بسم الله الرحمن الرحيم

دانشکده فنی و مهندسی
بخش مهندسی شیمی

پایان نامه تحصیلی برای دریافت درجه کارشناسی ارشد مهندسی شیمی
گرایش پیشرفته

مطالعه جداسازی فلزات سنگین از محلول‌های آبی درون نانولوله‌های کربنی به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

مؤلف:
سارا طلعتی

استاد راهنما:
دکتر علی محبی

استاد مشاور:
دکتر حسن هاشمی پوررفسنجانی

بهمن ماه 1393

این پایان نامه به عنوان یکی از شرایط درجه کارشناسی ارشد به

بخش مهندسی شیمی

دانشکده فنی و مهندسی

دانشگاه شهید باهنر کرمان

تسلیم شده است و هیچ گونه مدرکی به عنوان فراغت از تحصیل دوره مذبور شناخته نمی‌شود.

دانشجو: سارا طلعتی

استاد راهنما: دکتر علی محبی

استاد مشاور: دکتر حسن هاشمی پوررفسنجانی

داور اول: دکتر وحید صاحب

داور دوم: دکتر عطاالله کامیابی

نماینده تحصیلات تکمیلی در جلسه دفاع: دکتر امیر صرافی

معاونت پژوهشی و تحصیلات تکمیلی دانشکده: دکتر مرتضی زندرحیمی

حق چاپ محفوظ و مخصوص به دانشگاه شهید باهنر کرمان است.

تقدیم به:

خدایی که آفرید:

جهان را، انسان را، عقل را، علم را، معرفت را، عشق را

و به کسانی‌که عشقشان را در وجودم دمید.

تقدیم به:

خانواده عزیزم که در پس هر کلمه از این پایان‌نامه حضور دارند، چه، هر کلمه‌ای در این پایان‌نامه، نه لفظی، که پاره‌ای از ((بودن)) من بوده‌اند.

مادر مهربانم که لبانش بارگاه دعاست و شبنم نگاهش بدرقه همیشگی راهم،

پدر خوبم که وجودش سرشار از مهر و صفاست و مهربانی و محبتش مایه آرامش قلبم،

برادر و خواهران مهربانم، آنان که می‌توان به محبتشان تا ابد تکیه کرد.

تشکر و قدردانی

سپاس خداوند مهربان را که هیچ‌کس شکر او به حد کمال به جا نیاورد چرا که هر شکری که کند، آن شکر هم نعمت و احسان اوست و شکری دیگر بر او لازم آید.

سپاس ویژه از استاد راهنمای بزرگوارم جناب آقای دکتر محبی، به‌خاطر زحمات بی‌دریغ و راهنمایی‌های ارزشمندشان که الگوی فروتنی و مهربانی توأم با دانش و آگاهی‌اند.

همچنین از جناب آقای دکتر هاشمی پوررفسنجانی نیز به خاطر راهنمایی‌هایشان کمال قدردانی را دارم.

از اساتید محترم جناب آقایان دکتر صاحب و دکتر کامیابی که زحمت داوری و تصحیح این پایان‌نامه را به‌عهده گرفتند، بسیار ممنونم.

