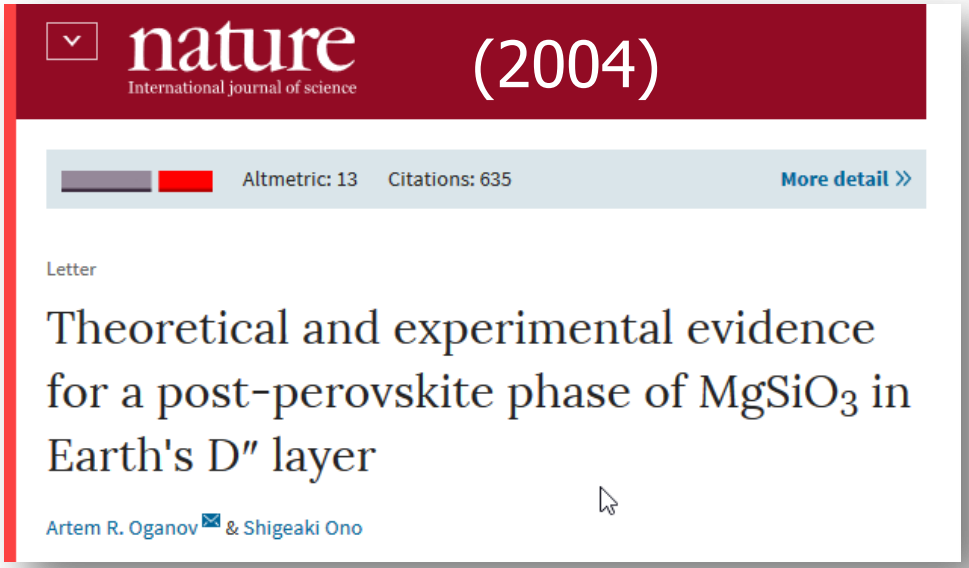


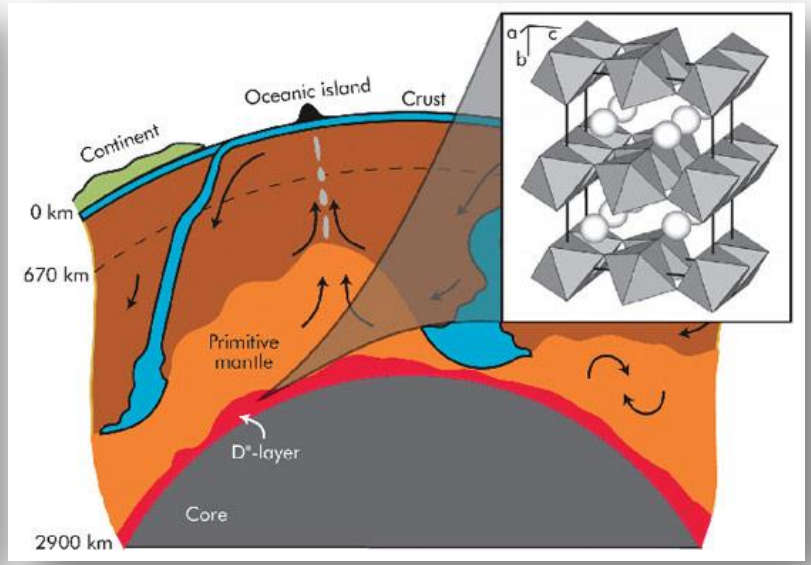
پیش بینی دمای مرکز زمین (p=350 Gpa)

