**دانشکده علوم پایه**

رساله دوره دکتری **شیمی(فیزیک)**

# مطالعه جذب فیزیکی و شیمیایی برخی مولکولها روی نانولوله های نیترید بور با استفاده از روشهای محاسباتی

نگارنده

**جواد بهشتیان**

استاد راهنما

**دکتر ناصر هادیپور**

تیر ماه ۱۳۸۹

دانشگاه تربیت مدرس

دانشکده علوم پایه

**بسمه تعالی**

## تاییدیه اعضای هیات داوران حاضر در جلسه دفاع از رساله دکتری

آقای **جواد بهشتیان** رساله واحدی خود را باعنوان: «**مطالعه جذب فیزیکی و شیمیایی برخی مولکولها روی نانولوله های نیترید بور با استفاده از روشهای محاسباتی**» در تاریخ ۸۹/٤/۱۲ ارائه کردند.

اعضای هیات داوران نسخه نهایی این رساله را از نظر فرم و محتوا تایید کرده است و پذیرش آنرا برای تکمیل درجه دکتری پیشنهاد می کند.

| اعضای هیأت داوران | نام و نام خانوادگی | رتبه علمی | امضاء |
|---|---|---|---|
| ۱- استاد راهنما | آقای دکتر ناصر هادیپور | استاد | |
| ۲- استاد مشاور | آقای دکتر سیدمجید هاشمیان زاده | دانشیار | |
| ۳- استاد ناظر داخلی | خانم دکتر سهیلا جوادیان | استادیار | |
| ٤- استاد ناظر داخلی | آقای دکتر حسین غریبی | استاد | |
| ٥- استاد ناظر خارجی | آقای دکتر غلام عباس پارسافر | استاد | |
| ٦- استاد ناظر خارجی | آقای دکتر محسن تفضلی | استاد | |
| ۷- نماینده شورای تحصیلات تکمیلی | خانم دکتر سهیلا جوادیان | استادیار | |

**آیین نامه چاپ پایان‌نامه (رساله)های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس**

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان نامه (رساله)های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیتهای علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه،دانش آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می‌شوند:

ماده ۱: در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله)ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثارعلمی» دانشگاه اطلاع دهد.

ماده ۲: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه) عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان نامه رساله دکتری نگارنده در رشته **شیمی(فیزیک)** است که در سال **۱۳۸۹** در دانشکده **علوم پایه** دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی جناب آقای **دکتر ناصر هادی‌پور**، مشاوره جناب آقای **دکتر مجید هاشمیان‌زاده** از آن دفاع شده است.»

ماده ۳: به منظور جبران بخشی از هزینه‌های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت‌چاپ) را به «دفتر نشر آثارعلمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می‌تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر درمعرض فروش قرار دهد.

ماده ۴: در صورت عدم رعایت ماده ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت‌مدرس، تأدیه کند.

ماده ۵: دانشجو تعهد و قبول می کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می‌تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می‌دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در ماده ۴ را از محل توقیف کتابهای عرضه شده نگارنده برای فروش، تامین نماید.

ماده ۶: اینجانب **جواد بهشتیان** دانشجوی رشته **شیمی(فیزیک)** مقطع **دکتری**

تعهد فوق وضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.

نام و نام خانوادگی:

تاریخ و امضا:

## آیین‌نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهشهای علمی

## دانشگاه تربیت مدرس

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی و فناوری دانشگاه در راستای تحقق عدالت و کرامت انسانها که لازمه شکوفایی علمی و فنی است و رعایت حقوق مادی و معنوی دانشگاه و پژوهشگران، لازم است اعضای هیأت علمی، دانشجویان، دانش‌آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهشهای علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرحهای تحقیقاتی با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد زیر را رعایت نمایند:

ماده ۱- حق نشر و تکثیر پایان نامه/ رساله و درآمدهای حاصل از آنها متعلق به دانشگاه می باشد ولی حقوق معنوی پدید آورندگان محفوظ خواهد بود.

ماده ۲- انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان‌نامه/ رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجامع علمی باید به نام دانشگاه بوده و با تایید استاد راهنمای اصلی، یکی از اساتید راهنما، مشاور و یا دانشجوی مسئول مکاتبات مقاله باشد. ولی مسئولیت علمی مقاله مستخرج از پایان نامه و رساله به عهده اساتید راهنما و دانشجو می باشد.

