

رسالة محمد

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری



دانشگاه ملایر

دانشکده علوم پایه - گروه شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی (گرایش شیمی فیزیک)

مطالعه برهمکنش و جذب گاز هیدروژن بر روی نانوتیوب بورن نیتريد همراه
با دوپینگ آرسنیک

به وسیله ی :

شبنم دارابی

استاد راهنما :

دکتر مهدی رضایی صامتی

استاد مشاور:

دکتر اعظم شیری

مهر ۱۳۹۲

به نام خدا

مطالعه برهمکنش و جذب گاز هیدروژن بر روی نانوتیوب بورن نیتريد همراه با دوپینگ آرسنيک

به وسيله‌ی:

شبنم دارابی

پایان نامه

ارائه شده به تحصیلات تکمیلی به عنوان بخشی

از فعالیت های لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

در رشته‌ی:

شیمی (گرایش شیمی فیزیک)

از دانشگاه ملایر

ارزیابی و تأیید شده توسط کمیته پایان نامه با درجه:

دکتر مهدی رضایی صامتی، دانشیار شیمی فیزیک (استاد راهنما).....

دکتر اعظم شیری، استادیار شیمی آلی (استاد مشاور).....

دکتر رعد چگل، استادیار فیزیک نانو اپتیک (استاد داور).....

دکتر مسعود رضوانی جلال، استادیار فیزیک نظری (استاد داور).....

دکتر داود اخضری، استادیار علوم مرتع (نماینده تحصیلات تکمیلی).....

مهرماه ۱۳۹۲

تقدیم بہ

پدرِ خویم

مادرِ مہربانم

و

استادِ بزرگوارم

پاسکزاری و قدردانی

پروردگارتو را پاس می گویم که مرا مشمول الطاف بیکرانت قرار دادی و در پچه های علم و معرفت را فرارویم کشودی و در این سردترین روزکاران بهترین پشتیبانم بودی. مرا همتی چنان عطا کن که جزء خشنودی و لقای توبه چنری قانع نگردم.

اکنون که این پژوهش به لطف ایزدیکتابه پایان رسیده بر خود لازم می دانم که از سرقدرشناسی پاسکزار بزرگوارانی باشم که همواره یاری ام کردند. از خانواده عزیزم که در نهایت دلسوزی و محبت بهترین مشوقم بودند صمیمانه تشکر می کنم.

پاسکزار استاد راهنمای ارجمندم؛ جناب آقای دکتر مهدی رضایی صامتی که شکر دیشان برایم غنیمتی بود و مساعدت های ارزنده اشان سختی های مسیر را بر من هموار کرد.

از دوستان و بهکلاس های عزیزم؛ خانم ها:

سحر یعقوبی، نینا علی صفرزاده، فریده خواجه جشوقانی، عترت السادات دادفر، رویارامی، معصومه فراهانی و سایر دوستان پاسکزارم.

نام خانوادگی دانشجو : دارابی	نام : شبیم
عنوان پایان نامه : مطالعه‌ی برهمکنش و جذب گاز هیدروژن بر روی نانو تیوب بورن نیتريد همراه با دوپینگ آرسنیک	
استاد راهنما : دکتر مهدی رضایی صامتی	
استاد مشاور : دکتر اعظم شیری	
مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد	رشته: شیمی
گرایش: شیمی فیزیک	
دانشگاه ملایر-گروه: شیمی	تاریخ فارغ التحصیلی : مهر ۱۳۹۲
تعداد صفحات: ۱۰۲	
کلید واژه : نانولوله، بور نیتريد، جایگزینی آرسنیک، جذب گاز هیدروژن، انرژی جذب، NMR	
LUMO ، HOMO ، NQR ، ویژگی‌های کوانتومی، انرژی گپ	

چکیده:

