بسم الله الرحمن الرحیم

دانشگاه حکیم سبزواری

دانشکده علوم پایه

پایان نامه جهت دریافت درجه کارشناسی ارشد شیمی فیزیک

شبیه سازی دینامیک مولکولی جذب گاز بر نانو خوشه های نقره

استاد راهنما :

دکتر حامد اکبرزاده

استاد مشاور:

دکتر محسن عباسپور

نگارش :

محمود محمدزاده

مهرماه ۹۲

دانشگاه حکیم سبزواری

فرم ۱۱۴ – ت

شماره :

تاریخ :

بسمه تعالی

صورتجلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

با تلاوت آیاتی چند ازکلام ا... مجید جلسه دفاع از پایان نامه آقای محمود محمدزاده دانشجوی کارشناسی ارشد رشته شیمی فیزیک با عنوان **شبیه سازی دینامیک مولکولی جذب گازها بر نانو خوشه های نقره** در ساعت ۱۱/۳۰ مورخه ۹۲ /۷/۹ در محل دانشکده علوم پایه تشکیل گردید .

پس از استماع گزارش ارائه شده توسط دانشجو و استاد راهنما هیات داوران و حاضران سئوالاتی را مطرح و آقای محمود محمدزاده به دفاع از موضوع پرداخت وبه سئوالات آنها پاسخ گفت .

سپس پایان نامه توسط هیات داوران مورد ارزشیابی قرار گرفت و نمره ۱۹/۵ برابر درجه برای آن تعیین گردید .

به این ترتیب ضمن تصویب پایان نامه مزبور از این تاریخ آقای محمود محمدزاده به عنوان کارشناس ارشد در رشته شیمی فیزیک شناخته می شود .

ردیف	نام و نام خانوادگی	سمت	امضا
۱-	**دکتر حامد اکبرزاده**	**استاد راهنما**	
۲-	**دکتر محسن عباسپور**	**استاد مشاور**	
۳-	**دکتر سیروس سالمی**	**استاد داور**	
		استاد داور	
۴-	**دکتر فاطمه صادقی فر**	**نماینده تحصیلات تکمیلی**	

نام و نام خانوادگی وامضای مدیر گروه

رونوشت

۱- معاونت آموزشی و تحصیلات تکمیلی دانشگاه جهت اطلاع

۲- معاونت پژوهشی دانشگاه جهت اطلاع

۳- آموزش دانشکده جهت درج در پرونده دانشجو

۴- دانشجو

دانشگاه حکیم سبزواری

سوگند نامه دانش آموختگان دانشگاه تربیت معلم سبزوار

به نام خداوند جان و خرد کزین برتر اندیشه بر نگذرد

اینک که به خواست آفریدگار پاک ، کوشش خویش و بهره گیری از دانش استادان و سرمایه های مادی و معنوی این مرز و بوم، توشه ای از دانش و خرد گردآورده ام، در پیشگاه خداوند بزرگ سوگند یاد می کنم که در به کارگیری دانش خویش، همواره بر راه راست ودرست گام بردارم. خداوند بزرگ، شما شاهدان، دانشجویان و دیگر حاضران را به عنوان داورانی امین گواه می گیرم که ازهمه دانش و توان خود برای گسترش مرزهای دانش بهره گیرم و از هیچ کوششی برای تبدیل جهان به جایی بهتر برای زیستن، دریغ نورزم. پیمان می بندم که همواره کرامت انسانی را در نظر داشته باشم و همنوعان خود را در هر زمان و مکان تا سر حد امکان یاری دهم. سوگند می خورم که در به کارگیری دانش خویش به کاری که با راه و رسم انسانی، آیین پرهیزگاری، شرافت و اصول اخلاقی برخاسته از ادیان بزرگ الهی، به ویژه دین مبین اسلام، مباینت دارد دست نیازم. همچنین در سایه اصول جهان شمول انسانی و اسلامی، پیمان می بندم از هیچ کوششی برای آبادانی و سرافرازی میهن و هم میهنانم فروگذاری نکنم و خداوند بزرگ را به یاری طلبم تا همواره در پیشگاه او و در برابر وجدان بیدار خویش و ملت سرافراز ، بر این پیمان تا ابد استوار بمانم.

