



101-11



دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه، گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد «M.Sc.»

گرایش: شیمی فیزیک

عنوان:

مطالعه تئوری برهمکنش گاز CO_2 با نانوتیوب (۸،۰) و (۱۰،۰)

بروکسول به روش DFT

استاد راهنما:

دکتر احسان زاهدی

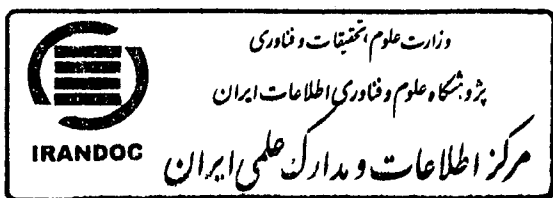
استاد مشاور:

دکتر صفا علی عسگری

نگارش:

زهرة صائمی

زمستان ۱۳۸۸



ب

۱۵۸۰۸۷





دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه ، گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد « M.Sc. »

گرایش : شیمی فیزیک

عنوان :

مطالعه تئوری بر همکنش گاز CO_2 با نانو تیوب $(8,0)$ و $(10,0)$ بروکسول به روش DFT

نگارش :

زهرة صائمی

زمستان ۸۸

۱. دکتر احسان زاهدی

۲. دکتر صفا علی عسگری

۳. دکتر بهزاد چهکندی

۴. دکتر عبدالحکیم پنیق

هیأت داوران :

پروردگارا

به پیشگاه پاک و مقدست تقدیم می‌دارم که بندگی را فقط و فقط تو را سزد، آنچه داده‌ای بیش از شایستگی من است
گر چه در خور بخشندگی توست.

سپاسگزارم :

خدای بی همتا را ، که در لحظه لحظه زندگی ، وجودش را با تمام وجودم حس کرده و در تمام طول حیاتم از او یاری
طلبیده و می طلبم

سپاسگزارم از استاد راهنمای گرامیم جناب آقای دکتر احسان زاهدی

که با راهنمایی‌های ارزشمندشان مرا در به پایان رساندن این پروژه یاری نمودند.

با تشکر فراوان از جناب آقای دکتر صفا علی عسگری

استاد بزرگوام که زحمت مشاوره‌ی پروژه‌ی اینجانب را متقبل شدند.

از جناب آقای دکتر بهزاد چهکندی و جناب آقای دکتر عبدالحکیم پنق

که داوری پایان‌نامه‌ی بنده را قبول زحمت کردند کمال تشکر را دارم.

و در نهایت از همه‌ی کسانی که مرا در به ثمر رساندن این پروژه یاری نمودند، کمال تشکر را دارم.

تقدیم به پدر عزیزم :

الگوی راهم وجودم همه بر ایش رنج بود و رنج

و وجودش برای همه عشق بود و عشق

توانش رفت تا به توانایی برسم

با نگاه پر فروغش با عشق به زندگیش به من درس زندگی آموخت

این پیشکش بی قدریست از قطره به دریا

تقدیم به الهه عشق ، ملکه خوبی ها

تقدیم به مادرم یگانه عشقم روی زمین مادری که تمام لحظات زندگی ام آکنده از عشق و علاقه به او بوده و هست .

تقدیم به وجود پر مهرت و قلب مالا مال از عشقت که الفبای زندگی و چگونه زیستن را به من آموختی .

این تقدیم بی ارجی است از ذره به خورشید

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	چکیده
	فصل اول : کلیات
۳	۱-۱- فناوری نانو
۳	۱-۱-۱- تاریخچه
۳	۱-۱-۲- تعریف نانوفناوری
۴	۱-۱-۳- کاربردهای فناوری نانو
۴	۱-۱-۴- منافع نانوتکنولوژی
۵	۱-۱-۵- معایب و مضرات نانو تکنولوژی
۶	۱-۱-۶- چشم انداز فناوری نانو تکنولوژی
۷	۲-۱- نانوتیوبها
۷	۲-۱-۱- تعریف
۷	۲-۱-۲- انواع نانوتیوب ها
۱۰	۲-۱-۳- خواص نانوتیوبها
۱۰	۲-۱-۱-۱- قابلیت هدایت الکتریکی
۱۰	۲-۱-۲-۱- استحکام و الاستیسیته
۱۱	۲-۱-۲-۱- کاربرد نانوتیوب ها
۱۱	۲-۱-۲-۱- الکترونیک

