بسم الله الرحمن الرحیم

باسمه تعالی

مدیریت تحصیلاتت کمیلی

تعهدنامه اصالت اثر

اینجانب الهام ضرورتی معتهد میشوم که مطالب مندرج دراین پایان نامه حاصل کارپژوهشی اینجانب است ودستاوردهای پژوهشی دیگران که دراین پژوهش از آنها استفاده شده است، مطابق مقررات ارجاع و در فهرست منابع و مأخذ ذکر گردیده است. این پایان نامه /رساله قبلاً برای احراز هیچ مدرک همسطح یا بالاتر ارایه نشده است.درصورت اثبات تخلف (درهرزمان) مدرک تحصیلی صادرشده توسط دانشگاه از اعتبار ساقط خواهد شد.

کلیه حقوق مادی و معنوی این اثر متعلق به دانشگاه تربیت دبیر شهیدرجایی میباشد.

الهام ضرورتی

امضاء

تهران- لویزان- کدپستی:۱۶۷۸۸- صندوق پستی ۱۶۳-۱۶۷۸۵تلفن: ۹- ۲۲۹۷۰۰۶۰- نمابر ۲۲۹۷۰۰۱۱ پست الکترونیکی sru@sru.ac.ir

دانشکده علوم پایه

مطالعه جذب برخی مولکول‌ها برروی ساختارهای فولرن‌مانند کربن سیلیس

نگارش

الهام ضرورتی

استاد راهنما: دکتر جواد بهشتیان

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته شیمی فیزیک

دی۱۳۹۱

تقدیم به:

زیباترین و مهربانترین وجود هستی، **مادر**

به شکوه دستانش، نگاه همیشه منتظرش...

و به:

فداکارترین صبور هستی، **پدر**

به ترنم بودنش و...

و همه ی پویندگان راه علم و دانش...

حمد و ستایش پروردگار مهربان را که همواره سایه ی لطف و رحمتش همراه و یاور من بوده است.

با سپاس و تشکر از استاد ارجمندم جناب آقای دکتر بهشتیان که راهنمایی های ارزشمند و لطف بی دریغشان همواره راه گشای من در انجام این پروژه بوده است.

از اساتید بزرگوار جناب آقای دکتر میرزایی و جناب آقای دکتر هاشمیان زاده که زحمت مطالعه و داوری این اثر را بر عهده داشتند، سپاسگزارم.

و تشکر از همه ی دوستان خوب و مهربانم.

چکیده

در سالیان اخیر، ساختارهایی همچون نانولوله‌ها، ساختارهای فولرن‌مانند، گرافن و... توجهات بسیاری را به خود جلب کرده است. یکی از مسائل مطرح برای این مواد، شناسایی ویژگی‌های حسگری و جاذب آن‌ها به منظور کاربرد در ابزارهای نانو است. از این رو هدف اصلی این پایان نامه مطالعه‌ی دو ساختار فولرن-مانندکربن سیلیس$Si_{16}C_{16}$ و $Si_{24}C_{24}$ انتخاب گردید. به همین منظور با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) ماهیت جذب شیمیایی و فیزیکی مولکول‌هایی نظیر آب، آمونیاک، هیدروژن وکربن منوکسید بر روی ساختارهای $Si_{16}C_{16}$ و$Si_{24}C_{24}$ بررسی شده است. همچنین برهم‌کنش عناصر و کاتیون‌های گروه‌های یک و دو اصلی جدول تناوبی با دو ساختار$Si_{16}C_{16}$ و$Si_{24}C_{24}$ مورد بررسی قرار گرفت. در نهایت به این نتیجه رسیدیم که ساختارهای $Si_{16}C_{16}$ و$Si_{24}C_{24}$ حسگر مناسبی برای مولکول کربن منوکسید می‌باشند.

کلید واژه‌ها: فولرن‌مانند کربن سیلیس، جذب فیزیکی، جذب شیمیایی، نظریه تابعیت چگالی، کربن منوکسید

فهرست مطالب

فصل اول: فولرن‌ها

۱-۱ نانو فناوری ۲
۱-۲ فولرن‌ها ۴
۱-۳ واکنش‌های فولرن‌ها ۵
۱-۴ خواص و کاربرد فولرن ها ۵
۱-۴-۱ استحکام مکانیکی، به عنوان تقویت‌کننده در نانوکامپوزیت‌ها ۵
۱-۴-۲ خاصیت روان‌سازی بالا، روان‌کاری در مقیاس نانومتری ۶
۱-۴-۳ حساس در برابر نور، کاربردهای فوتونیک ۶
۱-۴-۴ ساختار توخالی، مکانی برای قرارگیری عناصر ۶
۱-۴-۵ خواص زیست‌سازگاری، دارورسانی ۶
۱-۵ فولرن‌های کربن سیلیس ۶

