دانشکده علوم

پایان نامه کارشناسی ارشد در رشته فیزیک (اتمی و مولکولی)

بررسی پراکندگی پرتوهای الکترومغناطیسی از نانو لوله‌های کربنی

به کوشش

علیرضا نورمندی‌پور

استاد راهنما

دکتر حمید نادگران

شهریور ماه ۱۳۹۱

بسم الله الرحمن الرحيم

اظهارنامه

اینجانب علیرضا نورمندی‌پور (۸۹۰۳۹۵) دانشجوی رشته فیزیک گرایش اتمی و مولکولی دانشکده علوم اظهار می‌کنم که این پایان‌نامه حاصل پژوهش خودم بوده و در جاهایی که از منابع دیگران استفاده کرده‌ام، نشانی دقیق و مشخصات کامل آن را نوشته‌ام. همچنین اظهار می‌کنم که تحقیق و موضوع پایان‌نامه‌ام تکراری نیست و تعهد می‌نمایم که بدون مجوز دانشگاه دستاوردهای آن را منتشر ننموده و یا در اختیار غیر قرار ندهم. کلیه حقوق این اثر مطابق با آیین نامه مالکیت فکری و معنوی متعلق به دانشگاه شیراز است.

نام و نام خانوادگی: علیرضا نورمندی‌پور

تاریخ و امضا: ۱۳۹۱/۶/۲۹

به نام خدا

بررسی پراکندگی پرتوهای الکترومغناطیسی از نانو لوله‌های کربنی

به کوشش:

علیرضا نورمندی‌پور

پایان نامه

ارائه شده به تحصیلات تکمیلی دانشگاه شیراز به عنوان بخشی

از فعالیت های تحصیلی لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

در رشته ی:

فیزیک

از دانشگاه شیراز

شیراز

جمهوری اسلامی ایران

ارزیابی کمیته ی پایان نامه، با درجه ی: عالی

دکتر حمید نادگران، دانشیار بخش فیزیک (استاد راهنما) .....

دکتر عبدالناصر ذاکری ، استاد بخش فیزیک .....

دکتر محمد مهدی گلشن، استاد بخش فیزیک .....

دکتر محمود مرادی، استاد بخش فیزیک .....

شهریورماه ۱۳۹۱

تقدیم

تقدیم به حضرت حق، او که عالم مطلق است

و

تقدیم با بوسه بر دستان پدرم:

به او که نمی دانم از بزرگی اش بگویم یا مردانگی، سخاوت، سکوت، مهربانی و .....

و

تقدیم به مادرم:

مادرم، آنکه آفتاب مهرش در آستانه قلبم، پابرجاست و هرگز غروب نخواهد کرد.

سپاسگذاری

اینک که به یاری خداوند متعال موفق شدم این رساله را به پایان برسانم بر خود واجب می‌دانم که از استاد گرامی جناب آقای دکتر حمید نادگران به خاطر راهنمایی‌های ارزنده‌شان نهایت تشکر و قدردانی را داشته باشم. از اعضای محترم کمیته‌ی پایان نامه، آقایان دکتر عبدالناصر ذاکری، دکتر محمد مهدی گلشن و دکتر محمود مرادی سپاسگذاری می‌نمایم و از آقای دکتر احمد پوستفروش نماینده‌ی محترم تحصیلات تکمیلی تشکر می‌نمایم. همچنین بر خود واجب می‌دانم از پدر و مادر فداکارم که تا ابد مدیون زحماتشان هستم تشکر و سپاسگذاری کنم، امیدوارم همیشه بتوانم قدردان زحمات این بزرگواران باشم.