و سپاس

از آنان‌که ناتوان شدند تا به توانایی برسم

موهایشان سپید شد تا روسفید شوم

پدرم

مادرم

چکیده

بحران آب یکی از مهم‌ترین چالش‌ها در زمان حاضر بوده و آلوده‌کننده‌های گوناگون که ناشی از فعالیت‌های انسانی بوده مانند فلزات سنگین وارد منابع آبی شده و مشکل کمبود آب را تشدید می‌کنند. اکثر این آلوده‌کننده‌ها را نمی‌توان به وسیله روش‌های قدیمی تصفیه آب به‌طور مؤثر جدا نمود، بنابراین برای جداسازی آنها بایستی از تکنولوژی‌های جدید مانند فرآیند فیلتراسیون غشایی استفاده شود. نانولوله‌های کربنی به دلیل دارا بودن خواص ساختاری، فیزیکی و شیمیایی قابل تنظیم و منحصربه‌فردشان قابلیت ویژه‌ای در فرآیند تصفیه آب به‌عنوان غشا از خود نشان داده‌اند. در این مطالعه، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی توانایی غشاهای نانولوله کربنی در جداسازی سه یون فلزی سنگین Cd^{2+}، Ni^{2+} و Zn^{2+} با در نظر گرفتن مکانیزم جداسازی از نوع فرآیند اسمز معکوس، مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور نانولوله‌های کربنی از نوع دسته‌صندلی در چهار مختصات کایرالیتی (۸،۸)، (۹،۹)، (۱۰،۱۰) و (۱۱،۱۱) در نظر گرفته شد و دو جعبه به ضخامت 20 آنگستروم حاوی غلظت یک مولار از نمک‌های $ZnCl_2$، $NiCl_2$ و $CdCl_2$ در دو سمت نانولوله‌ها تحت سه اختلاف فشار هیدرواستاتیک 200 مگاپاسکال، 400 مگاپاسکال و 800 مگاپاسکال به‌طور مجزا شبیه‌سازی شدند. هر یک از سیستم‌های مورد نظر ابتدا در مدت زمان 3 نانوثانیه به تعادل رسیدند و پس از آن در مدت زمان 3 نانوثانیه‌ی دیگر تحت اعمال اختلاف فشار هیدرواستاتیک قرار گرفتند. همچنین پس از انجام شبیه‌سازی تأثیر دو عامل کایرالیتی نانولوله‌کربنی و فشار روی تعداد عبور مولکول‌های آب، یون فلز سنگین و آنیون کلرید از درون نانولوله‌های کربنی و همچنین تأثیر نوع یون فلزی سنگین در تعداد مولکول‌های آب عبوری به‌طور دقیق مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها نشان داد که افزایش کایرالیتی موجب افزایش قطر نانولوله‌ها شده و تعداد مولکول‌های آب و یون‌های عبوری نیز افزایش می‌یابد. علاوه‌بر این پارامتر فشار رابطه‌ی مستقیمی با تعداد مولکول‌های آب و یون عبوری از درون نانولوله‌کربنی دارد و بیشترین تعداد مولکول آب عبوری در حضور یون نیکل جداسازی شد. در نهایت غشاهای نانولوله‌کربنی با کایرالیتی (8،8) تحت اختلاف فشار 200 مگاپاسکال گزینه مناسب برای جداسازی یون‌های فلزات سنگین مذکور از محلول‌های آبی انتخاب شد.

کلمات کلیدی: نانولوله‌کربنی، فلزات سنگین، تصفیه آب، فیلتراسیون غشایی، فرآیند اسمز معکوس، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی.

فهرست مطالب: **صفحه**

فصل اول 1

1-1- مقدمه‌ای بر نانوتکنولوژی 2

1-1-1- تعریف نانو 3

1-1-2- تعریف نانوتکنولوژی 3

1-2- تاریخچه نانولوله‌کربن 4

1-2-1- معرفی کاربرد نانولوله‌کربنی به عنوان غشا جهت تصفیه آب 5

1-3- شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای 6

1-4- اهداف پایان‌نامه 8

فصل دوم..... 9

2-1- انواع کربن و ساختارهای آن 10

2-1-1- نانولوله‌کربن 10

2-1-2- انواع نانولوله‌کربن 11

2-1-2-1- انواع نانولوله‌کربنی تک‌دیواره 13

2-2- خواص نانولوله‌کربنی 15

2-2-1- خواص مکانیکی 16

2-2-2- خواص الکتریکی 16

2-2-3- خواص حرارتی 16

2-3- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی 17

2-4- مکانیک آماری 17

2-4-1- نمونه‌برداری از هنگردها.....17
2-4-2- هنگردهای آماری متداول 20
2-5- میدان‌های نیرو 21
2-5-1- برهمکنش پیوندی 23
2-5-1-1- پتانسیل کشش پیوندی 23
2-5-1-2- پتانسیل خمش زاویه‌ای 23
2-5-1-3- پتانسیل پیچشی 23
2-5-1-4- پتانسیل خمش خارج از صفحه 24
2-5-2- برهمکنش‌های ناپیوندی 24
2-5-2-1- برهمکنش‌های ناپیوندی الکتروستاتیکی 24
2-5-2-2- برهمکنش‌های ناپیوندی واندروالسی 25
2-6- تکنیک‌های مورد استفاده در شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای 26
2-6-1- شرط مرزی متناوب.....26
2-6-2- مرزهای نامتناوب 27
2-6-3- قطع پتانسیل و قرارداد نزدیکترین تصویر.....28
2-6-4- مشکلات مربوط به فاصله قطع و روشهای جلوگیری از آنها.....29
2-6-5- نیروهای برد بلند 30
2-7- شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی.....30
2-7-1- دینامیک نیوتنی 31
2-7-2- انتگرال‌گیری از معادلات حرکت نیوتن.....32
2-7-2-1- روش‌های تفاضل معین.....32
2-7-2-2- الگوریتم ورله 33

