بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه گیلان

دانشکده پردیس بین الملل

پایان‌نامه کارشناسی ارشد

عنوان:

پیش بینی خواص مکانیکی نانو صفحات کربنی با استفاده از تئوری تابع چـــگالی

از

مصطفی صادقی

استاد راهنما:

دکتر رضا انصاری خلخالی

مهر ماه ۱۳۹۲

دانشکده پردیس بین الملل
مکانیک طراحی کاربردی

پیش بینی خواص مکانیکی نانو صفحات کربنی با استفاده از تئوری تابع چـــگالی

از
مصطفی صادقی

استاد راهنما:
دکتر رضا انصاری خلخالی

مهر ماه ۱۳۹۲

تقدیم به :

پدر و مادر عزیزم

که ، همیشه در تمامی مشکلات زندگی پشتیبانم بودند.

تقدیر و تشکر

حمد و سپاس بیکران، خداوند داور دادار را که به اینجانب توفیق داد تا برهه‌ای از سالهای تحصیلی خود را در محضر اساتید ارجمند و بزرگوار افتخار شاگردی یافته و در کنار تحصیل درس تادیب نفس بیاموزم. بر این ترتیب بر خود فرض می‌دانم به رسم قدردانی از استاد ارجمند راهنما جناب آقای دکتر رضا انصاری خلخالی که در محضر گران‌سنگشان زانوی تعلم زده و بهره‌های وافی از وجود شریف و علم سرشارشان یافته‌ام سپاسگزاری و تشکر کنم. امیدوارم بعد از این نیز همواره بنده را از نعمت علم و ادب وجودشان بهره‌مند فرمایند.

و از مدیریت محترم و زحمتکش گروه ، جناب آقای دکتر علی باستی که در طول این مدت از حضور نورانیشان بهره برده‌ام نهایت تشکر و سپاس را دارم.

و در نهایت از کلیه کسانی که در حین انجام این پژوهش یاریگر بنده بوده‌اند تشکر و قدردانی می‌نمایم و سلامتی روزافزون این عزیزان را از خداوند متعال خواهانم.

اجرکم عندالله

فهرست مطالب

عنوان		صفحه
چکیده فارسی		ذ
چکیده انگلیسی		ر
فصل اول		
۱-۱	مقدمه	۱
۱-۲	تاریخچه نانوتکنولوژی	۲
۱-۳	دسته بندی نانو مواد و تاریخچه	۳
۱-۲-۲	نانو لایه‌ها	۳
۱-۲-۳	نانو پوشش‌ها	۴
۱-۲-۴	نانو سیم ها	۴
۱-۲-۵	نانو حفره	۵
۱-۲-۶	نانو ذرات	۵
۱-۲-۷	نانو لوله	۵
۱-۲-۸	نانو صفحه گرافن	۶
۱-۴	مدلسازی محاسباتی نانوسازه ها	۹
۱-۴-۱	مدل دینامیک مولکولی	۹
۱-۴-۲	مدل مکانیک مولکولی	۱۰
۱-۴-۳	مدل کوانتوم ملوکولی	۱۰
۱-۵	هدف از انجام این پایان نامه	۱۱
فصل دوم	نانو سازه های کربنی	
۲-۱	گونه های مختلف کربن	۱۲
۲-۱-۱	کربن بی شکل	۱۲
۲-۱-۲	الماس	۱۳
۲-۱-۳	گرافیت	۱۴
۲-۱-۴	فلورن	۱۵
۲-۱-۵	نانو لوله های کربنی	۱۷
۲-۱-۵-۱	صفحه ی گرافنی	۱۷
۲-۱-۵-۲	هندسه ی نانو لوله ی تک جداره	۱۹
۲-۱-۵-۳	سلول واحد نانو لوله	۲۴
فصل سوم	تئوری تابعی چگالی (DFT)	
۳-۱	مقدمه	۲۸
۳-۲	تقریب بورن- اوپنهایمر (بی دررو)	۲۹
۳-۳	معادلات کوهن- شم	۳۰
۳-۳-۱	تقریب چگالی موضعی (LDA)	۳۱

