بسم الله الرحمن الرحيم

ABBYY PDF Transformer 2.0 Click here to buy www.ABBYY.com

دانشگاه آزاد اسلامی

واحدشاهرود

دانشکده علوم پایه، گروه شیمی

پایان‌نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد«M.Sc.»

گرایش: شیمی‌فیزیک

عنوان :

مطالعه بر هم کنش NO_2 با نانوتیوب هیبریدی $C_{0.5}(BN)_{0.5}$ به روش DFT

استاد راهنما :

آقای دکتر زاهدی

استاد مشاور :

آقای دکتر مجید محمد حسینی

دانشجو :

سمیرا صادقی

زمستان 1390

ABBYY PDF Transformer 2.0 Click here to buy www.ABBYY.com

ISLAMIC AZAD UNIVERSITY

Shahrood Branch

Faculty of Science- Department of Chemistry
((M.Sc.)) Thesis
Physical Chemistry

Subject:

Study of the Interaction of NO_2 Molecule With the Nanotube Hybrid $C_{60}(BN)_{30}$ in Density Functional Theory Method

Advisor:

Dr. Zahedi

Consulting Advisor:

Dr. M.Mohammad Hosseini

By:

Samira Sadeghi

Winter 2012

ABBYY PDF Transformer 2.0 Click here to buy www.ABBYY.com

تعهد نامه اصالت رساله یا پایان نامه

اینجانب ..... دانش آموخته مقطع کارشناسی ارشد ناپیوسته در رشته ..... گرایش ..... که در تاریخ ..... از پایان نامه خود تحت عنوان:"..... ....." با کسب نمره ..... و درجه ..... دفاع نموده ام بدینوسیله متعهد می شوم :

1) این پایان نامه/ رساله حاصل تحقیق و پژوهش انجام شده توسط اینجانب بوده و در مواردی که از دستاوردهای علمی و پژوهشی دیگران (اعم از پایان نامه، کتاب، مقاله و.....) استفاده نموده ام، مطابق ضوابط و رویه موجود، نام منبع مورد استفاده و سایر مشخصات آن را در فهرست مربوطه ذکر و درج کرده ام.

2) این پایان نامه / رساله قبلاً برای دریافت هیچ مدرک تحصیلی (هم سطح، پایین تر یا بالاتر) در سایر دانشگاه ها و مؤسسات آموزش عالی ارائه نشده است.

3) چنانچه بعد از فراغت از تحصیل، قصد استفاده و هرگونه بهره برداری اعم از چاپ، ثبت اختراع و..... از این پایان نامه داشته باشم، از حوزه معاونت پژوهشی واحد مجوز های مربوطه را اخذ نمایم.

4) چنانچه در هر مقطعی زمانی خلاف موارد فوق ثابت شود، عواقب ناشی از آن را می پذیرم و واحد دانشگاهی مجاز است با اینجانب مطابق ضوابط و مقررات رفتار نموده و در صورت ابطال مدرک تحصیلی ام هیچگونه ادعایی نخواهم داشت.