فصل دوم:روش‌های محاسباتی

۲-۱مقدمه ۱۱
۲-۲تقریب‌های معادله شرودینگر ۱۱
۲-۲- ۱مکانیک غیرنسبیتی ۱۱
۲-۲-۲ تقریب بورن –اپن‌هایمر ۱۲
۲-۳ روش‌های محاسباتی وابسته به مکانیک کوانتوم ۱۳
۲-۳-۱ روش‌های نیمه تجربی ۱۳
۲-۳-۲ روش ab-initio ۱۴
۲-۳-۲-۱ طبقه بندی روش‌ها ی ab-initio ۱۴
۲-۳-۳ نظریه تابعیت چگالی ۱۶
۲-۳-۳-۱ اساس نظریه تابعیت چگالی ۱۶
۲-۳-۳-۲ نظریه هوهنبرگ – کوهن ۱۷
۲-۳-۳-۳ مزایا ۱۹
۲-۳-۳-۴ معایب ۲۰
۲-۴ مجموعه پایه ۲۰
۲-۴-۱توابع پایه ۲۰
۲-۴-۲ طبقه بندی مجموعه‌های پایه` ۲۱
۲-۴-۲-۱ مجموعه پایه حداقل(مینیمم) ۲۱
۲-۴-۲-۲ مجموعه پایه ظرفیتی شکافته ۲۲

۲-۴-۲-۳ مجموعه پایه نفوذی ۲۳
۲-۴-۲-۴ مجموعه پایه قطبیده ۲۴
۲ -۶ آشنایی با Gaussian ۲۵
۲-۶-۱ انرژی ۲۵
۲-۶-۲ گرادیانها و بهینه سازی ساختارها ۲۶
۲-۶-۳ فرکانس و مشتقات دوم ۲۶
۲-۶-۴ خواص مولکولی ۲۶
فصل سوم: برهم‌کنش اتم‌هاو مولکول‌ها در درونساختارفولرن‌مانند سیلیسیم‌کربید
۳-۱ مقدمه ۲۸
۳-۲ بهینه‌سازی ساختارهای$Si_{16}C_{16}$ و $Si_{24}C_{24}$ ۲۸
۳-۳ برهم‌کنش عناصر درون ساختارهای$Si_{16}C_{16}$ و $Si_{24}C_{24}$ ۳۰
۳-۳-۱کلیات محاسبات ۳۱
۳-۳-۲ برهم‌کنش عناصر گروه I (به صورت اتمی) با ساختار$Si_{16}C_{16}$ ۳۲
۳-۳-۲-۱بحث و نتیجه‌گیری ۳۲
۳-۳-۳ برهم‌کنش عناصر گروه I (به صورت کاتیونی) با ساختار$Si_{16}C_{16}$ ۳۵
۳-۳-۳-۱بحث و نتیجه‌گیری ۳۶
۳-۳-۴ برهم‌کنش عناصر گروه II (به صورت اتمی) با ساختار$Si_{16}C_{16}$ ۳۸
۳-۳-۴-۱بحث و نتیجه‌گیری ۳۹
۳-۳-۵ برهم‌کنش عناصر گروه II (به صورت کاتیونی) با ساختار$Si_{16}C_{16}$ ۴۱
۳-۳-۵-۱بحث و نتیجه‌گیری ۴۱
۳-۳-۶ برهم‌کنش عناصر گروه I (به صورت اتمی) درون ساختار$Si_{24}C_{24}$ ۴۴
۳-۳-۶-۱بحث و نتیجه‌گیری ۴۴
۳-۳-۷ برهم‌کنش عناصر گروه I (به صورت کاتیونی) درون ساختار$Si_{24}C_{24}$ ۴۷
۳-۳-۷-۱بحث و نتیجه‌گیری ۴۷
۳-۳-۸ برهم‌کنش عناصر گروه II (به صورت اتمی) درون ساختار$Si_{24}C_{24}$ ۵۰
۳-۳-۸-۱بحث و نتیجه‌گیری ۵۰
۳-۳-۹ برهم‌کنش عناصر گروه II (به صورت کاتیونی) با ساختار$Si_{24}C_{24}$ ۵۲
۳-۳-۹-۱بحث و نتیجه‌گیری ۵۳
۳-۴ برهم‌کنش مولکول‌ها با ساختارهای$Si_{16}C_{16}$ و $Si_{24}C_{24}$ ۵۵

۳-۴-۱ برهم‌کنش مولکول آب با ساختار$Si_{16}C_{16}$ و $Si_{24}C_{24}$ ۵۶
۳-۴-۲ برهم‌کنش مولکول آمونیاک با ساختار$Si_{16}C_{16}$ و $Si_{24}C_{24}$ ۵۷
۳-۴-۲-۱ شرح محاسبات ۵۷