۲-۳-۳	مشکلات تقریب چگالی موضعی	۳۲
۳-۳-۳	تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)	۳۲
۴-۳	رهیافت شبه پتانسیل	۳۳
۲-۴-۳	انواع شبه پتانسیل	۳۵
۵-۳	آشنایی با برنامه کامپیوتری Quantum ESPRESSO	۳۶
۶-۳	توانایی‌های کد PWscf	۳۶
۷-۳	برنامه‌های موجود در کد PWscf	۳۷
۸-۳	حل خود سازگار سیستم در کد PWscf	۳۹
۱-۸-۳	قسمت CONTROL	۳۹
۲-۸-۳	قسمت ELECTRONS	۴۲
۳-۸-۳	قسمت ATOMIC-SPECIES	۴۳
۴-۸-۳	قسمت ATOMIC-POSITIONS	۴۳
۵-۸-۳	قسمت K_POINT	۴۳
فصل چهارم	بحث و نتیجه گیری	۴۴
۱-۴	خواص مکانیکی نانو صفحه گرافن	۴۴
۱-۱-۴	بهینه سازی ساختارها	۴۴
۲-۴	مدول یانگ و نسبت پواسون	۴۶
۳-۴	مدول بالک	۴۸
۴-۴	مدول برشی	۵۰
۵-۴	تاثیر حرارت بر روی خواص مکانیکی صفحه گرافن	۵۲
۱-۵-۴	سلول اولیه و فرضیات	۵۳
۲-۵-۴	مدل سازی و روش	۵۴
۳-۵-۴	اثر حرارت بر روی مدول یانگ صفحه گرافن	۵۵
۴-۵-۴	اثر حرارت بر روی مدول بالک صفحه گرافن	۶۰
۶-۴	جذب فیزیکی	۶۵
۱-۶-۴	بهینه سازی ساختارها	۶۶
۲-۶-۴	مدلسازی جذب فیزیکی	۶۷
۳-۶-۴	جذب فیزیکی مولکول گاز هیدروژن بر روی گرافن	۶۹
۴-۶-۴	جذب فیزیکی مولکول گاز اکسیژن بر روی گرافن	۷۳
۵-۶-۴	جذب فیزیکی مولکول گاز هیدروژن بر روی نانولوله ی تک دیواره زیگزاگ (۰و۸)	۷۶
۶-۶-۴	جذب فیزیکی مولکول گاز اکسیژن بر روی نانولوله ی تک دیواره زیگزاگ (۰و۸)	۷۷
۷-۴	خواص مکانیکی نانو صفحه گرافن تحت جذب فیریکی	۷۹
۱-۷-۴	مدول یانگ و ضریب پوآسون گرافن تحت جذب فیزیکی مولکول هیدروژن	۸۱
۲-۷-۴	مدول یانگ و ضریب پوآسون گرافن تحت جذب فیزیکی مولکول اکسیژن	۸۲
۸-۴	جذب شیمیایی اتم هیدروژن بر روی نانو صفحه گرافن	۸۴
۱-۸-۴	سلول اولیه و فرضیات	۸۴
۲-۸-۴	مکان های جذب سطحی	۸۴

۴-۸-۳	روش و مراحل	۸۵
۴-۸-۴	محاسبه خواص مکانیکی	۸۶
۴-۸-۴-۲	مدول یانگ و نسبت پواسون	۸۶
۴-۸-۴-۳	مدول بالک	۸۷
۴-۸-۴-۴	مدول برشی	۸۸
۴-۹	نتیجه گیری	۸۹
۴-۱۰	پیشنهادات ادامه کار	۹۰
۴-۱۱	مراجع	۹۱

فهرست شکل‌ها

شکل (۲-۱) توده کربن بی‌شکل ۱۲

شکل (۲-۲) شبکه‌کریستالی‌الماس ۱۳

شکل (۲-۳) شبکه کریستالی ۱۴

شکل (۲-۴) شبکه کریستالی فلورن C_{60} ۱۶

شکل (۲-۵) صفحه گرافن و نحوه رول کردن آن برای تولید نانولوله (n,m) ۱۷

شکل (۲-۶) شبکه گرافن همراه با سلول واحد آن که در شکل سایه زده شده که دارای دو اتم در سلول واحد می‌باشد ۱۸

شکل (۲-۷) نمای شماتیک از الف. نانولوله آرمچیر، ب. نانولوله زیگ‌زاگ، ج. نانولوله کایرال ۲۰

شکل (۲-۸) نمایش اندیس‌های کایرال (n,m) برروی صفحه گرافن ۲۵

شکل (۲-۹) سلول واحد الف. نانولوله آرمچیر (۵.۵)، ب. نانولوله زیگ‌زاگ (۹.۰) ۲۶

شکل (۲-۱۰) سلول واحد نانولوله کایرال (۶.۳) ۲۷

شکل (۳-۱) تفکیک الکترون های اتم Si، به الکترون های مغزه و ظرفیت ۳۴

شکل (۴-۱) نمای بالا از ساختار گرافن و سلول واحد شش وجهی ۴۶

شکل (۴-۲) انرژی کرنش برحسب کرنش در محدوده همساز ۴۷

شکل (۴-۳) انرژی کرنش برحسب کرنش در محدوده همساز ۴۸

شکل (۴-۴) نمودار تغییرات انرژی کرنشی با مساحت ۴۹

شکل (۴-۵) درصد افزایش طول پیوندی C-C مدول بالک و مدول یانگ ۴۹

شکل (۴-۶) نحوه اعمال کرنش برشی به سلول واحد هگزاگونال ۵۰

شکل (۴-۷) نمودار انرژی کرنشی بر حسب کرنش خطی و زاویه ای صفحه گرافن ۵۱

شکل (۴-۸) سلول واحد تک لایه ی بهینه شده ی گرافن شش وجهی ۵۳

شکل (۴-۹) انرژی فونون ، تابعـی از دما در کرنـش های مختلف ۵۷

شکل (۴-۱۰) انرژی کرنشی گرافن به عنوان یک تابع از کرنش در درجه ی حرارت های مختلف ۵۸