تبصره: در مقالاتی که پس از دانش‌آموختگی بصورت ترکیبی از اطلاعات جدید و نتایج حاصل از پایان‌نامه/ رساله نیز منتشر می‌شود نیز باید نام دانشگاه درج شود.

ماده ۳- انتشار کتاب و یا نرم افزار و یا آثار ویژه حاصل از نتایج پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی کلیه واحدهای دانشگاه اعم از دانشکده ها، مراکز تحقیقاتی، پژوهشکده ها، پارک علم و فناوری و دیگر واحدها باید با مجوز کتبی صادره از معاونت پژوهشی دانشگاه و براساس آئین نامه های مصوب انجام شود.

ماده ۴- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه یافته ها در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی که حاصل نتایج مستخرج از پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی دانشگاه باید با هماهنگی استاد راهنما یا مجری طرح از طریق معاونت پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

ماده ۵- این آیین‌نامه در ۵ ماده و یک تبصره در تاریخ۸۷/۴/۱ در شورای پژوهشی و در تاریخ ۸۷/۴/۲۳ در هیأت رئیسه دانشگاه به تایید رسید و در جلسه مورخ ۸۷/۷/۱۵ شورای دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب در شورای دانشگاه لازم‌الاجرا است.

دانشکده علوم پایه

رساله دوره دکتری **شیمی(فیزیک)**

# مطالعه جذب فیزیکی و شیمیایی برخی مولکولها روی نانولوله های نیترید بور با استفاده از روشهای محاسباتی

نگارنده

**جواد بهشتیان**

استاد راهنما

**دکتر ناصر هادیپور**

استاد مشاور

**دکتر مجید هاشمیان‌زاده**

تیر ماه ۱۳۸۹

تقدیم به :

پویندگان طریقت معرفت و جویندگان رستگاری

روح پدرم که در سرآغاز این خیال پر کشید

مادرم که همواره دعا می‌کند

همسرم، همسفر وفادار زندگی

## تقدیر و تشکر

سپاس خدای را عزوجل که همه چیز از اوست و مرا لیاقت انسان بودن داد

استاد گرامی که همواره چون پدری مهربان مشتهای کودکانه زندگی مرا نخط می کشید

همسرم که با صبر و بردباری مرا در طی انجام دادن رساله همراهی کرد

دوستان باغ زندگی که همیشه مرا یاری کردند

محمد، علی، هادی، مهدی، ...

## چکیده

در این رساله با استفاده از نظریه تابعیت چگالی (DFT ) ماهیت جذب شیمیایی و فیزیکی مولکولهایی نظیر آب، آمونیاک و خوشه‌های هر کدام از آنها بر روی نانولوله‌های نیترید بور (BNNT) بررسی شده است و این نتیجه حاصل شد که در نظر گرفتن خوشه‌های آب و آمونیاک در فرایند جذب اهمیت بسیار زیادی دارد و با افزایش اندازه خوشه، مقدار انرژی جذب افزایش قابل توجهی دارد. برای شناسایی ماهیت بر همکنش‌های بین مولکولی از نظریه اتمها در مولکول (AIM) و آنالیز اوربیتالهای پیوندی طبیعی (NBO) استفاده شده است و نقش نیروهای الکتروستاتیکی و انتقالات بار در جذب مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین با توجه به حساسیت بالای تانسورهای پوشیدگی شیمیایی (CS) و گرادیان میدان الکتریکی (EFG) هسته‌های درگیر در جذب، به مطالعه ثابتهای NQR و جابجایی شیمیایی NMR در آنها پرداخته شده است که نتایج بدست آمده از آنها همخوانی بسیار نزدیکی با سایر روشهای بکار گرفته شده دارند. در ادامه مکانیسم جذب آمونیاک در هر دو انتهای باز نانولوله بررسی شد و دو مدل پیشنهاد گردید. در بخش دیگر جذب اتمهای هیدروژن بر روی نانولوله‌های نوع زیگزاگ و دسته‌صندلی نیترید بور برای دو طول مورد مطالعه قرار گرفت. جذب هیدروژن به صورت تک اتمی و دو اتمی در قالب پنج مدل ارائه شد و این نتیجه حاصل شد که اندازه طول تاثیر زیادی بر میزان انرژی جذب ندارد. همچنین نشان دادیم با استفاده از جابجایی شیمیایی NMR در نانولوله‌ها، می‌توانیم طول مناسب نانولوله در محاسبات را تعیین کرد که راهکار بسیار مناسبی برای محاسبات با طول محدود نانولوله می‌باشد و سرانجام بررسی نانولوله‌های دوپ شده با اتمهای کربن و سیلیسیم و جذب مولکولهای آب و مونوکسیدکربن بر روی آنها مد نظر قرار گرفته‌است و مشخص شد که اتمهای اطراف اتم دوپ شده شرایط مناسبی برای جذب سایر مولکولها نسبت به قبل از دوپ شدن پیدا می‌کنند و می‌توان با تغییر محیط شیمیایی اطراف یک اتم خاص در نانولوله، چگونگی برهمکنش آن با مولکولهای جذب شونده مورد نظر را کنترل کرد.