2-7-3- شروع و اجرای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی 34
2-7-3-1- انتخاب پیکربندی اولیه 35
2-7-3-2- سرعت‌های اولیه 35
2-7-3-3- به تعادل رساندن سیستم 35
2-7-4- دینامیک مولکولی در دما و فشار ثابت 36
2-7-4-1- دینامیک مولکولی در دمای ثابت 36
2-7-4-2- دینامیک مولکولی در فشار ثابت 37
فصل سوم 39
3-1- تاریخچه شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای 40
3-2- مروری بر برخی از پژوهش‌های انجام شده با محوریت شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غشاهای نانولوله‌کربنی و یون فلزات سنگین 41
فصل چهارم 45
4-1- نحوه‌ی بررسی قابلیت نانولوله‌های کربنی به‌عنوان غشا در جداسازی فلزات سنگین از محول‌های آبی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی 46
4-2- نرم‌افزار NAMD.....47
4-3- نرم‌افزار VMD 47
4-4- مراحل انجام شبیه‌سازی 47
4-5- آماده‌سازی فایل‌های اولیه مورد نیاز جهت انجام شبیه‌سازی.....48
4-5-1- آماده‌سازی فایل‌های PDB، PSF و Topology 48
4-5-1-1- آماده‌سازی سه فایل PDB، Topology و PSF برای تک نانولوله کربنی 49
4-5-1-2- آماده‌سازی سه فایل PDB، Topology و PSF برای مجموعه‌ای از

غشاهای نانولوله‌کربنی 50

4-5-1-3- آماده‌سازی سه فایل PDB، Topology و PSF برای جعبه آب و نمک یون فلزی سنگین در بالا و پایین غشاهای نانولوله‌کربنی 51

4-5-1-4- آماده‌سازی سه فایل PDB، Topology و PSF مورد نیاز جهت ادغام غشاهای نانولوله‌کربنی و دو جعبه آب و نمک یون فلزی سنگین در بالا و پایین غشاها 52

4-5-2- آماده‌سازی فایل میدان نیرو 54

4-5-3- فایل پیکربندی 56

4-5-3-1- نحوه‌ی تعیین اختلاف فشار اسمزی در دو طرف غشا در فایل پیکربندی56

4-6- اجرای فرآیند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار NAMD 58

فصل پنجم 60

5-1- آماده‌سازی و ساخت فایل‌های مورد نیاز جهت انجام شبیه‌سازی دینامیک مولکولی 61

5-2- انجام فرآیند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و به تعادل رساندن سیستم‌ها 65

5-2-1- بررسی به تعادل رسیدن سیستم از طریق بررسی نمودار دما بر حسب گام زمانی 66

5-2-2- بررسی به تعادل رسیدن سیستم از طریق بررسی نمودار انرژی بر حسب گام زمانی 66

5-2-3- بررسی به تعادل رسیدن سیستم از طریق بررسی پارامتر RMSD 68

5-3- اعمال اختلاف فشار هیدرواستاتیک به سیستم‌ها و بررسی تعداد عبور یون‌های کاتیون فلزات سنگین،آنیون کلرید و مولکول‌های آب از درون نانولوله‌کربنی 70

5-3-1- بررسی تعداد مولکول‌های آب و یون‌های کاتیون Zn^{2+} و آنیون Cl^{-} عبوری از درون نانولوله‌های کربنی.....71

5-3-1-1- بررسی تأثیر کایرالیتی روی تعداد مولکول‌های آب، یون‌های روی و کلرید عبوری از درون نانولوله‌ها 72

5-3-1-2- بررسی تأثیر پارامتر فشار روی تعداد مولکول‌های آب، یون‌های روی و کلرید عبوری از درون نانولوله‌ها 74

5-3-2- بررسی تعداد مولکول‌های آب و یون‌های کاتیون Ni^{2+} و آنیون Cl^- عبوری از درون نانولوله‌های کربنی.....76

