بسم الله الرحمن الرحيم
الحمد لله رب العالمين الرحمن الرحيم مالك يوم الدين
اهدنا الصراط المستقيم صراط الذين
انعمت عليهم غير المغضوب عليهم
ولا الضالين

دانشگاه شهرکرد
دانشکده‌ی علوم پایه

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک گرایش حالت جامد

تأثیر تغییر مکان یک ناخالصی بر ترابرد الکترونی یک نانو حلقه در حضور میدان مغناطیسی

استاد راهنما:
دکتر محمد مردانی

استاد مشاور:
دکتر حسن ربانی

پژوهشگر:
فاطمه مقدسی

مهرماه ۱۳۹۳

به مصداق «من لم یشکر المخلوق لم یشکر الخالق » بسی شایسته است از استادان فرهیخته و فرزانه آقایان دکتر محمد مردانی و دکتر حسن ربانی که با کرامتی چون خورشید، سرزمین دل را روشنی بخشیدند و گلشن سرای علم دانش را با راهنمایی های کار ساز و سازنده بارور ساختند ،تقدیر و تشکر نمایم.
تقدیم به مادر مهربانم، او که الهۀ صدق و صفای زندگیم است و هر چه دارم از دعای خیر اوست. وجودش توان حرکت و امید آینده من است. اگر هستم برای اوست، او که سلامتی و آرزوهایش را در گرو خوشبختی دخترانش نهاد، با دلی سرشار از عشق و چشمی سرشار از ناتوانی برای جبران زحماتش بر دستانش بوسه می زنم. تقدیم به همسر و دختر عزیز، دلسوز و مهربانم که آرامش روحی و آسایش فکری فراهم نمودند تا با حمایت های همه جانبه در محیطی مطلوب، مراتب تحصیلی و نیز پایان نامه درسی را به نحو احسن به اتمام برسانم.

چکیده

از پدیده‌های جالبی که در الکترونیک مولکولی مورد بررسی قرار می‌گیرد، اثر میدان مغناطیسی در سامانه‌های شامل مولکول‌های حلقوی است. از جمله این سامانه‌ها مولکول فولرن و حلقه پلی استیلن است. با استفاده از روش‌هایی مانند تغییر محل اتصال هادی‌های ورودی و خروجی، اعمال میدان خارجی، تزریق ناخالصی و غیره می‌توان ویژگی‌های ترابردی این سامانه‌ها را کنترل نمود. در این پایان‌نامه، با استفاده از روش تابع گرین به بررسی اثر میدان مغناطیسی بر ترابرد الکترونی نانو حلقه‌های فولرنی، پلی استیلنی و مولکول بنزن پرداخته‌ایم. در نوشتن هامیلتونی این سامانه‌ها از تقریب نزدیک‌ترین همسایه‌ها در رهیافت بستگی قوی بهره گرفته‌ایم. نتایج نشان می‌دهد که رسانش الکترونی این سامانه‌ها با تغییرات شار مغناطیسی عبوری شدیداً تأثیر می‌پذیرد. این تأثیرات شامل جدا شدن نمودارهایی که در غیاب میدان کاملاً بر هم منطبق بوده‌اند و همچنین جابجایی مکان قله‌های تشدیدی و دره‌های ضد تشدیدی در طیف رسانش می‌شود.

کلمات کلیدی: مولکول فولرن، حلقه پلی استیلن، بنزن، بستگی قوی، میدان مغناطیسی، ترابرد الکترونی.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول: مقدمه

۱-۱- تاریخچه فناوری نانو ۱
۱-۲- عناصر پایه در فناوری نانو ۲
۱-۲-۱- نانو ذره ۲
۱-۲-۲- نانو لوله ۲
۱-۲-۳- نانوسیم ۳
۱-۳- خواص نانو مواد ۳
۱-۴- نانو الکترونیک ۴
۱-۴-۱- کاربرد نانو الکترونیک در صنعت ۵
۱-۴-۲- مواد مولکولی برای الکترونیک مولکولی ۶
۱-۵- کربن ۶
۱-۶- هیدروکربن‌های آروماتیک و آلیفاتیک ۷
۱-۷- انواع گونه‌های کربن ۸
۱-۷-۱-گرافیت ۸
۱-۷-۲- الماس ۹
۱-۷-۳- فولرن ۹
۱-۷-۳-۱- تهیه فولرن ۱۰
۱-۷-۳-۲- خواص و کاربردهای فولرن ۱۱
۱-۷-۳-۳- انواع فولرن ۱۱
۱-۷-۳-۴- نانوحلقه‌های بکار رفته در ترکیبات مولکول فولرن ۱۲

فصل دوم: مبانی نظری برای محاسبه‌ی رسانش الکترونی نانو ساختارها

۲-۱- پتانسیل دوره‌ای ۱۳
۲-۱-۱- قضیه بلوخ ۱۴
۲-۲- مدل کرونیک پنی ۱۴
۲-۳- روش تنگابست ۱۶
۲-۳-۱- انرژی ویژه‌های نانو ساختار سه اتمی به کمک روش تنگابست ۱۷

۲-۴- معرفی مدل به روش تابع گرین ۱۹
۲-۵- خود انرژی یک مولکول سه اتمی به خاطر حضور نیم سیم‌های سمت چپ و راست ۲۱
۲-۶- ارتباط رسانش الکتریکی با تابع گرین سامانه ۲۳
۲-۷- چگالی حالت‌های الکترونی ۲۳
۲-۸- هامیلتونی بستگی قوی سامانه‌های کوانتومی در حضور اثر آهارانف-بوهم ۲۴
۲-۹-خلاصه و نتیجه‌گیری ۲۵

فصل سوم: بررسی مغناطو رسانش یک نانو حلقه پلی استیلن

۳-۱- سامانه‌ی شامل یک حلقه پلی استیلن ۲۶
۳-۱-۱- اثر تغییر مکان نقص پیوندی بر ویژگی‌های ترابردی حلقه پلی استیلن ۲۸
۳-۱-۱- ۱- اثر تغییر مکان اتصال هادی‌ها بر ویژگی‌های ترابردی حلقه پلی استیلن ۳۱
۳-۱-۱-۲ –ضریب عبور و چگالی حالت‌های الکترونی برای سامانه ۳۲
۳-۱-۱-۳- بررسی اثر قدرت دوپارش بر ترابرد حلقه پلی استیلن ۳۲
۳-۱-۱-۴- بررسی اثر قدرت اتصال متفاوت بین حلقه پلی استیلن و هر هادی ۳۲
۳-۱-۱-۵- اثر تغییر شار مغناطیسی بر ضریب عبور الکترونی حلقه پلی استیلن ۳۵
۳-۱-۱-۶-چگالی الکترونی اتم‌ها در یک حلقه پلی استیلن ۳۵
۳-۲-سامانه‌ای شامل نانو حلقه پلی استیلنی در حضور دو حلقه بنزن ۳۸
۳-۲-۱- ترابرد الکترونی در نانو حلقه پلی استیلنی در حضور دو حلقه بنزن ۳۹
۳-۲-۲-بررسی اثر قدرت اتصال متفاوت بین نانو حلقه و هر هادی ۴۰
۳-۳- خلاصه و نتیجه‌گیری ۴۳

فصل چهارم: وابستگی رسانش الکترونی یک مولکول فولرن به محل اتصال هادی‌ها و میدان مغناطیسی اعمالی