کلید واژه‌ها: نانولوله نیترید بور، جذب شیمیایی، جذب فیزیکی، نظریه تابعیت چگالی

# فهرست مطالب


فصل اول: نانولوله‌ها ..... ۱

۱-۱ مقدمه ..... ۲

۱-۱-۲ ساختار نانولوله‌های کربنی ..... ۳

۱-۱-۲-۱ ساختار هندسی ..... ۳

۱-۱-۲-۲ ساختار الکترونی ..... ۶

۱-۱-۲-۳ کاربرد نانولوله‌های کربنی ..... ۸

۱-۱-۳ نانولوله‌های نیترید بور ..... ۸

۱-۱-۳-۱ خواص مکانیکی ..... ۹

۱-۱-۳-۲ خواص الکترونی ..... ۱۰

۱-۱-۳-۳ کاربردها ..... ۱۱

فصل دوم: روشهای محاسباتی ..... ۱۳

۲-۱ مقدمه ..... ۱۴

۲-۲ تقریب بورن- اوپنهایمر ..... ۱۴

۲-۳ نظریه تابعیت چگالی ..... ۱۶

۲-۳-۱ مقدمه ..... ۱۶

۲-۳-۲ تئوری هوهنبرگ – کوهن ..... ۱۷

۲-۳-۲-۱ روش هوهنبرگ – کوهن ..... ۲۰

۲-۳-۲-۲ روش کوهن – شم ..... ۲۱

۲-۳-۳ تقریب چگالی موضعی (LDA) ..... ۲۶

۲-۳-۴ تقریب چگالی اسپین موضعی(LSDA) ..... ۲۷

۲-۳-۵ تصحیح گرادیان و تابعیتهای هیبریدی ..... ۲۸

۲-۳-۵-۱ تابعیت B3LYP ..... ۳۰
۲-۴ مجموعه پایه ..... ۳۲
۲-۵ تشدید مغناطیسی هسته(NMR) ..... ۳۴
۲-۵-۱ مقدمه ..... ۳۴
۲-۵-۲ هامیلتونی‌های تشدید مغناطیسی هسته‌ای ..... ۳۵
۲-۵-۲-۱ اثر زیمن ..... ۳۷
۲-۵-۲-۲ فرکانس رادیویی ..... ۳۸
۲-۵-۲-۳پوشیدگی مغناطیسی ..... ۳۹
۲-۵-۳ تعبیر پوشیدگی مغناطیسی و جابجایی شیمیایی ..... ۴۰
۲-۶ تشدید چهارقطبی هسته‌ای(NQR) ..... ۴۴
۲-۶-۱ مقدمه ..... ۴۴
۲-۶-۲ اصول کلی ..... ۴۴
۲-۶-۳ هامیلتونی چهارقطبی الکتریکی ..... ۴۷
فصل سوم: مطالعه جذب هیدروژن بر روی نانولوله‌های نیترید بور ..... ۵۲
۳-۱ مقدمه ..... ۵۳
۳-۲ آشنایی با *Gaussian* 03 ..... ۵۳
۳-۲-۱ انرژی ..... ۵۴
۳-۲-۲ گرادیانها و بهینه سازی ساختارها ..... ۵۵
۳-۲-۳ فرکانس و مشتقات دوم ..... ۵۵
۳-۲-۴ خواص مولکولی ..... ۵۵
۳-۳ کلیات محاسبات ..... ۵۶
۳-۳-۱ مقدمه ..... ۵۶
۳-۳-۲ مطالعه NMR نانولوله‌های نیترید بور ..... ۵۸
۳-۳-۲-۱مقدمه ..... ۵۸