اندازه گیری دمای ذوب آهن در فشارهای بالا



کاربرد محاسبات DFT: شرایط محیطی غیرعادی



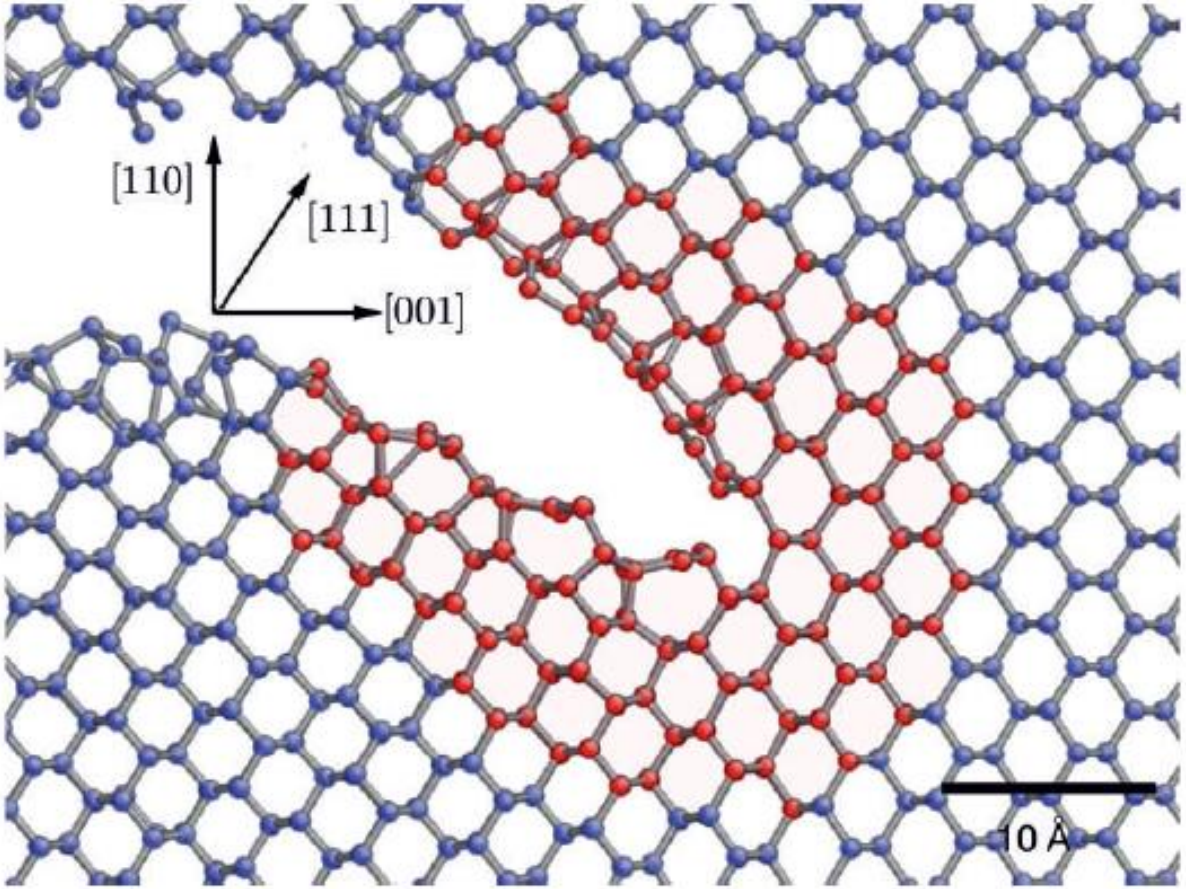


پیش بینی فاز جدید $MgSiO_3$ در فشارهای بالا با محاسبات DFT،

این فاز بسیاری از رفتارهای مشاهده شده در لایه ″D زمین را توضیح می‌دهد.

کاربرد محاسبات DFT: محاسبات چندمقیاسی

بررسی انتشار تَرَک در بلور سیلیکن



کاربرد محاسبات ابتدا به ساکن: جستجوی مواد جدید

nature materials

Altmetric: 0 Citations: 951 More detail »

Article

Computational high-throughput screening of electrocatalytic materials for hydrogen evolution

Jeff Greeley, Thomas F. Jaramillo, Jacob Bonde, Ib Chorkendorff & Jens K. Nørskov

Nature Materials **5**, 909–913 (2006) Received: 30 June 2006

کاربرد محاسبات ابتدا به ساکن: جستجوی مواد جدید

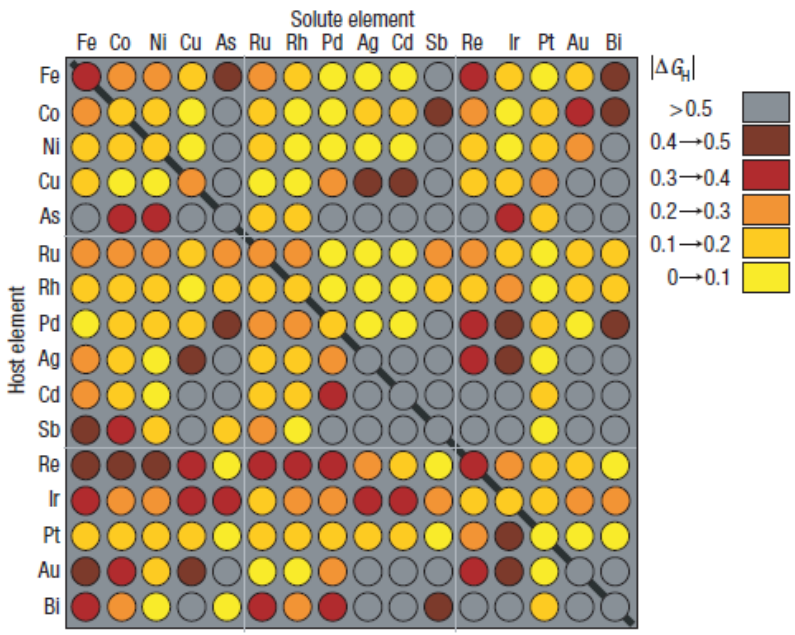


Figure 3 Computational high-throughput screening for $|\Delta G_H|$ on 256 pure metals and surface alloys. The rows indicate the identity of the pure metal