در این پروژه ساختار نانو لوله‌های آرمچیر (۴و۴) و (۵و۵) و (۶و۶) نانو لوله‌های زیگزاگ (۶و۰) و (۸و۰) و (۱۰و۰) با دستور $B3LYP/6-31G^*$ بهینه شد. در بور نیتريد‌های آرمچیر اتم آرسنیک جایگزین B و در بور نیتريد زیگزاگ جایگزین B شده است. جذب گاز هیدروژن در چهار موقعیت مختلف، جذب از بیرون نانو لوله با زاویه های ۰ و ۹۰ درجه و جذب از داخل نانو لوله با زاویه های ۰ و ۹۰ درجه روی بور نیتريد آرمچیر (۴و۴) و زیگزاگ (۶و۰) در حالت خالص و جایگزین شده با آرسنیک انجام شد. سپس پارامترهای NMR و LUMO و HOMO و NQR و انرژی جذب و ویژگی‌های کوانتومی و مقادیر طول و زاویه‌ی پیوند برای همه

ساختارهای خالص و جایگزین شده با آرسنیک محاسبه شد. نتایج به دست آمده از محاسبات عبارتند از: شعاع بزرگ اتم آرسنیک باعث افزایش طول پیوند و کاهش زاویه پیوند می شود اما جذب گاز تاثیری در این پارامترها ندارد. جذب در حالت خالص نسبت به حالت جایگزین شده با آرسنیک مساعدتر است. الکترون های والانس بیشتر آرسنیک باعث توزیع نامتقارن دانسیته ی ابر الکترونی می شوند و پارامترهای NMR را دستخوش تغییر می کنند. جایگزینی آرسنیک باعث کاهش پارامترهای NQR در بور نیتريد آرمچير و افزایش آن در بور نیتريد زیگزاگ شده است که نشان می دهد موقعیت های فعال در نانو لوله های آرمچير کاهش و در زیگزاگ افزایش یافته اند. در ساختارهای HOMO و LUMO موقعیت های نوکلئوفیلی در حالات خالص و جایگزین شده با آرسنیک روی اتم نیتروژن و موقعیت های الکتروفیلی در حالت خالص روی اتم های بور و پیوندهای بور- نیتروژن و در حالت جایگزینی روی اتم آرسنیک و پیوندهای بور- نیتروژن اطراف آن متراکم هستند. انرژی گپ در بور نیتريد زیگزاگ کمتر از بور نیتريد های آرمچير است که نشان می دهد رسانایی در این حالت بیشتر است

فهرست مطالب

عنوان.....	صفحه.....
فصل اول (مقدمه)	۲.....
۱-۱- تاریخچه نانوتکنولوژی در دنیا	۲.....
۲-۱- نانو چیست؟	۲.....
۳-۱- نانولوله‌های کربنی و روش‌های ساخت آنها	۲.....
۴-۱- روشهای تولید نانو لوله کربنی	۸.....
۴-۱-۱- فرآیندهای تولید نانولوله های کربنی	۹.....
۵-۱- هیدروژن	۱۰.....
۵-۱-۱- تولید هیدروژن	۱۰.....
۶-۱- استفاده از نانولوله کربنی برای کاربرد هیدروژن	۱۱.....
۷-۱- نانولوله های بور نیتريد	۱۲.....
۷-۱-۱- روش‌های تولید نانو لوله‌های بور نیتريد	۱۴.....
۸-۱- شیمی محاسباتی	۱۶.....
فصل دوم: بررسی جایگزینی اتم آرسنیک بر روی اتم بور در نانو لوله بور نیتريد آرمچير (۴و۴)، (۵و۵) و (۶و۶).....	۱۸.....
۱-۲- مقدمه	۱۹.....
۲-۲- پارامترهای ساختاری مدل‌های آرمچير نانولوله بور نیتريد (۴و۴)، (۵و۵) و (۶و۶).....	۱۹.....
۲-۲-۱- پارامترهای طول پیوند و زاویه پیوند نانولوله آرمچير (۴و۴) بور نیتريد.....	۱۹.....
۲-۲-۲- پارامترهای طول پیوند و زاویه پیوند نانولوله بور نیتريد (۵و۵).....	۲۱.....
۲-۲-۳- پارامترهای طول پیوند و زاویه پیوند نانولوله بور نیتريد (۶و۶).....	۲۲.....
۳-۲- ساختارهای هومو-لومو نانولوله های بور نیتريد (۴و۴)، (۵و۵) و (۶و۶).....	۲۴.....

