



دانشگاه کردستان

دانشکده علوم

گروه شیمی

عنوان:

بررسی نظری جذب گاز متان بر نانوتیوب‌های بورنیتريد خالص و داپت شده

پژوهشگر:

کبری صلابت

استاد راهنما:

دکتر خالد عزیزی

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک

اسفند ماه ۱۳۸۸

کلیه حقوق مادی و معنوی مترتب بر نتایج مطالعات،

ابتکارات و نوآوری‌های ناشی از تحقیق موضوع

این پایان‌نامه (رساله) متعلق به دانشگاه کردستان است.

*** تعهد نامه ***

اینجانب کبری صلابت دانشجوی کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک دانشگاه کردستان، دانشکده علوم پایه گروه شیمی تعهد می‌نمایم که محتوای این پایان نامه نتیجه تلاش و تحقیقات خود بوده و از جایی کپی برداری نشده و به پایان رسانیدن آن نتیجه تلاش و مطالعات مستمر اینجانب و راهنمایی و مشاوره اساتید بوده است.

با تقدیم احترام

کبری صلابت

۱۳۸۸/۱۲/۱۵



دانشگاه کردستان
دانشکده علوم
گروه شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک

عنوان:

بررسی نظری جذب گاز متان بر نانوتیوب‌های بورنیتريد خالص و داپت شده

پژوهشگر:

کبری صلابت

در تاریخ ۱۳۸۸/۱۲/۱۵ توسط کمیته تخصصی و هیات داوران زیر مورد بررسی قرار گرفت و با نمره و درجه به تصویب رسید.

<u>امضاء</u>	<u>مرتبه علمی</u>	<u>نام و نام خانوادگی</u>	<u>هیات داوران</u>
	استادیار	دکتر خالد عزیزی	۱- استاد راهنما
	دانشیار	دکتر سید مجید هاشمیان زاده	۳- استاد داور خارجی
	دانشیار	دکتر رحمت صادقی	۴- استاد داور داخلی

مهر و امضاء معاون پژوهشی و تحصیلات تکمیلی

مهر و امضاء گروه

دانشکده

چکیده

در این تحقیق فرآیند جذب مولکول متان بر روی سطح داخلی و خارجی نانوتیوب‌های بورنیتريد (۸،۰)، (۱۰،۰) و (۱۲،۰) خالص و داپت شده با اتم Al بطور نظری و با روش DFT مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج این بررسی نشان می‌دهد که مولکول متان بر سطح داخلی نانوتیوب‌های بورنیتريد خالص و داپت شده جذب نمی‌شود و انرژی جذب آن بر سطح خارجی نانوتیوب‌های خالص نیز بسیار اندک بوده و با افزایش قطر نانوتیوب بطور جزئی کاهش می‌یابد. مولکول متان بطور موثر جذب سطح خارجی نانوتیوب‌های بورنیتريد داپت شده با اتم Al (به جای اتم N نانوتیوب) شده و انرژی جذب آن در حدود ۵ (kcal/mol) محاسبه شده که نشان دهنده انجام یک جذب فیزیکی قوی است. جذب متان شکاف انرژی HOMO-LUMO نانوتیوب را حدود ۲۵٪ افزایش داده و در حدود $0.115|e|$ بار الکتریکی از مولکول متان به نانوتیوب انتقال می‌یابد.

همچنین مقایسه بین فرآیند جذب متان بر روی نانوتیوب‌های کربنی و بورنیتريد (۸، ۰) داپت شده با اتم Al نشان می‌دهد که، انرژی جذب متان بر نانوتیوب بورنیتريد داپت شده با Al بطور قابل ملاحظه بیشتر از نانوتیوب کربنی داپت بوده و میزان انتقال بار الکتریکی از متان به نانوتیوب کربنی در مقایسه با نانوتیوب بورنیتريد بسیار ناچیز است.