۱۱	۲-۲-۲-۱- ذخیره هیدروژن
۱۱	۳-۲-۲-۱- آسانسورها یا بالابرهای فضایی
۱۲	۳-۱- نانو لوله های کربنی
۱۲	۱-۳-۱- تعریف
۱۲	۴-۱- نانوتیوب های بور نیتريد
۱۲	۱-۴-۱- بور- نیتريد
۱۲	۲-۴-۱- ویژگی بورنیتريد
۱۳	۵-۱- نانوتیوب بورنیتريد
۱۳	۱-۵-۱- تعریف
۱۵	۲-۵-۱- روش های سنتز نانوتیوب بورنیتريد
۱۵	۳-۵-۱- شیمی نانوتیوب های نیتريد بور و خالص سازی آنها
۱۶	۴-۵-۱- مزیت های نانوتیوب های بورنیتريد
۱۶	۵-۵-۱- تفاوت نانوتیوبهای بورنیتريد با نانوتیوبهای کربنی

فصل دوم : روش های محاسبات

۱۹	۱-۲- مقدمه
۲۰	۲-۲- طبقه بندی روش های کوانتومی
۲۰	۱-۲-۲- روش های نیمه تجربی
۲۲	۲-۲-۲- روش های آغازین
۲۳	۱-۲-۲-۲- روش هارتری فاک
۲۴	۲-۲-۲-۲- روش ماتریس دانسیته
۲۴	۳-۲-۲-۲- تئوری اختلال Moller - Plesset
۲۵	۴-۲-۲-۲- روش های فوق هارتری - فاک
۲۶	۵-۲-۲-۲- روشهای همبستگی وردشی
۲۶	۶-۲-۲-۲- روشهای همبستگی اختلال

- ۴۰ ab initio فرضیه های شیمی کوانتومی
- ۴۱ ab initio کاربردهای متد
- ۴۱ ab initio تواناییهای متد
- ۴۱ ab initio محدودیتها ، نکات قوت و اعتبار شیمی کوانتومی
- ۴۲ NMR -۵-۲
- ۴۲ NMR -۱-۵-۲ تاریخچه ی
- ۴۳ NMR - ۲ - ۵ - ۲ چیست ؟
- ۴۶ اسپین هسته ای -۳-۵-۲
- ۴۷ NMR -۴-۵-۲ مکانیک کوانتومی
- ۴۹ -۵-۵-۲ ماتریس دانسیته
- ۵۰ -۶-۵-۲ برهمکنش ها در رزونانس مغناطیسی هسته ای
- ۵۲ NMR -۷-۵-۲ محاسبات آغازین پارامترهای
- ۵۳ -۸-۵-۲ محاسبه ی تانسورهای رزونانس مغناطیسی هسته ای
- ۵۴ NQR -۶-۲
- ۵۴ -۱-۶-۲ هامیلتونی چهارقطبی
- ۵۶ -۲-۶-۲ اثرات چهار قطبی

فصل سوم : روش کار ، محاسبات و نتیجه گیری

- ۶۰ ۱-۳ بحث مقدماتی
- ۶۰ ۲-۳ بخش اول: مطالعه اثر جذب مولکول دی اکسید کربن روی نانوتیوبهای بورنیتريد (۸۰۰) و (۱۰۰۰)
- ۶۰ ۱-۲-۳ ترسیم و تعیین شکل هندسی نانوتیوب های بور نیتريد (۸۰۰) و (۱۰۰۰)
- ۶۳ ۲-۲-۳ برهینه سازی ساختار نانوتیوب بورنیتريدخالص (۸۰۰) و (۱۰۰۰)
- ۶۸ ۳-۲-۳ جذب CO₂ بر روی نانوتیوب بور نیتريد ۸۰۰ و ۱۰۰۰
- ۶۹ ۱-۳-۲-۳ جذب نوع A در نانوتیوبهای بور نیتريد (۸۰۰) و (۱۰۰۰)