۲۴	۱-۳-۲- اوربیتال‌های هومو-لومو نانولوله بورنیتريد (۴و۴).....
۲۶	۲-۳-۲- اوربیتال‌های هومو-لومو نانولوله بورنیتريد (۵و۵).....
۲۷	۳-۳-۲- اوربیتال‌های هومو-لومو نانولوله بورنیتريد (۶و۶).....
۲۹	۴-۲- بررسی ویژگی‌های کوانتومی نانولوله‌های بورنیتريد آرمچير حالت‌های (۴و۴)،(۵و۵) و (۶و۶).....
۳۳	۵-۲- پارامترهای NMR هسته‌های ^{11}B و ^{15}N نانولوله‌های بورنیتريد آرمچير (۴و۴)،(۵و۵) و (۶و۶).....
۳۳	۱-۵-۲- پارامترهای NMR هسته‌های ^{11}B و ^{15}N نانو لوله آرمچير (۴و۴).....
۳۵	۲-۵-۲- پارامترهای NMR هسته‌های ^{11}B و ^{15}N نانو لوله آرمچير (۵و۵).....
۳۶	۳-۵-۲- پارامترهای NMR هسته‌های ^{11}B و ^{15}N نانو لوله آرمچير (۶و۶).....
۳۷	۶-۲- بررسی پارامترهای NQR هسته‌های ^{11}B و ^{15}N نانو لوله‌های بور نیتريد (۴و۴)، (۵و۵) و (۶و۶).....
۴۱	فصل سوم: بررسی جایگزینی اتم آرسنیک بر روی اتم بور در نانو لوله بور نیتريد زیگزاگ (۶و۰)، (۸و۰) و (۱۰و۰).....
۴۲	۱-۳- مقدمه.....
۴۲	۲-۳- بررسی طول پیوند و زاویه پیوند نانولوله‌های زیگزاگ (۶و۰)، (۸و۰) و (۱۰و۰).....
۴۲	۱-۲-۳- بررسی طول پیوند و زاویه پیوند نانولوله (۶و۰) و (۸و۰) و (۱۰و۰).....
۴۷	۳-۳- ساختارهای هومو-لومو نانولوله‌های بورنیتريد زیگزاگ (۶و۰)، (۸و۰) و (۱۰و۰).....
۴۷	۱-۳-۳- بررسی هومو-لومو نانولوله بورنیتريد (۶و۰).....
۴۹	۲-۳-۳- بررسی ساختارهای هومو-لومو نانو لوله بورنیتريد (۸و۰).....
۴۹	۳-۳-۳- بررسی ساختارهای هومو-لومو نانولوله بورنیتريد (۱۰و۰).....
۵۱	۴-۳- بررسی ویژگی‌های کوانتومی نانولوله‌های زیگزاگ (۶و۰)، (۸و۰) و (۱۰و۰).....
۵۴	۵-۳- بررسی پارامترهای NMR هسته‌های ^{11}B و ^{15}N نانو لوله بور نیتريد حالت‌های زیگزاگ (۶و۰)، (۸و۰) و (۱۰و۰).....
۵۴	۱-۵-۳- بررسی پارامترهای NMR هسته‌های ^{11}B و ^{15}N نانو لوله بورنیتريد زیگزاگ (۶و۰).....
۵۵	۲-۵-۳- پارامترهای NMR هسته‌های ^{11}B و ^{15}N نانو لوله بور نیتريد زیگزاگ (۸و۰).....