واژگان کلیدی: نانوتیوب‌های بورنیتريد داپت شده، جذب فیزیکی، متان، روش DFT.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	فصل اول (مقدمه و پیشینه پژوهشی)
۱	۱-۱-۱-۱ متان
۱	۱-۱-۱-۱-۱ منابع تولید متان
۲	۱-۱-۱-۲ واکنش های متان
۳	۱-۱-۱-۳ موارد استفاده
۴	۱-۲-۱ انواع نیروهای بین مولکولی
۵	۱-۲-۱-۱ هسته ای قوی
۵	۱-۲-۱-۲ هسته ای ضعیف
۵	۱-۲-۱-۳ گرانشی
۵	۱-۲-۱-۴ الکترومغناطیسی
۶	۱-۴-۲-۱ نیروهای الکترواستاتیکی
۶	۱-۴-۲-۲ نیروهای القایی
۷	۱-۴-۲-۳ نیروهای پراکندگی لاندن
۸	۱-۳-۱ نانو ساختارهای بورنیتريد
۸	۱-۳-۱-۱ هگزاگونال بورنیتريد
۱۰	۱-۳-۲-۱ نانو تیوب های بور نیتريد
۱۱	۱-۳-۲-۱-۱ خواص الکترونی نانو تیوب های بور نیتريد
۱۳	۱-۴-۱ پیشینه پژوهشی
۱۵	۱-۴-۱-۱ بررسی جذب گاز هیدروژن روی نانو تیوب بورنیتريد (۵،۵) داپت شده با Pt
۱۸	۱-۴-۱-۲ داپت کردن اتم پلاتین به صورت پیل روی نانو تیوب بورنیتريد
۲۲	۱-۴-۱-۳ بررسی تئوری جذب گاز مونوکسید کربن بر نانو تیوب بورنیتريد (۸،۰) داپت شده با سیلیسیم
۲۵	۱-۴-۱-۴ جذب گاز متان بر سطح داخلی و خارجی نانو تیوب کربنی خالص و داپت شده با نیتروژن
۲۶	۱-۴-۱-۴-۱ جذب متان بر سطح خارجی نانو تیوب های کربنی تک لایه

۲۷ ۴-۴-۲- جذب متان بر سطح داخلی نانوتیوب
۲۸ ۴-۴-۳- جذب متان بر نانوتیوب کربنی داپت شده با نیتروژن
۳۰ فصل دوم (روش های کوانتومی)
۳۱ ۱-۲- مکانیک کوانتومی
۳۱ ۱-۱-۲- روش های نیمه تجربی
۳۲ ۲-۱-۲- روش های آغازین
۳۲ ۱-۲-۱-۲- روش هارتری- فاک
۳۳ ۲-۲-۱-۲- تئوری اختلال مولر- پلست
۳۴ ۳-۲-۱-۲- همبستگی الکترونی
۳۵ ۴-۲-۱-۲- روش تابعیت دانسیته الکترون (DFT)
۳۶ ۲-۲- مجموعه های پایه
۳۷ ۱-۲-۲- مجموعه های پایه حداقل
۳۷ ۲-۲-۲- مجموعه های پایه ظرفیتی شکافته
۳۷ ۳-۲-۲- توابع پایه نفوذی
۳۸ ۴-۲-۲- مجموعه های قطبش پذیر
۳۸ ۳-۲- نرم افزارها
۳۸ ۱-۳-۲- نرم افزار نانوتیوب مودلر
۳۹ ۲-۳-۲- نرم افزار گوسویو
۳۹ ۳-۳-۲- نرم افزار گوسین (۰۳)
۴۰ ۴-۳-۲- نرم افزار گاس سام
۴۰ ۱-۴-۳-۲- نمودار (DOS)
۴۱ ۴-۲- بهینه سازی ساختار
۴۲ ۵-۲- روش scan
۴۳ ۶-۲- سیستم های مولکولی و مدل های شیمیایی
۴۴ ۷-۲- محاسبات انرژی و اربیتال پیوندی طبیعی
	فصل سوم (بررسی نظری جذب گاز متان بر روی نانوتیوب های بورنیتريد خالص و داپت
۴۵ شده با آلومینیم)