- ۷۱ ۳-۲-۴- بهینه سازی ساختار نانوتیوب بورنیتريد CO₂- attached (۸۰۰) و (۱۰۰۰)
- ۷۵ ۳-۲-۵- تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ^{۱۱}B، ^{۱۵}N و ^۱H
- ۸۸ ۳-۶- مطالعه ی رزونانس چهار قطبی هسته ای ^{۱۴}N و ^{۱۱}B
- ۱۱۱ ۳-۳- مطالعه اثر جذب مولکول دی اکسید کربن روی نانوتیوب های (۸۰۰) و (۱۰۰۰) بروکسول
- ۱۱۱ ۳-۳-۱- ترسیم و تعیین شکل هندسی نانوتیوب بروکسول (۸۰۰) و (۱۰۰۰)
- ۱۱۲ ۳-۹- بهینه سازی ساختار نانوتیوب بروکسول خالص (۸۰۰) و (۱۰۰۰)
- ۱۱۳ ۳-۱۰- جذب دی اکسید کربن روی نانوتیوب های بورنیتريد (۸۰۰) و (۱۰۰۰) بروکسول
- ۱۱۶ ۳-۱۱- بهینه سازی ساختار نانوتیوب بروکسول CO₂-attached (۸۰۰) و (۱۰۰۰)
- ۱۱۸ ۳-۱۲- تغییرات طول پیوند در نانوتیوبهای (۸۰۰) و (۱۰۰۰) بروکسول
- ۱۱۹ ۳-۱۳- مطالعه ی تانسورهای پوشیدگی شیمیایی هسته های ^{۱۱}B، ^{۱۵}N، ^{۱۷}O و ^۱H
- ۱۲۸ ۳-۱۴- مطالعه ی رزونانس چهار قطبی هسته ای ^{۱۴}N، ^{۱۱}B، ^{۱۷}O و ^۲H

نتیجه گیری

- ۱۵۶ نتیجه گیری
- ۱۵۷ منابع فارسی
- ۱۵۸ منابع انگلیسی
- ۱۶۰ چکیده انگلیسی

فهرست جداول

عنوان	صفحه
جدول (۱-۱). مشخصات بورنیتريد	۱۳
جدول (۱-۲). مجموعه ای انتخابی از هسته های فعال در NMR و خواص آن ها	۴۵
جدول (۲-۲). هاميلتوني ها و برهم کنش های اسپين - هسته ای	۵۱
جدول (۱-۳). مقادير انرژی کل الکترونی، ممان دو قطبی و گاف انرژی با استفاده از روش AM1	۶۳
جدول (۲-۳). مقادير میانگين طول پیوند بين اتم های لایه های مختلف برای نانوتیوب بورنیتريد (۸۰۰) و (۱۰۰۰) با استفاده از روش AM1	۶۳
جدول (۳-۳). مقادير انرژی کل الکترونی، ممان دو قطبی و گاف انرژی با روش B3LYP و با استفاده از سری پایه STO-3G	۶۴
جدول (۴-۳). مقادير میانگين طول پیوند بين اتم های لایه های مختلف برای نانوتیوب بورنیتريد (۸۰۰) و (۱۰۰۰) با روش B3LYP و با استفاده از سری پایه STO-3G	۶۴
جدول (۵-۳). مقادير انرژی کل الکترونی، ممان دو قطبی و گاف انرژی، با روش B3LYP و با استفاده از سری پایه 3-21G	۶۵
جدول (۶-۳). مقادير میانگين طول پیوند بين اتم های لایه های مختلف برای نانوتیوب بورنیتريد (۸۰۰) و (۱۰۰۰) با روش B3LYP و با استفاده از سری پایه 3-21G	۶۵
جدول (۷-۳). مقادير انرژی کل الکترونی، ممان دو قطبی و گاف انرژی با روش B3LYP و با استفاده از سری پایه 6-31G	۶۶
جدول (۸-۳). مقادير میانگين طول پیوند بين اتم های لایه های مختلف برای نانوتیوب بورنیتريد (۸۰۰) و (۱۰۰۰) با روش B3LYP و با استفاده از سری پایه 6-31G	۶۶