- ۳-۵-۳- پارامترهای NMR هسته‌های ^{11}B و ^{15}N نانو لوله بور نیتريد زيگزاگ (۱۰ و ۰) ۵۶
- ۳-۶- بررسی پارامترهای NQR هسته‌های ^{11}B و ^{15}N نانولوله بور نیتريد (۶۰ و ۰) (۸ و ۰) (۱۰ و ۰) ۵۷
- فصل چهارم: بررسی برهمکنش و جذب مولکول هیدروژن بر سطح نانو لوله بور نیتريد (۴ و ۰) (۶ و ۰) ۵۹
- ۴-۱- مقدمه ۶۰
- ۴-۲- حالت‌های مختلف برهمکنش هیدروژن بر روی سطح نانولوله ۶۰
- ۴-۳- بررسی طول پیوند و زاویه پیوند برهمکنش H_2 با نانولوله‌های (۴ و ۰) (۶ و ۰) ۶۰
- ۴-۳-۱- طول پیوند و زاویه پیوند حالت‌های جذب با سطح نانولوله (۴ و ۰) آرمچير بور نیتريد ۶۰
- ۴-۳-۲- بررسی طول پیوند و زاویه پیوند برهمکنش هیدروژن با سطح نانولوله بور نیتريد (۶ و ۰) ۶۶
- ۴-۴- بررسی انرژی جذب برهمکنش گاز هیدروژن با سطح نانولوله‌های بور نیتريد (۴ و ۰) و (۶ و ۰) ۷۱
- ۴-۴-۱- محاسبه انرژی جذب ۷۲
- ۴-۴-۲- محاسبه انرژی جذب برهمکنش هیدروژن با سطح نانولوله بور نیتريد (۴ و ۰) ۷۲
- ۴-۴-۳- محاسبه انرژی جذب برهمکنش گاز هیدروژن با سطح نانولوله بور نیتريد زيگزاگ (۶ و ۰) ۷۳
- ۴-۵- ساختارهای هومو-لومو حالت‌های برهمکنش هیدروژن با سطح نانولوله‌های (۴ و ۰) و (۶ و ۰) ۷۵
- ۴-۵-۱- بررسی ساختارهای هومو-لومو برهمکنش گاز هیدروژن با سطح نانولوله بور نیتريد (۶ و ۰) ۷۵
- ۴-۵-۲- بررسی ساختارهای هومو-لومو برهمکنش گاز هیدروژن با سطح نانولوله بور نیتريد (۶ و ۰) ۷۹
- ۴-۶- تعیین پارامترهای کوانتومی مولکولی نانولوله‌های بور نیتريد (۴ و ۰) و (۶ و ۰) ۸۵
- ۴-۶-۱- محاسبه ویژگی‌های کوانتومی حالت‌های برهمکنش هیدروژن با سطح نانولوله بور نیتريد (۴ و ۰) ۸۵
- ۴-۶-۲- محاسبه ویژگی‌های کوانتومی حالت‌های برهمکنش هیدروژن با سطح نانولوله بور نیتريد (۶ و ۰) ۸۷
- ۴-۷- پارامترهای NMR حالت‌های برهمکنش هیدروژن با سطح نانولوله‌های بور نیتريد (۴ و ۰) (۶ و ۰) ۸۹
- ۴-۷-۱- بررسی پارامترهای NMR حالت‌های برهمکنش با سطح نانولوله (۴ و ۰) ۹۰
- ۴-۷-۱-۱- حالت (A) ۹۰

- ۹۱ (B) حالت ۲-۱-۷-۴
- ۹۲ (C) حالت ۳-۱-۷-۴
- ۹۳ (D) حالت ۴-۱-۷-۴
- ۹۳ بررسی پارامترهای NMR حالت‌های برهمکنش هیدروژن با سطح نانو لوله (۶ و ۰)
- ۹۳ بررسی حالت‌های (A) و (B)
- ۹۵ بررسی حالت‌های (C) و (D)
- ۹۶ ۸-۴- پارامترهای NQR حالت‌های برهمکنش گاز هیدروژن با سطح نانولوله بور نیتريد (۴ و ۰) و (۶ و ۰)
- ۹۶ ۱-۸-۴- بررسی پارامترهای NQR نانو لوله بور نیتريد حالت (۴ و ۰)
- ۹۸ ۲-۸-۴- بررسی پارامترهای NQR نانو لوله بور نیتريد حالت (۶ و ۰)
- ۹۹ ۹-۴- نتیجه گیری
- ۱۰۰ منابع