فصل چهارم: برهم‌کنش برخی مولکول‌ها برروی ساختارهای سیلیسیم کربید

۴-۱جذب سطحی ۶۱
۴-۱-۱جاذب‌ها ۶۱
۴-۱-۲ انواع جذب سطحی ۶۲
۴-۲ حسگر ۶۲
۴-۳ جذب مولکول هیدروژن بر روی ساختار $Si_{16}C_{16}$ و $Si_{24}C_{24}$ ۶۳
۴-۳-۱ مقدمه ۶۳
۴-۳-۱-۱شرح محاسبات ۶۳
۴-۳-۲ جذب مولکول هیدروژن بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$ ۶۴
۴-۳-۲-۱ بحث و نتیجه‌گیری ۶۴
۴-۳-۳ جذب مولکول هیدروژن بر روی ساختار$Si_{24}C_{24}$ ۶۵
۴-۳-۳-۱ بحث و نتیجه‌گیری ۶۵
۴-۴ جذب مولکول آب بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$ و $Si_{24}C_{24}$ ۶۵
۴-۴-۱مقدمه ۶۷
۴-۴-۱-۱ شرح محاسبات ۶۷
۴-۴-۲ جذب مولکول آب بر روی ساختار $Si_{16}C_{16}$ ۶۷
۴-۴-۲-۱ بحث و نتیجه‌گیری ۶۸
۴-۴-۳ جذب مولکول آب بر روی ساختار $Si_{24}C_{24}$ ۷۰
۴-۴-۳-۱ بحث و نتیجه‌گیری ۷۰
۴-۵ جذب مولکول آمونیاک بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$و$Si_{24}C_{24}$ ۷۲
۴-۵-۱ مقدمه ۷۲
۴-۵-۱-۱شرح محاسبات ۷۲
۴-۵-۲ جذب آمونیاک بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$ ۷۳
۴-۵-۲-۱ بحث و نتیجه‌گیری ۷۳
۴-۵-۳ جذب آمونیاک بر روی ساختار $Si_{24}C_{24}$ ۷۵
۴-۵-۳-۱ بحث و نتیجه‌گیری ۷۵
۴-۶ جذب مولکول کربن مونوکسید بر روی ساختار $Si_{16}C_{16}$و $Si_{24}C_{24}$ ۷۷
۴-۶-۱ مقدمه ۷۷
۴-۶-۱-۱شرح محاسبات ۷۷

۴-۶-۲ جذب کربن مونوکسید بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$ ۷۸
۴-۶-۲-۱ بحث و نتیجه‌گیری ۷۸
۴-۶-۳ جذب کربن مونوکسید بر روی ساختار$Si_{24}C_{24}$ ۸۰
۴-۶-۳-۱ بحث و نتیجه‌گیری ۸۰

فصل پنجم: جذب برخی مولکول‌ها بر روی ساختار اندوفولرن مانند سیلیسیم کربید

۵-۱ مقدمه ۸۴
۵-۲ جذب مولکول هیدروژن بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$-Li ۸۴
۵-۲-۱ بحث و نتیجه‌گیری ۸۴
۵-۳ جذب مولکول آب بر روی ساختار $Si_{16}C_{16}$-Li ۸۶
۵-۳-۱ بحث و نتیجه‌گیری ۸۶
۵-۴ جذب مولکول آمونیاک بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$-Li ۸۷
۵-۴-۱ بحث و نتیجه‌گیری ۸۷
۵-۶ جذب مولکول‌های H_2 ,NH_3 ,H_2O برروی ساختار $Si_{16}C_{16}$-K ۸۹
پیشنهادات ۹۱
منابع ۹۲

فهرست جداول

جدول ۱-۱ مشخصات ساختاری دو ساختار$Si_{16}C_{16}$و $Si_{24}C_{24}$ ۹

جدول ۲-۱ روش‌های نظریه تابعیت چگالی ۱۹

جدول۳-۱ داده‌های هندسی ساختارهای مختلف، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۳۰

جدول ۳-۲ داده‌های انرژی (a.u)، سطوح انرژی (eV)، گشتاور دوقطبیکل و بار کل ساختار ۳۰

جدول ۳-۳ بار و چندگانگی به کار برده شده برای بهینه سازی ساختارها ۳۲

جدول ۳-۴ داده‌های هندسی ساختارهای مختلف، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۳۴

جدول ۳- ۵ داده‌های انرژی برهم‌کنش(ev)، سطوح انرژی(ev) وگشتاورهای دوقطبی کل و مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{16}C_{16}$به اتم ها(Q) ۳۴

جدول ۳-۶ داده‌های هندسی ساختارهای مختلف، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۳۷

جدول ۳-۷ داده‌های انرژی برهم‌کنش(ev)، سطوح انرژی(ev) وگشتاورهای دوقطبی کل و مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{16}C_{16}$به اتم‌ها(Q) ۳۷

جدول ۳-۸ داده‌های هندسی ساختارهای مختلف، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۴۰

جدول ۳-۹ داده‌های انرژی برهم‌کنش(ev)، سطوح انرژی(ev) وگشتاورهای دوقطبی کل و مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{16}C_{16}$به اتم‌ها (Q) ۴۰

جدول ۳-۱۰ داده‌های هندسی ساختارهای مختلف، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۴۱

جدول ۳-۱۱ داده‌های انرژی برهم‌کنش(ev)، سطوح انرژی(ev) وگشتاورهای دوقطبی کل و مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{16}C_{16}$به اتم‌ها(Q) ۴۱