- جدول (۳-۹) . مقادیر انرژی کل الکترونی، ممان دو قطبی و گاف انرژی با روش B3LYP و با استفاده از سری پایه 6-31G* ----- ۶۷
- جدول (۳-۱۰) . مقادیر انرژی HOMO و LUMO با روش B3LYP و با استفاده از سری پایه 6-31G* ۶۷
- جدول (۳-۱۱) . مقادیر میانگین طول پیوند بین اتم های لایه های مختلف برای نانوتیوب بورنیتريد (۸،۰) و (۱۰،۰) با روش B3LYP و با استفاده از سری پایه 6-31G* ----- ۶۷
- جدول (۳-۱۲) . مقادیر انرژی کل الکترونی، ممان دو قطبی و گاف انرژی مولکول CO2 پس از بهینه سازی با روش B3LYP و با استفاده از سری پایه 6-31G* ----- ۶۸
- جدول (۳-۱۳) . نتایج حاصل از جذب دی اکسید کربن روی نانوتیوب (۸،۰) با روش B3LYP و با استفاده از سری پایه 6-31G* ----- ۷۲
- جدول (۳-۱۴) . مقادیر میانگین طول پیوند بین اتم های لایه های مختلف پس از جذب دی اکسید کربن بر روی نانوتیوب بورنیتريد (۸،۰) با روش B3LYP و با استفاده از سری پایه 6-31G* ----- ۷۲
- جدول (۳-۱۵) . نتایج حاصل از جذب دی اکسید کربن روی نانوتیوب (۱۰،۰) با روش B3LYP و با استفاده از سری پایه 6-31G* ----- ۷۳
- جدول (۳-۱۶) . مقادیر میانگین طول پیوند بین اتم های لایه های مختلف پس از جذب دی اکسید کربن بر روی نانوتیوب بورنیتريد (۱۰،۰) با روش B3LYP و با استفاده از سری پایه 6-31G* ----- ۷۳
- جدول (۳-۱۷) . مقادیر تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپیک و آنیزوتروپیک نانوتیوب بورنیتريد (۸،۰) قبل و بعد از جذب مربوط به هسته های ۱H، ۱۱B، ۱۵N ----- ۷۶
- جدول (۳-۱۸) . مقادیر تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپیک و آنیزوتروپیک نانوتیوب (۱۰،۰) قبل و بعد از جذب مربوط به هسته های ۱H، ۱۱B، ۱۵N ----- ۸۱
- جدول (۳-۱۹) . مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی a.u و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته های ۱۴N، ۱۱B و ۲H نانوتیوب خالص (۸،۰) قبل از جذب با روش B3LYP و سری پایه 6-311G** - ۹۰
- جدول (۳-۲۰) . مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی a.u و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته های ۱۴N، ۱۱B، ۲H و ۱۱B نانوتیوب (۸،۰) بعد از جذب نوع A با روش B3LYP و سری پایه 6-311G** ۹۳

جدول (۳-۲۱). مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی $a.u$ و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته های ^{11}B ، ^{14}N و 2H نانوتیوب خالص (8.0) بعد از جذب نوع B با روش $B3LYP$ و سری پایه $6-311G^{**}$ ۹۶

جدول (۳-۲۲). مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی $a.u$ و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته های ^{11}B ، ^{14}N و 2H نانوتیوب خالص (10.0) قبل از جذب با روش $B3LYP$ و سری پایه $6-311G^{**}$ ۹۹

جدول (۳-۲۳). مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی $a.u$ و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته های ^{11}B ، ^{14}N و 2H نانوتیوب خالص (10.0) بعد از جذب نوع A با روش $B3LYP$ و سری پایه $6-311G^{**}$ ۱۰۳

جدول (۳-۲۴). مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی $a.u$ و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته های ^{11}B ، ^{14}N و 2H نانوتیوب خالص (10.0) بعد از جذب نوع B با روش $B3LYP$ و سری پایه $6-311G^{**}$ ۱۰۷

جدول (۳-۲۵). مقادیر انرژی کل الکترونی و ممان دو قطبی نانوتیوب های بورنیتريد بروکسول با روش $B3LYP$ و با استفاده از سری پایه $6-31G$ ۱۱۲

جدول (۳-۲۶). مقادیر انرژی کل الکترونی و ممان دو قطبی مولکول دی اکسید کربن با روش $B3LYP$ و با استفاده از سری پایه $6-31G$ ۱۱۳

جدول (۳-۲۷). نتایج حاصل از جذب دی اکسید کربن روی نانوتیوب (8.0) بروکسول با روش $B3LYP$ و با استفاده از سری پایه $6-31G$ ۱۱۷

جدول (۳-۲۸). نتایج حاصل از جذب دی اکسید کربن روی نانوتیوب (10.0) بروکسول با روش $B3LYP$ و با استفاده از سری پایه $6-31G$ ۱۱۷