۴۷ ۱-۳- بینه سازی ساختار هندسی و انتخاب سطح محاسباتی
۴۹ ۲-۳- محاسبات انرژی و خواص الکترونی
۵۰ ۳-۳- بررسی اثر قطر بر خواص ساختاری و الکترونی نانوتیوب‌های بورنیتريد خالص
۵۰ ۱-۳-۳- اثر قطر بر خواص ساختاری نانوتیوب‌های بورنیتريد خالص
۵۴ ۲-۳-۳- اثر قطر بر خواص الکترونی نانوتیوب‌های بورنیتريد خالص
۵۴ ۱-۲-۳-۳- انرژی ارییتال‌های HOMO، LUMO و H-L gap
۵۵ ۲-۲-۳-۳- هیبریداسیون اتم‌های نیتروژن و بور
۵۸ ۳-۲-۳-۳- بار الکتریکی اتم‌های بور و نیتروژن
۵۸ ۴-۲-۳-۳- نمودارهای DOS
۶۰ ۴-۳- بررسی اثر قطر بر خواص ساختاری و الکترونی نانوتیوب‌های بورنیتريد داپت شده با Al
۶۰ ۱-۴-۳- اثر قطر بر خواص ساختاری نانوتیوب‌های بورنیتريد داپت شده با Al
۶۱ ۲-۴-۳- اثر قطر بر خواص الکترونی نانوتیوب‌های بورنیتريد داپت شده با Al
۶۱ ۱-۲-۴-۳- ارییتال‌های HOMO، LUMO و H-L gap
۶۲ ۲-۲-۴-۳- هیبریداسیون اتم Al و اتم‌های B متصل به آن
۶۳ ۳-۲-۴-۳- بار الکتریکی اتم Al و اتم‌های B متصل به آن
۶۴ ۴-۲-۴-۳- نمودارهای DOS
۶۶ ۵-۳- جذب متان بر روی نانوتیوب بورنیتريد (۱۰،۰) خالص و داپت شده
۷۰ ۱-۵-۳- هیبریداسیون
۷۰ ۲-۵-۳- تغییرات بار الکتریکی اتم‌های جاذب و جذب شونده
۷۱ ۳-۵-۳- انرژی جذب، E_{ad}
۷۳ ۴-۵-۳- فاصله تعادلی (r_{min})
۷۴ ۵-۵-۳- ارییتال‌های مولکولی HOMO، LUMO و H-L gap
۷۵ ۶-۵-۳- سهم متان و نانوتیوب در ارییتال‌های HOMO و LUMO
۷۵ ۷-۵-۳- نمودارهای DOS
۷۸ ۶-۳- بررسی تأثیر قطر نانوتیوب‌های خالص بر فرآیند جذب متان
۸۳ ۷-۳- بررسی جذب متان بر روی نانوتیوب‌های بورنیتريد داپت شده (۰،۸)، (۰،۱۰) و (۰،۱۲) با اتم Al
۸۳ ۱-۷-۳- انرژی جذب (E_{ads})

۸۴(r _{min}) فاصله تعادلی ۲-۷-۳
۸۶ H-L gap و LUMO،HOMO اربیتال های ۳-۷-۳
۸۷ هیبریداسیون ۴-۷-۳
۸۷ بار الکتریکی اتم های درگیر در جذب و انتقال بار ۵-۷-۳
۸۸ DOS نمودارهای ۶-۷-۳
۹۰ مقایسه فرایند جذب متان بر نانوتیوب های (۸، ۰) بور نیتريد و کربنی داپت شده با Al ۸-۳
۹۳ نتیجه گیری ۹-۳
۹۴ منابع

فهرست جداول

صفحه

عنوان

۱۲	جدول ۱-۱: موقعیت پیک‌های طیف PLE برای نانوتیوب‌های مختلف و شیفت انرژی آنها نسبت به h-BN در دمای (k) ۲۰.....
۱۷	جدول ۱-۲: انرژی جذب مولکول هیدروژن بر روی نانوتیوب بورنیتريد داپت شده و مقدار شکاف انرژی.....
۲۴	جدول ۱-۳: داده‌های مربوط به برهمکنش CO با نانوتیوب بورنیتريد خالص و داپت شده.....
۲۷	جدول ۱-۴: انرژی‌های جذب محاسبه شده برای جذب متان بر نانوتیوب‌های کربنی خالص و داپت شده.....
۴۸	جدول ۳-۱: نتایج برهم‌کنش دو مولکول متان با مجموعه پایه‌های مختلف.....
۵۴	جدول ۳-۲: اثر قطر بر خواص ساختاری نانوتیوب‌های بورنیتريد خالص.....
۵۵	جدول ۳-۳: اثر قطر بر خواص الکترونی نانوتیوب‌های بورنیتريد خالص.....
۶۱	جدول ۳-۴: اثر قطر بر خواص ساختاری نانوتیوب‌های بورنیتريد داپت شده با Al.....
۶۳	جدول ۳-۵: اثر قطر بر خواص الکترونی نانوتیوب‌های بورنیتريد داپت شده با Al.....
۶۸	جدول ۳-۶: اثر جذب خارجی متان بر خواص الکترونی (۱۰،۰) NTBN خالص و داپت شده.....
۶۹	جدول ۳-۷: اثر جذب داخلی متان بر خواص الکترونی (۱۰،۰) NTBN داپت شده.....
۸۱	جدول ۳-۸: اثر برهمکنش متان با نانوتیوب‌های خالص بورنیتريد بر خواص الکترونی.....
۸۶	جدول ۳-۹: اثر جذب متان بر نانوتیوب‌های بورنیتريد داپت شده با Al.....
۹۲	جدول ۳-۱۰: مقایسه فرآیند جذب متان بر نانوتیوب‌های (۸،۰) بور نیتريد و کربنی داپت شده با Al.....