نام و نام خانوادگی

تاریخ و امضاء

ABBYY PDF Transformer 2.0 Click here to buy www.ABBYY.com

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

چکیده 1

فصل اول

1-1- تعریف نانو 3

1-2 - فواید نانو 4

1-3- مضرات نانو 5

1-4 - تعریف نانو تیوب 7

1-5 -خواص CNT 8

1-6 - کاربرد های CNT 9

فصل دوم

2-1 – مقدمه 12

2-2 - طبقه بندی روش های کوانتومی 13

2-2-1 - روش های نیمه تجربی 13

2-2-2. روش های آغازین (ab initio) 14

2-2-2-1. روش هارتری فاک 15

ABBYY PDF Transformer 2.0 Click here to buy www.ABBYY.com

2-2-2-2 - تئوری اختلال Moller – Plesset 16
2 – 2 – 2 – 3 - نظریه تابع دانسیته(DFT) 16
2 – 2 – 3 - سری پایه ها 21
2-2-3-1- توابع نوع اسلیتر 22
2-2-3-2- توابع گوسین 22
2-2-3-3- سری های پایه حداقل 23
2-2-3-4- سری پایه ظرفیتی شکافته 24
2-2-3-5- توابع پایه نفوذی 25
2-2-3-6- توابع پایه قطبیده 26
2-2-4- معرفی چند محاسبه آغازین 30
2-2-4-1 محاسبات تک نقطه ای 30
2-2-4-2- محاسبات بهینه سازی هندسی 30
2-2-4-3- محاسبات فرکانس 32
2-2-4- 4- شرح مراحل یک اجرای آغازین 32
2-2-5- فرضیه های شیمی کوانتومی آغازین 33
2-2-6- کاربردهای روش آغازین 33
2-2-7- محدودیت ها، نکات قوت و اعتبار شیمی کوانتومی آغازین 34
2-2-8- برنامه Gaussian 35
2-2-9- روش های نیمه تجربی 36
2-3-نرم افزارهای شیمی کوانتومی 38
2-4- آینده شیمی کوانتومی 41

فصل سوم

3 – 1- مقدمه 43
3 – 2) هندسه جذب 49

3 – 3) مراحل انجام محاسبات 49
3 – 4) بررسی طول پیوندها در موضع جذب 56
3 – 5) NMR : مطالعه تانسورهای پوشیدگی شیمیایی 57
نتیجه گیری 67
فهرست منابع غیر فارسی 68
چکیده انگلیسی 69

ABBYY PDF Transformer 2.0 Click here to buy www.ABBYY.com

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

جدول(2-1). روش های معروف در نرم افزار Gaussian 37

جدول (3 – 1). مقادیر انرژی کل الکترونی (a.u) ، انرژی جذب $(\frac{kcal}{mo1})$ و مقدار بار انتقال یافته (C) در مولکولهای مورد مطالعه. 55

جدول (3 – 2). مقادیر طول پیوندها در موضع جذب (Å) (قبل و بعد از جذب). 56

جدول (3 – 3). فاصله بین نانوتیوب و NO_2جذب شده (Å) در مولکولهای مورد مطالعه. 57

جدول (3- 4). مقادیر تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی ((CSI(ppm)و پوشیدگی شیمیایی آنیزوتروپی (CSA(ppm)) قبل از جذب NO_2 58

جدول 3- 5– مقادیر تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی ((CSI(ppm)و پوشیدگی شیمیایی آنیزوتروپی (CSA(ppm)موقعیت 1 59

جدول (3- 6). مقادیر تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی ((CSI(ppm)و پوشیدگی شیمیایی آنیزوتروپی (CSA(ppm)موقعیت 2 60

جدول (3- 7). مقادیر تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی ((CSI(ppm)و پوشیدگی شیمیایی آنیزوتروپی (CSA(ppm)موقعیت 3 61

جدول (3- 8). مقادیر تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی ((CSI(ppm)و پوشیدگی شیمیایی آنیزوتروپی (CSA(ppm)موقعیت 4 62

جدول (3- 9). مقادیر تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی ((CSI(ppm)و پوشیدگی شیمیایی آنیزوتروپی (CSA(ppm)موقعیت 5 63

جدول (3 – 10). مقادیر CSI(ppm) و CSA(ppm) در مواضع جذب. 64

جدول (3 – 11). مقادیر بار روی اتم های بور قبل و بعد از جذب به روش NBO 65

ABBYY PDF Transformer 2.0 Click here to buy www.ABBYY.com

فهرست اشکال

عنوان **صفحه**

شکل (3-1)، شکل فضایی نانوتیوب $C_{0.5}(BN)_{0.5}(10.0)$ قبل از جذب 43

شکل (3-2)، شکل فضایی نانوتیوب $C_{0.5}(BN)_{0.5}$ در موقعیت 1 اتم(B_{35}) 44

شکل (3-3)، شکل فضایی نانوتیوب $C_{0.5}(BN)_{0.5}$ در موقعیت 2 اتم(B_{28}) 45

شکل (3-4)، شکل فضایی نانوتیوب $C_{0.5}(BN)_{0.5}$ در موقعیت 3 اتم(B_{20}) 46

شکل (3-5)، شکل فضایی نانوتیوب $C_{0.5}(BN)_{0.5}$ در موقعیت 4 اتم (B12). 47

شکل (3-6)، شکل فضایی نانوتیوب $C_{0.5}(BN)_{0.5}$ در موقعیت 5 اتم (B_4) 48

شکل (3-7)، نحوه اتصال NO_2 به مولکول نانوتیوب اولیه. 49

شکل (3-8)، ساختار بهینه شده نانوتیوب $C_{0.5}(BN)_{0.5}$ بعد از جذب NO_2 در موقعیت 1. 50