۴-۱- سامانه‌ی مولکولی شامل یک نانو حلقه فولرنی ۴۵
۴-۲- اثر تغییر مکان اتصال هادی‌ها بر ویژگی‌های ترابردی مولکول فولرن ۴۷
۴-۳-اثر تغییرمکان اتصال هادی‌ها بر ویژگی‌های ترابردی مولکول فولرن در حضور میدان مغناطیسی ۴۹
۴-۴- اثر تغییر شار مغناطیسی بر ضریب عبور الکترونی مولکول فولرن ۴۹
۴-۵- سامانه شامل مولکول فولرن در حضور دو حلقه بنزن ۵۲
۴-۵-۱- اثر تغییر مکان مولکولهای بنزن بر ویژگی‌های ترابردی مولکول فولرن ۵۲
۴-۵-۲-بررسی اثر قدرت اتصال متفاوت بین نانو حلقه فولرنی و هر هادی ۵۴
۴-۵-۳-اثر تغییر شار مغناطیسی بر ضریب عبور الکترونی مولکول فولرن شامل دو حلقه بنزن ۵۶
۴-۶-خلاصه و نتیجه‌گیری ۵۶

فصل پنجم: تعیین عدد اشغال الکترونی اتم‌ها در یک حلقه بنزن

۵-۱- سامانه مولکولی شامل یک مولکول بنزن ۵۹
۵-۲- بررسی عدد اشغال الکترونی در یک نانو ساختار خطی شامل یک ناخالصی ۶۰
۵-۳- بررسی عدد اشغال الکترونی مولکول بنزن در گستره‌های مختلف انرژی ۶۲
۵-۴- بررسی اثر قدرت دو پارش بر عدد اشغال الکترونی مولکول بنزن ۶۵
۵-۵- بررسی اثر اعمال ولتاژ بر عدد اشغال الکترونی مولکول بنزن ۶۷
۵-۶-خلاصه و نتیجه‌گیری ۶۸
نتایج ۶۹
پیشنهادها ۷۱
منابع ۷۲

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل۱-۱: (الف)ساختار نانو ذرات (ب) ساختار نانو لوله (ج) ساختار نانو سیم است ۳
شکل۱-۲: نمای شماتیک گردش الکترون ها در مولکول بنزن ۸
شکل۱-۳: برخی ترکیبات آلیفاتیک حلقوی ۸
شکل۱-۴: مولکول فولرن ۹
شکل۱-۵: نانو حلقه‌های بکار رفته در ترکیبات مولکول فولرن ۱۲
شکل۲-۱: پتانسیل مدل KP ۱۵
شکل۲-۲: شماره‌گذاری اتم‌ها در یک نانو حلقه سه اتمی ۱۸
شکل۲-۳: شکل ۲-۳:یک نانو حلقه با ۶ اتم ۲۰
شکل۲-۴: نانو حلقه سه اتمی متصل به دو نیم هادی است ۲۲
شکل۳-۱: یک نانو حلقه پلی استیلنی که از اتم‌های شماره ۱ و۱۰ به هادی‌ها متصل است ۲۷
شکل۳-۲: یک نانو حلقه پلی استیلنی که از اتم‌های شماره ۱ و۱۰ به هادی‌ها متصل است ۲۸
شکل۳-۳: ضریب عبور الکترونی در یک حلقه‌ی پلی‌استیلن با تغییر مکان نقص پیوندی در غیاب میدان ۳۰
شکل۳-۴: ضریب عبور الکترونی در یک حلقه‌ی پلی‌استیلن با تغییر مکان نقص پیوندی. در اینجا ۳۰
شکل۳-۵: حالت‌های متفاوت اتصال دو هادی ساده به یک حلقه پلی استیلن ۳۱
شکل ۳-۶: ترابرد الکترونی در یک حلقه پلی استیلن متصل به هادی‌های ساده ۳۱
شکل۳-۷: ضریب عبور الکترونی در یک حلقه پلی استیلن در حضور شار مغناطیسی $\phi = 0, \pi / 3$. ۳۳
شکل۳-۸: چگالی حالت‌های الکترونی در یک حلقه پلی‌استیلن در حضور شار مغناطیسی $\phi = 0, \pi / 3$ ۳۳
شکل۳-۹: ضریب عبورالکترونی بر انرژی الکترون ورودی برای نانو حلقه شکل ۳۴
شکل۳-۱۰: ضریب عبورالکترونی بر حسب انرژی پرش اتصال، $\varepsilon = 1\text{eV}$ است ۳۴
شکل۳-۱۱: ضریب عبور الکترونی نانو حلقه پلی‌استیلنی شامل ۱۸ اتم برحسب ۳۶
شکل۳-۱۲: نمایش چگالی الکترونی اتم‌ها در جایگاه ۱تا ۱۸ نشان داده شده در ۳۷
شکل۳-۱۳: قسمت (الف) چگالی الکترون‌ها در جایگاه ۱تا ۱۰ نشان داده شده در شکل ۳۷
شکل۳-۱۴: پیکربندی‌های متفاوت از قرارگیری دو حلقه بنزن روی یک حلقه پلی‌استیلن ۳۸
شکل۳-۱۵: حلقه بنزنی به همراه پیوندهای اطرافش به یک ناخالصی مؤثر با انرژی ۳۸
شکل۳-۱۶: ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی برای پیکربندی‌های نشان داده شده ۴۱
شکل۳-۱۷: ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی برای پیکربندی نشان داده شده در ۴۱
شکل۳-۱۸: ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی الکترون ورودی برای پیکربندی ۴۲
شکل۳-۱۹: چگالی الکترونی بر حسب انرژی الکترون ورودی برای پیکربندی نشان داده شده ۴۲
شکل۴-۱: ساختار شیمیایی یک نانو حلقه فولرنی ۴۵
شکل۴-۲: نانو حلقه‌ی شکل ۴-۱که بنزن‌های آن به مولکول‌های دو اتمی مؤثر تقلیل یافته‌اند ۴۶
شکل۴-۳: ضریب عبور الکترونی مولکول فولرن بر حسب انرژی برای موردی که هادی ورودی ۴۸
شکل۴-۴: ضریب عبور الکترونی مولکول فولرن بر حسب انرژی الکترون ورودی برای مواردی ۴۸
شکل۴-۵: لگاریتم ضریب عبور بر حسب انرژی الکترون ورودی برای مواردی که هادی ۵۰
شکل۴-۶: ضریب عبور الکترونی به صورت تابعی از شار مغناطیسی گذرنده از مولکول ۵۱