فهرست اشکال

صفحه	عنوان
۸	شکل ۱-۱: ساختار مواد صفحه ای (a) گرافیت (b) هگزاگونال بور نیتريد
۹	شکل ۲-۱: ساختار نواری تئوری تک لایه ای از (a) گرافیت (b) هگزاگونال بور نیتريد
۱۵	شکل ۳-۱: نمودارهای DOS نانوتیوب بورنیتريد (۹،۰) خالص و داپت شده با کربن، در حضور و عدم حضور اتم هیدروژن
۱۶	شکل ۴-۱: ساختارهای بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد (۵،۵) داپت شده با پلاتین (۱) S_N (۲) S_B
۱۶	شکل ۵-۱: اربیتال های HOMO و LUMO در نانوتیوب بورنیتريد (۵،۵) داپت شده با پلاتین
۱۹	شکل ۶-۱: ساختارهای بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد (۸،۰) خالص (۱) و نانوتیوب داپت شده با اتم پلاتین در موقعیت BA (۲) و BZ (۳)
۲۱	شکل ۷-۱: ساختارهای بهینه شده بعد از جذب یک مولکول هیدروژن (الف)، دو مولکول (ب)، سه مولکول (ج) و جذب چهار مولکول هیدروژن روی دایمر پلاتین داپت شده بر نانوتیوب (د)
۲۲	شکل ۸-۱: ساختار بهینه شده نانوتیوب بور نیتريد (۸،۰) خالص (۱) Si_B (۲) Si_N (۳)
۲۳	شکل ۹-۱: نمودارهای DOS مربوط به نانوتیوب بورنیتريد خالص (a) Si_B (b) Si_N و (c)
۲۳	شکل ۱۰-۱: حالت های مختلف برهمکنش CO با نانوتیوب بورنیتريد (۸،۰) خالص A_1 تا A_4 ، نانوتیوب Si_B و B_1 و B_2 و نانوتیوب Si_N و C_1 و C_2
۲۶	شکل ۱۱-۱: ساختارهای بهینه شده نانوتیوب های کربنی داپت شده با نیتروژن (الف) N_{SP^3} و (ب) N_{PY}
۲۸	شکل ۱۲-۱: ساختار بهینه شده کمپلکس جذب خارجی متان و نانوتیوب داپت شده (الف) N_{PY} و (ب) N_{SP^3}
۴۱	شکل ۱-۲: نمودار شماتیکی از باندهای هدایت و والانس
۴۷	شکل ۱-۳: آرایش های مختلف برهم کنش دو مولکول گاز متان با یکدیگر
۵۱	شکل ۲-۳: ساختارهای بهینه شده نانوتیوب های بورنیتريد (۸،۰) (الف)، (۱۰،۰) (ب) و (۱۲،۰) (ج)
۵۶	شکل ۳-۳: اتم های بور و نیتروژن در نانوتیوب با موقعیت های وسط (C) و لبه (E)
۵۹	شکل ۴-۳: نمودارهای DOS نانوتیوب های بورنیتريد خالص
۶۰	شکل ۵-۳: ساختارهای بهینه شده نانوتیوب های بورنیتريد داپت شده BNNT/Al(N) (۸،۰) (الف)، (۱۰،۰) (ب) و (۱۲،۰) (ج)
۶۵	شکل ۶-۳: نمودارهای DOS نانوتیوب های بورنیتريد داپت شده
۶۷	شکل ۷-۳: حالت های مختلف جذب گاز متان بر نانوتیوب بورنیتريد (۱۰،۰): (الف) خالص، (ب) Al(N)، (ج) Al(B)، (د) جذب داخلی Al(N)، (ه) جذب داخلی Al(B)

- شکل ۳-۸: نمودارهای DOS مربوط به نانوتیوب بورنیتريد (۱۰،۰) خالص و داپت شده (الف) عدم حضور متان، (ب) در حضور متان..... ۷۶
- شکل ۳-۹: نمودارهای DOS مربوط به جذب متان از داخل نانوتیوب بورنیتريد (۱۰،۰) داپت شده..... ۷۷
- شکل ۳-۱۰: ساختار بهینه شده نانوتیوب های بورنیتريد خالص: (۱) (۰،۸)، (۲) (۰،۱۰) و (۳) (۰،۱۲) در حضور متان ۸۰
- شکل ۳-۱۱: نمودارهای DOS نانوتیوب های خالص در حضور متان ۸۲
- شکل ۳-۱۲: ساختار بهینه شده نانوتیوب های بورنیتريد داپت شده (S_N): (۱) (۰،۸)، (۲) (۰،۱۰) و (۳) (۰،۱۲) در حضور متان ۸۵
- شکل ۳-۱۳: نمودارهای DOS نانوتیوب های داپت شده (S_N) در حضور متان ۸۹
- شکل ۳-۱۴: ساختارهای بهینه شده نانوتیوب های (۸،۰) در حضور مولکول متان، (الف) بورنیتريد (ب) کربنی..... ۹۱