5-3-2-1- بررسی تأثیر کایرالیتی روی تعداد مولکول‌های آب، یون‌های نیکل و کلرید عبوری از درون نانولوله‌ها 77

5-3-2-2- بررسی تأثیر پارامتر فشار روی تعداد مولکول‌های آب، یون‌های نیکل و کلرید عبوری از درون نانولوله‌ها 79

5-3-3- بررسی تعداد مولکول‌های آب و یون‌های کاتیون Cd^{2+} و آنیون Cl^- عبوری از درون نانولوله‌های کربنی.....81

5-3-3-1- بررسی تأثیر کایرالیتی روی تعداد مولکول‌های آب، یون‌های کادمیوم و کلرید عبوری از درون نانولوله‌ها 82

5-3-3-2- بررسی تأثیر پارامتر فشار روی تعداد مولکول‌های آب، یون‌های کادمیوم و کلرید عبوری از درون نانولوله‌ها 84

5-3-4- بررسی تأثیر نوع یون فلزی سنگین Zn^{2+}، Ni^{2+} و Cd^{2+} در تعداد مولکول‌های آب عبوری از درون نانولوله‌کربنی در کایرالیتی و فشارهای مختلف 86

5-3-4-1- بررسی تأثیر نوع یون فلزی سنگین Zn^{2+}، Ni^{2+} و Cd^{2+} در تعداد مولکول های آب عبوری از درون نانولوله‌کربنی در کایرالیتی‌های مختلف تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 200 مگاپاسکال 86

5-3-4-2- بررسی تأثیر نوع یون فلزی سنگین Zn^{2+}، Ni^{2+} و Cd^{2+} در تعداد مولکول های آب عبوری از درون نانولوله‌کربنی در کایرالیتی‌های مختلف تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 400 مگاپاسکال 88

5-3-4-3- بررسی تأثیر نوع یون فلزی سنگین Zn^{2+}، Ni^{2+}و Cd^{2+} در تعداد مولکول های آب عبوری از درون نانولوله‌کربنی در کایرالیتی‌های مختلف تحت اختلاف

فشار هیدرواستاتیک 800 مگاپاسکال 90
5-4- بررسی اعتبارسنجی نتایج به دست آمده در این مطالعه با پژوهش‌های مشابه 91
فصل ششم.....93
6-1- نتیجه‌گیری 94
6-2- پیشنهادات.....96
مراجع 97
مقالـــه.....101

فهرست اشکال: **صفحه**

شکل(2-1): هیبریداسیون اتم‌های کربن در ساختار الماس، گرافیت، نانولوله‌کربنی و فولرین 11
شکل(2-2): شکل گیری نانولوله کربنی از صفحات گرافن 12
شکل(2-3): انواع نانولوله‌های کربنی 13
شکل(2-4): انواع نانولوله‌های کربنی بر اساس نحوه پیچیده شدن صفحات گرافن 14
شکل(2-5): انواع مختلف نانولوله‌های کربن 15
شکل(2-6): شمایی از فضای فاز یک سیستم غیر ارگودیک. شش ضلعی‌ها از نقاط فازی (p,q) را نشان می‌دهند. در یک سیستم ارگودیک، تمام مسیرها باید بخش‌هایی از یک مسیر طولانی باشند. نقاط بزرگ مسیرهای دیواره‌وار و یک ناحیه مرزی که منجر به ایجاد گلوگاه‌ها می‌شود به صورت سایه‌دار نشان داده شده است 19
شکل(2-7): نمایش اصلی میدان‌های نیروی مکانیک مولکولی 22
شکل(2-8): پتانسیل لنارد-جونز 26
شکل(2-9): شرایط مرزی تناوبی در دو بعد 27
شکل(2-10): قرارداد نزدیک‌ترین تصویر در دو بعد 29
شکل(4-1): نانولوله‌کربنی تک‌دیواره از نوع دسته‌صندلی.....50
شکل(4-2): ساختار غشاهای نانولوله‌کربنی 51
شکل(4-3): جعبه شبیه‌سازی شده حاوی مولکولهای آب و یونهای فلز سنگین و کلرید 52
شکل(4-4): ساختار نهایی حاصل از ادغام ساختار غشاهای نانولوله‌کربنی و جعبه‌ی بالا حاوی آب و نمک یون فلز سنگین 53
شکل(4-5): ساختار نهایی غشاهای نانولوله‌کربنی شامل مولکولهای آب و یون فلزی سنگین در بالا و پایین نانولوله‌ها 54
شکل(4-6): نحوهی ایجاد اختلاف فشار در دو سمت غشاهای نانولوله‌کربنی 57
شکل(5-1): روند رشد قطر نانولوله‌کربنی با افزایش مختصات کایرالیتی. 62
شکل(5-2): افزایش تعداد اتم‌های کربن موجود در ساختار نانولوله با زیاد شدن مقدار کایرالیتی. ..63
شکل(5-3): افزایش تعداد اتم‌های کربن در مجموعه چهار غشای نانولوله‌کربنی با ازدیاد کابرالیتی نانولوله‌ها. 64