نام و نام خانوادگی وامضای دانشجو

تاییدیه ی صحت و اصالت نتایج

بسمه تعالی

اینجانب محمود محمدزاده به شماره دانشجویی ۹۰۲۳۹۵۱۰۲۳ رشته شیمی فیزیک

مقطع تحصیلی کارشناسی ارشد

تأ یید می نمایم که کلیه نتایج این پایان نامه حاصل کار اینجانب و بدون هرگونه دخل و تصرف و موارد نسخه برداری شده از آثار دیگران را با ذکر کامل مشخصات منبع ذکر کرده ام در صورت اثبات خلاف مندرجات فوق به تشخیص دانشگاه مطابق با ضوابط و مقررات حاکم (قانون حمایت از حقوق مولفان و مصنفان . قانون ترجمه و تکثیر کتب و نشریات و آثار صوتی ضوابط و مقررات آموزشی پژوهشی و انضباطی ...) با اینجانب رفتار خواهد شد . و حق هر گونه اعتراض در خصوص احقاق حقوق مکتسب و تشخیص و تعیین تخلف و مجازات را از خویش سلب می نمایم . در ضمن مسئولیت هر گونه پاسخگویی به اشخاص اعم از حقیقی و حقوقی و مراجع ذی صلاح (اعم از اداری و قضایی) به عهده اینجانب خواهد بود و دانشگاه هیچ گونه مسئولیتی در این خصوص نخواهد داشت .

نام و نام خانوادگی :

تاریخ و امضاء:

مجوز بهره برداری از پایان نامه

بهره برداری از این پایان نامه در چهار چوب مقررات کتابخانه و با توجه به محدودیتی که توسط استاد راهنما به شرح زیر تعیین می شود بلامانع است :

- بهره برداری از این پایان نامه برای همگان بلامانع است
- بهره برداری از این پایان نامه با اخذ مجوز از استاد راهنما بلامانع است
- بهره برداری از این پایان نامه تا تاریخ ..... ممنوع است .

استاد راهنما :

تاریخ :

امضاء:

فرم چکیده‌ی پایان‌نامه‌ی دوره‌ی تحصیلات تکمیلی

مدیریت تحصیلات تکمیلی

دانشگاه حکیم سبزواری

نام خانوادگی دانشجو: محمدزاده	**نام:** محمود	**ش دانشجویی:** ۹۰۲۳۹۵۱۰۲۳
استاد راهنما:آقای دکتر حامد اکبرزاده	**استاد مشاور:آقای دکتر محسن عباسپور**	
دانشکده:علوم پایه	**رشته:** شیمی	**گرایش:**شیمی فیزیک
مقطع: کارشناسی ارشد	**تاریخ دفاع:**۱۳۹۲/۷/۹	**تعداد صفحات:** ۱۱۶

عنوان پایان‌نامه: شبیه سازی دینامیک مولکولی جذب گازها بر نانو خوشه های نقره

کلیدواژه‌ها: شبیه سازی دینامیک مولکولی،جذب فیزیکی،نانو خوشه های نقره،جذب گاز،آنتالپی جذب

چکیده: در این تحقیق ما با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی،جذب مخلوط‌های مختلفی (کسرهای مولی مختلف)از آرگون وهلیم را برنانو خوشه های نقره،با شعاع های مختلف و در دماها وفشارهای متفاوت مورد بررسی قرار دادیم.در این کار ما از پتانسیل ساتن–چن برای توصیف برهمکنش‌های فلز–فلز وبرای سایربرهمکنش‌ها از پتانسیل لنارد جونز استفاده کرده‌ایم.به منظور ثابت نگه داشتن دما وفشاردر طول شبیه‌سازی از امکانات نرم افزار دی ال پلی بهره‌گرفته شده‌است.ترموستات برندسون در تمامی شبیه سازی ها برای ثابت نگه داشتن دما در سل شبیه سازی استفاده شده است. با زمان آسایش ۰/۱