جدول (۳-۲۹). طول پیوندها در نانوتیوب (8.0) بروکسول در حلقه شش ضلعی موضع جذب ۱۱۸

جدول (۳-۳۰). طول پیوندها در نانوتیوب (10.0) بروکسول در حلقه شش ضلعی موضع جذب ۱۱۸

جدول (۳-۳۱). طول پیوندها بین مولکول CO_2 و نانوتیوب (8.0) بروکسول ۱۱۹

جدول (۳-۳۲). طول پیوندها بین مولکول CO_2 و نانوتیوب (10.0) بروکسول ۱۱۹

جدول (۳-۳۳). مقادیر پارامترهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی و آنیزوتروپی هسته های ^{15}N ، ^{11}B ، ^{17}O و 1H در نانوتیوب بروکسول (8.0) قبل و بعد از جذب به روش $B3LYP$ و سری پایه $6-311G^{**}$ ۱۲۰

جدول (۳-۳۴). مقادیر تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپیک و آنیزوتروپیک هسته های ^{15}N ، ^{11}B ، ^{17}O و 1H در نانوتیوب (10.0) بروکسول قبل و بعد از جذب به روش $B3LYP$ و سری پایه $6-311G^{**}$ ۱۲۳

جدول (۳-۳۵). مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی a.u و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz)

هسته های N ۱۴، B ۱۱، O ۱۷ و H ۲ نانوتیوب (۸،۰) بروکسول قبل از جذب با روش B3LYP و سری پایه 6-

311G** ----- ۱۲۹

جدول (۳-۳۶). مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی a.u و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته

های N ۱۴، B ۱۱، O ۱۷ و H ۲ در نانوتیوب (۸،۰) بروکسول بعد از جذب نوع A با روش B3LYP و سری پایه 6-

311G** ----- ۱۳۲

جدول (۳-۳۷). مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی a.u و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته

های N ۱۴، B ۱۱، O ۱۷ و H ۲ نانوتیوب (۸،۰) بروکسول بعد از جذب نوع B با روش B3LYP و سری پایه 6-

311G** ----- ۱۳۵

جدول (۳-۳۸) مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی a.u و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته

های N ۱۴، B ۱۱، O ۱۷ و H ۲ در نانوتیوب (۱۰،۰) بروکسول قبل از جذب با روش B3LYP و سری پایه 6-311G**

----- ۱۳۷

جدول ۳ (۳۹-). مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی a.u و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته

های N ۱۴، B ۱۱، O ۱۷ و H ۲ در نانوتیوب (۱۰،۰) بروکسول بعد از جذب نوع A با روش B3LYP و سری پایه 6-

311G** ----- ۱۴۱

جدول (۳-۴۰). مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی a.u و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته

های N ۱۴، B ۱۱، O ۱۷ و H ۲ در نانوتیوب (۱۰،۰) بروکسول بعد از جذب نوع B با روش B3LYP و سری پایه 6-

311G** ----- ۱۴۵

جدول (۳-۴۱). ثابت های جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) نانوتیوب بروکسول (۸،۰) B3LYP و سری پایه 6-

311G** ----- ۱۴۹

جدول (۳-۴۲). ثابت های جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) نانوتیوب بروکسول (۱۰،۰) با روش B3LYP و

سری پایه 6-311G** ----- ۱۵۱

فهرست اشکال

عنوان	صفحه
شکل (۱-۱) . نانوتیوب تک دیواره و نانوتیوبهای چند دیواره	۷
شکل (۲-۱) . نانوتیوبهای نامگذاری شده	۸
شکل (۳-۱) . انواع نانوتیوبها	۹
شکل (۴-۱) . الف) مدل مولکولی که ساختار نیتريد بور هگزاگونال	۱۴
شکل (۱-۳) . ساختار هندسی نانوتیوب بورنیتريد خالص (۸،۰)	۶۱
شکل (۲-۳) . ساختار هندسی نانوتیوب بورنیتريد خالص (۱۰،۰)	۶۱
شکل (۳-۳) . بسته شدن انتهای نانوتیوب بورنیتريد (۸،۰)	۶۲
شکل (۴-۳) . بسته شدن انتهای نانوتیوب بورنیتريد (۱۰،۰)	۶۲
شکل (۵-۳) . مولکول CO ₂	۶۸
شکل (۶-۳) . تغییرات ΔE برحسب ۲ برای نانوتیوب بورنیتريد (۱۰،۰) در جذب نوع A	۶۹
شکل (۷-۳) . الف) جذب نوع A روی نانوتیوب (۸،۰) بورنیتريد ب) جذب نوع A روی نانوتیوب (۱۰،۰) بورنیتريد	۷۰
شکل (۸-۳) . تغییرات ΔE برحسب ۲ برای نانوتیوب بورنیتريد (۱۰،۰) در جذب نوع B	۷۰
شکل (۹-۳) . الف) جذب نوع B روی نانوتیوب (۸،۰) بورنیتريد ب) جذب نوع B روی نانوتیوب (۱۰،۰) بورنیتريد	۷۱
شکل (۱۰-۳) . نانوتیوب (۸،۰) بروکسول خالص	۱۱۱
شکل (۱۱-۳) . نانوتیوب (۱۰،۰) بروکسول خالص	۱۱۲
شکل (۱۲-۳) . جذب نوع A در نانوتیوب (۸،۰) بروکسول	۱۱۴
شکل (۱۳-۳) . جذب نوع B در نانوتیوب (۸،۰) بروکسول	۱۱۴
شکل (۱۴-۳) . جذب نوع A در نانوتیوب (۱۰،۰) بروکسول	۱۱۵