شکل(5-4): روند افزایش سطح عبور مولکول‌ها و یون‌ها از دهانه ورودی نانولوله‌کربنی نسبت به افزایش مختصات کایرالیتی. 65
شکل(5-5): ثابت ماندن دما بر حسب گام زمانی. 66
شکل(5-6): به تعادل رسیدن سیستم با کاهش انرژی پتانسیل. 67
شکل(5-7): نمودار انرژی پتانسیل در 1500 گام زمانی اولیه شبیه‌سازی. 68
شکل(5-8): ثابت ماندن RMSD در طول شبیه‌سازی. 69
شکل(5-9): نمایی از سیستم قبل از رسیدن به تعادل.....69
شکل(5-10): نمایی از سیستم بعد از رسیدن به تعادل. 70
شکل(5-11): تأثیر افزایش کایرالیتی نانولوله‌کربنی روی تعداد مولکول‌های آب و یون‌های روی و کلرید عبوری در فشار 400 مگاپاسکال در مدت زمان 3 نانوثانیه. 73
شکل(5-12): تأثیر افزایش کایرالیتی نانولوله‌کربنی روی تعداد مولکول‌های آب و یون‌های روی و کلرید عبوری در فشار 800 مگاپاسکال در مدت زمان 3 نانوثانیه. 73
شکل(5-13): تأثیر اختلاف فشار هیدرواستاتیک روی تعداد عبور در مختصات کایرالیتی (9،9) در مدت زمان 3 نانوثانیه.....75
شکل(5-14): تأثیر اختلاف فشار هیدرواستاتیک روی تعداد عبور در مختصات کایرالیتی (10،10) در مدت زمان 3 نانوثانیه.....75
شکل(5-15): تأثیر افزایش کایرالیتی نانولوله‌کربنی روی تعداد مولکول‌های آب و یون‌های نیکل و کلرید عبوری در فشار 400 مگاپاسکال در مدت زمان 3 نانوثانیه. 78
شکل(5-16): تأثیر افزایش کایرالیتی نانولوله‌کربنی روی تعداد مولکول‌های آب و یون‌های نیکل و کلرید عبوری در فشار 800 مگاپاسکال در مدت زمان 3 نانوثانیه. 78
شکل(5-17): تأثیر اختلاف فشار هیدرواستاتیک روی تعداد عبور در کایرالیتی (9،9) در مدت زمان 3 نانوثانیه.....80
شکل(5-18): تأثیر اختلاف فشار هیدرواستاتیک روی تعداد عبور در کایرالیتی (10،10) در مدت زمان 3 نانوثانیه. 80
شکل(5-19): تأثیر افزایش کایرالیتی نانولوله‌کربنی روی تعداد مولکول‌های آب و یون‌های کادمیوم و کلرید عبوری در فشار 400 مگاپاسکال در مدت زمان 3 نانوثانیه. 83