شکل (۴-۱۱) استحـکام داخل صفحه به عنوان تابعی از دما ۵۹

شکل (۴-۱۲) انرژی فونون و کرنش مینیمم انرژی گرافن تک لایه با توجه به دما ۶۱

شکل (۴-۱۳) تغییرات کل انرژی در ارتباط با سطوح مختلف کرنش با افزایش دما ۶۱

شکل (۴-۱۴) تنوع کرنش در مقابل نقاط مختلف برای گرافن تک لایه برای دمای صفر کلوین ۶۲

شکل (۴-۱۵) تاثیـرات دما به منحنی انرژی کرنش در نقاط مختلف برای گرافن تک لایه ۶۳

شکل (۴-۱۶) تغییرات مدول بالک صفحه گرافن در برابر حرارت ۶۴

شکل (۴-۱۷) مشتق اول مدول بالک در برابر حرارت ۶۴

شکل (۴-۱۸) موقعیت‌های قرار گیری مولکول ها بر روی صفحه گرافن و نانولوله ۶۸

شکل (۴-۱۹) سلول واحد ریلکس شده گرافن در غیاب جذب فیزیکی مولکول دو اتمی ۶۹

شکل (۴-۲۰) تغییرات انرژی بستگی بر حسب تغییر فاصله‌ی مولکول H_2 از صفحه‌ی گرافن، تقریب چگالی موضعی ۷۱

شکل (۴-۲۱) تغییرات انرژی بستگی بر حسب تغییر فاصله‌ی مولکول H_2 از صفحه‌ی گرافن، تقریب شیب تعمیم یافته. ۷۱

شکل (۴-۲۲) تغییرات انرژی بستگی بر حسب تغییر فاصله‌ی مولکول O_2 از صفحه‌ی گرافن، تقریب چگالی موضعی. ۷۵

شکل (۴-۲۳) تغییرات انرژی بستگی بر حسب تغییر فاصله‌ی مولکول O_2از صفحه‌ی گرافن، تقریب شیب تعمیم. ۷۵
شکل (۴-۲۴) تغییرات انرژی بستگی بر حسب تغییر فاصله‌ی مولکول H_2 از سطح نانولوله(۰و۸)، تقریب چگالی موضعی. ۷۷
شکل (۴-۲۵) تغییرات انرژی بستگی بر حسب تغییر فاصله‌ی مولکول O_2 از سطح نانولوله(۰و۸)، تقریب چگالی موضعی ۷۸
شکل (۴-۲۶) انرژی کرنش برحسب کرنش در محدوده همساز با جذب مولکول هیدروژن ۸۲
شکل (۴-۲۷) انرژی کرنش برحسب کرنش در محدوده همساز با جذب مولکول اکسیژن ۸۳
شکل (۴-۲۸) نحوه آرایش سلول واحد پایدارترین حالت جذب شیمیایی اتم هیدروژن بر صفحه گرافن ۸۵
شکل (۴-۲۹) مدول یانگ نانو صفحه گـــرافن در حالت جذب شیمیایی اتم هیدروژن ۸۶
شکل (۴-۳۰) مدول بالک نانو صفحه گرافن در حالت جذب شیمیایی اتم هیدروژن ۸۷
شکل (۴-۳۱) مدول برشی نانو صفحه گرافن در حالت جذب شیمیایی اتم هیدروژن ۸۸

فهرست جدول‌ها

جدول (۲-۱) برخی خواص فیزیکی و مکانیکی الماس ۱۳

جدول (۲-۲) برخی خواص فیزیکی و مکانیکی گرافیت ۱۴

جدول (۲-۳) برخی خواص فیزیکی و مکانیکی فلورن C_{60} ۱۶

جدول (۲-۴) مقادیر پارامترهای مختلف برای نانولوله‌های آرمچیر و زیگ‌زاگ ۲۴

جدول (۴-۱) نتایج بدست آمده ی طول پیوندهای بهینه، ستون اول از سمت چپ. نتایج تجربی طول پیوندها، ستون دوم از سمت چپ. ۴۴

جدول (۴-۲) مقادیر مختلف مدول یانگ سطحی ارایه شده توسط محققین مختلف ۴۷

جدول (۴-۳) تغییرات طول پیوندی در کرنش برشی ۵۱

جدول (۴-۴) پارامتر های شبکه و موقعیت اتمی برای کرنش های مختلف ۵۷

جدول (۴-۵) انرژی و فاصله‌ی پایدارترین حالات قرار گرفتن مولکول H_2 بر روی صفحه‌ی گرافن. ۷۲

جدول (۴-۶) انرژی و فاصله‌ی پایدارترین حالات قرار گرفتن مولکول O_2 بر روی صفحه‌ی گرافن. ۷۶

جدول (۴-۷) انرژی و فاصله‌ی پایدارترین حالات قرار گرفتن مولکول H_2 بر روی سطح نانولوله(۰و۸). ۷۷

جدول (۴-۸) انرژی و فاصله‌ی پایدارترین حالات قرار گرفتن مولکول O_2 بر روی سطح نانولوله(۰و۸). ۷۹