چکیده

بررسی پراکندگی امواج الکترومغناطیسی از نانولوله‌های کربنی

به کوشش

علیرضا نورمندی‌پور

از زمان کشف نانولوله‌های کربنی در سال ۱۹۹۱، توجه زیادی به‌خاطر ویژگی جالب شبه-یک-بعدی بودنشان، به این مواد شده است. اعتقاد بر این است که این مواد، پتانسیل‌های کاربردی فراوانی در نانوتکنولوژی دارند. اهمیت این لوله‌ها، بیشتر به‌خاطر قطر کوچکشان است. از طرفی، بدلیل جذب نور مرئی توسط این مواد، یکی از کاربردهای نانولوله‌های کربنی، استفاده در سلول‌های خورشیدی است. در این پایان‌نامه، پراکندگی امواج الکترومغناطیسی از نانولوله‌های کربنی مورد بررسی قرار می‌گیرد. به همین جهت، ابتدا نظریه‌ی پراکندگی را معرفی نموده و سپس یک رابطه برای سطح مقطع پراکندگی نانولوله‌های کربنی بدست می‌آوریم. برای ادامه‌ی کار، به خواص اپتیکی (ثابت دی‌الکتریک) نانولوله‌های کربنی احتیاج داریم. ثابت دی‌الکتریک نانولوله‌های کربنی را از روش محاسباتی *از ابتدا* بدست می‌آوریم. و سرانجام نمودار سطح مقطع پراکندگی را برای انواع مختلف نانولوله رسم می‌کنیم. نتایج بدست آمده نشان می‌دهند که با افزایش قطر نانولوله‌های کربنی، قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک، که معرف جذب است، در محدوده‌ی بیشتری از طیف الکترومغناطیسی غیر صفر است و همچنین تعداد پیک‌های این طیف، با افزایش قطر، افزایش می‌یابند.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

۱- مقدمه

۱-۱- مقدمه ۲

۲- پراکندگی

۲-۱- مقدمه ۶

۲-۲- فیزیک پراکندگی و جذب ۷

۲-۳- پراکندگی از یک تک ذره ۸

۲-۴- معادلات برداری موج ۹

۲-۴-۱- شرایط مرزی ۱۱

۲-۴-۲- برهم‌نهی ۱۳

۲-۵- سطح مقطع‌های خاموشی، پراکندگی، و جذب – حالت کلی ۱۴

۲-۶- جواب‌های معادلات برداری موج ۱۸
۲-۷- استوانه‌ی بینهایت ۲۰
۲-۷-۱- حل معادله‌ی اسکالر در مختصات استوانه‌ای..... ۲۰
۲-۷-۲- خواص کلی توابع $Z_p(\rho)$ ۲۳
۲-۷-۳- بسط یک موج تخت برحسب توابع موج استوانه‌ای ۲۶
۲-۷-۴- سطح مقطع‌های خاموشی، پراکندگی، و جذب برای استوانه‌ی نامحدود ۳۴
۲-۸- روابط کرامرز-کرونیگ ۳۷
۳- آشنایی با نانولوله‌های کربنی
۳-۱- تاریخچه کشف نانولوله‌های کربنی ۴۴
۳-۲- ساختارهای مختلف نانولوله‌های کربنی ۴۶
۳-۳- انواع نانولوله‌های تک جداره ۴۹
۳-۳-۱- نوع زیگزاگ..... ۵۰
۳-۳-۲- نوع صندلی ۵۱
۳-۳-۳- نوع نامتقارن..... ۵۲
۳-۴- نقایص و ناخالصیها ۵۳
۳-۵- ویژگی‌های نانو لوله‌های کربنی ۵۴
۳-۵-۱- حالت رسانایی و نیمه رسانایی ۵۴
۳-۵-۲- برخورداری از خاصیت منحصر به فرد پرتابه‌ای..... ۵۵