شکل۴- ۷: سه نوع مولکول فولرنی شامل دو حلقه‌ی بنزن دوتایی..... ۵۲
شکل۴-۸: ضریب عبور الکترونی مولکول شکل ۴-۷ قسمت (الف) بر حسب..... ۵۳
شکل۴-۹: ضریب عبور الکترونی مولکول‌های شکل ۴-۷ بر حسب انرژی برای..... ۵۳
شکل۴-۱۰: لگاریتم ضریب عبور الکترونی بر حسب انرژی الکترون ورودی برای..... ۵۴
شکل۴-۱۱: لگاریتم چگالی الکترونی بر حسب انرژی الکترون ورودی برای..... ۵۵
شکل۴-۱۲: ضریب عبور الکترونی به صورت تابعی از شار مغناطیسی گذرنده..... ۵۷
شکل۵-۱: یک حلقه‌ی بنزن متصل به دو هادی ساده..... ۵۹
شکل۵-۲: یک نانو ساختار خطی..... ۶۰
شکل۵-۳: چگالی الکترونی اتم‌های ساختار نشان داده شده در شکل ۵-۲ که متصل به دو سیم..... ۶۰
شکل۵-۴: چگالی الکترونی اتم شماره ۴ در شکل ۵-۱ بر حسب تابع دو پارش ۶۱
شکل۵-۵: چگالی الکترونی اتم شماره ۴ در شکل ۱ بر حسب انرژی جایگاهی..... ۶۱
شکل۵-۶: حالت‌های متفاوت اتصال دو هادی ساده به یک حلقه بنزن..... ۶۲
شکل۵-۷: ضریب عبور الکترونی در یک حلقه بنزن متصل به هادی‌های ساده..... ۶۲
شکل۵-۸: چگالی الکترونی مربوط به اتم‌ها در حلقه بنزن نمایش داده شده در شکل..... ۶۳
شکل۵-۸: (الف) چگالی الکترونی بر حسب قدرت دوپارش برای پیکربندی شکل..... ۶۴
شکل۵-۹: چگالی حالت‌های موضعی اتم‌ها..... ۶۵
شکل۵- ۱۰: (الف) چگالی الکترونی بر حسب قدرت دوپارش برای پیکربندی..... ۶۶
شکل۵-۱۱: (الف) چگالی الکترونی بر حسب قدرت دوپارش برای پیکربندی..... ۶۶
شکل۵-۱۲: (الف) چگالی الکترونی بر حسب قدرت دوپارش برای پیکربندی..... ۶۶
شکل۵-۱۳: یک حلقه بنزن متصل به اختلاف پتانسیل $1\mathrm{eV}$در حالت‌های متفاوت اتصال هادی‌ها..... ۶۷

فهرست جدول‌ها

عنوان **صفحه**

جدول ۵-۱: میانگین چگالی الکترونی در بازه‌های مختلف انرژی در مسیر بالا و پایین ۶۴
جدول۵-۲: ضریب پاسخ اتم‌های بنزن به خاطر وجود اختلاف پتانسیل برای سه حالت..... ۶۷

فصل اول

مقدمه

نانوفناوری، توانمندی تولید مواد، ابزارها و سامانه‌های جدید و کنترل خصوصیات آنها در سطوح مولکولی و اتمی است. از همین تعریف ساده برمی‌آید که نانوفناوری یک رشته جدید نیست، بلکه رویکردی جدید در تمام رشته‌ها است. برای نانوفناوری کاربردهایی را در حوزه‌های مختلف از غذا، دارو، تشخیص پزشکی و بیوفناوری تا الکترونیک، کامپیوتر، ارتباطات، حمل‌ونقل، انرژی، محیط زیست، مواد، هوافضا و امنیت ملی برشمرده‌اند.کاربردهای وسیع این عرصه به همراه پیامدهای اجتماعی، سیاسی و حقوقی آن، این فناوری را به عنوان یک زمینه فرا رشته‌ای و فرابخش مطرح نموده است. هر چند آزمایش‌ها و تحقیقات پیرامون نانوفناوری از ابتدای دهه ۸۰ قرن بیستم بطور جدی پیگیری شد، اما اثرات معجزه آسا و باورنکردنی نانوفناوری در روند تحقیق و توسعه باعث گردید که نظر تمامی کشورهای بزرگ به این موضوع جلب گردد و فناوری نانو را به عنوان یکی از مهمترین اولویت‌های تحقیقاتی خویش طی دهه اول قرن بیست‌ویکم محسوب نمایند. استفاده از این فناوری در کلیه علوم پزشکی، پتروشیمی، علوم مواد، صنایع دفاعی، الکترونیک، کامپوترهای کوانتومی و غیره باعث شده که تحقیقات در زمینه نانو به عنوان یک چالش اصلی علمی و صنعتی پیش روی جهانیان باشد.

۱-۱- تاریخچه فناوری نانو

فناوری نانو حدود نیم قرن پیش در دهه‌های آخر قرن بیستم همراه با توسعه فناوری‌های نوین تصویربرداری، دستکاری و شبیه‌سازی ماده در مقیاس اتمی پدید آمده است. نانو در گذشته فیزیک اتمی نامیده می‌شد، پس از کاربردی شدن آن، نام آن نانو شد. به همین دلیل نانو یک علم جدید نیست، اما کاربردی شدن آن زندگی انسان را دگرگون ساخت. ایده نانوفناوری رابرای اولین بار اریک درکسلر[۱] به دنیا عرضه نمود، او

[۱] Eric Drexler

درآزمایشگاه مشهور MIT متعلق به انستیتو فورسایت مطالعات خود را با سامانه‌های بیولوژیکی شروع کرده سپس متوجه شد که می‌توان دستگاه‌های مولکولی تولید کرد، بدین ترتیب ایده نانو فناوری به نام او ثبت شد. اصطلاح نانو برگرفته از یونان قدیم است و به معنی کوتوله بوده است

۱-۲ - عناصر پایه در فناوری نانو

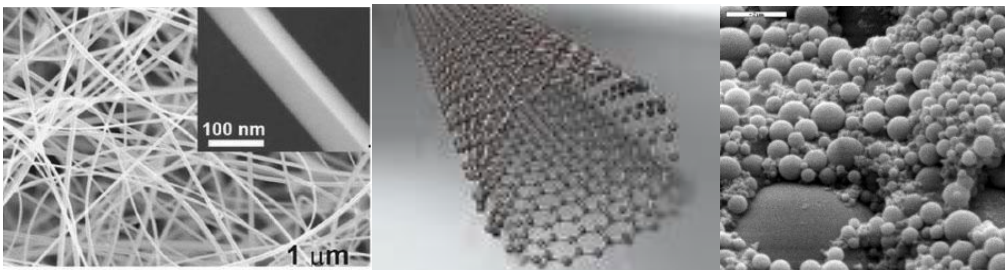
در حقیقت اگر بخواهیم تفاوت فناوری نانو را با فناوری‌های دیگر به صورت قابل ارزیابی بیان کنیم، می‌توانیم وجود عناصر پایه را به عنوان یک معیار ذکر کنیم. عناصر پایه در حقیقت همان عناصر نانو مقیاسی هستند که خواص آنها در حالت نانو مقیاس با خواصشان در مقیاس بزرگتر تفاوت دارد. در اینجا به تعدادی از عناصر پایه اشاره می‌کنیم.