فصل اول

مقدمه و پیشینه پژوهشی

۱-۱- متان^۱

متان با فرمول مولکولی CH_4 ، ساده‌ترین عضو خانواده آلکان‌ها بوده و دارای ساختار چهاروجهی با زوایای پیوندی 109.5° درجه می‌باشد. متان گازی بی‌رنگ، بی‌بو، قابل اشتعال و در آب نامحلول است. نقطه ذوب آن 90.7° کلوین و نقطه جوش آن 109° کلوین است. این گاز در سال ۱۷۷۸ توسط شیمیدان ایتالیایی آله ساندرو ولتا^۲ (۱۸۲۷-۱۷۴۵)، زمانی که در حال مطالعه بر روی گاز مرداب بود، کشف گردید. در سال ۱۹۳۵ به کمک روش‌های طیف‌سنجی در جو سیاره مشتری کشف و در سال ۱۹۷۷ با توجه به تابش آن در طول موج 3.09 میلی‌متر در فضای بین ستاره‌ای وجود آن به اثبات رسید. متان از گازهای گلخانه‌ای مهم بوده و نسبت به سایر گازهای گلخانه‌ای انرژی بیشتری را به دام می‌اندازد. با این وجود دی‌اکسید کربن به واسطه حجم بیشتر آن در اتمسفر مهم‌ترین گاز گلخانه‌ای است.

۱ - Methane

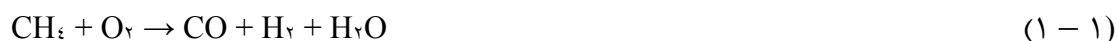
۲ - Alessandro volta

۱-۱-۱- منابع تولید متان

در طبیعت متان از تجزیه و پوسیده شدن بقایای موجودات زنده خصوصاً فساد بی‌هوازی گیاهان، یعنی شکستن مولکول‌های پیچیده آلی حاصل می‌شود. متان در اکثر سازه‌های نفتی جزء گازهای بالای چاه نفت بوده و در معادن زغال سنگ نیز به وفور یافت می‌شود. مهمترین منبع گاز متان، میدان گاز طبیعی می‌باشد. گاز در لایه‌های سطحی زمین از تجزیه بی‌هوازی مواد آلی تولید می‌شود. اصولاً در میدان گاز به همراه گاز متان درصد کمی از هیدروکربن‌های دیگر و مقداری هلیوم و نیتروژن نیز یافت می‌شود. منبع دیگری از گاز متان، بیوگاز حاصل از تخریب کودهای شیمیایی در زمین‌های کشاورزی و یا تخریب لجن فاضلاب‌ها و آشغال‌های جامد شهری و یا هر ماده‌ای که از نظر زیستی تحت شرایط بی‌هوازی تجزیه پذیر باشد. متان تولید شده از تخمیر مواد آلی در معده احشام، سالیانه حدود ۱۶٪ کل متان منتشر شده در اتمسفر را تشکیل می‌دهد.

۱-۱-۲- واکنش‌های متان

مهمترین واکنش‌های متان عبارتند از سوختن و هالوژن‌دار شدن. سوختن متان شامل مراحل متعددی است، در اولین مرحله متان تشکیل فرمالدهید (HCHO or H_2CO) می‌دهد و سپس یک رادیکال فرمیل (HCO) به وجود می‌آید که تشکیل مونوکسید کربن می‌دهد.



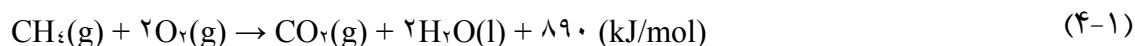
به دنبال این مرحله H_2 به H_2O اکسید می‌شود، این مرحله بسیار سریع و در کمتر از یک میلی ثانیه رخ می‌دهد.



در نهایت CO هم اکسید می‌شود و با آزاد کردن گرما تشکیل CO_2 می‌دهد.



بطور کلی واکنش موازنه شده سوختن متان به صورت زیر می‌باشد:



بطور کلی کنترل واکنش‌های متان مشکل است، برای مثال اکسیداسیون جزئی متان به متانول مشکل است و واکنش بطور کامل پیش می‌رود و تولید دی‌اکسید کربن و آب می‌کند.

متان تحت شرایط مناسب با همه هالوژن‌ها واکنش می‌دهد:



مکانیسم واکنش بالا، هالوژن‌دار شدن با رادیکال آزاد نامیده می‌شود.

پیوندهای کوالانسی C-H در متان، از جمله محکم‌ترین پیوندها در هیدروکربن‌ها هستند و همین دلیل استفاده متان را به عنوان ماده اولیه محدود می‌سازد. یافتن کاتالیزوری که سد فعالسازی شکستن پیوند C-H در متان را کاهش دهد، در صنعت اهمیت فراوانی دارد.