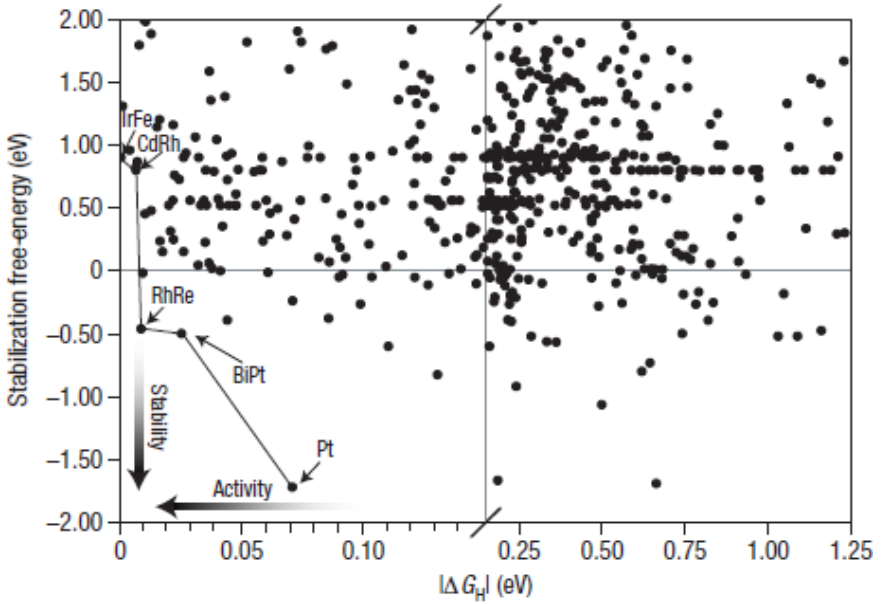


Figure 4 Pareto-optimal plot of stability and activity of surface alloys for the HER. The stabilization free-energy can be thought of as a free energy of formation

The free energy of hydrogen adsorption ΔG_H : a reasonable descriptor of hydrogen evolution activity for a wide variety of metals and alloys.
The optimum value should be around $\Delta G_H = 0$

کاربرد محاسبات DFT: پیش‌بینی مواد جدید

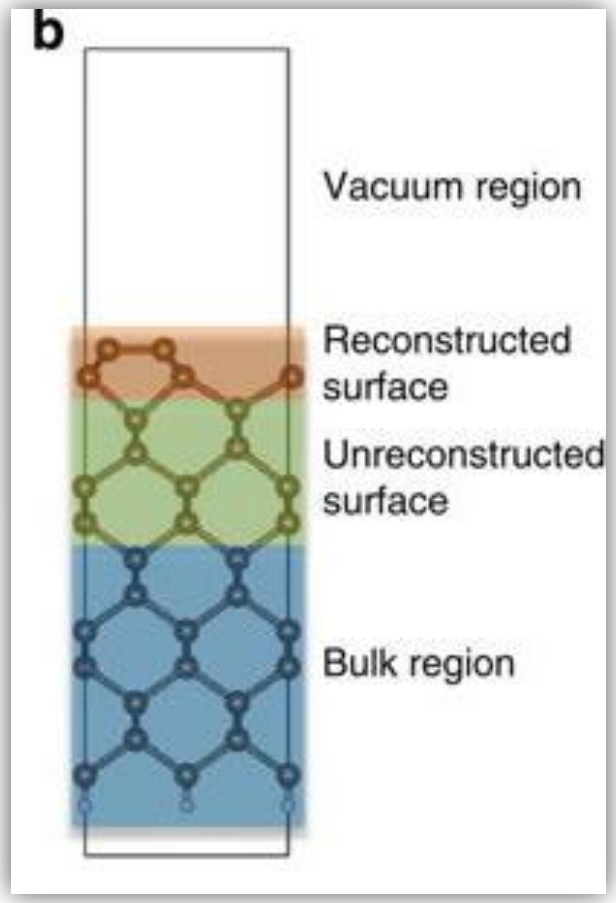
nature COMMUNICATIONS (2014)

Article | Published: 16 April 2014

Self-assembled ultrathin nanotubes on diamond (100) surface

Shaohua Lu, Yanchao Wang, Hanyu Liu, Mao-sheng Miao ✉ & Yanming Ma ✉

Discovery of self - assembled CNTs on the diamond (100) surface highlights the power of the intelligent surface structure search and reveals the chemical complexity of a seemingly simple system.



دلایل فراگیر شدن محاسبات DFT

انتقال‌پذیری	برای انواع مواد و ساختارهای مختلف قابل استفاده است.
سهولت	یک تصویر کوانتمی شهودی و قابل درک از مواد ارائه می دهد.
قابل اعتماد	در بسیاری از موارد نتایج بدست آمده با دقت بالایی منطبق بر داده های آزمایشگاهی است.
نرم‌افزارهای سهل‌الوصول	تکنیک های و بسته های محاسباتی توسعه یافته، به سادگی در دسترس همگان است.
نقطه شروع مناسب	در مواردی که محاسبات DFT از دقت کافی برخودار نیست، نتایج DFT نقطه شروع خوبی برای محاسبات پیچیده تر است.

آزمایشگاه های مجازی