۱-۲-۱- نانوذره

در نانوفناوری یک ذره به عنوان شئ کوچکی که تمام ویژگی‌های سامانه‌ی بزرگ را دارد، تعریف می‌شود. همچنین ذرات را مطابق با اندازه‌شان تقسیم‌بندی می‌کنند. ذرات ریز، برحسب قطر دایره، اندازه‌ای بین ۱۰۰ تا ۲۵۰۰ نانومتر دارند. ذرات خیلی ریز، اندازه‌ای بین ۱ تا ۱۰۰ نانومتر دارند. مشابه ذرات خیلی ریز، نانوذره، ابعادی بین ۱ تا ۱۰۰ نانومتردارد (شکل۱-۱). نانوذرات می‌توانند ویژگی‌های مرتبط با اندازه‌ای از خود نشان دهند که با خصوصیات ذرات ریز یا مواد انبوهه متفاوت است[۱]. اگرچه اندازه‌ی بیشتر مولکول‌ها در حدود بالا قرار می‌گیرد، معمولاً مولکول‌های تنها را نانو ذره در نظر نمی‌گیرند. نانوذرات علاوه بر نوع فلزی، عایق‌ها، نیمه‌هادی‌ها و نانوذرات ترکیبی را نیز شامل می‌شود. همچنین نانوکره‌ها، نانومیله‌ها و نانوفنجان‌ها اشکالی از نانوذرات در نظر گرفته می‌شوند. نانوذرات در اندازه‌های پایین نانوخوشه به حساب می‌آیند. دست کم یکی از ابعاد نانوخوشه‌ها بین ۱ تا ۱۰ نانومتر قرار می‌گیرد[۲]. نانوپودرها از متراکم شدن ذرات خیلی ریز، نانوذرات یا نانوخوشه‌ها به‌دست می‌آیند [۳]. بلورهای تنها و یا ذرات خیلی ریز با اندازه‌ی نانومتری، اغلب به عنوان نانوبلور در نظر گرفته می‌شوند. نانوبلورها زیرمجموعه‌ی نانوذرات هستند. چنین نانوذراتی در زمینه‌های مختلف الکترونیکی و الکتریکی و بیودارویی به عنوان حامل دارو و عوامل تصویربرداری کاربرد دارند [۸-۴]. نانو ذرات می‌توانند از مواد مختلفی مانند نانو ذرات فلزی، سرامیکی و غیره تشکیل شوند.

۱-۲-۲- نانولوله

ساختارهای لوله مانند در مقیاس نانومتر، نانولوله نامیده می‌شوند (شکل۱-۱). نانولوله‌ها به شکل نانو لوله های کربنی، نانولوله‌های معدنی، نانولوله‌هایDNA و نانولوله‌های غشایی (یک غشای لوله‌ای در پیوند بین سلول‌ها) یافت می‌شوند. نانولوله‌ی کربنی، در سال ۱۹۹۱ در شرکت NEC کشف شد و در حقیقت لوله‌هایی از گرافیت است. اگر صفحات گرافیت را پیچیده و به شکل لوله در بیاوریم، به نانولوله‌های کربنی می‌رسیم. این نانولوله‌ها دارای اشکال و اندازه‌های مختلفی هستند و می‌توانند تک دیواره یا چند دیواره باشند[۹]. این لوله‌ها خواص بسیار جالبی دارند که منجر به ایجاد کاربردهای جالب توجهی از آنها می‌شود. خواص بسیار بدیع و خارق العاده‌ی نانولوله‌های کربنی، موجب شده است که محققین از آنها به عنوان ماده‌ی قرن یاد کنند. نانولوله‌های کربنی به علت دارا بودن ساختاری ویژه، در تجهیزات مکانیکی و الکتریکی در



(ج) (ب) (الف)

شکل ۱-۱: (الف)ساختار نانو ذرات (ب) ساختار نانو لوله (ج) ساختار نانو سیم است.

مقیاس کوچک، سلول‌های خورشیدی، ابرخازنها، نانوالکترومکانیک، لباس‌های ضد گلوله و موتورهای الکتریکی خیلی کوچک کاربرد دارند[۱۰-۱۲]. یک نانولوله‌ی معدنی، مولکولی استوانه‌ای شکل است که اغلب از اکسیدهای فلزی تشکیل شده و از نظر شکل شبیه نانولوله‌های کربنی است[۱۳ و۱۴]. نانولوله‌های غشایی، لوله‌های دراز و نازکی از غشای پلاسمایی هستند که سلول‌های حیوانی مختلف را به هم متصل می‌کنند[۱۵ و ۱۶].

۱-۲-۳- نانوسیم

نانوسیم یک ساختار شبه یک بعدی است (شکل ۱-۱). چون در این ابعاد اثرات کوانتومی مهم هستند، این سیم‌ها، سیم‌های کوانتومی نیز نامیده می‌شوند. این سیم‌ها از قرار گرفتن ذرات بسیار ریز از مواد مختلف و به صورت خطی ساخته می‌شوند[۱۷]. نانوسیم‌ها از فلزات، نیمه‌هادی‌ها و انواع بسپارها ساخته می‌شوند و برای ساخت مدارهای الکتریکی در اندازه‌های کوچک استفاده می‌شوند. همچنین نانوسیم‌ها برای ثبت مغناطیسی اطلاعات در حافظه رایانه‌ها، قطعات نانوالکترونیکی و نوری و اتصال مکانیکی ذرات کوانتومی به کار می‌روند.

۱-۳- خواص نانومواد

با گذر از مقیاس میکرو به نانو، با تغییر برخی از خواص فیزیکی و شیمیایی روبرو می‌شویم که دو مورد مهم از آنها عبارتند از: افزایش نسبت مساحت سطحی به حجم و ورود اندازه ذره به قلمرو اثرات کوانتومی. افزایش نسبت مساحت سطحی به حجم که به تدریج با کاهش اندازه‌ی ذره رخ می‌دهد، باعث غلبه یافتن رفتار اتم‌های واقع در سطح ذره به رفتار اتم‌های درونی می‌شود. این پدیده بر خصوصیات ذره در حالت منزوی و بر تعاملات آن با دیگر مواد اثر می‌گذارد. افزایش سطح، واکنش‌پذیری نانومواد را به شدت افزایش می‌دهد، زیرا تعداد مولکول‌ها یا اتم‌های موجود در سطح، در مقایسه با تعداد اتم‌ها یا مولکول‌های موجود در توده‌ی نمونه، بسیار زیاد است. به گونه‌ای که این ذرات به شدت تمایل به آگلومره یا کلوخه‌ای شدن دارند. به‌عنوان مثال نانوذرات فلزی، به محض قرار گرفتن در هوا، به سرعت اکسید می‌شوند. در بعضی مواقع برای حفظ خواص مطلوب نانومواد، جهت پیشگیری از واکنش بیشتر، یک پایدارکننده به آنها اضافه می‌کنند. این پایدارکننده، آنها را قادر می‌سازد تا در برابر سایش، فرسودگی و خوردگی مقاوم باشند. البته این خاصیت مزایایی هم در بردارد. مساحت سطحی زیاد، عاملی کلیدی در کارکرد کاتالیزورها و ساختارهایی همچون الکترودها است. به عنوان مثال با استفاده از این خاصیت می‌توان کارایی کاتالیزورهای شیمیایی را به نحو

مؤثری بهبود بخشید. همچنین استفاده از این مواد در تولید نانوکامپوزیت‌ها، پیوندهای شیمیایی مستحکم‌تری بین ماده زمینه و ذرات برقرار کرده و استحکام آنها را به شدت افزایش می‌دهد. افزایش سطح ذرات، فشار سطحی را کاهش داده و منجر به تغییر فاصله‌ی بین ذرات یا فاصله‌ی بین اتم‌های ذرات می‌شود. تغییر در فاصله‌ی بین اتم‌های ذرات و نسبت سطح به حجم بالا در نانوذرات، تأثیر متقابلی در خواص ماده دارد. تغییر در انرژی آزاد سطح، پتانسیل شیمیایی را تغییر می‌دهد. این امر در خواص ترمودینامیکی ماده (مانند نقطه ذوب) تأثیر گذار است [۱۸و۱۹]. علاوه بر این، کوچک بودن ابعاد نانوذرات آنها را نامرئی و شفاف می‌نماید. مواد در مقیاس نانو، رفتار کاملاً متفاوت، نامنظم و کنترل نشده‌ای از خود بروز می‌دهند. با کوچکتر شدن ذرات، خواص آنها نیز تغییر خواهد کرد. مثلا فلزات، سخت‌تر و سرامیک‌ها نرم‌تر می‌شود.