جدول ۳-۱۲ داده‌های هندسی ساختارهای مختلف، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۴۶

جدول ۳-۱۳ داده‌های انرژی برهم‌کنش(ev)، سطوح انرژی(ev) وگشتاورهای دوقطبی کل و مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{24}C_{24}$به اتم‌ها(Q) ۴۶

جدول ۳-۱۴ داده‌های هندسی ساختارهای مختلف، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۴۷

جدول ۳-۱۵ داده‌های انرژی برهم‌کنش(ev)، سطوح انرژی(ev) وگشتاورهای دوقطبی کل و مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{24}C_{24}$به اتم‌ها(Q) ۴۹

جدول ۳-۱۶داده‌های هندسی ساختارهای مختلف، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۵۰

جدول ۳-۱۷ داده‌های انرژی برهم‌کنش(ev)، سطوح انرژی(ev) وگشتاورهای دوقطبی کل و مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{24}C_{24}$به اتم‌ها(Q) ۵۲

جدول ۳-۱۸داده‌های هندسی ساختارهای مختلف، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۵۴

جدول ۳-۱۹ داده‌های انرژی برهم‌کنش(ev)، سطوح انرژی(eV) وگشتاورهای دوقطبی کل و مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{24}C_{24}$به اتم‌ها(Q) ۵۴

جدول ۳-۲۰ داده‌های هندسی ساختارهای $Si_{16}C_{16}$و $Si_{24}C_{24}$ همراه با مولکول آب، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۵۷

جدول ۳-۲۱ داده‌های انرژی برهم‌کنش(ev)، سطوح انرژی(eV) وگشتاورهای دوقطبی کل و مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{24}C_{24}$به مولکول آب ۵۷

جدول ۳-۲۲ داده‌های هندسی ساختارهای $Si_{16}C_{16}$و$Si_{24}C_{24}$ همراه با مولکول آمونیاک، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۵۹

جدول ۳-۲۳ داده‌های انرژی برهم‌کنش(ev)، سطوح انرژی(eV) وگشتاورهای دوقطبی کل و مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{24}C_{24}$به مولکول آمونیاک ۵۹

جدول ۴-۱ داده‌های هندسی ساختار ، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۶۵

جدول ۴-۲ داده‌های انرژی جذب (ev)، سطوح انرژی(eV) وگشتاورهای دوقطبی کل و مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{16}C_{16}$بهمولکول هیدروژن ۶۵

جدول ۴-۳ داده‌های هندسی ساختار، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۶۵

جدول ۴-۴ داده‌های انرژی جذب (ev)، سطوح انرژی(eV) وگشتاورهای دوقطبی کل و مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{24}C_{24}$ به مولکول هیدروژن ۶۶

جدول ۴-۴ داده‌های هندسی ساختارهای مختلف، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۶۸

جدول ۴-۵ داده‌های انرژی جذب (ev)، سطوح انرژی(eV) وگشتاورهای دوقطبی کل و مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{16}C_{16}$ به مولکول آب ۶۸

جدول ۴-۷ داده‌های هندسی ساختار ، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۷۰

جدول ۴-۸ داده‌های انرژی جذب (ev)، سطوح انرژی(eV) وگشتاورهای دوقطبیکل و مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{24}C_{24}$ به مولکول آب ۷۰

جدول ۴-۹ داده‌های هندسی ساختار، طول پیوندها بر حسب آنگسترم ۷۳

جدول ۴-۱۰ داده‌های انرژی جذب (ev)، سطوح انرژی(ev) وگشتاورهای دوقطبی کل و

مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{16}C_{16}$به مولکول آمونیاک ۷۳

جدول ۴-۱۱ داده‌های هندسی ساختارهای مختلف، طول پیوندها بر حسب آنگستروم ۷۵

جدول ۴-۱۲ داده‌های انرژی جذب (ev)، سطوح انرژی(ev) وگشتاورهای دوقطبی کل و
مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{24}C_{24}$به مولکول آمونیاک ۷۵

جدول ۴-۱۳ داده‌های هندسی ساختارهای مختلف، طول پیوندها بر حسب آنگستروم ۷۸

جدول ۴-۱۴ داده‌های انرژی جذب (ev)، سطوح انرژی(eV) وگشتاورهای دوقطبی کل و
مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{16}C_{16}$به مولکول کربن مونوکسید ۷۸

جدول ۴-۱۵ داده‌های هندسی ساختارهای مختلف، طول پیوندها بر حسب آنگستروم ۸۰

جدول ۴-۱۶ داده‌های انرژی جذب (ev)، سطوح انرژی(eV) وگشتاورهای دوقطبی کل و
مقدار بار (au) منتقل شده از $Si_{24}C_{24}$به مولکول کربن مونوکسید ۸۲

جدول ۵-۱ داده‌های انرژی جذب(ev)،سطوح انرژی(ev) وگشتاورهای دوقطبیکل و مقدار بار(au)
منتقل شده از ساختار$Si_{16}C_{16}$-Liبه‌مولکول هیدروژن (Q) ۸۴