۳-۵-۳- قدرت رسانایی گرمایی خیلی بالا ۵۵
۳-۵-۴- سطح جداره‌ی صاف با قدرت تفکیک بالا ۵۵
۳-۵-۵- بروز خواص الکتریکی و مکانیکی منحصر به فرد در طول آنها ۵۶
۳-۵-۶- مدول یانگ بالا ۵۶
۳-۵-۷- حساس به تغییرات کوچک نیروهای اعمال شده ۵۶
۳-۵-۸- گسیل و جذب نور ۵۷
۳-۵-۹- ضریب تحرک الکتریسیته‌ی بسیار بالا ۵۷
۳-۵-۱۰- خاصیت مغناطیسی، ممان مغناطیسی بسیار بزرگ ۵۷
۳-۵-۱۱- چگالی سطحی بسیار بالا ۵۸
۳-۵-۱۲- قابلیت ذخیره‌سازی..... ۵۸
۳-۵-۱۳- داشتن خاصیت ابررسانایی ۵۹
۳-۵-۱۴- تولید ولتاژ ۵۹
۳-۵-۱۵- استحکام و مقاومت کششی بالا ۵۹
۳-۶- ساختار الکتریکی نانولوله‌های کربنی ۶۰
۳-۷- اثر آلایندگی‌ها بر رسانایی نانولوله‌های کربنی ۶۲
۳-۸- کاربردهای نانولوله‌های کربنی.....۶۳
۳-۸-۱- ترانزیستورها.....۶۴
۳-۸-۲- حسگرها ۶۵
۳-۸-۳- نمایشگرهای گسیل میدانی ۶۶
۳-۸-۴- حافظه‌ی نانولوله‌ای ۶۷

۳-۸-۵- استحکام دهی کامپوزیت ها.....۶۷

۳-۸-۶- کاربردهای دیگر نانولوله‌ها.....۶۸

۴- خواص اپتیکی نانولوله‌های کربنی

۴-۱- مقدمه ۷۰

۴-۲- روش k-نقطه..... ۷۲

۴-۲-۱- ناحیه‌ی کاهش‌ناپذیر بریلوین ۷۲

۴-۲-۲- مش‌بندی مناسب..... ۷۳

۴-۲-۳- انتخاب مناسب نقاط ویژه‌ی $\boldsymbol{k}$ ۷۴

۴-۳- نظریه‌ی تابعی چگالی ۷۷

۴-۳-۱- مقایسه بین محاسبات *از ابتدا* و محاسبات تجربی ۷۷

۴-۳-۲- اصل وردشی برای حالت پایه ۷۹

۴-۳-۳- نظریه‌ی تابعی چگالی ۸۰

۴-۳-۴- معادلات کوهن-شم ۸۴

۴-۳-۵- تقریب چگالی موضعی ۸۶

۴-۴- محاسبه‌ی تابع دی‌الکتریک نانولوله‌های کربنی ۸۷

۵- نتایج

۵-۱- تابع دی‌الکتریک و سطح مقطع پراکندگی نانولوله‌های‌کربنی نوع صندلی... ۹۱

۵-۱-۱- تابع دی‌الکتریک و سطح مقطع پراکندگی نانولوله‌های کربنی نوع (۳،۳) ۹۲
۵-۱-۲- تابع دی‌الکتریک و سطح مقطع پراکندگی نانولوله‌های کربنی نوع (۵،۵) ۹۴
۵-۱-۳- تابع دی‌الکتریک و سطح مقطع پراکندگی نانولوله‌های کربنی نوع (۱۰،۱۰) ۹۵
۵-۲- تابع دی‌الکتریک و سطح‌مقطع پراکندگی نانولوله‌های‌کربنی نوع نامتقارن .. ۹۸
۵-۲-۱- تابع دی‌الکتریک و سطح مقطع پراکندگی نانولوله‌های کربنی نوع (۴،۲) ۹۸
۵-۲-۲- تابع دی‌الکتریک و سطح مقطع پراکندگی نانولوله‌های کربنی نوع (۶،۴) ۱۰۰
۵-۲-۳- تابع دی‌الکتریک و سطح مقطع پراکندگی نانولوله‌های کربنی نوع (۸،۴) ۱۰۲
۵-۳- نتایج و پیشنهادات..... ۱۰۴
۵-۳-۱- نتایج..... ۱۰۵
۵-۳-۲- پیشنهادات..... ۱۰۷
فهرست منابع ۱۰۸