شکل (۳-۱۵). جذب نوع B در نانوتیوب (۱۰،۰) بروکسول ----- ۱۱۶

شکل (۴-۱). تصاویری از نانوتیوب های بورنیتريد ----- ۱۵۸

چکیده

هدف اصلی در این تحقیق بررسی تاثیر جذب کربن دیوکسید، بر روی تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی (CSI) و تانسورهای پوشیدگی شیمیایی آنیزوتروپی (CSA) هسته های مختلف، ثوابت جفت شدن چهارقطبی هسته ای، ممان دو قطبی، گاف انرژی و طول پیوندها، در هر یک از نانوتیوب های بورنیتريد با کایرالیت ۸ و ۱۰ خالص و با اتصال CO₂ و همچنین نانوتیوب های (۰،۸) و (۱۰،۰) خالص و با اتصال CO₂ بروکسول، می باشد. در ابتدا تمام ساختارها با گوسین ۰۳ و با روش B3LYP و سری پایه 6-31G* برای نانوتیوب بورنیتريد (۸،۰) و (۱۰،۰)، و سری پایه 6-31G برای نانوتیوب (۸،۰) و (۱۰،۰) بروکسول بهینه شدند.

برای هر یک از ساختارها دو نوع اتصال CO₂ به صورت A و B در نظر گرفته شد و برای هر یک در طی فرایند جذب، انرژی جذب، طول پیوند، ممان دو قطبی، HLG، تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی و آنیزوتروپی و پارامترهای NQR هسته های مختلف مورد بررسی قرار گرفتند. نتایج نشان می دهند که در هر دو نانوتیوب های بورنیتريد (۸،۰) و (۱۰،۰)، جذب بصورت فیزیکی بوده و انرژی جذب در حدود ۲/۶۲۵ kJ/mol در نانوتیوب (۸،۰) و ۲/۳۶۳ kJ/mol در نانوتیوب (۱۰،۰) می باشد (جذب نوع A).

همچنین در طی فرایند جذب CO₂ تغییرات پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی و آنیزوتروپی هسته های B و N بسیار جزئی می باشند این نتیجه به علت جذب ضعیف CO₂ بر روی نانوتیوب بورنیتريد است.

بررسی ها در موضع جذب نانوتیوب های بروکسول (۸،۰) و (۱۰،۰)، نشان می دهد که در تمامی پارامترهای مورد نظر در موضع جذب، تغییرات قابل ملاحظه ای را مشاهده می کنیم و این نشان می دهد که جذب مولکول کربن دیوکسید روی نانوتیوب های بروکسول، گرمازا و از نوع شیمیایی قوی است. انرژی های جذب نوع A و B در نانوتیوب (۸،۰) بروکسول به ترتیب ۴۷۰/۷۴۱ kJ/mol و ۳۶۸/۴۸۴ kJ/mol و در نانوتیوب (۱۰،۰) بروکسول به ترتیب ۴۸۲/۴۸۷ و ۴۰۲/۳۳۹ kJ/mol می باشند. محاسبات NMR و NQR تاکید می کنند که تغییرات تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی و آنیزوتروپی و همچنین ثوابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای در موضع جذب شدیدتر می باشند.