شکل(5-20): تأثیر افزایش کایرالیتی نانولوله کربنی روی تعداد مولکول‌های آب و یون‌های کادمیوم و کلرید عبوری در فشار 800 مگاپاسکال در مدت زمان 3 نانوثانیه. 83
شکل(5-21): تأثیر اختلاف فشار هیدرواستاتیک روی تعداد عبور در کایرالیتی (9،9) در مدت زمان 3 نانوثانیه.....85
شکل(5-22): تأثیر اختلاف فشار هیدرواستاتیک روی تعداد عبور در کایرالیتی (10،10) در مدت زمان 3 نانوثانیه. 85
شکل(5-23): مقایسه تعداد مولکول‌های آب عبوری در حضور یون‌های مختلف فلزی سنگین در کایرالیتی (8،8) تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 200 مگاپاسکال در مدت زمان 3 نانوثانیه.....87
شکل(5-24): مقایسه تعداد مولکول‌های آب عبوری در حضور یون‌های مختلف فلزی سنگین در کایرالیتی (9،9) تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 200 مگاپاسکال در مدت زمان 3 نانوثانیه.....87
شکل(5-25): مقایسه تعداد مولکول‌های آب عبوری در حضور یون‌های مختلف فلزی سنگین در کایرالیتی (8،8) تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 400 مگاپاسکال در مدت زمان 3 نانوثانیه.....89
شکل(5-26): مقایسه تعداد مولکول‌های آب عبوری در حضور یون‌های مختلف فلزی سنگین در کایرالیتی (9،9) تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 400 مگاپاسکال در مدت زمان 3 نانوثانیه..... 89

فهرست جداول: **صفحه**

جدول (4-1): مقادیر نیرو و اختلاف فشار تحمیلی معادل مورد استفاده در تحقیق 59
جدول(5-1): نتایج حاصل از ساخت فایل‌های PDB و PSF تک نانولوله‌ی کربنی دسته‌صندلی. 62
جدول(5-2): نتایج حاصل از ساخت فایل‌های PDB و PSF مجموعه چهارغشای نانولوله کربنی.....63
جدول(5-3): تعداد مولکول‌های آب و یون‌های Zn^{2+} و Cl^{-} عبوری از درون غشاهای نانولوله کربنی در مدت زمان 3 نانوثانیه تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 200 مگاپاسکال. 71
جدول(5-4): تعداد مولکول‌های آب و یون‌های Zn^{2+} و Cl^{-} عبوری از درون غشاهای نانولوله کربنی در مدت زمان 3 نانوثانیه تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 400 مگاپاسکال. 71
جدول(5-5): تعداد مولکول‌های آب و یون‌های Zn^{2+} و Cl^{-} عبوری از درون غشاهای نانولوله کربنی در مدت زمان 3 نانوثانیه تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 800 مگاپاسکال. 72
جدول(5-6): تعداد مولکول‌های آب و یون‌های Ni^{2+} و Cl^{-} عبوری از درون غشاهای نانولوله کربنی در مدت زمان 3 نانوثانیه تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 200 مگاپاسکال. 76
جدول(5-7): تعداد مولکول‌های آب و یون‌های Ni^{2+} و Cl^{-} عبوری از درون غشاهای نانولوله کربنی در مدت زمان 3 نانوثانیه تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 400 مگاپاسکال. 76
جدول(5-8): تعداد مولکول‌های آب و یون‌های Ni^{2+} و Cl^{-} عبوری از درون غشاهای نانولوله کربنی در مدت زمان 3 نانوثانیه تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 800 مگاپاسکال. 77
جدول(5-9): تعداد مولکول‌های آب و یون‌های Cd^{2+} و Cl^{-} عبوری از درون غشاهای نانولوله کربنی در مدت زمان 3 نانوثانیه تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 200 مگاپاسکال. 81
جدول(5-10): تعداد مولکول‌های آب و یون‌های Cd^{2+}و Cl^{-} عبوری از درون غشاهای نانولوله کربنی در مدت زمان 3 نانوثانیه تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 400 مگاپاسکال. 81
جدول(5-11): تعداد مولکول‌های آب و یون‌های Cd^{2+} و Cl^{-} عبوری از درون غشاهای نانولوله کربنی در مدت زمان 3 نانوثانیه تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 800 مگاپاسکال. 82
جدول(5-12): تعداد مولکول‌های آب و یون‌های Mg^{2+} و Li^{+} عبوری از درون غشاهای نانولوله کربنی در مدت زمان 10 نانوثانیه تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 100 مگاپاسکال..... 91
جدول(5-13): تعداد مولکول‌های آب و یون‌های Mg^{2+} و Li^{+} عبوری از درون غشاهای نانولوله کربنی در مدت زمان 10 نانوثانیه تحت اختلاف فشار هیدرواستاتیک 200 مگاپاسکال 91