۳-۳-۲-۲ شرح محاسبات ..... ۵۹
۳-۳-۲-۳ بحث و نتیجه‌گیری ..... ۵۹
۳-۳-۲ جذب شیمیایی هیدروژن بر روی نانولوله‌های نیترید بور ..... ۶۳
۳-۳-۲-۱ مقدمه ..... ۶۳
۳-۳-۲ نانولوله‌های زیگزاگ نیترید بور ..... ۶۷
۳-۳-۲-۱ شرح محاسبات ..... ۶۷
۳-۳-۲-۲ بحث و نتیجه‌گیری ..... ۶۹
۳-۳-۳ نانولوله‌ی دسته¬صندلی ..... ۷۶
۳-۳-۳-۱ شرح محاسبات ..... ۷۶
۳-۳-۳-۲ بحث و نتیجه‌گیری ..... ۷۹
فصل چهارم : جذب آب و آمونیاک بر روی نانولوله‌های نیترید بور ..... ۸۷
۴-۱ جذب آب بر روی نانولوله‌های نیترید بور ..... ۸۸
۴-۱-۱ مقدمه ..... ۸۸
۴-۱-۲ شرح محاسبات ..... ۸۸
۴-۱-۳ بحث و نتیجه‌گیری ..... ۹۰
۴-۲ جذب آمونیاک بر روی نانولوله‌های نیترید بور ..... ۱۰۰
۴-۲-۱ جذب آمونیاک بر روی سطح خارجی نانولوله‌های نیترید بور ..... ۱۰۰
۴-۲-۱-۱ مقدمه ..... ۱۰۰
۴-۲-۱-۲ شرح محاسبات ..... ۱۰۰
۴-۲-۱-۳ بحث و نتیجه‌گیری ..... ۱۰۴
۴-۲-۲ بررسی مکانیسم جذب آمونیاک در انتهای نانولوله‌های نیترید بور ..... ۱۱۰
۴-۲-۲-۱ مقدمه ..... ۱۱۰
۴-۲-۲-۲ شرح محاسبات ..... ۱۱۰
۴-۲-۲-۳ بحث و نتیجه‌گیری ..... ۱۱۲

فصل پنجم: بررسی ساختار نانولوله‌های نیترید بور دوپ شده با اتمهای کربن، سیلیسیم .....۱۱۹
۵-۱ مقدمه .....۱۲۰
۵-۲ شرح محاسبات .....۱۲۱
۵-۳ بحث و نتیجه‌گیری.....۱۲۳
۶- منابع.....۱۳۰

فصل اول

# نانولوله‌ها

## ۱-۱ مقدمه

در سالیان اخیر با ظهور نانوساختارها که ویژگیهای شیمیایی و فیزیکی منحصر به فردی دارند، تداعی آغاز عصر جدیدی از علم و فناوری در ذهن انسان متبادر می‌شود، طلیعه این عرصه با کربن آغاز شد و همواره ساختارهای آن به عنوان شاخص در رسیدن به ساختارهای جدید از عناصر دیگر مورد توجه بوده‌اند، از این رو در ابتدا به تعریف توضیح مفاهیم اولیه با توجه به نانو لوله‌های کربنی می‌پردازیم.

کربن دارای آلوتروپهای گوناگونی مانند الماس، گرافیت و کربن بی شکل است که تا سال ۱۹۸۵ شناخته شده بودند. از حدود دو دهه قبل تاکنون اشکال دیگری از کربن مانند فولرن ($C_{60}$) و نانولوله‌های کربنی کشف و شناسایی شدند که تغییرات شگرفی را در حوزه نانوتکنولوژی رقم زده‌اند.