جدول ۵-۲ داده‌های انرژی جذب(ev)،سطوح انرژی(ev)وگشتاورهای دوقطبیکل و مقدار بار(au)
منتقل شده از ساختار$Si_{16}C_{16}$-Liبه مولکول آب(Q) ۸۶

جدول ۵-۳ داده‌های انرژی جذب(ev)، سطوح انرژی(ev)وگشتاورهای دوقطبیکل و مقدار بار(au)
منتقل شده از ساختار$Si_{16}C_{16}$-Liبه مولکول آمونیاک(Q) ۸۹

جدول ۵-۴ داده‌های انرژی جذب (ev)، سطوح انرژی(ev) وگشتاورهای دوقطبی کل و مقدار بار (au)
منتقل شده از دو ساختار$Si_{16}C_{16}$-Kبه مولکول‌ها(Q) ۸۹

فهرست نمودارها

نمودار ۳-۱ مقایسه انرژی برهم‌کنش عناصر و کاتیون‌های گروه Iبا ساختار $Si_{16}C_{16}$ ۳۸

نمودار ۳-۲ مقایسه گاف انرژی برهم‌کنش عناصر وکاتیون‌های گروه I با ساختار $Si_{16}C_{16}$ ۳۸

نمودار ۳-۳ مقایسه انرژی برهم‌کنش عناصر و کاتیون‌های گروهII با ساختار $Si_{16}C_{16}$ ۴۳

نمودار ۳-۴ مقایسه گاف انرژی برهم‌کنش عناصر و کاتیون‌های گروه با ساختار $Si_{16}C_{16}$ ۴۳

نمودار ۳-۵ مقایسه انرژی برهم‌کنش عناصر و کاتیون‌های گروه با ساختار $Si_{24}C_{24}$ ۴۹

نمودار ۳-۶ مقایسه گاف انرژی، برهم‌کنش عناصر و کاتیون‌های گروه با ساختار$Si_{24}C_{24}$ ۵۰

نمودار ۳-۷ مقایسه انرژی برهم‌کنش عناصر و کاتیون‌های گروه با ساختار $Si_{24}C_{24}$ ۵۵

نمودار ۳-۸مقایسه گاف انرژی برهم‌کنش عناصر وکاتیون‌های گروهIIبا ساختار $Si_{24}C_{24}$ ۵۵

فهرست شکل‌ها

شکل ۱-۱ برخی از ساختارهای Si_nC_n ۸

شکل ۱-۲ ساختار$Si_{14}C_{14}$ ۹

شکل۲-۱ روش هارتری- فاک نقطه ی آغاز برای روش‌های دقیق تر ونیمه تجربی ۱۳

شکل ۳-۱ ساختارهای$Si_{16}C_{16}$ و $Si_{24}C_{24}$ ۲۹

شکل۳-۲ فاصله دو اتم در ساختارهای$Si_{16}C_{16}$ و $Si_{24}C_{24}$ ۲۹

شکل۳-۳ اوربیتال‌های مولکولی ساختارهای فولرن مانندکربن سیلیس ۲۹

شکل ۳-۴ چگالی حالت‌ها برای ساختارهای الف) $Si_{24}C_{24}$ و ب) $Si_{16}C_{16}$ ۳۰

شکل ۳-۵ ساختار $Si_{16}C_{16}$ همراه با عناصر گروه I ۳۳

شکل۳-۶ اوربیتال‌های مولکولی ساختار $Si_{16}C_{16}$با عناصر گروه I ۳۳

شکل ۳-۷ چگالی حالت‌ها برای ساختار$Si_{16}C_{16}$همراه با عناصر گروه I ۳۳

شکل ۳-۸ ساختار $Si_{16}C_{16}$ همراه با کاتیون‌های گروه I ۳۶

شکل۳-۹ اوربیتال‌های مولکولی ساختار $Si_{16}C_{16}$با کاتیون‌های گروه I ۳۶

شکل ۳-۱۰چگالی حالت‌ها برای ساختار $Si_{16}C_{16}$همراه با کاتیون‌های گروه I ۳۶

شکل ۳-۱۱ ساختار $Si_{16}C_{16}$ همراه با عناصر گروه II ۳۹

شکل۳-۱۲ اوربیتال‌های مولکولی ساختار $Si_{16}C_{16}$همراه با عناصر گروه II ۳۹

شکل ۳-۱۳چگالی حالت‌ها برای ساختار $Si_{16}C_{16}$همراه با عناصر گروه II ۳۹

شکل ۳-۱۴ ساختار $Si_{16}C_{16}$همراه با کاتیون‌های گروه II ۴۲

شکل۳-۱۵ اوربیتال‌های مولکولی ساختار $Si_{16}C_{16}$همراه با کاتیون‌های گروه II ۴۲