فصل اول

مقدمه

1-1-مقدمه‌ای بر نانوتکنولوژی

ریچارد فینمن[1] برنده جایزه نوبل فیزیک در سال 1965 ویکی از مشهورترین فیزیکدان‌های دهه 60 میلادی که ملقب به پدر علم نانوتکنولوژی است، در سال 1960 در همایش جامعه فیزیک آمریکا طی یک سخنرانی، پیش بینی انقلابی و جذاب را بیان نمود. وی بیان کرد فضای زیادی در پایین وجود دارد[2]. وی در آن سخنرانی این نکته را مطرح ساخت که اصول علم فیزیک چیزی جز امکان ساختن اتم به اتم اشیا بیان نمی‌کنند. فینمن همچنین خطوط حکاکی شده‌ای روی یک سطح را فرض نمود که عرضی به اندازه چند اتم داشتند و تصور کرد که می‌توان این خطوط را به وسیله تابش پرتوهای الکترونی به یک ماده زیر لایه[3] تبدیل نمود. این بحث، پایه و اساس تولید تراشه‌های سیلیکونی[4] امروزی است. وی پیشنهاد کرد که می‌توان اتم‌های مجزا را دستکاری کرد و مواد و ساختارهای کوچکی را تولید نمود که خواص متفاوتی دارند. گرچه پیش بینی‌های فینمن در بین دانشمندان هم‌دوره‌اش از پذیرش خوبی برخوردار نشد، ولی این پیش بینی‌ها امروزه به حقیقت پیوسته است[1].

در دهه 50 و 60 میلادی فعالیت‌های زیادی روی ذرات فلزی کوچک در حال انجام بود. در آن زمان این فعالیت‌ها را نانو تکنولوژی نمی‌نامیدند. تولید سیلیکون متخلخل[5] در سال 1965 و یا کار روی تولید ذرات نانومتری (نانوذرات[6]) فلزات قلیایی به وسیله تبخیر فلز سدیم و پتاسیم و چگالش سریع آنها، از جمله این فعالیت‌ها بود. سیال‌های مغناطیسی[7] نیز در دهه 60 توسعه یافتند. این مواد شامل نانوذرات مغناطیسی هستند که در یک مایع توزیع شده‌اند[2].

اخیراً در عملیات باستان‌شناسی کشف شده که برخی از سرامیک‌های لعاب‌دار دوره خلفای عباسی دارای طرحی بسیار پیچیده هستند و چندین رنگ و تلالؤ رنگین کمانی را از خود نشان می دهند. تعدادی از این کاشی‌ها در برخی مساجد کشور تونس به کار برده شده است. وقتی نور سفید به این سرامیک‌ها برخورد می‌کند، بسته به زاویه تابش رنگ لعاب عوض می‌شود. این جلوه، از کنار هم قرار گرفتن تناوبی نانو ذرات که هر ذره خواص نوری منحصر به فردی دارد، به وجود می‌آید[2].

1- Richard Feynman
2- There is a plenty of room at the bottom
3- Substrate
4- Silicon Chips
5- Porous Silicon
6- Nanoparticles
7- Ferrofluids

1-1-1- تعریف نانو

پیشوند نانو در اصل یک کلمه یونانی است. معادل لاتین این کلمه به معنی کوتوله و قد کوتاه است. این پیشوند در علم مقیاس‌ها به معنی یک میلیاردم است. بنابراین یک نانومتر، یک میلیاردم متر است. این مقیاس را با ذکر مثال‌هایی عینی، بهتر می‌توان حس کرد. یک تار موی انسان به طور متوسط قطری حدود 50000 نانومتر دارد. یک سلول باکتری، قطری معادل چند صد نانومتر دارد. کوچکترین اشیای قابل دید توسط چشم غیر مسلح اندازه‌ای حدود 10000 نانومتر دارند. فقط حدود 10 اتم هیدروژن در یک خط، یک نانومتر را می‌سازند[3].

1-1-2- تعریف نانوتکنولوژی

به بیان ساده علم نانو مطالعه اصول اولیه مولکول‌ها و ساختاری با ابعاد بین 1 تا 100 نانومتر است. این ساختارها را نانوساختار می‌نامند. نانوتکنولوژی، کاربرد این ساختارها در دستگاه‌های با اندازه نانومتری است.