شکل (3-9)، ساختار بهینه شده نانوتیوب $C_{0.5}(BN)_{0.5}$ بعد از جذب NO_2 در موقعیت 2. 51

شکل (3-10)، ساختار بهینه شده نانوتیوب $C_{0.5}(BN)_{0.5}$ بعد از جذب NO_2 در موقعیت 3. 52

شکل (3-11)، ساختار بهینه شده نانوتیوب $C_{0.5}(BN)_{0.5}$ بعد از جذب NO_2 در موقعیت 4. 53

شکل (3-12)، ساختار بهینه شده نانوتیوب $C_{0.5}(BN)_{0.5}$ بعد از جذب NO_2 در موقعیت 5. 54

ABBYY PDF Transformer 2.0 Click here to buy www.ABBYY.com

چکیده

در نانوتیوب زیگزاگ (10.0) هیبرید شده پنج اتم بور با موقعیتهای مختلف وجود داردکه از لحاظ انرژی امادگی بالا جهت برهمکنش با اتم تیتروژن گاز دی اکسید نیتروژن دارد طی برهمکنش این گاز بانانوتیوب هیبریدی، مشخصات ساختاری و الکترونی نانوتیوب، دچار تغییرات خواهد شد. در این تحقیق میزان این تغییرات و اتم بور مولکول نانوتیوب موضع جذب بر روی این تغییرات بررسی میشود .

کلمات کلیدی : اتم ، نانوتیوب ، مولکول ، هیبرید

ABBYY PDF Transformer 2.0
Click here to buy
www.ABBYY.com
ABBYY PDF Transformer 2.0
Click here to buy
www.ABBYY.com

فصل اول

ABBYY PDF Transformer 2.0 Click here to buy www.ABBYY.com

1-1- تعریف نانو

یک نانو متر یک هزارم میکرون است و اگر بخواهیم احساس فیزیکی نسبت به آن داشته باشیم می توان گفت که یک نانو متر1/80000 قطر موی انسان است. اما این تعریف مقیاس نانو نمی تواند مقیاس درستی باشد چراکه ضخامت موی انسان با توجه به خصوصیات فردی هر انسان از چند ده میکرومتر تا چند صد میکرومتر متغیر می باشد. بنابراین نیاز به یک استاندارد برای بیان مفهوم مپقیاس نانو وجود دارد. با ایجاد ارتباط میان اندازه اتم ها و مقیاس نانو می توان یک نانومتر را راحت تر تصور کرد. یک نانو متر برابر قطر ده اتم هیدروژن و یا 5 اتم سیلیسیم است. این است که نانو فناوری عبارت است از دستکاری کوچک ترین اجزا ماده یا اتم ها .

تعریف فناوری نانو :

توسعه و استفاده از ادوات و قطعاتی که اندازه آن ها تنها چند نانو متر است تحقیق بر روی قطعات و ادوات بسیار کوچک که خواصشان به خواص الکترونیکی این قطعات وابسته است و خواص الکتریکی آن ها احتمالا متاثر از حرکت تعداد معدودی الکترون در طی عملکرد قطعه می باشد. این ادوات سریع تر از ادوات بزرگ تر عمل می کنند و می توان چنین ساختارهای در ابعاد مولکولی را به کمک انتخاب مناسب مراحل واکنش های شیمیایی تولید کرد و می توان چنین ساختارهایی را از طریق دستکاری اتم ها روی سطح به وسیله میکروسکوپ های نیروی اتمی به دست آورد. شاخه ای از علوم که هدف نهایی آن کنترل بر روی تک تک اتم ها و مولکول ها می باشد تا بتوان به کمک آن تراشه های کامپیوتری و سایر ادواتی تولید کرد که هزاران بار کوچک تر از ادوات فعلی می باشند که فناوری امروز امکان