ما میانگین انرژی برهمکنش بین اتم‌های گاز ونانوخوشه‌ها، ثابت جذب وآنتالپی جذب را برای همه نانو خوشه های نقره بدست آورده ایم.نتایج نشان می دهد که ثابت جذب، میانگین انرژی برهمکنش وآنتالپی جذب با افزایش اندازه نانو ذرات کاهش می یابد.همچنین با کاهش اندازه نانو ذرات کسر بیشتری از اتم های گاز بر سطح نانو خوشه ها جذب می شوند.زیرا اتم های سطح در نانو خوشه ها در مقایسه با اتم های بالک انرژی پیوندی کمتری دارند بنابر این با کاهش اندازه نانو ذره انرژی چسبندگی آن کاهش می یابد ودر نتیجه ساختار ناپایدارتر می شود.پس اتم های سطح تمایل بیشتری برای جذب اتم های گاز و افزایش انرژی چسبندگی دارند.به همین دلیل با افزایش اندازه نانو خوشه ها، کاهش ثابت جذب متوقع خواهد بود

امضای استاد راهنما

فهرست مطالب

فصل اول

مقدمه

۱-۱ سیستم های کوچک درمقیاس نانو..... ۲

۱-۱-۱ فناوری نانوچیست؟..... ۲

۱-۱-۲ تاریخچه‌ی فناوری نانو..... ۳

۱-۱-۳ کاربردهای فعلی وآینده ی فناوری نانو..... ۵

۱-۱-۴ نانوخوشه ها..... ۶

۱-۲ تئوری جذب..... ۸

۱-۲-۱ جذب فیزیکی..... ۹

۱-۲-۲ جذب شیمیایی..... ۹

۱-۲-۳ انواع ایزوترمهای جذب..... ۱۰

۱-۲-۴ جذب سطحی لانگمویر..... ۱۲

۱-۲-۵ جذب سطحی فروندلیش..... ۱۴

۱-۲-۶ جذب سطحی BET..... ۱۵

۱-۳ –تاریخچه بررسی جذب گاز روی نانوسیستم‌ها به وسیله شبیه سازی..... ۱۶

فصل دوم

شبیه سازی دینامیک مولکولی ونرم افزاردی ال پلی

۲-۱ شبیه‌سازی دینامیک مولکولی(MD)..... ۲۱

۲-۱-۱ مقدمه..... ۲۲

۲-۱-۲ مبانی نظری..... ۲۳

۲-۱-۲-۱ ارائه یک مدل..... ۲۷

۲-۱-۲-۲ پتانسیل بریده شده..... ۲۷

۲-۱-۲-۳ اندازه‌ی سیستم مدل وشرایط مرزی تناوبی..... ۲۸

۲-۱-۲-۴ مراحل اساسی دربه‌دست آوردن خواص ترمودینامیکی ازMD ۲۹
۲-۱-۳ مکانیک کلاسیک ۳۲
۲-۱-۴ روش تفاضل محدود ۳۴
۲-۱-۵ روش‌های پیش‌بینی کننده ـ تصحیح کننده ی گیر ۳۶
۲-۱-۶ الگوریتم ورلت ۳۷
۲-۱-۷خواص ایستا ۳۹
۲-۱-۸ انرژی داخلی ۳۹
۲-۱-۹ فشار ۴۰
۲-۱-۱۰ تابع توزیع شعاعی ۴۰
۲-۱-۱۱ دینامیک مولکولی درمجموعه یNVT ۴۱
۲-۱-۱۱-۱ روش سیستم توسعه یافته ۴۱
۲-۱-۱۱-۲ روش‌های قیدی ۴۲
۲-۲- نرم افزاردی ال پلی(DLPOLY) ۴۳
۲-۲-۱ فایلهای اولیه ی شبیه سازی درنرم افزارDLPOLY 2.20 ۴۴
۲-۲-۱-۱ فایلConfig ۴۴
۲-۲-۱-۲ فایلField ۴۶
۲-۲-۱-۳ فایلControl ۴۹
۲-۲-۲- فایل های خروجی دی ال پلی ۵۲