۱-۴-نانو الکترونیک

در سال ۱۹۵۶ گوردون مور بنیان‌گذار اینتل تحلیلی ارایه کرد که بر طبق آن هر ۱۸ ماه تعداد ترانزیستورهای بکار رفته در ریزپردازهای اینتل دو برابر می‌شود که نصف شدن ابعاد گیت ترانزیستورها با شرط ثابت بودن اندازه تراشه سیلیکونی در آن می‌تواند نتیجه این قوانین باشد. این قاعده به قانون مور موسوم شد. این نصف شدن در واقع پیام‌آور ابعاد اقتصادی بود یعنی هر چه گیت کوچکتر می‌شد ترانزیستور می‌توانست سریعتر سوئیچ کند و در نتیجه انرژی کمتری مصرف می‌شد و تعداد بیشتری ترانزیستور در یک تراشه سیلیکون جای می‌گرفت. افزایش تعداد ترانزیستورها و بازدهی آنها، هزینه را کاهش می‌دهد بنابراین مقرون به صرفه این بود که هر ترانزیستور تا حد امکان کوچکتر شود، این کوچک‌سازی بالاخره در نقطه‌ای متوقف می‌شد بنابراین برای ادامه رشد صنعت الکترونیک باید به فکر فناوری‌های جایگزین بود، فناوری‌ای که مشکلات گذشته را حل کرده و توجیه اقتصادی داشته باشد و این نانوفناوری بود که توانست به کمک الکترونیک بیاید و فناوری الکترونیک مولکولی یا همان نانوالکترونیک بنا نهاده شد. نانو فناوری یک رشته وابسته به ابزار است ابزارهایی که به مرور در حال بهتر شدن است نانو فناوری و شاخه‌های کاربردی آن مانند نانوالکترونیک در واقع تولید کارآمد دستگاه‌ها و سامانه‌ها با کنترل ماده در مقیاس طولی نانو است و بهره‌برداری از خواص و پدیده‌های نوظهوری است که در این مقیاس توسعه یافته است. صنعت الکترونیک امروزی مبتنی بر سیلیکون است سن این صنعت به حدود ۵۰ سال می‌رسد و اکنون به مرحله‌ای رسیده است که از لحاظ فناوری، صنعتی و تجاری به بلوغ رسیده است. در مقابل این فناوری، الکترونیک مولکولی قرار دارد که در مراحل کاملاً ابتدایی است و قرار است این فناوری به عنوان آینده و نسل بعدی صنعت الکترونیک سیلیکونی مطرح شود.

الکترونیک مولکولی دانشی است که مبتنی بر فناوری نانو بوده و کاربردهای وسیعی در صنعت الکترونیک دارد. با توجه به کاربردهای وسیع الکترونیک در محصولات تجاری بازار می‌توان با سرمایه‌گذاری و تأمل بیشتر در فناوری نانو الکترونیک در آینده‌ای نه چندان دور شاهد سوددهی کلان محصولاتی بود که جایگزین فناوری الکترونیک سیلیکونی شده‌اند. میل، اشتیاق و علاقه مصرف‌کنندگان و نیاز بازار به محصولات جدید با قابلیت‌های بالا سازندگان و صنعتگران را بر آن می‌دارد که با سرمایه‌گذاری در این فناوری شاهد رشد و شکوفایی اقتصادی هر چه بیشتر باشند، ولیکن با توجه به اهمیت نانوفناوری و نیز نانو الکترونیک که به عنوان یک شاخه کاربردی از نانوفناوری مطرح است، لزوم سرمایه‌گذاری کلان در دراز مدت و خطرپذیری و تشکیل مراکز تحقیقاتی توسط دولتمردان پیش از پیش احساس می‌شود.

۱-۴-۱- کاربرد نانوالکترونیک در صنعت

با استفاده از این فناوری می‌توان ظرفیت ذخیره‌سازی اطلاعات را در حد ۱۰۰۰ برابر یا بیشتر افزایش داد که این نهایتاً به ساخت ابزارهای ابرمحاسباتی به کوچکی یک ساعت مچی منتهی می‌شود. ظرفیت نهایی ذخیره اطلاعات به حدود یک ترابیت در هر اینچ مربع رسیده، و این امر موجب ذخیره سازی ۵۰ عدد DVD یا بیشتر در یک هارد دیسک با ابعاد یک کارت اعتباری می‌شود. ساخت تراشه‌ها در اندازه‌های فوق‌العاده کوچک به‌عنوان مثال در اندازه‌ی ۳۲ تا ۹۰ نانومتر، تولید دیسک‌های نوری ۱۰۰ گیگابایتی در اندازه‌ای کوچک نیز از دیگر محصولات آن است. در ادامه نمونه‌هایی از کاربرد فناوری نانو در الکترونیک را نام می‌بریم.

الف- نانو لوله‌های کربنی

نانو لوله‌های کربنی دارای شکل لوله‌ای با ساختار شش ضلعی هستند. نانو لوله‌های کربنی را می‌توان صفحات گرافیتی فرض کرد که لوله شده‌اند. بر اساس محور چرخش صفحات نانو لوله‌ها می‌توانند رسانا یا نیمه رسانا باشند. به علت اینکه کربن با سه پیوند همچنان دارای یک اوربیتال خالی p است، حرکت موجی الکترون‌ها به راحتی در سطح بیرونی این لوله ها صورت می‌گیرد. این ساختار کربنی علاوه بر رسانایی بالا دارای استحکام مکانیکی بسیار خوبی نیز است. البته در کنار این مزایا مشکلاتی نیز وجود دارد. اغلب فرآیندهای ساخت نانو لوله‌ها به گونه‌ای می‌باشند که امکان کنترل و نظارت کامل در طول فرآیند وجود ندارد به عنوان مثال تعیین قطر دقیق و یکسان برای لوله‌های کشت شده در یک محیط، کنترل تولید نانو لوله‌های تک دیواره و یا چند لایه و یا ساخت نانو لوله‌های مستقیم و بدون خم‌شدگی با طول زیاد از مسائلی است که هنوز در فرآیند بهبود کیفیت تولید نیاز به مطالعه و تحقیقات بیشتری دارد. همچنین به علت پدیده تونل‌زنی الکترون که یک پدیده کوانتومی است امکان افزایش نشتی جریان و در نتیجه افزایش تلفات وجود دارد که بررسی روش‌های کاهش احتمال تونل‌زنی از جمله کارهایی است که می‌توان انجام داد. از کربن نانو لوله‌ها به دلیل رسانایی بالا و مقاومت کم در دمای محیط در ساخت نوک میکروسکوپ‌های عکسبرداری در ابعاد نانو استفاده می‌شود.

ب) نانو ترانزیستورها

فناوری رایج امروز در ساخت ترانزیستورها بر پایه استفاده از سیلیکون است. کوچکتر شدن ابعاد ترانزیستورها در این فناوری دارای مشکلاتی است که از جمله آن نشتی‌های جریان متفاوتی است که ایجاد می‌شود. یکی از روش‌های حل این مشکل ساخت تراتزیستورها با استفاده از نانوساختارها و به خصوص نانو لوله‌ها می باشد.