چکیده

پیش بینی خواص مکانیکی نانو صفحات کربنی با استفاده از تئوری تابع چـــگالی DFT

مصطفی صادقی

در این پایان‌نامه به بررسی خواص مکانیکی نانو صفحات کربنی از قبیل مدول یانگ،مدول بالک، مدول برشی و ضریب پواسون به روش شبیه‌سازی مکانیک کوانتوم پرداخته شده است. برای این منظور، جهت محاسبه انرژی پیوندی بین اتمهای کربن از تئوری تابع چـــگالی استفاده شده است. در این روش یک معادله شرودینگر برای مجموعه الکترون‌ها و هسته‌های موجود در درون ساختار نوشته می‌شود و سپس سعی می‌شود به اعمال تقریب‌هایی این معادله شرودینگر بس ذره‌ای حل و کلیه خواص ساختار از جمله انرژی آن استخراج شود. علاوه بر این در این مطالعه به اثر افزایش دما، جذب فیزیکی و شیمیایی به خواص مکانیکی نانو ساختار مورد بررسی قرار می‌گیرد و نتایج بدست آمده در حد امکان با نتایج بدست آمده در تاریخچه تحقیقات مقایسه گردیده است که همخوانی قابل قبولی بین این نتایج مشاهده می‌شود.

کلیدواژه: شبیه‌سازی مکانیک کوانتوم ، تئوری تابع چـــگالی ، خواص مکانیکی ، نانو صفحات کربنی.

فصل اول

معرفی نانو تکنولوژی و تاریخچه تحقیقات

فصل اول: معرفی نانو تکنولوژی و تاریخچه تحقیقات

۱-۱. مقدمه

نانوتکنولوژی محدوده‌ای از تکنولوژی می‌باشد که در این محدوده، انسان قادر است انواع ترکیبات، آلیاژها، وسایل و ابزارها و به طورکلی سیستم‌ها و سازه‌های گوناگون را در مقیاس اتمی و مولکولی و در ابعاد نانومتری[۱] طراحی کرده و به مرحله ساخت برساند. دو دهه ی گذشته شاهد پیشرفت بی سابقه ای در زمینه ی علم و فناوری نـانو بـوده اسـت. همانگونـه کـه تعـداد فزاینـده نشـریات مختص به ساخت، توصیف ویژگی ها و کاربردهای نانو ساختار ها گویای این امـر اسـت. روش سـاخت در اکثـر مـوارد، بـه صـورت جابجا نمودن اتم‌ها و مولکول‌ها و قرار دادن آنها در موقعیت‌های مناسب است. محدوده ابعادی مورد بحث در نانوتکنولوژی عبـارت است از ابعادی بین ۱ تا ۱۰۰ نانومتر که این محدوده، بخش زیادی از محدوده ابعادی علوم مختلـف را شـامل مـی‌شـود. همچنـین، می‌توان نانوتکنولوژی را بر اساس اجزاء تشکیل دهنده این نام گذاری، یعنی نانو و تکنولوژی تعریف کرد. تکنولوژی در کل بـه معنـی ساخت ابزارهای کاربردی با استفاده از قوانین علمی می‌باشد و نانومتر به معنی یک میلیاردم متر است. بنـابراین، نـانو تکنولـوژی بـه معنی ساخت ابزارهای کاربردی در اندازه‌های یک میلیاردم متر می‌باشد. به طور خلاصـه، نـانوتکنولـوژی شـامل دسـتکاری مـواد در حوزه اتم‌ها بوده که با قرار دادن اتم‌ها در جای خاص خود، اجازه می‌دهد تا موادی سبک‌تر، محکم‌تر، ارزان‌تـر، تمیـزتـر و بـا دقـت ابعادی بالاتر ساخته شوند [۱].

تعریف دیگری که می‌توان از نانو تکنولوژی ارائه نمود این است که نانو تکنولوژی شکل جدیدی از ساخت مواد بـه وسـیله کنتـرل و دستکاری واحدهای ساختمانی آنها درمقیاس نانو می‌باشد. به عبارت دیگر نانو تکنولوژِی تولید کارآمد مـواد و دسـتگاهها بـا کنتـرل ماده درمقیاس طولی نانو متر و بهره‌برداری ازخواص و پدیده‌های نو ظهوری است که درمقیاس نانو توسعه یافته‌اند.

شاید این سوال در ذهن پدید آید که چه چیزی درمقیاس نانومتری وجود دارد که یک تکنولوژی برپایـه آن بنـا نهـاده شـده اسـت. آنچه باعث ظهور نانو تکنولوژی شده نسبت سطح به حجم بالای نانومواد است. این موضوع یکی ازمهمترین خصوصیات مـواد تولیـد شده درمقیاس نانو است. دراین مقیاس، مواد شروع به تغییر رفتاری می‌کنند و رفتارسطوح بررفتار توده‌ای مـاده غلبـه مـی‌کننـد. در

[۱] Nanometer

این مقیاس، برخی روابط فیزیکی که برای مواد معمولی کاربرد دارند، نقض می‌شوند و بعنوان نمونه خواص مکـانیکی (مثـل سـختی خیره کننده و مقاومت کششی و خواص حرارتی و الکترونیکی عالی)، دراین مقیاس بطور کلـی متفـاوت از خـواص درمقیـاس مـاکرو خواهد بود.