شکل ۳-۱۶چگالی حالت‌ها برای ساختار $Si_{16}C_{16}$همراه با کاتیون‌های گروه II ۴۲

شکل ۳-۱۷ ساختار $Si_{24}C_{24}$همراه با عناصر گروه I ۴۵

شکل۳-۱۸ اوربیتال‌های مولکولی ساختار $Si_{24}C_{24}$همراه با عناصر گروه I ۴۵

شکل ۳-۱۹ چگالی حالت‌ها برای ساختار $Si_{24}C_{24}$همراه با عناصر گروه I ۴۵

شکل ۳-۲۰ ساختار$Si_{24}C_{24}$با عناصر گروه I ۴۵

شکل۳-۲۱ اوربیتال‌های مولکولی ساختار $Si_{24}C_{24}$همراه با کاتیون‌های گروه I ۴۸

شکل ۳-۲۲چگالی حالت‌ها برای ساختار $Si_{24}C_{24}$ همراه با کاتیون‌های گروه I ۴۸

شکل ۳-۲۳ ساختار$Si_{24}C_{24}$همراه با عناصر گروه II ۵۱
شکل۳-۲۴ اوربیتال‌های مولکولی ساختار $Si_{24}C_{24}$ همراه با عناصر گروه II ۵۱
شکل ۳-۲۵چگالی حالت‌ها برای ساختار $Si_{24}C_{24}$همراه با عناصر گروه II ۵۱
شکل ۳-۲۶ ساختار$Si_{24}C_{24}$همراه با کاتیون‌های گروه II ۵۳
شکل۳-۲۷ اوربیتال‌های مولکولی ساختار $Si_{24}C_{24}$ همراه با کاتیون‌های گروه II ۵۳
شکل ۳-۲۸چگالی حالت‌ها برای ساختار $Si_{24}C_{24}$همراه با کاتیون‌های گروه II ۵۳
شکل۳-۲۹ ساختارهای $Si_{16}C_{16}$ و $Si_{24}C_{24}$همراه با مولکول آب ۵۶
شکل۳-۳۰ اوربیتال‌های مولکولی ساختارهای $Si_{16}C_{16}$و$Si_{24}C_{24}$همراه با مولکول آب ۵۶
شکل ۳-۳۱چگالی حالت‌ها برای ساختارهای $Si_{16}C_{16}$و $Si_{24}C_{24}$ همراه با مولکول آب ۵۶
شکل۳-۳۲ ساختارهای $Si_{16}C_{16}$ و $Si_{24}C_{24}$ همراه با مولکول آمونیاک ۵۸
شکل۳-۳۳ اوربیتال‌های مولکولی ساختارهای $Si_{16}C_{16}$ و $Si_{24}C_{24}$ همراه با مولکول آمونیاک ۵۸
شکل ۳-۳۴ چگالی حالت‌ها برای ساختارهای $Si_{16}C_{16}$ و $Si_{24}C_{24}$ همراه با مولکول آمونیاک ۵۸
شکل ۴-۱ جذب مولکول هیدروژن بر روی $Si_{16}C_{16}$ ۶۴
شکل ۴-۲ اوربیتال‌های مولکولی جذب مولکول هیدروژن بر روی $Si_{16}C_{16}$ ۶۴
شکل ۴-۳ چگالی حالت‌هایالف) $Si_{16}C_{16}$-H_2و $Si_{16}C_{16}$ ۶۴
شکل۴-۴ جذب مولکول هیدروژن بر روی $Si_{24}C_{24}$ ۶۶
شکل ۴-۵ اوربیتال‌های مولکولی جذب مولکول هیدروژن بر روی $Si_{24}C_{24}$ ۶۶
شکل ۴-۶ چگالی حالت‌های الف) $Si_{24}C_{24}$-H2 و $Si_{24}C_{24}$ ۶۶
شکل ۴-۷ جذب مولکول آب بر روی $Si_{16}C_{16}$ ۶۹
شکل ۴-۸ اوربیتال‌های مولکولی جذب مولکول آب بر روی $Si_{16}C_{16}$ ۶۹
شکل ۴-۹ چگالی حالت‌های جذب مولکول آب بر روی $Si_{16}C_{16}$ ۶۹
شکل ۴-۱۰ جذب مولکول آب بر روی $Si_{24}C_{24}$ ۷۱
شکل ۴-۱۱ اوربیتال‌های مولکولی جذب مولکول آب بر روی $Si_{24}C_{24}$ ۷۱
شکل ۴-۱۲ چگالی حالت‌های جذب مولکول آب بر روی $Si_{24}C_{24}$ ۷۱
شکل ۴-۱۳ جذب مولکول آمونیاک بر روی $Si_{16}C_{16}$ ۷۴
شکل ۴-۱۴ اوربیتال‌های مولکولی جذب مولکول آمونیاک بر روی $Si_{16}C_{16}$ ۷۴

