



پردیس دانشکده های فنی



دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر

بسمه تعالی

جلسه دفاعیه رساله دکتری

گرایش: الکترونیک

موضوع: بررسی ساختارهای دو بعدی برای کاربردهای فوتوکاتالیستی جهت تولید سوخت سبز

توسط: فروغ شبیریان

استاد راهنما: آقای دکتر سید شمس‌الدین مهاجرزاده

استاد مشاور: آقای دکتر مهدی پورفتح

روز، ساعت، تاریخ دفاع: شنبه ساعت: ۱۰:۰۰ مورخ ۱۴۰۲/۱۰/۲۳

مکان دفاع: اتاق جلسات ۸۰۳

چکیده:

واکنش کلی شکافت آب برای تولید هیدروژن و اکسیژن با استفاده از ماده فوتوکاتالیست، یک فرآیند امیدبخش برای تولید هیدروژن در مقیاس گسترده است. در سال‌های اخیر، تلاش‌های بسیاری برای پیدا کردن فوتوکاتالیست‌هایی که با پرتو مرئی کار می‌کنند برای استفاده کارآمد از انرژی خورشیدی صورت گرفته است. طراحی یک فوتوکاتالیست بهینه نسبتاً کاری چالش برانگیز است. در این رساله خواص الکترونیکی و نوری ساختارهای به فرم $Cr_2X_2Y_6$ ($X=Si, Ge, Y=S, Se, Te$) به منظور بررسی فعالیت فوتوکاتالیستی آن‌ها برای شکافت آب محاسبه شده است. در ادامه بر روی خواص الکترونیکی ۳۳ ماده دو بعدی که همگی نیمه‌هادی و ضد فرومغناطیس هستند به منظور بررسی فعالیت فوتوکاتالیستی ساختار ناهمگون نوع II تشکیل شده از مواد دوبعدی مورد مطالعه برای شکافت آب محاسبات دقیق انجام شد و در میان ساختارهای ناهمگون ایجاد شده از ۳۳ ماده دو بعدی، پنج ساختار ناهمگون دو بعدی نوع II با کمترین عدم تطابق شبکه و کمترین تعداد اتم و همچنین کمترین درصد اعمال کشیدگی و فشردگی انتخاب شدند. در نهایت ویژگی‌های الکترونیکی و نوری آن‌ها با استفاده از نظریه تابعی چگالی برای استفاده در شکافت آب بررسی شده است.