کشف فولرن، نشان داد که به کمک منابع انرژی شدید می‌توان کربن معمولی را تبخیر کرده و به شکلهای جدیدی از ماده تبدیل نمود. پس از آن در سال ۱۹۹۱ کشف نانولوله‌های کربنی چند دیواره توسط Iijima (۱) و شاید مهمتر از آن در سال ۱۹۹۳ نانولوله‌های تک دیواره[۱] (SWNT) در NEC و IBM باعث انقلابی در علوم مواد، فیزیک و شیمی شد(۲).

SWNT ها دارای ویژگیهای منحصر به فردی هستند: نانولوله‌ها نمونه کاملی از سیمهای کوانتمی شبه یک بعدی متشکل از اتمهای یکسان کربن با دیواری به ضخامت یک اتم هستند. هر اتم بر روی سطح لوله دارای پیوند قوی کووالانسی با سایر اتمهاست. عمدتاً قطر لوله‌ها حدود یک نانومتر بوده و طولهایی بین چند صد نانومتر تا چندین سانتیمتر دارند. مطالعات، خواص مکانیکی برجسته‌ای مانند مدول الاستیکی به اندازه 1000 GPa و قابلیت تنشی حدود چند ده گیگاپاسکال را نشان

[۱] Single Wall Carbon Nanotube

می‌دهند. شاید جذابترین ویژگی آنها خواص الکترونیکی‌شان باشد. پژوهشها به خوبی نشان می‌دهند که نانولوله‌ها یکی از کلیدی‌ترین نقشها را در دنیای نانوالکترونیک، الکترونیک مولکولی و ... خواهند داشت.

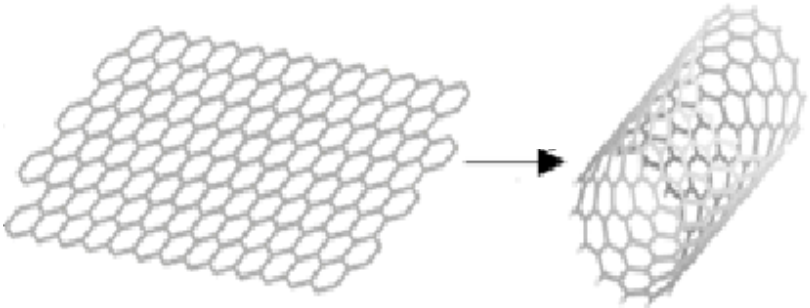
در این راستا، نانولوله‌های غیرکربنی مانند نیتریدهای عناصر گروه سوم جدول تناوبی (بور، آلومینیوم، گالیوم و ایندیوم) و دی اکسید تیتانیوم و ... نیز معرفی شدند که بعضی از آنها سنتز شده و بعضی دیگر هنوز فقط به طور نظری مطالعه می‌شوند. شاید مهمترین این نانولوله‌ها نیترید بور است که از سال ۱۹۹۴ تاکنون انبوهی از مطالعات را به صورت نظری و تجربی به خود اختصاص داده است.

در این فصل، برای آشنایی با نانولوله‌ها ابتدا نانولوله‌های کربنی را به اختصار بررسی کرده و سپس نانولوله‌های نیترید بور را معرفی می‌کنیم.

### ۱-۱-۲ ساختار نانولوله‌های کربنی

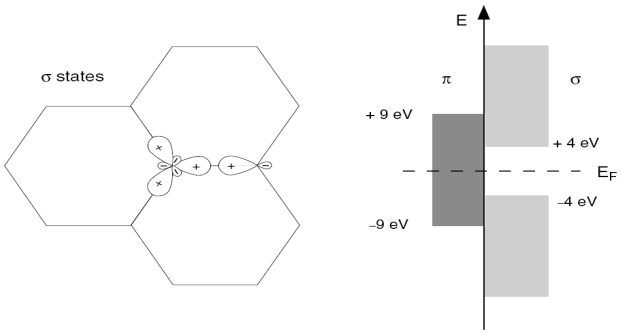
#### ۱-۱-۲-۱ ساختار هندسی

گرافیت از صفحاتی متشکل از شش‌گوشی‌های کربنی ساخته شده است که نسبت به یکدیگر جابجا شده‌اند. هر یک از صفحات گرافیت را گرافن[۱] می‌نامند. هر نانولوله کربنی از پیچیدن یک صفحه گرافنی به شکل لوله‌ای استوانه‌ای از اتمهای کربن ساخته شده است (شکل (۱-۱)). بنابراین مطالعه آنها نیاز به بررسی ساختار و خواص گرافن دارد(۷-۳).