۱-۳-۱- موارد استفاده

مهمترین مورد استفاده متان، استفاده از آن به عنوان سوخت، برای تولید حرارت و گرما است. از آنجا که محصول فرآیند سوختن متان فقط آب و دی‌اکسید کربن است، لذا فرآیند سوختن متان نسبت به سایر سوخت‌های فسیلی (نفت، گازوئیل، بنزین...) تمیزتر است. همچنین مقدار گرمایی که از سوختن یک واحد جرمی متان تولید می‌شود نسبت به بقیه هیدروکربن‌ها بیشتر است. این موارد باعث می‌شود که متان بطور گسترده به عنوان سوخت مورد استفاده قرار گیرد. در صنعت، متان ماده اولیه منتخب برای تولید هیدروژن، متانول، اسید استیک و انیدرید استیک می‌باشد. در توربین‌های گازی و دیگ‌های بخار بطور گسترده از متان به عنوان سوخت استفاده می‌شود و تحقیقاتی نیز در حال انجام است، تا قابلیت کاربرد متان به عنوان سوخت در موشک و فضاپیماها مورد بررسی و ارزیابی قرار گیرد. توجه به این نکته مثبت حائز اهمیت است که متان در بسیاری از نقاط منظومه شمسی یافت می‌شود و در فضا امکان سوخت‌گیری وجود دارد [۱].

با توجه به کاربردهای متعدد متان بحث ذخیره سازی و انتقال آن حائز اهمیت است. متان بطور عمومی توسط لوله های انتقال و یا حاملان LNG^۱ منتقل می شود. با این وجود در بسیاری از کشورها هنوز متان را توسط کامیون های بارکشی انتقال می دهند. در سال های اخیر تلاش های فراوانی در جهت پیشرفت تکنولوژی سوختی خودروها به منظور دست یابی به سوختی با قابلیت حمل و کاربرد آسان و کاهش مصرف بنزین صورت گرفته است. از میان سوخت های ممکن گاز طبیعی که متان جزء اصلی آن است، بهترین مورد است. البته باید به این نکته توجه نمود که دانسیته انرژی متان نسبت به بنزین خیلی پایین و تقریباً ۰/۱۱٪ آن است.

برای ارتقای کیفیت کار و توانایی رقابت خودروهای گاز سوز با بقیه خودروها، لازم است مقدار مناسبی متان در مخزن سوخت آنها ذخیره شود. به علت پایین بودن دمای بحرانی متان (۱۹۱ k) تنها با کاهش دما نمی توان گاز را مایع نمود. کاربرد گاز طبیعی فشرده (CNG)^۲، راه حل دیگری است که البته این روش نیز بدون اشکال نیست زیرا در بردارنده مراحل چندگانه و گران تا ایجاد فشار (۲۵-۲۰ MPa) می باشد. در مقایسه با CNG، روش گاز طبیعی جذب شده (ANG)^۳، که در آن فشار (۴ MPa) لازم است کارآمدتر است. پیشرفت دانش نانو تکنولوژی نشان داده است که نانوتیوب ها به علت ساختار حفره دار و مساحت سطح بالا، می توانند برای جذب سطحی، ذخیره سازی و ساخت حسگر گازی بسیاری از گازها مورد استفاده قرار گیرند [۳ و ۲]. از آنجا که نیروهای بین مولکولی نقش مهمی را در فرآیند جذب گاز دارند در ادامه این فصل به طور خلاصه مورد بحث قرار می گیرند.

۲-۱- انواع نیروهای بین مولکولی

نیروهای بین ذره ای را می توان به چهار دسته تقسیم کرد:

۱ - Liquefied natural gas

۲ - Compressed natural gas

۳ - Absorbed natural gas

۱-۲-۱- هسته‌ای قوی

نیروهای هسته‌ای قوی عامل ایجاد پیوند بین نوترون‌ها و پروتون‌های درون هسته بوده و محدوده عملکرد آنها در حدود (nm) 10^{-4} است.

۱-۲-۲- هسته‌ای ضعیف

از طرف دیگر نیروهای هسته‌ای ضعیف دارای منشأ الکترومغناطیسی بوده و نظیر نیروهای هسته‌ای قوی دارای برد کوتاه هستند. با توجه به اینکه ابعاد مولکولی معمولاً از مرتبه 5×10^{-1} (nm) هستند، لذا نیروهای هسته‌ای ضعیف نمی‌توانند مشارکت موثری در نیروی بین مولکولی داشته باشند.