تعریف دیگری که می‌توان از نانوتکنولوژی ارائه نمود این است که نانوتکنولوژی شکل جدیدی از ساخت مواد به وسیله کنترل و دستکاری واحدهای ساختمانی[1] آنها در مقیاس نانو می‌باشد. می‌توان گفت نانوتکنولوژی تولید کارآمد مواد و دستگاه‌ها و سیستم‌ها با کنترل ماده در مقیاس طولی نانومتر و بهره‌برداری از خواص و پدیده‌های نوظهوری است که در مقیاس نانو توسعه یافته‌اند.

یکی از ویژگی‌های مهم نانوتکنولوژی جنبه چندرشته‌ای آن است. مفهوم چندرشته‌ای در نانو تکنولوژی بدان معناست که نیروی کاری نانوتکنولوژی باید دارای بینش وسیعی از مفاهیم زیست شناسی، فیزیک، شیمی، اصول مهندسی طراحی، کنترل فرآیند و محصولات باشد. برای درک مفاهیم پایه‌ای و تدوین قوانین در مقیاس نانو تقریباً به تمامی علوم نیاز است. به‌عنوان مثال، علم زیست شناسی به دودلیل مورد نیاز است: اول آن‌که محصولات نانوتکنولوژی، به شدت از سیستم‌های زیستی تبعیت می‌کنند؛ و دوم این‌که محصولات نانو کاربرد چشمگیری در زیست پزشکی دارند. علم فیزیک مورد نیاز است، زیرا دنیای نانو دنیای توابع موج، تونل‌زنی کوانتومی و کشف نیروهای اتمی ناشناخته است. علم شیمی مورد نیاز است، زیرا روش‌های پیوند مولکول‌ها با همدیگر و چگونگی ترکیب مواد را به ما می‌آموزد. به اصول مهندسی نیز نیاز است تا بتوان قابلیت تولید و حیات اقتصادی را تضمین نمود. اصل

1- Building Blocks

چند رشته‌ای بودن نانوتکنولوژی بیانگر این حقیقت است که این علم، رشته جدیدی نیست بلکه رویکردی جدید در تمام رشته‌هاست و تمام عرصه‌های مختلف علم و فناوری را در برمی‌گیرد[4].

1-2- تاریخچه نانولوله کربن

عصر حاضر را شاید بتوان عصر کربن نام نهاد زیرا این ماده کاربرد وسیعی در صنایع مختلف پیدا کرده است. در این بین، نانولوله کربن[1] و فلورن[2]، توجه دانشمندان را بیشتر از دیگر شکل‌های کربن به خود جلب کرده‌اند. اگرچه مدت زیادی از کشف نانولوله‌های کربن و فلورن نمی‌گذرد ولی تحقیقات وسیعی در زمینه شناسایی، ساخت و بکارگیری آنها در صنایع مختلف انجام شده و پیشرفت‌های زیادی نیز در این رابطه صورت گرفته است[5].

تا سال 1980 تنها چهار نوع کربن شناخته شده بود: الماس، گرافیت، لانسدیلایت[3] و کربن بدون شکل یا آمورف. کشف فلورن ها نیز مانند بسیاری دیگر از اکتشافات به صورت اتفاقی رخ داده است. در حالی‌که قبل از کشف فلورن‌ها توافق کلی بر روی ناپایداری اتم‌های کربن وجود داشت دانشمندان روسی با استفاده از محاسبات نشان داده بودند که مولکول فلورن در حالت گازی می‌تواند پایدار باشد.

در سال 1985 کروتو[4] و اسمالی[5] در حین اسپکتروسکوپی نمونه‌های بخار کربن به نتایج جالبی دست یافتند. در اینجا بود که فلورن‌ها کشف شدند و پایداری آن‌ها در فاز گازی نیز به صورت عملی اثبات گشت. البته شواهدی نیز وجود دارد که برای اولین بار در دهه 70 فیبرهای کربن با ابعاد نانومتری توسط میرینوبو اندو[6] به‌عنوان بخشی از پروژه دکترای وی در دانشگاه اورلان[7] واقع در فرانسه ساخته شده است. وی فیبرهایی به قطر 7 نانومتر را با استفاده از تکنیک رشد بخار تهیه نمود اما به‌دلیل ناشناخته بودن، این فیبرها به عنوان نانو لوله شناخته نشدند و به صورت سیستماتیک نیز مورد مطالعه قرار نگرفتند[5].

1- Carbon Nanotube
2- Fullerene
3- Lonsdaleite
4- Kroto
5- Smalley
6- Mirinobu Endo
7- Orlean