فهرست جداول

عنوان و شماره **صفحه**

جدول ۴- ۱ پارامترهای ساختاری تئوری نانولوله‌های کربنی. D قطر متوسط، T طول بردار انتقال و N تعداد اتمها در سلول واحد است. ۸۹

فهرست شکل‌ها

عنوان و شماره **صفحه**

شکل ۲- ۱ پراکندگی از یک تک ذره ۷
شکل ۲- ۲ میدان کل پراکنده شده در نقطه‌ی P، نتیجه‌ی تمام موجک‌های پراکنده شده است.... ۸
شکل ۲-۳ میدان فرودی $\boldsymbol{E}_i, \boldsymbol{H}_i$ منجر به یک میدان $\boldsymbol{E}_1, \boldsymbol{H}_1$ درون ذره و یک میدان پراکنده شده‌ی $\boldsymbol{E}_s, \boldsymbol{H}_s$ در محیط پیرامون ذره می‌شود..... ۱۱
شکل ۲-۴ سطح بسته‌ی جداکننده‌ی مناطق ۱ و ۲ ..... ۱۲
شکل ۲-۵ خاموشی توسط مجموعه‌ای از ذرات..... ۱۵
شکل ۲-۶ خاموشی توسط یک تک ذره..... ۱۶
شکل ۲- ۷ استوانه‌ی بینهایت که در معرض تابش یک موج تخت قرار گرفته است..... ۲۷
شکل ۲-۸ سطح انتگرال‌گیری..... ۳۶
شکل ۲- ۹ مسیر انتگرال‌گیری در صفحه‌ی فرکانس مختلط..... ۴۰

شکل ۳- ۱شش ساختار آلوتروپ های مشهور کربن ۴۵
شکل ۳-۲ شش ساختار آلوتروپ های مشهور کربن ۴۷
شکل ۳- ۳ نانولوله های کربنی چنددیواره ۴۸

شکل ۳- ۴ نحوه انتخاب اتم‌های کربن برای تشکیل انواع نانولوله‌های کربنی..... ۵۰
شکل ۳- ۵ الف) نحوه انتخاب اتم کربن برای به دست آوردن نانولوله کربنی زیگزاگ، ب) نانولوله کربنی زیگزاگ..... ۵۱
شکل ۳- ۶ الف) نحوه‌ی انتخاب اتم کربن برای تولید نانولوله کربنی نوع صندلی، ب) نانولوله نوع صندلی..... ۵۲
شکل ۳- ۷ الف) نحوه انتخاب اتم کربن برای تولید نانولوله کربنی نامتفارن، ب) نانولوله کربنی نامتفارن..... ۵۳
شکل ۳- ۸ نحوه ذخیره‌سازی اتم‌های هیدروژن در نانولوله‌های کربنی..... ۵۸
شکل ۳- ۹ بردارهای هندسه‌ای نانولوله..... ۶۱

شکل ۵- ۱ تابع دی‌الکتریک نانولوله‌های کربنی (۳،۳)..... ۹۳
شکل ۵- ۲ سطح مقطع پراکندگی نانولوله‌های کربنی (۳،۳)..... ۹۳
شکل ۵- ۳ تابع دی‌الکتریک نانولوله‌های کربنی (۵،۵)..... ۹۴
شکل ۵- ۴ سطح مقطع پراکندگی نانولوله‌های کربنی (۵،۵)..... ۹۵
شکل ۵- ۵ تابع دی‌الکتریک نانولوله‌های کربنی (۱۰،۱۰)..... ۹۶
شکل ۵- ۶ سطح مقطع پراکندگی نانولوله‌های کربنی (۱۰،۱۰)..... ۹۷
شکل ۵- ۷ قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک نانولوله‌های کربنی (۴،۲)..... ۹۹
شکل ۵- ۸ سطح مقطع پراکندگی نانولوله‌های کربنی (۴،۲)..... ۱۰۰
شکل ۵- ۹ قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک نانولوله‌های کربنی (۶،۴)..... ۱۰۱
شکل ۵- ۱۰ سطح مقطع پراکندگی نانولوله‌های کربنی (۶،۴)..... ۱۰۲
شکل ۵- ۱۱ قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک نانولوله‌های کربنی (۸،۴)..... ۱۰۳
شکل ۵- ۱۲ سطح مقطع پراکندگی نانولوله‌های کربنی (۸،۴)..... ۱۰۴