ج) C_{60}

از جمله نانو ساختارها که حتی نسبت به نانو لوله‌های کربنی دارای مزایای بیشتری نیز می باشد C_{60} است.

C_{60}از ۱۲ پنج ضلعی و ۲۰ شش ضلعی تشکیل شده که به شکل متقارنی در کنار هم قرار گرفته‌اند.

مولکول‌های C_{60} در محلول‌های بنزن یافت می‌شوند که با عمل تبخیر بدست می‌آیند. انواع ترکیبات C_{60} با فلزات، نظیر K_3C_{60}، که در آنها فلز فضای خالی درون C_{60} را پر می‌کند دارای خاصیت ابررسانایی در

دماهای نسبتاً مناسب می‌باشند، البته تحقیقات برای دستیابی به ترکیباتی با خاصیت ابررسانایی در دماهای بالاتر همچنان ادامه دارد. کاربرد دیگر C_{60} استفاده از آن به عنوان گیت‌های منطقی است. با لیتوگرافی طلا روی یک سطح سیلیکونی و عبور جریان از سیم‌های طلا یک صفحه مشبک ایجاد می‌شود که فاصله بین اتصالات آن در حدود نانو متر است. محلول رقیق C_{60} را بین اتصالات قرار می‌دهند به طوری که در هر فاصله یک C_{60} قرار گیرد. با برقرار شدن جریان در سیم‌های طلا، C_{60} به علت یک پدیده کوانتومی شروع به نوسان می‌کند و به همین علت جریان در زمان‌های معینی بر قرار می‌شود که از این خاصیت می‌توان در طراحی گیت‌های منطقی استفاده کرد.

۱-۴-۲- مواد مولکولی برای الکترونیک مولکولی

هیدروکربن‌های آروماتیک از ریشه بنزن به علت وجود اوربیتال های p و ابر الکترونی در بالا و پایین آنها و همچنین پدیده تشدیدی می‌توانند محیط انتقال خوبی برای الکترون باشند و بر عکس هیدروکربن‌های زنجیری مانند نارسانا عمل می‌کنند. از به هم پیوستن این هیدروکربن‌ها با هم می‌توان دیود، گیت‌های منطقی و مدارهای الکترونیکی را طراحی کرد. یک مولکول بنزن متصل شده به اتصالات طلا دقیقاً مانند یک ترانزیستور سیلیکونی عمل می‌کند[۲۰]. برای استفاده از قطعات در ابعاد مولکول در مدارات رایانه‌ای نیاز زیادی وجود دارد. زیرا ترانزیستورهای موجود نمی‌توانند در مقیاس مورد استفاده قرار بگیرند. ابعاد مولکولی پیشرفت بسیار بزرگی در زمینه تولید رایانه‌های مولکولی به حساب می‌آیند.

بنزن متعلق به خانواده هیدروکربن‌هاست و به جهت ترکیبات متعدد آن در صنعت اهمیت زیادی دارد. در این میان ترکیبات کربن گستردگی زیادی داشته و از اهمیت بسزایی در فناوری نانو برخوردارند. ترکیبات آلی در دو گروه آلیفاتیک و آروماتیک قرار می‌گیرند. این ترکیبات می‌توانند زنجیره‌ای، حلقوی و یا دربرگیرنده ساختارهای سه بعدی باشند. کربن می‌تواند هیبریدهای متنوع را در این ترکیبات دارا باشد. خصوصیات متنوع نانو ساختارهای کربنی مستقیماً با هیبرید اتم‌های کربن مرتبط است. به جز کربن و هیدروژن، اتم‌هایی همچون اکسیژن، نیتروژن، گوگرد، هالوژن‌ها و غیره نیز در ساختار ترکیبات آلی مشارکت می‌کنند[۲۱].

گروه‌های عاملی بخش‌هایی از مولکول آلی با آرایش اتمی مشخص‌اند که ویژگی‌ها و واکنش پذیری ترکیب را رقم می‌زنند. علی رغم تلاش‌های فراوان در دهه اخیر که برای پیشرفت در زمینه نانو فناوری صورت گرفته قیمت ابزارها هنوز به صورت یک مشکل سر راه پیشرفت در این زمینه است. یکی از راه‌های کاهش قیمت‌ها، پیش‌بینی خواص فیزیکی مواد به کمک محاسبات نظری است. محاسبات با توجه به پیشرفت و توسعه رایانه‌های پر سرعت، یکی از قابل اطمینان‌ترین و معتبرترین روش‌ها برای مطالعه خواص نانو ذرات است. با توجه به اهمیت ترکیبات کربن در الکترونیک مولکولی در ادامه به بررسی کربن و ترکیبات آن می‌پردازیم.

۱-۵- کربن

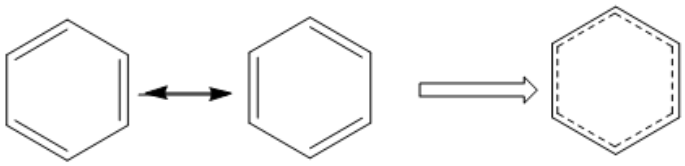
مهمترین ویژگی کربن که آن را از عنصرهای دیگر متمایز می‌کند، توانایی آشکار کربن در تولید ترکیب‌هایی است که در آن‌ها اتم‌های کربن به صورت زنجیروار یا حلقه‌ای با یک دیگر پیوند دارند. این خاصیت که به آن زنجیری شدن می‌گویند، در عنصرهایی مانند بور، نیتروژن و غیره نیز تا اندازه‌ای مشاهده می‌شود. بنابراین، علت بی‌شمار بودن ترکیب‌های کربن، تمایل بی‌مانند کربن به تشکیل پیوندهای دوگانه و سه‌گانه و تشکیل

زنجیر است. برای تعداد اتم‌هایی که می‌توانند به صورت زنجیری به یک دیگر متصل شوند، نمی‌توان حدی تصور کرد. از سوی دیگر، زنجیرهای کربن از زنجیرهای هر عنصر دیگری که دارای این خاصیت است، پایداری بیشتری دارند. همچنین، ترکیب‌های کربن در مقایسه با ترکیب‌های نافلزهای دیگر، واکنش‌پذیری چندانی ندارند. از همین روست که ترکیب‌های کربن پایدارند، فراوانی و پراکندگی بسیار گسترده‌ای در طبیعت یافته‌اند و هر گروه از این ترکیب‌ها ویژگی‌های متنوعی را از خود به نمایش می‌گذارند[۲۲].