۱-۲-۳- گرانشی

نیروهای گرانشی دارای برد بسیار بلند بوده و می‌توانند به عنوان منبع جاذبه‌ای بین مولکولی در نظر گرفته شوند. با این وجود یک محاسبه‌ی ساده نشان می‌دهد که انرژی پتانسیل گرانشی بین دو اتم آرگون که در فاصله‌ی (nm) $0/4$ از یکدیگر قرار دارند تنها 7×10^{-52} (J) بوده و از لحاظ مرتبه بزرگی حدود 10^{30} برابر کمتر از نیروهای بین مولکولی است. بنابراین نیروهای بین مولکولی بایستی دارای یک منشأ الکترومغناطیسی باشند.

۱-۲-۴- الکترومغناطیسی

با پذیرش این مطلب که نیروهای بین مولکولی دارای منشأ الکترومغناطیسی باشند، منبع برهم‌کنش می‌تواند ناشی از ذرات باردار یعنی الکترون‌ها و پروتون‌هایی که یک اتم یا مولکول را تشکیل می‌دهند، باشد. چون نیروهای بین مولکولی در فواصل کوتاه دارای رفتار دافعه و در فواصل بلند دارای رفتار جاذبه‌ای هستند، بنابراین حداقل دو عامل باید در نیروی کل و در نتیجه در پتانسیل بین مولکولی متناظر مؤثر باشند. هنگامی که ابرهای الکترونی دو مولکول به اندازه‌ی کافی به یکدیگر

نزدیک شده و همدیگر را می پوشانند، طبق اصل طرد پائولی^۱ از اشغال یک ناحیه مشترک توسط بعضی از الکترون ها جلوگیری می شود و این باعث کاهش دانسیته الکترونی در آن محدوده می شود. در نتیجه بارهای مثبت هسته ها به طور کامل پوشانده نمی شوند و یک نیروی دافعه را بر یکدیگر اعمال می کنند. چنین نیروهای برد کوتاهی را نیروهای هم پوشانی می نامند.

بخش جاذبه ای نیروی بین مولکولی که دارای برد بلند است، به صورتی کاملاً متفاوت بوجود می آید و هنگامی اهمیت پیدا می کند که هم پوشانی ابرهای الکترونی ناچیز باشد. بر اساس ماهیت مولکول های برهم کنش کننده سه عامل ممکن است بر نیروی جاذبه بین آنها موثر باشند. یکی از این عوامل در همه برهم کنش های مولکولی شرکت دارد که به عنوان نیروی پراکندگی لندن^۲ شناخته می شود و برای مولکول های ساده این عامل تقریباً همیشه بزرگ ترین سهم را در نیروی جاذبه بین مولکولی دارد. در ادامه این عوامل معرفی می شوند.

۱-۲-۴-۱- نیروهای الکترواستاتیکی

بعضی از مولکول ها نظیر HCl به علت توزیع غیر یکنواخت بار الکتریکی در مولکول، دارای ممان دو قطبی دائمی می باشند. بنابراین بخشی از انرژی برهم کنش برد بلند این مولکول ها از برهم کنش الکترواستاتیکی بین ممان های دو قطبی آنها ناشی می شود. از آنجا که انجام چنین برهم کنشی با عدم پیچش در توزیع الکترونی مولکول ها همراه است، انرژی برهم کنش حاصل را یک انرژی مرتبه اول^۳ می نامند. از آنجا که انرژی الکترواستاتیکی بین دو قطبی ها با جهت گیری نسبی آنها مرتبط است، لذا گاهی آن را انرژی جهت گیری می نامند.

۱-۲-۴-۲- نیروهای القایی

۱ - Pauli exclusion principle

۲ - London dispersion forces

۳ - First order

اگر برهم کنش بین یک مولکول با گشتاور دو قطبی دائمی و یک مولکول غیر قطبی را در نظر بگیریم، میدان الکتریکی مولکول دو قطبی با تغییر توزیع بار الکتریکی در مولکول دیگر یک گشتاور دو قطبی القایی در آن به وجود می آورد. دوقطبی القا شده با دوقطبی القا کننده برهم کنش انجام داده و یک نیروی جاذبه ای تولید می شود. از آنجا که وقوع و انجام این نوع برهم کنش به ایجاد تغییر شکل در ابرهای الکترونی بستگی دارد، لذا آن را انرژی برهم کنش درجه دوم^۱ می نامند. به هنگام برهم کنش دو مولکول دارای دو قطبی دائمی، سهم القایی همزمان با سهم الکترواستاتیکی وجود دارد.