ABBYY PDF Transformer 2.0 Click here to buy www.ABBYY.com

ساخت آن را برای ما فراهم کرده است. در فناوری فعلی تولید مدارات نیمه هادی از روش لیتوگرافی برای ایجاد طرح مدار بر روی مواد نیمه هادی استفاده می شود پیشرفت شگرفی که در لیتوگرافی در طی 2 دهه اخیر رخ داده است به ما این امکان را می دهد که با بهره گیری از دستگاه های جدید بتوانیم مداراتی کوچک تر از یک میکرون (1000 نانومتر) را تولید کنیم. البته باید توجه داشت که این مدارات هنوز از میلیون ها اتم تشکیل شده اند. بیشتر دانشمندان بر این باورند که لیتوگرافی به مرزهای محدود کننده فیزیکی خود نزدیک شده اند بنابراین برای کوچک تر کردن اندازه نیمه هادی ها می بایست از فناوری های جدیدی که می توانند تک تک اتم ها را سازماندهی کنند استفاده کرد و طبعا چنین فناوری جزء فناوری نانو می باشد.

نانو تکنولوژی به دلیل خصوصیات منحصر به فردی مانند سایز خیلی کوچک آن و نسبت سطح به جرم زیادش به طور بالقوه ای انسان ها را در معرض خطرات جدید و رو به رشد قرار می دهد و افزایش مشکلات بهداشتی به خصوص برای کارگران دارد. نانو تکنولوژی تولید کارآمد مواد و دستگاهی و سیستم ها با کنترل ماده در مقیاس طولی نانو و بهره برداری از خواص و پدیده های نو ظهوری است که در مقیاس نانو توسعه یافته اند.

2-1 - فواید نانو

تنها با در نظر گرفتن فرضیات اسامی فناوری نانو می توان فواید بالقوه وسیعی را در این قلمرو تصور کرد. برخی از برجسته ترین این فواید به این قرارند : ساخت دقیق، استفاده دوباره از مواد و کوچک سازی کاربردهای دارویی عبارتند از : تولید دارو، درمان بسیاری از بیماری های سخت و جراحی هایی با استفاده از نانو ماشین ها کاربردهای محیطی عبارتند از : تصفیه و پاکسازی سموم، چرخه زباله ها و کاهش مصرف منابع طبیعی بسیاری از کشور ها به این نتیجه رسیده اند که نانو تکنولوژی در طول چند دهه آینده به عامل اقتصادی اصلی تبدیل می شود. نانو تکنولوژی به صنایع الکترونیک و دارو سازی ـ مراقبت از سلامتی ـ آب و هوا و محیط زیست ـ انرژی ـ شیمی ـ کشاورزی و علوم رایانه ـ فن آوری اطلاعات و امنیت ملی اثر می گذارد و سلامتی و رفاه مردم را بالا می برد. از دیگر اثرات نانو تکنولوژی در کار رایانه هاست که سرعت آن ها را بیشتر می کند و علوم ارتباطات را هم گسترش می دهد. نانو الکترونیک ظرفیت تجهیزات نظامی را گسترش می دهد. روبات ها را پیشرفته تر می کند با نانو تکنولوژی می توان ساختمان ها و

ABBYY PDF Transformer 2.0 Click here to buy www.ABBYY.com

خودروهایی با مصالح و مواد اولیه سبک تر و مقاوم تر ساخت. هواپیماهای نظامی و ظرفیت باربری هواپیما ها بیشتر می شود. مصرف سوخت در ماشین ها کاهش می یابد. امکان پرتاب سفینه به خارج از مدار زمین و حتی خارج از منظومه شمسی افزایش می یابد.

محصولات ساخته شده از نانو تکنولوژی می تواند بسیاری از مشکلات جهان را حل کند به عنوان مثال ذخیره آب مشکل جدی و رو به رشدی است. بیشتر آب برای صنعت و کشاورزی مورد استفاده قرار می گیرد. اگر از فناوری نانو استفاده شود بهره وری بیشتر در صنعت و کشاورزی باعث می شود بتوانیم در آب ـ زمین ـ ماده و نیروی کار صرفه جویی کنیم و آلودگی ها را کاهش دهیم.