فصل سوم

بررسی جذب گازهای آرگون وهلیم درکسرمولی های مختلف روی نانوخوشه ی نقره بااستفاده ازشبیه سازی دینامیک مولکولی

۳-۱ مقدمه ۵۴
۳-۲ شرایط اولیه شبیه سازی ۵۶
۳-۲-۱ ساختن ساختارهای اولیه ۵۶
۳-۲-۲- تعیین جزئیات کنترل شبیه سازی ۵۸
۳-۲-۳ تعیین توابع پتانسیل ۵۸
۳-۳ ثابت جذب ۶۱

۳-۳-۱ وابستگی فشاری ثابت جذب..... ۶۲
۳-۳-۲ وابستگی کسرمولی ثابت جذب..... ۶۶
۳-۳-۳ وابستگی ثابت جذب به اندازه ی نانوخوشه ها..... ۶۹
۳-۳-۴ وابستگی ثابت جذب به دما..... ۷۶
۳-۴ میانگین انرژی برهمکنش..... ۸۲
۳-۴-۱ وابستگی فشاری میانگین انرژی برهمکنش..... ۸۳
۳-۴-۲**وابستگی میانگین انرژی برهم کنش به کسر مولی**..... ۸۸
۳-۴-۳ وابستگی میانگین انرژی برهمکنش به اندازه نانوخوشه..... ۹۱
۳-۴-۴ وابستگی دمایی میانگین انرژی برهمکنش ۹۵
۳-۵- محاسبه ی آنتالپی جذب بااستفاده ازشبیه سازی دینامیک مولکولی..... ۱۰۱
۳-۵-۱ نمودار$\ln P/P0$برحسب$1/T$درپوشش ۰/۳..... ۱۰۲
منابع..... ۱۱۰

فهرست جداول

جدول دستورات مربوط به شرایط مرزی تناوبی ۴۷
جدول انواع پتانسیل‌هاهمراه باثابت های مربوطه..... ۵۰
جدول دستورات مربوط به ترموستاتهاوباروستاتها..... ۵۲
جدول نسبت تعداد اتم های سطح به کل اتمها در نانو خوشه های مختلف..... ۵۷