**شکل (۱-۱):** تشکیل نانولوله از پیچیدن گرافن

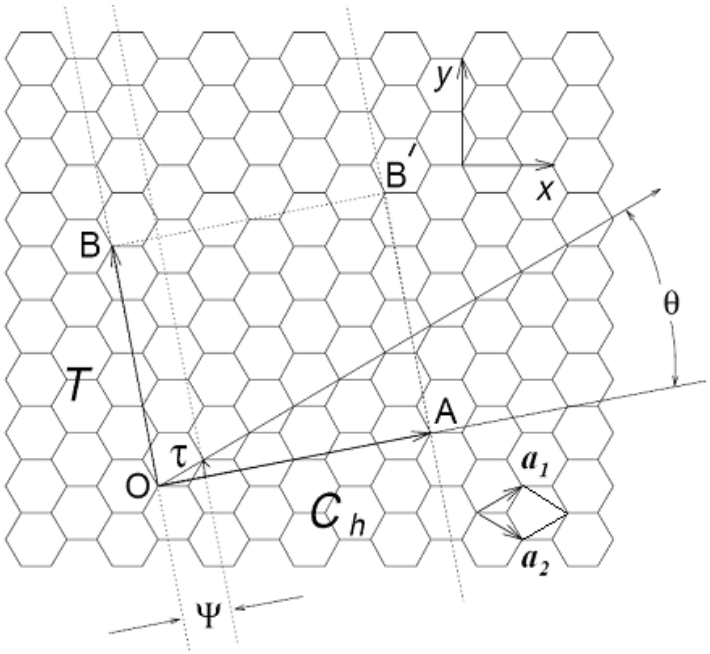
۱- Graphene




**شکل (۱-۲):** شکل سمت چپ پیوند بین اتمهای کربن و سمت راست طیف انرژی پیوندها را در گرافن نشان می‌دهند.

در گرافن، اتمهای کربن با آرایش الکترونی $1s^2 2s^2 2p^2$ و با پیوندهای کووالانسی به شکل یک شبکه دوبعدی شش‌گوشی در کنار یکدیگر قرار دارند. این شبکه دارای هیبرید $sp^2$ در همان صفحه بوده و $p_z$ عمود بر آن است.

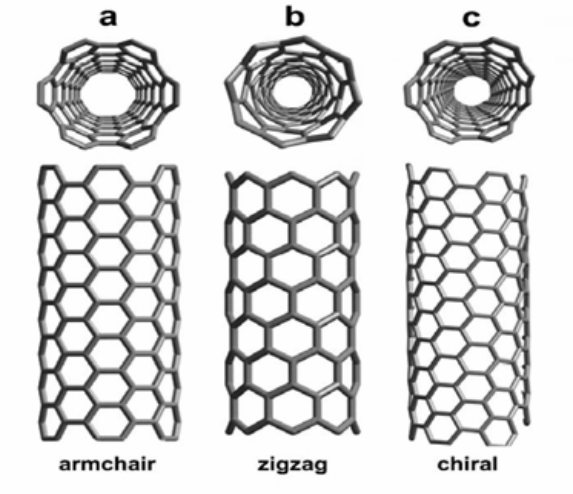
پیوندهای σ در صفحه گرافن مطابق شکل زیر قرار گرفته و گاف انرژیی حدود $eV$ ۸ دارند. از سوی دیگر، الکترونهای π دارای نوار انرژی پیوسته (بدون گاف) هستند و حالتهای الکترونی حول تراز