فصل اول

کلیات

۱-۱- فناوری نانو

۱-۱-۱- تاریخچه

در طول تاریخ بشر از زمان یونان باستان، مردم و به‌خصوص دانشمندان آن دوره بر این باور بودند که مواد را می‌توان آنقدر به اجزاء کوچک تقسیم کرد تا به ذراتی رسید که خردناشدنی هستند و این ذرات بنیان مواد را تشکیل می‌دهند. می‌توان "کی‌اریک درکسلر"^۱ را پدر نانوفناوری نامید چراکه نانوفناوری در سال ۱۹۸۶ در کتابی از وی با عنوان موتورهاى آفرینش بسط داده شد.

۱-۱-۲- تعریف نانوفناوری

در حالی که تعاریف زیادی برای فناوری نانو وجود دارد، موسسه پیشگامی ملی نانوفناوری در آمریکا (که نهاد دولتی متولی این فناوری در کشور آمریکاست) تعریفی را برای فناوری نانو ارائه می‌دهد که در برگیرنده هر سه تعریف ذیل باشد:

۱- توسعه فناوری و تحقیقات در سطوح اتمی، مولکولی و یا ماکرومولکولی در مقیاس اندازه ای ۱ تا ۱۰۰ نانومتر.

۲- خلق و استفاده از ساختارها و ابزار و سیستمهایی که به خاطر اندازه کوچک یا حد میانه آنها، خواص و عملکرد نوینی دارند.

۳- توانایی کنترل یا دستکاری در سطوح اتمی.

در مقالات و نوشته‌های عمومی واژه فناوری نانو گاهی به هر فرآیند کوچکتر از اندازه‌های میکرون اطلاق می‌گردد که می‌تواند

^۱ - E.Drexler

فرآیند لیتوگرافی را نیز شامل شود. به خاطر همین بسیاری از دانشمندان هنگامی که می‌خواهند درباره فناوری نانو به معنی واقعی و علمی کلمه صحبت کنند از آن به عنوان فناوری نانومولکولی یاد می‌کنند که به معنی فناوری نانو در ابعاد مولکولی می‌باشد.

۱-۱-۳- کاربردهای فناوری نانو

اگر بپذیریم که نانوفناوری، توانمندی تولید مواد، ابزارها و سیستم‌های جدید با در دست گرفتن کنترل در سطوح ملکولی، اتمی و استفاده از خواص آن سطوح است، آن‌گاه در می‌یابیم کاربردهای این فناوری، در حوزه‌های مختلف اعم از غذا، دارو، تشخیص پزشکی، فناوری زیستی، الکترونیک، کامپیوتر، ارتباطات، حمل و نقل، انرژی، محیط زیست، مواد، هوافضا، امنیت ملی و غیره خواهد بود؛ به گونه‌ای که به زحمت می‌توان عرصه‌ای را که از آن تأثیر نپذیرد معرفی نمود. به عنوان مثال، لاستیک‌های با عمر بالای ده سال و دارورسانی به تک سلول‌های آسیب دیده در بدن، از توانایی‌هایی است که بشر به مدد نانوفناوری به آن دست یافته است. دانشمندان امیدوارند با گسترش فعالیت‌ها در نانوفناوری، علاوه بر صرفه‌جویی‌هایی که در اثر ارتقای کیفیت در محصولات سنتی ایجاد می‌کنند، به مواد و محصولات با خواص جدید و چند منظوره دست یابند.

کاربردهای وسیع این عرصه به همراه اثرات اجتماعی، سیاسی و حقوقی آن، این فناوری را به عنوان یک زمینه «فرارشته‌ای و فرابخشی» مطرح نموده است.

۱-۱-۴- منافع نانوتکنولوژی

ساختارهایی در مقیاس نانو مانند نانوذرات و نانولایه‌ها دارای نسبت سطح به حجم بالایی هستند که آنها را برای استفاده در مواد کامپوزیت، واکنش‌های شیمیایی، تهیه دارو و ذخیره انرژی ایده‌آل می‌سازد. سرامیک‌های نانوساختاری غالباً سخت‌تر و غیرشکننده‌تر از مشابه مقیاس میکرونی خود هستند. کاتالیزورهای مقیاس نانو راندمان واکنش‌های شیمیایی و احتراق را افزایش داده و به میزان چشمگیری از مواد زائد و آلودگی آن کم می‌کنند. وسایل الکترونیکی جدید، مدارهای کوچکتر و سریعتر و ... با مصرف خیلی کمتر می‌توانند با کنترل واکنش‌ها در نانوساختار بطور همزمان بدست آیند.