فهرست اشکال ونمودارها

ساختارهایی باحداقل انرژی درابعاد نانومتر ۷

نمودارهای ایزوترمهای جذب سطحی ۱۲

ارتباط بین نظریه،تجربه،وشبیه سازی مولکولی ۲۵

ورودی وخروجی شبیه سازی‌های مولکولی ۲۶

تابع پتانسیل نوعی بریده شده ۲۷

شرایط مرزی تناوبی ۳۰

قراردادتصویرحداقل بااستفاده ازشرایط مرزی تناوبی ۳۱

نمایش تصویری الگوریتم ورلت ۴۰

فایل Config ۴۸

فایل Field ۵۰

فایل Control ۵۲

نانوخوشه ی نقره درون جوی ازگازهلیم ۶۰

نمودارثابت جذب برحسب فشار ۶۷

نمودارثابت جذب برحسب کسرمولی ۷۰

نموداروابستگی ثابت جذب به اندازه ی نانوخوشه ۷۴

نموداروابستگی ثابت جذب به اندازه ی نانوخوشه ۷۷

نموداروابستگی دمایی ثابت جذب برای نانوخوشه های مختلف ۸۳

نمودار وابستگی فشاری میانگین انرژی برهمکنش برای نانوخوشه‌های مختلف ۸۹

نمودار وابستگی میانگین انرژی برهمکنش جذب به کسرمولی ۹۲

نموداروابستگی میانگین انرژی برهمکنش به اندازه‌ی نانوخوشه ۹۷

نموداروابستگی دمایی میانگین انرژی برهمکنش درنانوخوشه‌های مختلف ۱۰۳

نمودار $\ln P/P_0$ برای نانوخوشه‌های مختلف برحسب معکوس دما ۱۰۷

فصل اول

مقدمه

در این پایان نامه تلاش بر این شده است که جذب سطحی گازهای بی اثر (جذب فیزیکی) بر روی نانوخوشه های نقره در اندازه های مختلف با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی در شرایط دمایی و فشاری مختلف بررسی شود. لذا لازم است در دو فصل ابتدایی به مقدمه ای هر چند کوتاه درباره ی این مفاهیم بپردازیم. در این فصل درباره ی نانو فناوری، تئوری جذب و تاریخچه ی جذب روی نانوسیستم ها خواهیم پرداخت. در فصل دوم به شرح موضوعاتی در مورد شبیه سازی دینامیک مولکولی و نرم افزاری که برای این شبیه سازی در این پایان نامه مورد استفاده قرار گرفته خواهیم پرداخت. در فصل سوم طریقه‌ی ساخت فایل های اولیه‌ی شبیه سازی و انجام آن و همچنین نتایج و مباحث حاصل را مورد بررسی قرار می دهیم.

۱-۱ سیستمهای کوچک در مقیاس نانو

۱-۱-۱ فناوری نانو[1] چیست؟

اعمال کنترل دقیق بر ساختار فیزیکی ماده در ابعاد اتمی و مولکولی را فناوری نانو تعریف نموده اند. رسیدن به دانش ساخت ابزار کنترل کننده در ابعاد نانومتر، هدفی بزرگ برای این علم محسوب می شود. اکنون بسیاری پذیرفته اندحد بالای قابل قبول برای اندازه گیری نانو ابزارها حدود ۱۰۰ نانومتر می باشد،و ابزاری با ابعاد کوچکتر از ۱۰۰ نانومتر، که کارایی خاصی از خود نشان می دهند، در

1. Nanotechnology

محدوده ی نانو ابزارها شناخته می شوند [۱].در ابعاد نانومتر بسیاری از خواص ماده از قبیل رسانش، چگالی، ظرفیت گرمایی ، ضریب انبساط گرمایی، سطوح انرژی آزاد و فعالیت شیمیایی به شدت تغییر می کنند و خواص کاملا متفاوتی برای مواد در این ابعاد ایجاد می نمایند که با ابعاد میکرومتر متفاوت است، و ابعاد نانومتر از این جهت مورد توجه قرار گرفته است.

با کوچک شدن ابعاد ماده و رسیدن به ابعاد نانومتری، اثرات کوانتومی اهمیت پیدا می کنند و دیگر نمی توان ماده را به عنوان یک محیط پیوستار کلاسیکی محسوب کرد. در واقع اثرات اتمی با کوچک شدن ماده اهمیت می یابد و ناگزیر به استفاده از یک نظریهای جامع تر از نظریه های کلاسیکی هستیم.

هر چند مکانیک کوانتومی در ابعاد اتمی نتایج خوبی ارائه نموده است و به عنوان یک نظریه ی جامع شناخته شده است اما به دلیل پیچیدگی های فراوان آن، نمی توان در ابعاد نانومتر از آن استفاده نمود، از این جهت با روش های نیمه کلاسیک به بررسی در این زمینه پرداخته می شود.

۱-۱-۲ تاریخچه ی فناوری نانو

تا ۱۹۵۹ اکثر دانشمندان و مهندسان تصوری از وجود وسایلی در ابعاد نانومتر نداشتند، تا اینکه ریچارد فاینمن، نابغه ی بزرگ فیزیک، در نشست سالانه ی انجمن فیزیک امریکا در دانشگاه صنعتی کالیفرنیا به معرفی دانش جدیدی پرداخت که نهایتا نانو تکنولوژی نامگذاری گردید.

مقاله ی او تحت عنوان "جاهای زیادی در ته وجود دارد"[1] ، تنها اشاره ای بود بر اینکه می توان از تمامی اتمهای موجود در ماده برای ساخت یک ریز ابزار استفاده کرد و پیشگویی او برای احتمال ساخت ابزاری با دقت بالا و قابلیت ذخیره سازی بالا اکنون به حقیقت پیوسته است. بر این اساس او را پدر علم نانو نامیده اند. وی پیش بینی نمود که ضخامت سیم های ارتباطی تا حد ۱۰ تا ۱۰۰ اتم می توانند کوچک شوند.