**شکل (۱-۳):** بردارهای شبکه و سلول واحد گرافن، بردارهای مشخص کننده سلول واحد نانولوله

فرمی که در آن حالتهای σ دارای شکافند را پوشش می‌دهند (شکل (۱-۲)). بنابراین، در مجموع صفحه گرافنی گاف انرژی نداشته و دارای خواص فلزی است. ساختار یک نانولوله به خوبی برحسب یک سلول واحد یک بعدی که با بردارهای $\boldsymbol{C}_h$ و $\boldsymbol{T}$ تعریف می‌شود. محیط نانولوله با بردار کایرال $\boldsymbol{C}_h = n\boldsymbol{a}_1+m\boldsymbol{a}_2$ نشان‌داده می‌شود، دو نقطه معادل از نظر بلور شناسی را در صفحه گرافن دوبعدی به یکدیگر متصل می‌کند (شکل (۱-۳). $\boldsymbol{a}_1$ و $\boldsymbol{a}_2$ بردارهای یکه شبکه گرافنی و $m$ و $n$ دو عدد صحیح هستند. ساختار نانولوله بطور یکتایی به این دو عدد که بردار کایرال را توصیف می‌کنند بستگی دارد. در شکل (۱-۳) زاویه کایرال $\theta$ زاویه بین بردار کایرال و جهت زیگزاگ ($\theta = 0$ ) را در شبکه شش گوشی لانه زنبوری گرافن نشان می‌دهد. سه نوع ساختار ممکن نانولوله از پیچاندن گرافن به شکل یک استوانه و با تغییر زاویه کایرال ایجاد می‌شود (شکل (۱-۴)).

نانولوله‌های زیگزاگ[۱] و دسته‌صندلی[۲] به ترتیب دارای زاویه‌های کایرال $\theta = 0$ و $\theta = 30^{\circ}$ و نانولوله‌های کایرال[۳] بین این دو مقدارند ($0< \theta < 30$) . بردار $\boldsymbol{OB}$ که بر $\boldsymbol{C}_h$ عمود بوده و مطابق شکل به اولین نقطه شبکه متصل می‌شود، بردار انتقال یک بعدی $\boldsymbol{T}$ را تعیین می‌کند. سلول واحد یک بعدی شبکه مستطیلی است که از بردارهای $\boldsymbol{C}_h$ و $\boldsymbol{T}$ تشکیل شده است.




**شکل (۱-۴):** انواع نانولوله: دسته‌صندلی، زیگزاگ و کایرال

۱- Zigzag
۲- Armchair
۳- Chairal

با استفاده از نمادگذاری $(n,m)$ برای بردار کایرال، بردارهای$(n,0)$ یا $(0,m)$ نانولوله زیگزاگ، بردارهای $(n,n)$ دسته‌صندلی و $(n,m)$ لوله‌های کایرال را نمایش می‌دهند. از روی $m$ و $n$ قطرلوله $(d_t)$ و زاویه کایرالیته $(\theta)$ به دست می‌آیند. قطر نانولوله برابر است با:

$$d_t = \frac{\sqrt{n^2 + m^2 + mn}}{\pi} a = \frac{|\boldsymbol{C}_h|}{\pi} \qquad (۱-۱)$$

که در آن $a$ طول هریک از بردارهای پایه در گرافن با طول پیوند کربنها $a_0$ دارای ارتباطی به شکل مقابل است $(a = \sqrt{3}a_0 = 2.46A^0)$. زاویه کایرال نیز به صورت زیر است:

$$\theta = \tan^{-1}[\frac{\sqrt{3m}}{(m+2n)}] \quad , \quad 0 \le \theta \le 30 \qquad (۲-۱)$$

تعداد شش گوشیها در سلول واحد یک نانولوله کایرال برابر است با:

$$N = 2(n^2 + m^2 + mn)/d_R \qquad (۳-۱)$$

که در آن داریم:

$$d_R = \begin{cases} d & \text{if } n-m \text{ is not a multiple of } 3d \\ 3d & \text{if } n-m \text{ is a multiple of } 3d. \end{cases} \qquad (۴-۱)$$

با این فرض که $d = gcd(n,m)$ بزرگترین مقسوم علیه مشترک بین $m$ و $n$ باشد. هر شش گوشی در شبکه گرافن شامل دو اتم کربن است. مساحت سلول واحد نانولوله $N$ برابر بزرگتر از سلول واحد گرافن است. در نتیجه مساحت سلول واحد نانولوله در فضای وارون به اندازه $1/N$ کوچکتر است.