این کار هم با استفاده از تولیدات ناشی از مصنوعات مولکولی ممکن است. بیماری های واگیردار هنوز بخش های بزرگی از جهان را آزار می دهد. محصولات ساده ای مثل لوله ها و صافی ها که توسط نانو تکنولوژی ساخته می شود می تواند این مشکلات را حل کند.

فناوری نانو اجازه استفاده از انرژی حرارتی خورشید را برای تجهیزات الکتریکی و دستگاه های ذخیره انرژی می دهد. آب و هوای بد یک مشکل جهانی است. محصولات با تکنولوژی بالا به مردم اجازه می دهد تا کم تر از تاثیرات سوء تغییرات آب و هوایی ضرر کنند. پژوهشگران علوم در دانشگاه فنی ماساچوست به نانو ذرات جدیدی دست یافتند که می تواند گامی موثر برای تولید واکسن عفونی مانند HIV و سرطان و مالاریا به صورت ایمن باشد. این ذرات جدید شامل حوزه های چربی هم مرکز هستند که می توانند نسخه های مصنوعی پروتئین ها را که در حالت عادی توسط ویروس ها تولید می شوند حمل کنند. این ذرات مصنوعی در مقایسه واکنش ایمنی تولید شده توسط واکسن های ویروس زنده واکنشی بسیار قوی تر تولید می کنند اما این واکنش باید بسیار ایمن تر باشد.

3-1- مضرات نانو

سلاح ها کاربرد منفی و آشکار فناوری نانو است. توسعه قابلیت سلاح های امروزی با کوچک سازی تفنگ ها، سلاح های انفجاری و انواع مختلف موشک ها می توانند کشتارها را به شکل فزاینده ای افزایش دهد، فناوری نانو به راحتی

ABBYY PDF Transformer 2.0 Click here to buy www.ABBYY.com

می تواند آزادی و خلوت ما را از بین ببرد. مردم می توانند میکروفون ها ـ دوربین ها و دید بانی های خانگی را با اندازه یک مولکول برای نظاره کردن ـ دنبال کردن و پیگیری دیگران به کار برند.

نانو ذرات به دو دلیل می توانند برای سلامتی مضر باشند. اول اینکه می توانند خیلی سریع از طریق پوست و سلول های مخاطی جذب بدن شوند و دوم اینکه به دلیل جدی این مواد مسمومیت های جدید و ناشناخته ای را به وجود می آورند.

چرا نانو ذرات می توانند خطرناک باشند ؟ وقتی مواد در مقیاس نانو تبدیل شوند در خواص کاتالی شیمیایی ـ بیولوژیکی و فعالیت های آن ها تغییراتی ایجاد می شود. بنابراین موادی که در حالت بالک (توده ای) بی خطر هستند وقتی به حالت نانو تبدیل می شوند می توانند سمی و خطرناک باشند اندازه کوچک نانو ذرات باعث می شود تا این مواد بتوانند به سدهای دفاعی بدن فائق آیند.

در چه شرایطی نانو ذرات خطرناک هستند ؟ بعضی بر این باورند که انسان ها آنقدر در معرض نانو ذرات نمی باشند که برای آن ها ایجاد خطراتی از جنبه سلامتی کند برای مثال گزارش شده است که بلعیدن TiO_2 توسط انسان بی ضرر است اما اگر در معرض نانو ذرات بودن بیشتر از حد معمولی گردد احتمال ایجاد خطر برای سلامتی وجود دارد.

عامل دیگری که باعث نگرانی در مورد نانو ذرات می باشد این است که نانو ذرات می توانند به دیگر آلاینده های خطرناک در آب یا هوا متصل شوند یا با آن ها واکنش دهند و در نتیجه ورود آن ها را به بدن آسان تر کند.

در ارزیابی خطرات نانو ذرات نکاتی مانند:

الف) اندازه و توزیع

ب) شکل

ج) خواص

د) بار سطحی

ه) جرم، غلظت و تعداد قابل توجه می باشند.

ABBYY PDF Transformer 2.0 Click here to buy www.ABBYY.com

اندازه ذرات در توزیع آن ها در بدن موثر است ذرات بزرگ تر از 100 nm به مغز استخوان نمی رسند و ذرات بزرگ تر از 300 nm در خون وجود ندارند. بار سطحی ذرات در توزیع آن ها در بدن نقش دارد .