۱-۲. تاریخچه نانوتکنولوژی

استفاده از نانوتکنولوژی توسط انسان، برخلاف تصور عمومی دارای سابقه تاریخی طولانی می‌باشد. در این رابطه، شواهدی مبنی بر نانو ساختاری بودن رنگ آبی به کار برده شده توسط قوم مایا وجود دارد [۲] . پس از آن، رومی ها از این مواد در ساخت جام‌های با رنگ‌های زنده استفاده کردند، به این صورت که آنها از ذرات طلا برای رنگ آمیزی این جام‌ها بهره می‌گرفتند. نمونه‌ای از این جام‌ها که برای نخستین بار کشف گردید، جام لیکورگوس[۱] می باشد که متعلق به قرن چهارم قبل از میلاد بوده و دارای ذرات نانومتری طلا و نقره است که در هنگام قرار گرفتن در نورهای مختلف، رنگ‌های گوناگونی را از خود نشان می‌دهد [۱].

در میان شاخه‌های مختلف علمی، بیولوژی اولین شاخه‌ای بود که وارد این حوزه علمی گردید. اساس کار ماشین های بیولوژیکی بر اساس واکنش‌های در ابعاد نانومتری می‌باشد. از مورچه، مگس و پشه می‌توان به عنوان نمونه‌ای از نانوماشین‌های طبیعی نام برد. با این وجود، داستان علمی نانوتکنولوژی چیز دیگری است. یکی از نخستین گزارش‌های علمی در این رابطه، گزارش ساخت کلویید ذرات طلا در سال ۱۸۵۷ توسط مایکل فارادی[۲] می‌باشد. بعدها از کربن سیاه به عنوان یک ماده افزودنی برای رنگ کردن و استحکام بخشی به لاستیک استفاده شد. استفاده از کاتالیست‌های با ساختار نانومتری، از ۷۰ سال پیش آغاز گردید. در اوایل دهه ۱۹۴۰، ذرات نانومتری تبخیر و ته نشین شده سیلیکا ساخته شد و در آمریکا و آلمان به عنوان جایگزینی برای ذرات ریز کربن سیاه برای مقاوم سازی لاستیک به مصرف رسید. ذرات آمورف[۳] سیلیکا، کاربردهای وسیعی را در محصولات تجاری روزمره پیدا کردند. اینگونه محصولات دارای محدوده وسیعی هستند. از پودرهای شیر خشک بدون شیر مخصوص قهوه گرفته تا لاستیک اتومبیل و فیبرهای نوری در این محدوده قرار دارند [۱]. در دهه‌های ۱۹۶۰ و ۱۹۷۰، پودرهای نانومتری فلزات برای ذخیره اطلاعات بر روی نوار ساخته شد. در سال ۱۹۷۶، کریستال‌های نانومتری توسط گرانکوسیت[۴] و بورمن[۵]، با استفاده از روش تبخیر گاز کامل تولید گردید [۳].

---

[۱] Lycurgus
[۲] Michael Faraday
[۳] Amorf
[۴] Granqvist
[۵] Buhrman

ریچارد فاینمن برنده جایزه نوبل فیزیک درسال ۱۹۶۵ و یکی از مشهورترین فیزیکدانان دهه ۶۰ میلادی که ملقب به پـدرعلم نـانو تکنولوژی است. درسال ۱۹۶۰ در همایش جامعه فیزیک آمریکا طی یک سخنرانی، پیش بینی انقلابـی وجـذابی را بیـان نمـود. وی بیان کرد" فضای زیادی در پایین وجود دارد". همین جمله پایه علم نانو تکنولـوژی شـد. وی در آن سـخنرانی ایـن نکتـه را مطـرح ساخت که اصول علم فیزیک چیزی جزء امکان ساختن اتم به اتم اشیاء را بیان نمی‌کنند.

وی ایده خود را از سیستم‌های بیولوژیکی گرفت که می‌توانند بسیار کوچک و در عین حال فعال باشند. فاینمن با انجام محاسباتی نشان داد که می‌توان با استفاده از پرتو الکترونی، کل اطلاعات نسخه ۲۵۰۰۰ صفحه‌ای فرهنگ لغات بریتانیکا را بر روی یک سر سوزن جای داد. همچنین، او این مطلب را بیان نمود که به کمک حک کردن و بدون عملیات کدگذاری، می‌توان کل اطلاعات انسان که تا آن زمان به صورت کتاب در آمده بود را بر روی یک برگ حک کرد. فاینمن همچنین خطوط حکاکی شده‌ای روی یک سطح را فرض نمود که عرضی به اندازه چند اتم داشتند و تصور کرد که می‌توان این خطوط را بوسیله تابش پرتوهای الکترونی به یک ماده زیر لایه تولید نمود که این بحث ، پایه واساس تولید تراشه‌های سیلیکونی امروزی است. وی پیشنهاد کرد که می‌توان اتمهای مجزا را دستکاری کرد تا مواد و ساختارهای کوچکی با خواص متفات را تولید نمود [۴]. وی همچنین ساختن ابزارهای کوچک با استفاده از ابزارهای بزرگ و نیز ساختن ابزارهای بازهم کوچک‌تر را با استفاده از این ابزارها مورد تایید قرار داد [۱]. اگرچه پیش‌بینی های فاینمن در بین دانشمندان هم دوره‌اش از پذیرش خوبی برخوردار نشد. اما امروزه این پیش‌بینی‌ها به حقیقت پیوسته است.