1.There is plenty of room at the bottom

ایده ی ساخت نانو ماشین هایی در ابعاد نانو وحافظه هایی با قابلیت ذخیره سازی حجم زیادی از اطلاعات، برای اولین بار توسط فاینمن ارائه گردید. به تدریج با پیشرفت هایی در فناوری و دسترسی به نانو ابزارهایی همچون میکروسکوپ اتم ران[1] توانایی ساخت ابزارهایی با کارایی خاص بیشتر شد. به وسیله ی میکروسکوپ اتم ران می توان اتم هایی را روی سطح جابجا نمود، بلند کرد و در جای دیگر نشاند.این قابلیت، امکان چینش یک به یک اتم ها، در مکان های از پیش تعیین شده را مهیا می سازد. البته این مکانهای از پیش تعیین شده، اغلب ابتدا با رایانه شبیه سازی گردیده و خواص آنها تا حدودی مشخص شده است.

دو رویکرد عمده در مسایل نانو تکنولوژی وجود دارد، که یکی از بالا به پایین، به مفهوم کوچک نمودن ابعاد ماده برای رسیدن به خواص متفاوت، و دیگری از پایین به بالا به مفهوم یک به یک چیدن اتم های یک ماده برای رسیدن به یک سیستم خاص است.

رویکرد "از بالا به پایین" بیشتر مورد نظر کشورهایی است که در زمینه ی ساخت قطعات دقیق و ریز ابزارها دستاوردهای زیادی داشته اند، همچون کشورهای پیشرفته‌ی شرق آسیا که اکثر توان خود را در این بخش متمرکز نموده اند.لازمه ی ورود به این بخش، داشتن امکانات زیاد در تمامی بخش های صنعتی و ارزان بودن نیروی کار در بخش صنعت می باشد.

رویکرد دیگر موسوم به "از پایین به بالا " امکانات کمتری را می طلبد. در این رویکرد ابتدا برای یک شرایط خاص، شبیه سازی هایی انجام می گیرد و سپس با علم به آرایش دقیق ماده و پیش بینی خواص آن ماده با میکروسکوپ اتم ران، اتمها یک به یک در مکانهایی از پیش تعیین شده چیده می شوند. این رویکرد برای کشورهایی که از لحاظ محاسبات رایانه ای در سطح بالایی هستند، و یا کشورهایی که توان تکنولوژی ضعیف دارند، مناسبتر می باشد.اکنون نانو تکنولوژی یکی از سه

1.Atomic Force Microscope

انقلاب علمی‌ای شناخته می شود که زندگی بشر را در قرنی که در پیش رو داریم متحول خواهد کرد. دو انقلاب دیگر فناوری زیستی[1] و فناوری اطلاعات[2]می باشند.

۱-۱-۳ کاربردهای فعلی و آینده ی فناوری نانو

تاکنون کاربردهای اندکی از فناوری نانو به مرحله ی بهره برداری رسیده است.می توان در این میان به حافظه هایی با قابلیت ذخیره سازی بالا اشاره نمود. از دیگر کاربردهای آن در پوشش، لباس ها و محافظ هایی است که در اتاق های تمیز مورد استفاده قرار می گیرد.

کاربردهای گسترده ای برای ساخت موادی با خواص نوری متفاوت و ساخت مواد هوشمند در برابر نور پیش بینی گردیده است.تحقیق بر روی نانو لوله ها با توجه به کاربردهای فراوان آن در چند سال اخیر به شدت مورد توجه قرار گرفته و خواص بسیار قابل توجهی نیز در این نانو لوله ها مشاهده گردیده است که از آن جمله می توان به سبک نمودن، استحکام بالا داشتن و همچنین زمینه ی مناسب برای سفارشی نمودن آنها می باشد. نانو لوله های کربنی در میان سایر محصولات نانو تکنولوژی به دلیل کاربردهای گسترده، بیشتر مورد توجه قرار گرفته است، و کاربردهای آن در زمینه های مختلف از ترمیم استخوان تا استفاده در موجبر الکتریکی و اپتیکی مطرح می باشد.