کربن را می‌توان یک عنصر استثنائی در جدول تناوبی دانست. شیمی گسترده ترکیبات کربنی تا به آن حد است که یکی از گرایش‌های رشته شیمی با عنوان شیمی آلی به طور کامل به بررسی ترکیبات این عنصر از جدول تناوبی می‌پردازد. پیوند کوالانسی هر اتم کربن با انواع دیگر اتم‌ها یا اتم‌های کربن دیگر، ساختارهای نامحدود و بسیار متنوع را ایجاد می‌نماید. از جهت دیگر بسیاری از ترکیباتی که در طبیعت طی روش‌های طبیعی سنتز ساخته می‌شوند نیز از خانواده ترکیبات آلی هستند. گستره وسیعی از ترکیبات شامل ترکیبات متنوع نفتی تا مواد دارویی و بسپارهای آلی زیر مجموعه ترکیبات کربن قرار می‌گیرند. در نانوفناوری نیز، ترکیبات کربنی دسته مهم و مشخصی را به خود اختصاص می‌دهند که با عنوان نانوساختارهای کربنی خوانده می‌شوند. نانوساختارهای کربنی خصوصیات فیزیکی و شیمیایی منحصر به فردی از خود نشان می‌دهند و نقش گسترده‌ای در زمینه فناوری‌های نوین و پیشرفته دارند. مطالعه شیمی پایه ترکیبات کربنی می‌تواند راهگشای درک بسیاری از خصوصیات نانوساختارهای کربنی و همچنین اصلاح ساختاری آنان باشد. ترکیبات هیدروکربنی به دو دسته تقسیم می‌شوند که در زیر به آنها اشاره می‌کنیم.

۱-۶- هیدروکربن‌های آروماتیک و آلیفاتیک

در شیمی آلی، به ترکیباتی که تا درصد بالایی از فرمول مولکولی خود از کربن و هیدروژن ساخته شده‌اند، ترکیبات هیدروکربنی گفته می‌شود. ترکیبات هیدروکربنی در دو دسته آلیفاتیک و آروماتیک قرار می‌گیرند. ترکیبات آروماتیک ساختاری ویژه دارند، در این ترکیبات، پیوندهای دوگانه π به صورت یکی در میان قرار گرفته‌اند. از آنجا که ساختار این ترکیبات حلقوی بوده و حالتی مسطح دارند، الکترون‌های π (پای) غیرمستقر می‌توانند درون مولکول جریان یابند. به بیان دیگر، چنین مولکول‌هایی دارای یک سامانه جفت شده بین اوربیتال‌های p اتم‌های کربن هستند (اتم‌های کربن هیبرید sp^2 داشته و اوربیتال‌های p عمود بر صفحه مولکولی آزاد بوده و در تشکیل ابر الکترونی π مشارکت می‌کنند). به دلیل وجود همین جریان غیرمستقر الکترونی است که حلقه‌های آروماتیک پایداری شیمیایی خاصی را از خود نشان می‌دهند. باید ذکر کرد که ترکیبات آروماتیک حاوی تعدادی مشخصی از الکترون های π هستند. معروف‌ترین ترکیب از این دسته مولکول بنزن با فرمول مولکولی C_6H_6 و با ۶ الکترون π است. نمای شماتیک گردش الکترون ها در مولکول بنزن در شکل ۱-۱ نشان داده شده است [۲۳و۲۴]. دسته دیگر، ترکیبات آلیفاتیک هستند. هر چند این ترکیبات به صورت زنجیره‌ای یا حلقوی وجود دارند و می‌توانند حاوی پیوندهای π غیرمستقر (پیوندهای دوگانه و سه‌گانه) باشند، گردش الکترون در این ساختارها مشاهده نمی شود. از همین روست که ترکیبات آلیفاتیک پایداری خاص ترکیبات آروماتیک را ندارند و از این رو واکنش‌های شیمیایی گسترده‌تری را انجام می‌دهند. یک درشت مولکول می‌تواند دارای بخش‌های متفاوت آلیفاتیک و آروماتیک باشند. برخی از ترکیبات آلیفاتیک حلقوی (که می‌توانند شامل اتم هایی به غیر از هیدروژن و کربن نیز



شکل ۱-۲: نمای شماتیک گردش الکترون ها در مولکول بنزن.

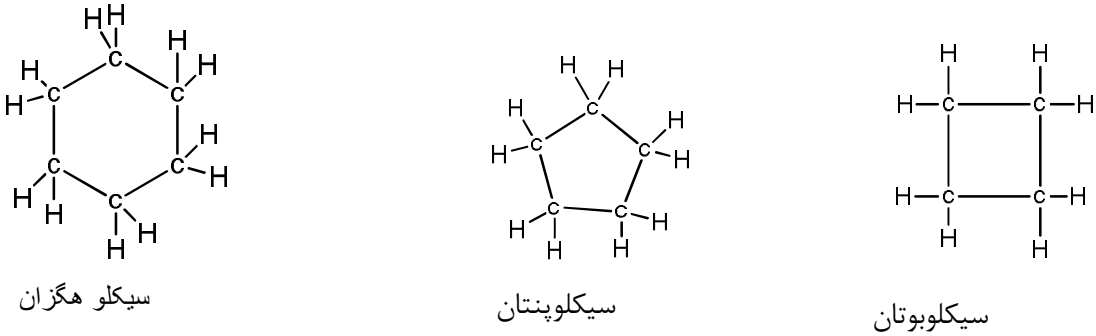
باشند) در شکل ۱-۳ آورده شده است. به طور کلی در ترکیبات حلقوی، پایدارترین حلقه‌ها شش عضوی هستند (مثل سیکلوهگزان). حلقه‌های کوچکتر معمولاً دارای فشار بوده و از این جهت ناپایدارتر است (مثل سیکلوبوتان). این ترکیبات حلقوی مسطح نیستند و در فضا ساختارهای متفاوت سه بعدی به خود می گیرند[۲۳و۲۴].

۱-۷- انواع گونه‌های کربن

ساختارهای کربنی گستره وسیعی از تنوع و کاربرد را در شیمی به خود اختصاص داده‌اند. این گستردگی به دلیل شیمی خاص اتم‌های کربن است. کربن در انواع میکروسکوپی مختلفی وجود دارد. ترکیباتی همچون گرافیت، الماس، کربن‌های بی‌شکل، فولرن، نانو الیاف کربنی، نانولوله‌های کربنی و گرافن از این دسته‌اند[۲]. در ادامه خصوصیات و شاخصه بعضی از فرم‌های مختلف کربن آورده شده است.

۱-۷-۱-گرافیت

گرافیت از یک ساختار شش وجهی با اتم‌های کربنی که در یک پیکربندی با پیوندهای هیبرید شده sp^2 منظم شده‌اند، تشکیل شده است [۲۴]. این ترتیب اتمی منجر به تشکیل صفحات لایه‌ای یا ورقه‌های گرافن با فاصله‌ی ۳/۳۵۴ آنگستروم شده است. پیوند کووالانسی قوی بین اتم‌ها در ورقه گرافن وجود دارد. بر خلاف الماس، نیروهای ضعیف واندروالس بین صفحات لایه‌ای وجود دارد تا آنها را کنار هم نگه دارد[۲۴و۲۵]. به دلیل این برهمکنش‌های ضعیف است که ورقه‌های گرافن (یک تک لایه از گرافیت) می‌توانند در سراسر هرلایه روی هم بلغزند و خصوصیت یک روان کننده خوب را به این ماده مـی‌دهد. گرافیت در دو شـکل آلفا و



شکل ۱-۳: برخی ترکیبات آلیفاتیک.