فصل اول

مقدمه

۱- مقدمه

۱-۱- مقدمه

کشف نانولوله‌های کربنی توسط ایجیما[1] و همکارانش در سال ۱۹۹۱ هم از نظر علمی و هم در تکنولوژی توجه بسیاری از پژوهشگران را به این مواد جلب کرد. ویژگی‌های منحصر به فرد نانو- لوله‌های کربنی از نظر خواص الکتریکی، مکانیکی، نوری و شیمیایی نشان از آینده‌ی پرکاربرد این ساختارها بود.

در یک نانولوله‌ی کربنی، اتم‌های کربن در ساختاری استوانه‌ای آرایش یافته‌اند. یعنی یک لوله‌ی توخالی که جنس دیواره‌اش از اتم‌های کربن است. آرایش اتم‌های کربن در دیواره‌ی این ساختار استوانه‌ای، دقیقاً مشابه آرایش کربن در صفحات گرافیت است. در گرافیت، شش ضلعی‌های منظم کربنی در کنار یکدیگر صفحات گرافیت را می‌سازند. این صفحات کربنی بر روی یکدیگر انباشته شده و هر لایه از طریق پیوندهای ضعیف واندروالس به لایه زیرین متصل می‌شود.

نانولوله‌ها در واقع یکی از پر کاربردترین ساختارها در مقیاس نانو هستند. از جمله کاربردهای آنها می‌توان به ذخیره‌ی انرژی، ذخیره‌ی هیدروژن، جای‌دهی لیتیم، ابر خازن‌های الکتروشیمیایی،

[1] *Ijima*

حسگرها و نانوکاوشگرها، الکترونیک مولکولی(ابزارهای گسیل میدان)، ابزارهای نانومکانیکی، مواد کامپوزیتی و همچنین به عنوان ترانزیستورهای تک مولکولی اشاره کرد.

یک خاصیت جالب این مواد این است که بر حسب اینکه در چه جهتی خم شوند، دارای خاصیت نیمه‌هادی و یا فلزی می‌شوند.

نانولوله‌ها دارای پیوندهای محکمی در بین اتم‌هایشان می‌باشند و به همین علت در برابر نیروهای کششی مقاومت و استحکام زیادی از خود نشان می‌دهند. به عنوان مثال نیروی لازم برای شکستن یک نانولوله‌ی کربنی چند برابر نیرویی است که برای شکستن یک قطعه فولاد با ضخامتی معادل یک نانو لوله احتیاج داریم. اما جالب است که بدانیم پیوندهای بین اتمی در نانولوله‌ها علاوه بر ایجاد استحکام بالا، شکل‌پذیری آسان و حتی پیچش را در آنها میسر می‌سازد، در حالی که فولاد تنها در برابر نیروهای کششی دارای مقاومت است و برای پیچش، انعطاف‌پذیری لازم را ندارد. مهم‌ترین خاصیت فیزیکی نانولوله‌ها، هدایت الکتریکی آنهاست. هدایت الکتریکی نانولوله‌ها بسته به زاویه و نوع پیوندها، از دسته‌ای به دسته‌ی دیگر کاملاً متفاوت است؛ هر اتم در جایگاه خود در حال ارتعاش است، وقتی که یک الکترون (یا بار الکتریکی) وارد مجموعه‌ای از اتم ها می‌شود، ارتعاش اتم‌ها بیشتر شده و در اثر برخورد با یکدیگر بار الکتریکی وارد شده را انتقال می‌دهند. هرچه نظم اتم‌ها بیشتر باشد، هدایت الکتریکی آن دسته از نانولوله‌ها بیشتر خواهد بود. نانولوله‌های کربنی را طی فرایندهای مختلفی و به روشهای متعددی تولید می‌کنند. از متداولترین آنها می‌توان به روشهای قوس الکتریکی *[۱]*، ذوب لیزری *[۲]*، و رسوب دهی با بخار شیمیایی *[۳]* اشاره کرد.