۱-۳ . دسته بندی نانو مواد و تاریخچه

مواد در مقیاس نانو به دسته‌های زیر قابل تقسیم می‌باشند:

۱-۳-۱. نانو لایه‌ها[۱]

در عصر حاضر، تغییرات سطحی به یک فرآیند اساسی تبدیل شده است. در این مورد، روش‌هایی شامل ایجاد لایه های نازک یا پوشش‌ها بر روی سطوح، افزایش کارآیی و محافظت سطوح را به همراه دارد. رسوب یک لایه نازک برای پوشش‌دهی در اکثر صنایع جایگاه مهمی یافته است. نانو لایه‌ها دارای یک ساختار نانو ذره‌ای هستند که این ساختار یا از توزیع نانو ذرات در لایه ایجاد می‌شود و یا به وسیله یک فرآیند کنترل شده، یک نانو ساختار در حین رسوب ایجاد می‌شود. فیلم‌های نانویی لایه نازک که بر روی سطح یک زیر پایه نشانده می‌شوند، عمدتا کاربردهای الکترونیکی دارند که می‌توان به زیرلایه‌ها، خازن‌ها، قطعات حافظه،

[۱] Nanolayers

آشکارسازی مادون قرمز و راهنماهای موجی اشاره نمود [۵].

۱-۳-۲. نانو پوشش‌ها[۱]

پوشش‌ها دارای کاربردهای متنوعی از صنایع اتومبیل گرفته تا صنایع لوازم خانگی می‌باشند. این پوشش‌ها سطوحی را که در معرض آسیب‌های محیطی مانند باران، برف، نمک‌ها، رسوب‌های اسیدی، اشعه ماوراء بنفش، رطوبت و نور آفتاب می‌باشند، محافظت می‌نماید. همچنین، پوشش‌ها قابلیت خش برداشتن، تکه تکه شدن و یا آسیب دیدگی در زمان استفاده، ساخت و حمل و نقل را دارند. با یافتن راه‌هایی می‌توان از آسیب دیدن روکش‌ها جلوگیری نمود. فناوری نانو، ایجاد نانو پوشش‌ها را پیشنهاد می‌کند. نانو پوشش‌ها حفاظتی برای افزایش مقاومت در برابر خوردگی، افزایش سختی سطوح و حفاظت در مقابل عوامل مخرب محیطی می‌باشند. علاوه بر این، فناوری نانو از خش برداشتن، تکه تکه شدن و خورده شدن روکش‌ها جلوگیری می‌کند. از کاربردهای نانو پوشش‌ها می‌توان به روکش‌های ضد انعکاس در مصارف خودروسازی، روکش‌های محافظ و روکش‌های تزئینی اشاره نمود [۵].

۱-۳-۳. نانو خوشه‌ها[۲]

در اوایل دهه ۸۰ میلادی، فیزیکدانان کشف کردند که اتم‌های گازی فلزی به شکل حباب‌هایی پایدار و با تعداد اتم‌های مشخصی، مجتمع می‌شوند. در دهه ۹۰ میلادی، آنها اثر مشابهی را در کار بر روی سطوح مشاهده نمودند که اتم‌های گازی می‌توانند به شکل خوشه‌هایی با اندازه‌های ویژه روی سطح بچسبند. با توجه به تحقیقات و محاسبات، محققین دریافتند که اتم‌ها، سطح را برای پیدا کردن مکانی که به کمترین مقدار انرژی برسند، جست و جو می‌کنند. آرایش‌های ۱ تا ۲ نانومتری از این خوشه‌ها، برای وسایل پیشرفته نوری و الکتریکی مناسب می‌باشند. زیرا الکترون‌های محبوس شده در این فضاها مجبور هستند که فوتون‌هایی با طول موج سفید ایجاد نمایند. اگر خوشه‌ها دارای خاصیت مغناطیسی شوند، می‌توانند برای وسایل ذخیره اطلاعات که بسیار فشرده هستند و کاتالیست‌ها برای واکنش‌های شیمیایی استفاده شوند [۵].

۱-۳-۴. نانو سیم‌ها[۳]

در حالت کلی، سیم به ساختاری گفته می‌شود که در جهت طولی گسترش داده شده و در دو جهت دیگر بسیار محدود باشد. یک خصوصیت مهم این ساختارها که دارای دو خروجی هستند، رسانایی الکتریکی می‌باشد. ساخت سیم‌هایی در ابعاد نانومتری، هم از نظر علمی و هم از نظر تکنولوژیکی بسیار مورد علاقه می‌باشد. زیرا در ابعاد نانومتری، خواص غیرمعمولی از خود بروز می‌دهند. مثال‌هایی از کاربرد نانوسیم‌ها عبارتند از: وسایل مغناطیسی، سنسورهای شیمیایی، نشانگرهای بیولوژیکی و اتصالات داخلی در نانو

[۱] Nanocoating
[۲] Nanoduster
[۳] Nanowire

الکترونیک مانند اتصال دو قطعه ابر رسانای آلومنیومی که توسط نانو سیم نقره صورت می‌گیرد [۵].