### ۱-۱-۲-۲ ساختار الکترونی

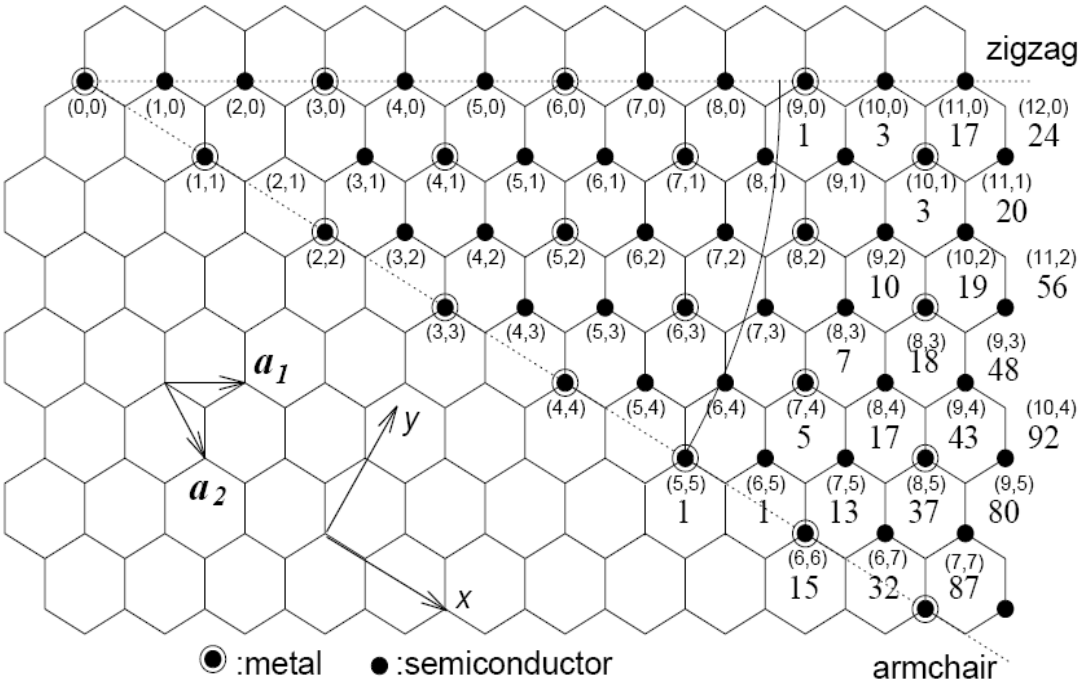
مطالعات نظری نشان داده‌اند که خواص الکترونی نانولوله‌ها به ساختار هندسی آنها بسیار حساس است. اگرچه گرافن یک نیمه رسانای با گاف انرژی صفر است، نانولوله‌ها می‌توانند رسانا یا نیمه-رساناهایی با گافهای انرژی متفاوتی که به شعاع و کایرالیته آنها بستگی دارد، باشند.

نانولوله‌ها از نقطه نظر خواص الکتریکی به دو دسته رسانا و نیمه رسانا طبقه بندی می شوند. کایرالیته تعیین کننده نوع نانولوله‌ها است. نانولوله کربنی هنگامی رسانا است که شرط زیر را داشته باشد (به شکل (۱-۵) مراجعه شود):

$$m\text{-}n=3d \qquad (۵-۱)$$

با استفاده از این رابطه می توان نوع نانولوله مورد نظر را مشخص کرد. در بسیاری از موارد تعیین نوع نانولوله در پیش بینی نوع برهمکنش اهمیت اساسی دارد. مثلا" جذب گازهایی مانند اکسیژن یا نیتروژن دی اکسید بر روی خواص الکتریکی نانولوله‌های نیمه‌رسانا تاثیر قابل توجهی دارد، در حالیکه اثر چندانی بر خواص الکتریکی نانولوله‌های رسانا ندارد.

در مجموع، می‌توان ادعا کرد که نانولوله‌های به شکل دسته‌صندلی همگی رسانا هستند. در حالیکه در نانولوله‌های به شکل زیگزاگ و کایرال یک سوم رسانا و بقیه نیمه‌رسانا هستند.




**شکل(۱-۵):** گرافن و نانولوله‌های رسانا و نیمه رسانا