از آنجا که نانولوله‌های تولید شده دارای ناخالصی هستند، که این ناخالصی‌ها ناشی از کاتالیزورها و هیدروکربن‌های به کار برده شده در ساخت آنها می‌باشد، لذا نیاز به خالص‌سازی آنها خواهیم داشت. روش‌های مختلفی برای خالص‌سازی نانولوله‌ها وجود دارد که از جمله‌ی آنها می‌توان به اکسید کردن، اسیدکاری، و سرد کردن تدریجی اشاره کرد *[۴]*.

هدف اصلی این رساله، بررسی خواص اپتیکی نانولوله‌های کربنی و بدست آوردن سطح مقطع پراکندگی این نوع ساختارها است. در فصل دوم به بررسی مفهوم پراکندگی می‌پردازیم. در ابتدا پایه‌های فیزیکی پراکندگی و جذب را بیان کرده و پراکندگی از یک تک ذره را مورد بررسی قرار می‌دهیم. در قسمت بعد، معادلات برداری موج را بیان کرده، و به بررسی شرایط مرزی حاکم بر میدان‌های فرودی و پراکنده شده می‌پردازیم. هدف اصلی مسئله‌ی پراکندگی، بدست آوردن سطح مقطع‌های خاموشی، پراکندگی، و جذب است. بنابراین یک رابطه‌ی کلی برای این سطح مقطع‌ها برای یک سیستم دلخواه را بدست می‌آوریم. در قسمت بعد، جواب‌های معادلات برداری موج را برای یک استوانه‌ی نامحدود بدست می‌آوریم. با حل این معادلات برداری موج، می‌توان مسئله‌ی پراکندگی از یک استوانه‌ی نامحدود را به‌طور دقیق حل کرد. در فصل سوم ضمن معرفی کامل نانولوله های کربنی، ویژگی‌ها و کاربردهای آن آورده شده است. خواص اپتیکی نانولوله‌های کربنی در فصل چهارم مورد بررسی قرار گرفته‌اند. برای بدست آوردن این خواص، از محاسبات *از ابتدا* استفاده می‌کنیم. محاسبات *از ابتدا* خواص اپتیکی نانولوله‌های کربنی، بر پایه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی در تقریب چگالی موضعی است. بنابراین ابتدا به بررسی این نظریه می‌پردازیم. برای محاسبه‌ی انتگرال‌ها در ناحیه‌ی اولیه‌ی بریلوین، از روش k-نقطه استفاده می‌کنیم. در ادامه روش k-نقطه را مورد بررسی قرار می‌دهیم. در آخر نیز یک رابطه برای قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک نانولوله‌های کربنی بدست می‌آوریم. قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک از تبدیلات کرامرز-کرونینگ بدست می‌آید. نهایتاً در فصل پنجم، طیف قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک نانولوله‌ها را برای انواع مختلف نانولوله‌های کربنی بدست می‌آوریم. و در نهایتاً نمودار سطح مقطع پراکندگی را برای هر کدام از این نانولوله‌ها را بدست می‌آوریم.

فصل دوم

پراکندگی