۱-۲-۴-۳- نیروهای پراکندگی لاندن

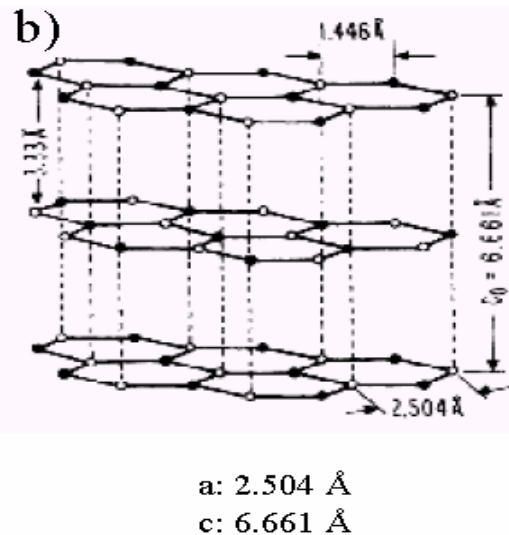
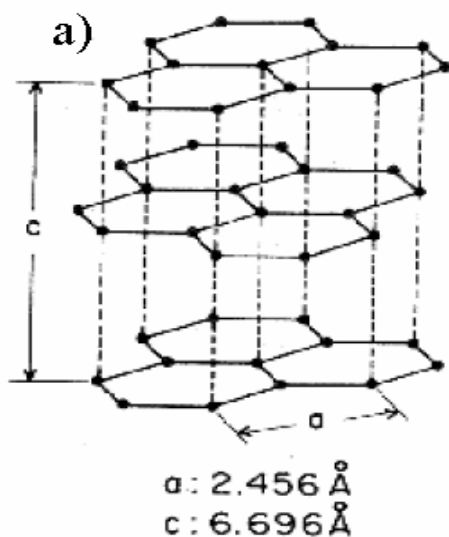
در برهم کنش بین دو مولکول که هیچ کدام از آنها گشتاور دوقطبی دائمی ندارند، درک منشأ انرژی جاذبه ممکن است تا حدودی مشکل بنظر برسد. می توان تصور نمود که در یک مولکول فاقد گشتاور دو قطبی دائمی، الکترون ها دارای یک حرکت پیوسته بوده و دانسیته الکترونی در مولکول به طور پیوسته در حال نوسان است. بنابراین در هر لحظه از زمان هر مولکول دارای یک دو قطبی الکتریکی لحظه ای خواهد بود که مقدار آن با نوسان دانسیته الکترونی افت و خیز می کند. دو قطبی لحظه ای ایجاد شده در یک مولکول، یک دو قطبی لحظه ای را در مولکول دوم القا می کند. دو قطبی القا شده در مولکول دوم و دو قطبی القا کننده در مولکول اول با هم برهم کنش انجام داده و حاصل آن انرژی جاذبه ای است که انرژی پراکندگی نامیده می شود. به عبارت دیگر انرژی پراکندگی حاصل همبستگی نوسانات دانسیته الکترونی دو مولکول است. انرژی پراکندگی از نوع مرتبه دوم است، زیرا دربردارنده واپیچش دانسیته الکترونی مولکول ها است. در مورد مولکول های خنثی و غیر قطبی، این نوع برهم کنش تنها عامل موثر بر انرژی برد بلند است [۴].

۱ - Second order energy

۳-۱- نانساختارهای بورنیتريد

۱-۳-۱- هگزگونال بورنیتريد

بورنیتريد، BN، يك تركيب شيميايي دوتايي است كه از تركيب نسبت مساوي از اتم هاي بور و نيتروژن تشكيل شده است. BN داراي ويژگي هاي جالب گرمائي، مكانيكي، نوري و الكتروني بوده و ايزومورفيسم^۱ آن به دو صورت است، آلوتروپ^۲ الماس مانند كه بورزان^۳ ناميده مي شود و يكي از سخت ترين مواد شناخته شده بعد از الماس است. آلوتروپ ديگر آن كه هگزگونال بورنیتريد (h-BN) ناميده مي شود شبه گرافيتي بوده و با گرافيت هم الكترون است. گرافيت به صورت يك شبه فلز عمل نموده و هادي الكتريسيته است، در واقع شبكه پيوندهاي π كه در صفحه شش گوشه اي ها گسترده شده اند هدايت الكتريكي را انجام مي دهند. با اين وجود در مورد h-BN پيوندهاي قطبي B-N از انتقال الكترون جلوگیری مي کنند و اين امر باعث مي شود كه بورنیتريد يك تركيب تقريباً نارسانا با شكاف تراز انرژي در حدود ۵ (eV) باشد. در شكل (۱-۱) ساختار مواد اوليه سازنده نانوتيوب هاي كربني و بورنیتريد يعني گرافيت و هگزگونال بورنیتريد آورده شده است.



۱ - Isomorphism

۲ - Allotrope

۳ - Borazon