4-1 - تعریف نانو تیوب

کربن نانو تیوب ها استوانه های تو خالی از تک ورقه های گرافیتی هستند که به شکل استوانه پیچیده شده اند. این مواد دارای خواص ساختاری مکانیکی و الکتریکی فوق العاده ای هستند که ناشی از خواص ویژه پیوند های کربنی و تقارن استوانه ای آن هاست.

کربن نانو تیوب ها یکی از مهم ترین زمینه های تحقیقاتی در نانو تکنولوژی می باشند. خواص و پتانسیل ویژه و انحصاری آن ها برای کاربرد های ارزشمند تجاری، طیف وسیعی از الکترونیک تا کنترل فرایندهای شیمیایی را دربر می گیرد. این امر موجب تلاش بسیار عظیمی جهت تحقیق در مورد نانو تیوب ها در 5 سال اخیر شده است. ساختمان، خواص و چگونگی حصول کربن نانو تیوب ها در این مقاله بررسی شده است. می توان کربن نانو تیوب ها و انواع اصلاح شده و تغییر شکل یافته گرافیت تصور کرد. گرافیت از لایه های بسیار زیاد اتم های کربن که به فرم 6 گوشه بهم وصل شده و ورقه های مسطحی را تشکیل می دهند شکل یافته است. پیوند بین لایه های ضعیف و پیوند کربن اتم ها (داخل لایه ها) قوی می باشند. CNT را می توان ورقه یا ورقه هایی از گرافیت تصور کرد که لوله شده باشند.CNT می تواند به شکل نانو تیوب های تک جداره مثل یک ورقه لوله شده و یا چند جداره شبیه به چند ورقه که با هم لوله شده باشند موجود باشد.

CNT ها با انواع مختلف chirality (کایرالیتی) می تواند تولید شود. کایرالیتی آرایش 6 گوشه اتم های کربن است که در جهت محور تیوب فرم گرفته اند. پس ممکن است دو تیوب با قطر یکسان ساختمان متفاوتی داشته باشند اگرچه منحصرا از اتم های کربن تشکیل شده باشند. CNT توسط بردار کردن شان تحت عنوان(m,n) شرح داده می شود که n و m اعداد صحیح هستند تیوب (m,0) برای مثال (100) یک تیوب مدل صندلی دسته دار را توصیف می کند که 6 گوشه ها در تیوب مستقیما به موازات طولشان درست شبیه دسته های یک صندلی دسته دار امتداد پیدا می کنند در

حالیکه تیوب با m = n برای مثال (5، 5) تیوب زیگزاگ خوانده می شود که شش گوشه ها به صورت زیگزاگ در طول لوله پایین می روند.

5-1 -خواص CNT

CNT ها خواص ویژه متعددی دارند. طیف رفتار الکترونیکی‌شان به کایرالیتی(chirality) آن ها بستگی دارد. تیوب های مدل صندلی دسته دار، فلزی و انواع دیگر تیوب ها نیمه رسانا هستند به علاوه درجه رسانایی یا نیمه رسانایی توسط doping قابل کنترل است به عنوان مثال تحقیق اخیر نشان داده که حضور اکسیژن به تدریج روی رسانایی همان CNT اثر می گذارد. تغییرات در اندازه یا تغییر شکل مکانیکی هم روی خواص الکترونیکی آن ها موثر است. CNT ها همچنین Field Emitters (دستگاه های نشر میدانی) با کیفیت بالا هستند. قرار دادن کربن نانو تیوب ها در یک میدان الکترونیکی قوی باعث ساطع شدن الکترون ها با راندمان بالا بدون آسیب رساندن به تیوب ها می شود. از دید مکانیکی به نظر می رسد CNT قوی ترین ماده است که تا به حال شناخته شده است. نتایج عملی نشان می دهد که آن ها میزانی از الاستیسیته (قابلیت ارتجاعی) دارند. در مورد رفتار حرارتی CNT کار کمتری انجام شده ولی کار تئوری درست مثل اندازه گیری های عملی روی سوسپانسیون CNT در مایعات اشاره دارد به این که ممکن است هدایت حرارتی آن ها هم نزدیک شدن به حد Theoretical مواد کربنی به نحو قابل توجهی بالا باشد اگر این تحقیق و ارزیابی ها درست باشند CNT ماده ای است که بیشترین رسانایی حرارتی را در دمای اتاق داراست که تا به حال شناخته نشده است. ویژگی دیگر این است که تصور می شود رسانایی حرارتی CNT در طول تیوب ها بیشتر از عرض آن ها باشد در نتیجه پتانسیلی برای موارد ایجاد می شود که خواص هدایت حرارتی نا همگن داشته باشند. به هر حال اندازه گیری های مستقیم روی CNT ها باید این حدسیات را تایید کند.