بتا وجود دارد. این دو خواص فیزیکی مشابهی دارند اما از دید ساختارهای بلوری متفاوتند.۳۰٪ گرافیت در شکل بتا تشکیل می‌شود، در حالی که انواع مصنوعی آن تنها دارای شکل آلفاست. نقطه‌ی ذوب بسیار بالای گرافیت کاربرد آن را در ساخت بوته‌ها جهت قالب‌گیری فلزها و پوشش کوره‌های الکتریکی بسیار مطلوب ساخته است. همچنین رسانایی

الکتریکی مناسب آن، استفاده از آن را در ساخت الکترودها برای فرآیندهای صنعتی، مانند کاهش آلومینیم امکان‌پذیر کرده است. همچنین می‌توان از گرافیت به صورت چند سازه‌های با قدرت بالا در پره‌های هلیکوپتر، راکت‌های تنیس، دریچه‌ی قلب مصنوعی و روان‌کننده‌ها و کندکننده‌ها در رآکتورهای هسته‌ای استفاده کرد [۲۲].

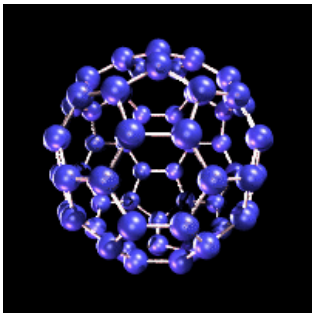
۱-۷-۲- الماس

بلور الماس مکعبی است و اتم‌های کربن در یک پیکربندی چهار وجهی با پیوندهای هیبریدی sp^3 مرتب شده‌اند [۲۳]. این پیوند قوی کووالانسی باعث شده تا الماس سخت‌ترین ماده شناخته شده، محسوب شود. به همین دلیل از جمله کاربردهای مهم تجاری الماس می‌توان به عنوان سنباده برای سایش و پرداخت فلزات و به عنوان یک پوشش برای ابزارهای برش نام برد. همچنین فیلم‌های بی‌شکل از الماس با مخلوطی از کربن‌های پیوند شده با هیبرید sp^2 و sp^3 نیز وجود دارند.

امروزه الماس‌های تجاری با کیفیتی بالا به طور مصنوعی تولید می‌شوند. این روش شامل فشردن گرافیت در دما و فشار بسیار بالاست. این فرآیند هزینه‌ی بسیاری در بردارد. از الماس‌های مصنوعی در تهیه‌ی پوشش روی ابزار برش و سایش، سوزن گرامافون در دستگاه‌های ضبط و پخش با کیفیت بالا، سندان برای ایجاد فشارهای در حد گیگا پاسکال و پوشش مقاوم در برابر خراش استفاده می‌شود[۲۲].

۱-۷-۳- فولرن

می دانیم که پیوندهای شیمیایی اتم کربن در الماس و گرافیت دو حالت الکترونی ارجح با اوربیتال‌های هیبریدی sp^2 و sp^3 دارند، که اوربیتالهای هیبریدی sp^2 در گرافیت و sp^3 در الماس یافت می‌شوند. اما مولکول‌های فولرن مخلوطی از هیبرید sp^2 و sp^3 را دارا هستند، آنها ۱۲ عدد پنج ضلعی دارند که تعداد متغیری شش ضلعی به آنها متصل شده است. زوایای شش ضلعی ها ۱۲۰ درجه و هیبرید کربن sp^2 است در حالی‌که در پنج ضلعی‌ها زوایا ۱۰۸ درجه بوده و هیبرید کربن به sp^3 بسیار نزدیک است. در فولرن



شکل ۱-۴: مولکول فولرن.

C_{20} که ساده‌ترین نوع فولرن‌ها هستند، ساختار آن تماماً از پنج ضلعی‌ها تشکیل شده است، لذا پیکربندی آن چهار وجهی و شبیه الماس است، اما باید توجه داشت برای پایدار نگه داشتن آن لازم است به هر اتم کربن یک اتم هیدروژن متصل شود در مورد C_{60} که از دوازده پنج ضلعی و ۲۰ شش ضلعی تشکیل یافته، هر یک از شصت اتم کربن آن به یک پنج ضلعی و دو شش ضلعی متصل شده است. لذا هیبرید آن sp^3 و sp^2 است. مطالعات پرتو ایکس در مورد C_{60}، وجود دو نوع پیوند C-C را نشان داده است. پیوند دوگانه C=C با طول $۳۹٫۱A^{\circ}$ و انرژی پیوندی ۶۱۲ که لبه های شش ضلعی را بهم متصل می کند و پیوندهای یگانه C-C به طول $۴۳٫۱A^{\circ}$ و انرژی ۳۴۸ که لبه‌های پنج و شش ضلعی را به هم متصل می‌کند.

۱-۷-۳-۱- تهیه فولرن‌ها

فولرن‌ها را می‌توان از تاباندن اشعه لیزر بر نمونه از گرافیت بدست آورد. همچنین هلیوم می‌تواند در ولتاژی بالا به کمک یک جرقه باعث تغییر گرافیت شود و فولرن را بوجود آورد.

محققین ژاپنی توانسته‌اند از الیاف‌های کربنی، فولرن‌ها را تهیه کنند. این الیاف‌ها درصنعت بدلیل سبکی و مقاومت ویژه‌ای که دارا هستند، کاربرد فراوانی پیدا کرده‌اند. آنها شامل یک بدنه کربنی بی‌شکل پیچیده در پوسته گرافیت هستند، که باعث مقاومت و انعطاف‌پذیری الیاف می‌شوند. یکی دیگر از راه‌های تهیه فولرن بدین ترتیب است که بنزن را می‌سوزانند و ماده‌ای بدست می‌آید که نیمی از آن فولرن و نیم دیگرش دوده معمولی است. در حال حاضر پژوهشگران روسی در بکارگیری این روش زمان‌بر، تخصص یافته‌اند. زیرا آنها تجهیزات لازم را در اختیار دارند. قبلاً پژوهشگران انسیتوی فناوری ماساچوست کشف کردند که دی‌ان‌ها به فولرن‌ها در دمای اتاق پیوند می‌خورند و با گرم شدن آنها را آزاد می‌کنند. با اختلاط مخلوط فولرن‌های دودی با سیلیکاژل محتوی دی‌ان، فولرن به دی‌ان‌ها متصل می‌شوند و دوده باقی مانده شسته می‌شود. زمانی که سیلیکاژل تا ۱۰۰ گرم شود پیوندها می‌شکنند و فولرن خالص آزاد می‌شود[۲۵].

۱-۷-۳-۲- خواص و کاربردهای فولرن‌ها

در زیر به برخی از ویژگی‌ها و کاربردهای فولرن اشاره می‌کنیم.

الف- استحکام مکانیکی و چگالی کم

فولرن‌ها مولکول‌های بیش از حد قوی هستند و تحمل فشارهای بسیار زیاد را دارند، به طوری که پس از تحمل فشاری حدود ۳۰۰۰ اتمسفر به شکل اولیه‌ی، خود برمی‌گردند و دارای چگالی کم و وزن بسیار سبک هستند. در نتیجه کاربرد آن در کامپوزیت‌های سبکتر و مقاوم تر است.

ب- خاصیت روان‌سازی بالا

مولکول‌های فولرن به وسیله پیوندهای ضعیفی که ناشی از نیروهای واندروالس بین آنهاست به هم می‌چسبند. این نیروهای نگهدارنده فولرن‌ها در کنار هم مشابه نیروهای موجود بین لایه‌های گرافیت است. بنابراین برخی از خواص فولرن‌ها مشابه خواص گرافیت است. در نتیجه کاربرد آن در خودروسازی و اتلاف حرارت اصطکاکی کمتر و در نهایت مصرف سوخت کمتر است.