شکل ۴-۱۵ چگالی حالت‌های الف و پ:$Si_{16}C_{16}$-NH_3 و $Si_{16}C_{16}$ ۷۴
شکل ۴-۱۶ جذب آمونیاک بر روی $Si_{24}C_{24}$ ۷۶
شکل ۴-۱۷ اوربیتال‌های مولکولی جذب مولکول آمونیاک بر روی $Si_{24}C_{24}$ ۷۶
شکل ۴-۱۸ چگالی حالت‌های الف تا ب:$Si_{24}C_{24}$-NH_3 و $Si_{24}C_{24}$ ۷۶
شکل ۴-۱۹ جذب مولکول کربن مونوکسید بر روی $Si_{16}C_{16}$ ۷۹
شکل ۴-۲۰ اوربیتال‌های مولکولی جذب مولکول کربن مونوکسید بر روی $Si_{16}C_{16}$ ۷۹
شکل ۴-۲۱ چگالی حالت‌های جذب مولکول کربن مونوکسید بر روی $Si_{16}C_{16}$ ۷۹
شکل ۴-۲۲ جذب کربن مونوکسید بر روی $Si_{24}C_{24}$ ۸۱
شکل ۴-۲۳ اوربیتال‌های مولکولی جذب مولکول کربن مونوکسید بر روی $Si_{24}C_{24}$ ۸۱
شکل ۴-۲۴ چگالی حالت‌های جذب مولکول کربن مونوکسید بر روی $Si_{24}C_{24}$ ۸۱
شکل ۵-۱ جذب مولکول هیدروژن بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$-Li ۸۵
شکل ۵-۲ اوربیتال‌های مولکولی جذب مولکول هیدروژن بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$-Li ۸۵
شکل ۵-۳ چگالی حالت‌های جذب مولکول هیدروژن بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$-Li ۸۵
شکل ۵-۴ جذب مولکول آب بر روی دو ساختار$Si_{16}C_{16}$-Li ۸۶
شکل ۵-۵ اوربیتال‌های مولکولی جذب مولکول آب بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$-Li ۸۷
شکل ۵-۶ چگالی حالت‌های جذب مولکول آب بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$-Li ۸۷
شکل ۵-۷ جذب مولکول آمونیاک بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$-Li ۸۸
شکل ۵-۸ اوربیتال‌های مولکولی جذب مولکول آمونیاک بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$-Li ۸۸
شکل ۵-۹ چگالی حالت‌های جذب مولکول آمونیاک بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$-Li ۸۸
شکل ۵-۱۳ جذب سه مولکول بر روی ساختار$Si_{16}C_{16}$-K ۹۰
شکل ۵-۱۴ اوربیتال‌های مولکولی جذب سه مولکول بر روی ساختار $Si_{16}C_{16}$-K ۹۰
شکل ۵-۱۵ چگالی حالت‌های جذب سه مولکول بر روی ساختار $Si_{16}C_{16}$-K ۹۰

فصل اول

فولرن ها

۱-۱ نانو فناوری

فناوری نانو را می‌توان از پیشرفته‌ترین فناوری‌های بشری دانست که کاربردهای گوناگون آن می‌تواند جهان آیندهرا متحول نماید. تغییر خصوصیات مواد در مقیاس نانومتری تحت تاثیر خصوصیات مکانیک کوانتومی، الکترون‌ها وبرهم‌کنش‌های اتمی است. با ایجاد ساختارهای نانومتری، کنترل خصوصیاتی از مواد نظیر رفتار مغناطیسی، هدایتالکتریکی، استحکام، نقطه ذوب و ... بدون تغییر ترکیب شیمیایی آن‌ها امکان‌پذیر است. بهبهر عملی که در اندازه‌ی اتمی و مولکولی انجام شود نانوفناوری اطلاق می‌شود. نانوفناوری بر پایه دستکاری تک تک اتم‌ها ومولکول‌هااستواراست بدین منظور که بتوانساختاری پیچیده را با خصوصیات اتمی تولید کرد. نانوفناوری، توانمندی تولید و ساخت مواد، ابزار و سیستم‌های جدید با در دست گرفتن کنترل در مقیاس نانومتری یا همان سطوح اتمی و مولکولی، و استفاده از خواصی است که در این سطوح ظاهر می‌شوند. نانوفناوری یک رشته نیست بلکه رویکردجدیدی درتمام رشته‌هاست.نانوفناوری یک زمینه بین رشته‌ایاست که در محدوده علوم کاربردی مختلفی نظیر فیزیک، مواد، بیوتکنولوژی تا الکترونیک،کامپیوتر،ارتباطات،حمل ونقل،انرژی،محیط زیست وغیرهوارد شدهاست و خود به تنهایی یک علم نیست بلکه با استفادهازآن می‌توان به کاربردی کردن علوم مختلف کمک کرد. ریچاردفاینمن[1] متخصصنظریه کوانتومی درسال۱۹۵۹مقاله‌ایتحت عنوان"فعالیت‌هاینانودرآینده"منتشرساخت و بهعنوان پایه‌گذاراینعلم شناخته شد.دراین سال ریچاردفاینمن طی یک سخنرانی باعنوان«فضای زیادی درسطوح پایین وجوددارد»ایده فناوری نانورامطرح ساخت.وی این نظریهراارائه دادکهدر آینده‌ای نزدیک می‌توانیم مولکول‌هاواتم‌هارا به صورت مستقیمدستکاری کنیم.درسال۱۹۷۴،پروفسورنوریو تاینگوچی[2]،استادعلوم دانشگاه توکیو،نخستین بار واژه‌ی" فناوری نانو"را به‌کارگرفت.اودرنوشته‌ای با نام"مفهوم اساسی فناوری نانو"،اشاره می‌کند که فناوری نانو اساسا مجموعه‌ای از فرآیندهای تفکیک،ادغام وتشکیل مواددر حد یک اتم یا یک مولکول است.او این واژه را برای توصیف ساخت مواددقیقی که تلورانس ابعادی آن‌ها در حدنانومتر می‌باشد به کار برد.اریک درکسلر[3] در سال ۱۹۶۶ مؤسسه فورسایت را که در حال حاضر یکی ازمؤسسات بنام تحقیقات نانوفناوری است پایه‌گذاری کرد. او در سال ۱۹۸۶کتاب موتورهای خلقت را منتشر کرد. این اولین کتابی بود که طرحی از پتانسیل‌های فناوری نانومولکولی راارائه میداد.درکسلراولینکسی بود کهدرزمینه فناوری نانومولکولی درجه‌ی دکتری دریافت نمودو پس ازاصلاحاتی بر روی رساله دکترایش در سال ۱۹۹۲آنرابا نام«نانوسیستم‌ها،محاسبات و ساخت ماشین‌های مولکولی»منتشر کرد[۱].برخیاز رویدادهایمهمتاریخیدرشکل‌گیریفناوریوعلومنانو عبارتند از:

- ۱۸۵۷ مایکل فارادی محلول کلوئیدی طلا را کشف کرد
- ۱۹۰۵ تشریح رفتار محلول‌های کلوئیدی توسط آلبرتانیشتین

[1]-Feynman
[2]-Norio Taniguchi
[3] -Eric Drexler

- ۱۹۳۲ ایجادلایه‌هایاتمی بهضخامت یک مولکولتوسطلانگمیر[1]

- ۱۹۵۹ فاینمن ایده"فضای زیادی درسطوح پایین" رابرای کار باموادر مقیاس نانو مطرح کرد

-۱۹۷۴ برایاولین بار واژه فناوری نانو توسط نوریوتاینگوچی برزبان‌هاجاری شد

- ۱۹۸۱ شرکت IBM دستگاهیاختراع کرد که به کمک آن می‌توان اتم‌هارا تک تک جابه‌جاکرد

-۱۹۸۵کشف ساختارجدیدی ازکربن(C_{60})

- ۱۹۹۰ شرکت IBM توانایی کنترل نحوه قرارگیری اتم‌ها را بهنمایش گذاشت

- ۱۹۹۱ کشف نانوتیوب های کربنی توسط ایجیما [2]و دانشمندان روسی[۲]

- ۱۹۹۳ تولیداولین نقاط کوانتومی باکیفیت بالا

- ۱۹۹۷ ساخت اولین نانوترانزیستور

- ۲۰۰۰ ساخت اولین موتور DNA

- ۲۰۰۱ ساخت یک مدل آزمایشگاهی سلولسوخت با استفادهاز نانولوله

- ۲۰۰۳ تولید نمونه‌های آزمایشگاهی نانوسلول‌های خورشیدی

- ۲۰۰۹ درمانتومورهای مغزی توسط نانوذرات حاوی دارو[۳].

علم نانو و علوم مرتبط با آن جدید نیستند چرا که صدها سال است که شیمیدانان از تکنیک‌هایی علم نانو را در کار خود استفاده می‌کنندکه بی‌شباهت به تکنیک‌های امروزی نانو نیست. دلایل زیادی برای اهمیت ابعاد نانو وجود دارد، خصوصیات مواد دراندازه‌های نانومتری دچار تغییراتی می‌شود و با طراحی مواد نانومتری تغییردرخصوصیات ماکروسکوپیکو میکروسکوپیک ماده مانند رنگ، خواص مغناطیسی، دمای ذوب و... بدون تغییر ترکیبات شیمیایی آن ممکن نیست.در سال‌های اخیر توجه به ساختارهای فولرن در تحقیقات آکادمیک و صنعتی بطور مداوم رشد یافته است.هدف این فصل بررسی ساختارها وخواص فولرن‌های کربن سیلیس می‌باشد.

۱-۲ فولرن‌ها

برای شیمی‌دان‌هایی که علاقه‌مند به دگرسازی مواد شناخته شده و خلق مواد جدید هستند، عنصر کربن به عنوان ماده شروع کننده نقش کمتری داشت. این وضعیت هنگام شناخته شدن چندشکلی جدیدی از کربن به طور چشمگیری تغییرکرد. گرافیت و الماس چندشکلی‌های شناخته‌شده کربن هستند و سومین

[1]-Langmuir
[2]-Iijima