کاربردهای نظامی گسترده در نانو تکنولوژی دلیلی برای تخصیص بودجه های نجومی در این زمینه گردیده است.از این دسته کاربردها می توان به تهیه ی لباسهای ضد گلوله و لباسهای هوشمند اشاره کرد که از الیاف نانو و نانو لوله های کربنی بافته شده اند.علاوه بر خواص جدیدی که مد نظر پژوهشگران می باشد، دسترسی به مواد با خواص قوی تر از آنچه قبلا در دسترس بوده نیز مورد توجه است. دستیابی به مقاومت های الکتریکی و گرمایی بالا، استحکام مکانیکی بالاتر و وزن سبک تر از این قبیل خواص می باشند.

1.Biotechnology
2.Information Technology

۱-۱-۴ نانوخوشه ها[1]

مجموعه‌ی محدودی از ذرات مقید به یکدیگر را یک خوشه می نامند. این تعریفی است که در بین سایر تعاریف مناسب تر است. خوشه ها از جهت گسترش فضایی، متفاوت از جسم کپه‌ای می باشند و مشخصه های تناوبی و ساختارهای بلوری که برای جسم کپه‌ای وجود دارد، در مورد خوشه ها مصداق پیدا نمی کند.

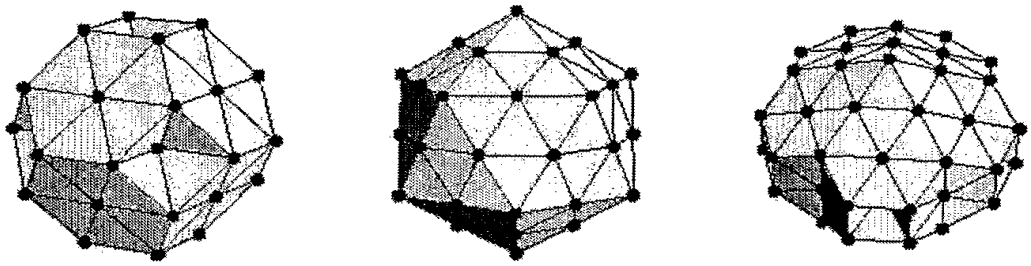
خوشه ها پلی بین دنیای میکروسکوپی اتم ها و دنیای ماکروسکوپی توده‌ی ماده هستند. دیر زمانی است که فیزیک، قادر به حل مسائلی با تعداد ذرات کم می باشد و فیزیک حالت جامد نیز با استفاده از تقارن موجود در ساختارهای بلوری قادر به حل مسائلی در گسترده ساختارهای بلوری می باشد، ولی بررسی مسائلی که شامل تعداد زیادی از اتم ها بوده و با استفاده از تقارن نمی توان از حجم عملیات کاست، حتی تا چندی پیش کمتر مورد توجه قرار داشتند.

خوشه هایی که قطری در محدوده ی ۱ تا ۱۰ نانومتر دارند، خواصی از خود نشان می دهند که این خواص بین خواص مولکولی وخواص بلوری است. انتظار بر این است که خواص ماده در این ابعاد با افزایش تعداد اتم های نانوخوشه از خواص اتمی تا خواص بلوری تغییر یابد. از آنجایی که مطالعه‌ی تجربی در این ابعاد بسیار مشکل است، مطالعه ی عددی خواص نانو خوشه ها، بهترین راه ممکن در شرایط فعلی است.تاکاگی[2] و بافات[3] با بررسی تجربی ذرات ریز نانو دریافتند که نقطه ی ذوب ذرات با کوچک شدن ابعاد آنها کاهش می یابد و آنرا بصورت تابعی بر حسب اندازه ی نانو خوشه بیان نمودند[۳و۲].ارائه نتایجی در مورد خواص ترمودینامیکی خوشه ها همچنان مورد توجه دانشمندان تجربی می باشد [۴].