ABBYY PDF Transformer 2.0 Click here to buy www.ABBYY.com

6-1 - کاربرد های CNT

زمینه های کلیدی کاربرد های بالقوه و بالفعل CNT شامل الکترونیک ـ حسگرها ـ مواد و مصالح ساختمانی ـ پرکن ها (Fillers) و مواد ذخیره ای می باشد. بیشترین طیف کاربرد تجاری این ماده استفاده از MWNT به عنوان ماده پرکن در کامپوزیت های پلاستیک و رنگ ها می باشد و گاهی به عنوان جایگزین بهبود و اصلاح یافته برای کربن سیاه می باشد. توانایی CNT در فلز و نیمه هادی بودنش با یک تغییر در ساختمانش به جای تغییر در ترکیباتش، امکانات قابل توجهی برای الکترونیک نانویی ایجاد می کند. انواع مختلف ترانزیستورهای CNT و دریچه های منطقی قبلا شرح داده شده و IC (مدارهای مجتمع) در حال توسعه است.

طبیعت خطی CNT به این معنی است که آن ها فایده دیگری نیز دارند و آن اینکه قادرند به عنوان اتصال دهنده (Leads)برای دستگاههای الکترونیکی عمل کنند. یکی از کاربردهای وابسته و احتمالا یکی از اولین مواردی که به بازار راه خواهد یافت، تحت عنوان Emitter in field display می باشد. همان طور که قبلا ذکر شد CNT بسیار Effective field Effect emitters of electron می باشند.

در این کاربرد الکترون های تولید شده توسط emitters به طرف مواد فسفری موجود در سطح هدایت می شوند که در بازگشت فوتون های مرئی ساطع می کنند. رفتار مکانیکی CNT علاقه مندی زیادی جهت استفاده از آن ها به عنوان مواد ساختمانی ایجاد کرده است. پتانسیل های استفاده از رشته های CNT هنوز قابل تامل بوده است. به نظر می رسد توسعه کوتاه مدت برای کامپوزیت های نانو تیوب با توجه به پتانسیل فعلی آن ها عملی تر باشد، چون طول تیوبی که در حال حاضر ساخته می شود نیز برای این منظور مناسب تر است. CNT به علت استحکام و نسبت طول به عرض فوق العاده زیادشان بسیار به تقویت کننده های ایده آل نزدیک اند.

زمینه های کاربرد متعدد و بسیار مهم دیگری وجود دارد. برای مثال به عنوان حسگرها برای ذخیره و کنترل کاتالیت ها و یا به عنوان نوک (tips) برای AFM ها (Atomic Force Microscopes) در زمینه های ذخیره‌سازی هیدروژن پیشرفت موفقیت آمیز کمتری وجود داشته است. تحقیقات اخیر چنین نشان می دهد که بعید به نظر می رسد CNT ابزار موثری جهت ذخیره سازی باشد. وسعت کاربرد ها برای CNT بستگی به بهبود و پیشرفت روش های نشر دارد.

توانایی تولید منظم و مداوم تیوب ها با طول زیاد و charility مشخص، رشته ها یا تیوب های تک که بسیار متناسب و مطلوب باشند و تیوب های با خواص الکترونیکی ویژه تماما برای کاربرد های مختلف تجاری لازم خواهد بود.

ABBYY PDF Transformer 2.0
Click here to buy
www.ABBYY.com
ABBYY PDF Transformer 2.0
Click here to buy
www.ABBYY.com

فصل دوم