۱-۳-۵. نانو حفره‌ها[۱]

مواد با اندازه‌های حفره‌ای در محدوده نانومتری، کاربردهای صنعتی جالبی را از خود بروز می‌دهند. به دلیل ویژگی ممتاز آنها با توجه به عایق حرارتی بودن، رهایش مواد کنترل شده و کاربردشان، آنها به عنوان پرکننده‌هایی برای کاتالیزورها در علم شیمی، مورد توجه قرار گرفته‌اند. این گروه از مواد، پتانسیل بالایی در کاتالیست‌ها، عایق‌های حرارتی، مواد الکترودی، فیلترهای محیطی و غشاها دارا می‌باشند [۵].

۱-۳-۶. نانو ذرات[۲]

نانو ذرات از ده‌ها یا صدها اتم یا مولکول و با اندازه‌های مختلف مانند کریستالی، کروی شکل، سوزنی شکل و غیره ساخته شده اند. اغلب نانو ذرات که به صورت تجاری مورد استفاده قرار می‌گیرند، به شکل پودر خشک و یا به صورت مایع می‌باشند. لازم به ذکر است که نانو ذرات ترکیب شده در یک محلول آلی یا آبی که به شکل خمیری هستند نیز مورد توجه است. این ذرات در شکل‌های گوناگونی مانند کروی، ورقه‌ای، شاخه‌ای، لوله‌ای و میله‌ای یافت می‌شوند [۵].

۱-۳-۷. نانو لوله‌ها[۳]

لفظ نانو لوله‌ها در حالت عادی در مورد نانو لوله‌های کربنی به کار می‌رود، هرچند که اشکال دیگری از نـانو لولـه‌هـا همچـون انـواع ساخته شده از نیترید بور یا حتی نانو لوله‌های خود آرای آلی نیز وجود دارند. نانو لوله‌های کربنی، یکـی از مهمتـرین سـاختارهـا در مقیاس نانو می‌باشند. این مواد، نخستین بار در سال ۱۹۹۱ توسط دانشمندی ژاپنی بـه نـام ایجیمـا[۴] در درون دوده‌هـای حاصـل از تخلیه الکتریکی کربن، در یک محیط حاوی گاز نئون کشف گردید [۶].

این ترکیبات شیمیایی، با ساختار اتمی شبیه صفحات گرافیت، از استوانه‌هایی با قطر چند نانومتر و طولی تا صدها میکرومتر تشکیل شده‌اند. از اشکال دیگر نانو لوله‌های کربن می‌توان به نانو لوله کربن تک دیواره[۵]، نانو لوله کربن چند دیواره[۶]، فلورن کروی[۷]، فلورن کروی تو در تو، فلورن بیضوی[۸]، فلورن بیضوی تو در تو و نانو تورس[۹] اشاره نمود. با کشف این نانو ساختارها، پیشرفت‌های

[۱] Nanohole
[۲] Nanoparticle
[۳] Nanotubes
[۴] Iijima
[۵] Single-walled carbon nanotube
[۶] Multi-walled carbon nanotube
[۷] Spherical fullerene
[۸] Ellipsoidal fullerene
[۹] Nanotorus

بسیار عظیمی در فناوری نانو رخ داده است. نانو لوله‌های کربنی به دلیل برخورداری از خواص منحصر به فرد مانند وزن کم، استحکام بالا، انعطاف پذیری و رسانایی حرارتی، کاربردهای بسیار متنوعی را در صنایع مختلف، در دو دهه اخیر پیدا کرده‌اند. یکی از کاربردهایی که توجه بسیاری از محققین را به خود معطوف داشته ، ساخت سیستم‌های نانو مکانیکی با فرکانس‌های کاری بسیار بالا در مقیاس گیگا هرتز می‌باشد. این نوسانگرها به نانو نوسانگرهای گیگا هرتز شهرت یافته‌اند. از آن جایی که میکرو نوسانگرها قادر به ایجاد فرکانس در مقیاس گیگا هرتز نبودند، نانو نوسانگرهای فرکانس بالا در سال‌های اخیر به شدت مورد توجه و بررسی قرار گرفته‌اند. از جمله کاربردهای این نوسانگرها می‌توان به فیلترهای نوری فوق سریع[۱] برای سیستم‌های فیبر نوری و نانو آنتن‌ها[۲] که حساس به سیگنال‌های الکترومغناطیسی[۳] با فرکانس بالا می‌باشند، اشاره نمود [۷] .

۱-۳-۸. نانو صفحه‌های گرافن:

در سال ۲۰۰۴، نووسلوو و همکارانش[۴][۸] موفق به جداسازی یک صفحه گرافن با روشهای آزمایشگاهی شدند. که در آن زمان، استحکام بالای این ماده منحصر به فرد نوید بخش استفاده از آن در کاربردهای مختلفی از جمله نانو-کامپوزیت‌ها بود[۹]. در سال ۲۰۰۸، لی و همکارانش[۱۰] استحکام نهایی و کرنش نهایی صفحه گرافن را جدا از امکان وجود نقص در ساختار آنها به روش نانو-ایندنشن میکروسکوپ نیروی اتمی[۵] اندازه‌گیری کردند که به ترتیب مقادیر ۱۵۰ گیگاپاسکال و ۲۵٪ برای آنها بدست آمد. علاوه بر این، اندازه‌گیریهای آنها مقدار ۱ تراپاسکال را برای مدول یانگ گرافن نشان داد. بعد از آن نیک عمل و همکارانش[۶] [۱۱.۱۲]با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی، نانو-ایندنشن صفحه گرافن دایره‌ای را همانند مرجع [۱۳]مورد بررسی قرار دادند. علاوه بر این، آنها به بررسی اثر نقص تهیجایی که به صورت تصادفی و به تعداد مختلف بر نقاط مختلف روی صفحه قرار گرفته پرداختند و دریافتند که استحکام نهایی و مدول یانگ صفحه گرافن با وجود نقوص بر روی صفحه کاهش می‌یابد. با استفاده از روش شبیه سازی مکانیک مولکولی، واشنین و همکارانش[۷] [۱۴] نانو-ایندنشن صفحه‌های گرافن دایره‌ای را با شعاع‌های مختلف و وجود نقص تهیجایی متعدد بر روی صفحه بررسی کردند که نتیجه‌ای متفاوت با نتیجه ارائه شده توسط نیک عمل و همکاران[۱۲] مشاهده کردند. با توجه به شبیه‌سازی آنها مدول یانگ در ابتدا با ایجاد نقص تهیجایی افزایش و سپس با تعدد این

[۱] Ultrafast optical filters
[۲] Nanoantennae
[۳] Electromagnetic signals
[4] Novoselov et al.
[5] AFM Nano-Indention
[6] Neek-Amal et al.
[7] Kvashnin et al.

نقص، کاهش می‌یابد. گذشته از این، ژو و لیااو[1] [۱۵] به مطالعه رفتار صفحه‌های گرافن دایره‌ای تحت بارگذاری جانبی-مرکزی به دو روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و المان محدود پرداختند. نتایج ارائه شده توسط این مطالعه نشانگر اختلاف عمده بین نتایج دو روش بود که نویسندگان این اختلاف را ناشی از تفاوت در روش‌های شبیه‌سازی دانستند که در این مورد حمصیزاده و همکارانش[2] [۱۶] با ارائه مدل محیط پیوسته هم ارز سعی در کاهش این اختلاف کردند.

برای بررسی رفتار و خواص صفحه گرافن تک‌لایه روش‌های متفاوتی از جمله تئوری تابع چگالی، مکانیک کوانتومی، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و مکانیک محیط پیوسته مورد استفاده قرار گرفته‌اند. با به کارگیری تئوری تابع چگالی ، لیو و همکاران[3] [۱۷] مدول یانگ را مقداری برابر ۱.۰۵ تراپاسکال به دست آوردند. علاوه بر این آنها مقدار تنش و کرنش نهایی را محاسبه کرده و به‌ترتیب مقادیر ۱۱۰ گیگاپاسکال و ۱۹.۴٪ را برای آنها ارائه کردند. با بکارگیری مکانیک کوانتومی، یانووسکی و همکاران[4] [۱۸]مقادیر مدول یانگ، تنش و کرنش نهایی را محاسبه کرده و به ترتیب مقادیر تراپاسکال ۰.۷۳۷، ۹۰ گیگاپاسکال و ۱۲.۳٪ را برای این پارامترها ارائه کردند. در مورد استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، ژیانگ و همکارانش[5] [۱۹] به محاسبه مدول یانگ صفحه گرافن تک لایه با اندازه‌های متفاوت و تحت دماهای مختلف پرداختند. در این میان، شن و همکارانش[6] [۲۰] مدول یانگ و مدول برشی صفحه گرافن تک‌جداره را در دماهای مختلف محاسبه کردند. از طرف دیگر، تحلیل شکست و محاسبه استحکام نهایی صفحه گرافن تک لایه توسط نی و همکارانش[7] مورد مطالعه قرار گرفت[۲۱]. این محققین در شبیه سازی خود مشاهده کردند که صفحه گرافن در راستای آرمچیر با تنش نهایی ۲۱۰ گیگاپاسکال محکمتر از راستای زیگ‌زاگ با تنش نهایی ۱۸۰ گیگاپاسکال می‌باشد که نشان دهنده رفتار ناهمسانگرد صفحه گرافن می‌باشد. علاوه بر آن همین محققین به بررسی رفتار و خواص مکانیکی نانو-نوارها پرداختند و پدیده مشابهی را مشاهده کردند[۲۲]. با این حال، هنوز مقادیر ارائه شده توسط این محققین اختلاف قابل توجهی با نتایج آزمایشگاهی[۲۳] داشت. با توجه به اینکه نیاز به زمان زیاد برای انجام مطالعات از طریق شبیه‌سازی‌های اتمی یک نقص بزرگ این روشها محسوب می‌شود، تلاشهای بسیار زیادی در جهت ارائه مدل مناسب مکانیک محیط پیوسته در مقیاس نانو انجام شده است. بر این اساس ردی و همکاران[8] [۲۴] و شکریه و رفیعی[1] [۲۵] بر اساس تئوری

[1] Xu and Liao
[2] Hemmasizadeh et al.
[3] Liu et al.
[4] Yanovsky et al.
[5] Jiang et al.
[6] Shen et al.
[7] Ni et al.
[8] Reddy et al.