1. Nanoclusters
2. Takagi
3. Bafat

تفاوت خواص ترمودینامیکی نانوخوشه ها ممکن است به دلیل اثرات سطحی باشد، بخصوص در نانوخوشه های فلزی به دلیل افزایش چگالی ابر الکترونی در سطح، اتم های سطحی در یک نانو خوشه پایداری کمتری نسبت به اتمهای مغزی[1] دارند.

در بررسی وابستگی نانو خوشه ها به تعداد اتم های نانو خوشه، مشاهده شده است که برای هر ساختار معین عدد های خاصی وجود دارند که پایداری خوشه ها در آن بیشتر است. این ساختارها با ساختارهای مشخصی که قبلا در فیزیک حالت جامد به عنوان ساختارهای شناخته شده‌ی بلوری معرفی می گردید، تفاوت دارد. متداولترین ساختار های بلوری فلزی fcc وbcc است، این ساختارها سطوح انرژی پایین تری نسبت به ساختارهای بلوری خوشه ای از ساختارهای بیست وجهی، ده وجهی و هشت وجهی دارند[۵].



(الف) (ب) (ج)

شکل ۱-۱- ساختارهایی با حد اقل انرژی در ابعاد نانومتر (الف) بیست وجهی (ب) هشت وجهی بریده (ج) ده وجهی

تمامی اشکال فوق به طور تجربی مشاهده و اعداد جادویی در ارتباط با هر یک، از طریق طیف سنجی های تجربی به اثبات رسیده است. ساختارهای بیست وجهی و ده وجهی از مرسوم ترین فازهاست که در بسیاری از خوشه های فلزی نیز مشاهده گردیده است.معمولا برای خوشه هایی با تعداد اتم های زیاد ساختار بلوری fcc ترجیح داده می شود.

1 . Core of atom

اغلب تعداد زیادی از پیکربندی های متفاوت وجود دارند که مقادیر انرژی آنها بسیار به هم نزدیک است. این مساله یافتن پایدارترین ساختار را مشکل می کند. خواص ذوب آنها نیز در اثر اندازه ی متناهی، حضور اثرات سطح و اثر ناهمسانگردی متفاوت از جامدات توده ای می باشند. خوشه های فلزی از دیدگاه صنعتی بسیار مهم می باشند. زیرا آنها نقش بسیار مهمی در واکنشهای مهم شیمیایی دارند.

سیستم ترمودینامیکی سیستمی است که در آن تعداد ذرات به سمت بی نهایت می رود و بنابراین اثرات سطح در آنها قابل صرفنظر می باشند.اما خوشه ی جامد یک سیستم بلورین می باشد که شامل تعداد محدودی اتم متصل به هم می باشد.در مقایسه با بلورها اثرات سطحی برای خوشه ها مهم می باشد.

۱-۲تئوری جذب

به طور کلی فرآیند جذب سطحی گاز ها بر روی جامدات به دو دسته تقسیم می شود:

- جذب سطحی فیزیکی[1] (جذب فیزیکی)
- جذب سطحی شیمیایی[2] (جذب شیمیایی)

بین جذب سطحی[3] و جذب[4] تفاوت وجود دارد. در جذب معمولی، عمل جذب در توده ماده جذب کننده اتفاق می افتد. اما در جذب سطحی، عمل جذب تنها در سطح ماده جذب کننده انجام می شود. جذب سطحی گازها بر روی جامدات از نظر کاربردی که در صنعت دارد، مورد اهمیت است. فعالیت کاتالیزوری جامدهایی همچون نقره به علت جذب سطحی گازها روی این مواد است. در فرآیند جذب سطحی، فلزها، اکسید فلزها، سیلیکاژل و زغال فعال از جمله مواد جامدی هستند که مورد

1. Physical adsorption (physisorption)
2. Chemical adsorption (chemisorption)
3. Adsorption
4. Absorption