فهرست شکل ها

عنوان.....	صفحه.....
شکل ۱-۱- صورت های مختلف کربن در طبیعت	۴
شکل ۱-۲- سه روش اصلی متصل شدن ورقه گرافن.....	۵
شکل ۳-۱- ساختار حالت زیگزاگ.....	۶
شکل ۴-۱- ساختار حالت آرمچیر.....	۶
شکل ۵-۱- ساختار حالت کایرال.....	۷
شکل ۶-۱- شبیه سازی مونت کارلو ذخیره سازی هیدروژن بر روی نانولوله ها.....	۱۲
شکل ۱-۲- ساختار نمادگذاری شده حالت خالص و حالت جایگزین (۴و۴)	۲۰
شکل ۲-۲- ساختار نمادگذاری شده حالت خالص و حالت جایگزین (۵و۵).....	۲۱
شکل ۳-۲- ساختار نمادگذاری شده حالت خالص و حالت جایگزین (۶و۶)	۲۳
شکل ۴-۲- اوربیتال هومو و لومو حالت خالص و حالت جایگزین شده (۴و۴).....	۲۵
شکل ۵-۲- اوربیتال هومو و لومو حالت خالص و حالت جایگزین شده (۵و۵).....	۲۷
شکل ۶-۲- اوربیتال هومو و لومو حالت خالص و حالت جایگزین شده (۶و۶).....	۲۸
شکل ۱-۳- ساختار نمادگذاری بهینه شده حالت خالص و حالت جایگزین (۶و۰).....	۴۳
شکل ۲-۳- ساختار نمادگذاری شده حالت خالص و حالت جایگزین (۸و۰).....	۴۴
شکل ۳-۳- ساختار نمادگذاری شده حالت خالص و حالت جایگزین شده (۱۰و۰).....	۴۶
شکل ۴-۳- ساختار بهینه شده اوربیتال هومو و لومو برای حالت خالص و حالت جایگزین شده نانو لوله بور نیتريد (۶و۰)	
زیگزاگ.....	۴۸

- شکل ۳-۵- ساختار بهینه شده اوربیتال هومو و لومو برای حالت خالص و حالت جایگزین شده نانو لوله بور نیتريد (۸۰ و ۵۰ زیگزاگ).....
- شکل ۳-۶- ساختار بهینه شده اوربیتال هومو و لومو برای حالت خالص و حالت جایگزین شده نانو لوله بور نیتريد (۸۰ و ۵۱ زیگزاگ).....
- شکل ۴-۱- ساختار نمادگذاری شده حالت خالص و حالت جایگزین شده (۴ و ۴).....
- شکل ۴-۲- جذب مولکول هیدروژن با زوایای مختلف روی ساختار آرمچیر (۴ و ۴) در حالت خالص.....
- شکل ۴-۳- جذب مولکول هیدروژن با زوایای مختلف روی ساختار آرمچیر (۴ و ۴) در حالت جایگزین شده.....
- شکل ۴-۴- ساختار نمادگذاری شده حالت خالص و حالت جایگزین شده (۶۰ و ۶۰).....
- شکل ۴-۶- جذب مولکول هیدروژن با زوایای مختلف روی ساختار زیگزاگ (۶۰ و ۶۰) در حالت خالص.....
- شکل ۴-۶- جذب مولکول هیدروژن با زوایای مختلف روی ساختار زیگزاگ (۶۰ و ۶۰) در حالت خالص.....
- شکل ۴-۷- اوربیتال هومو و اوربیتال لومو حالت خالص و حالت جایگزین شده (۴ و ۴).....
- شکل ۴-۸- اوربیتال هومو و لومو مدل A حالت خالص و جایگزین شده (۴ و ۴).....
- شکل ۴-۹- اوربیتال هومو و لومو مدل B حالت خالص و جایگزین شده (۴ و ۴).....
- شکل ۴-۱۰- اوربیتال هومو و لومو مدل C حالت خالص و جایگزین شده (۴ و ۴).....
- شکل ۴-۱۱- اوربیتال هومو و لومو مدل D حالت خالص و جایگزین شده (۴ و ۴).....
- شکل ۴-۱۲- اوربیتال هومو و لومو حالت خالص و جایگزین شده (۶۰ و ۶۰).....
- شکل ۴-۱۳- اوربیتال هومو و لومو حالت خالص و جایگزین شده مدل A (۶۰ و ۶۰).....
- شکل ۴-۱۴- اوربیتال هومو و لومو حالت خالص و جایگزین شده مدل B (۶۰ و ۶۰).....
- شکل ۴-۱۵- اوربیتال هومو و لومو حالت خالص و جایگزین شده مدل C (۶۰ و ۶۰).....
- شکل ۴-۱۶- اوربیتال هومو و لومو حالت خالص و جایگزین شده مدل D (۶۰ و ۶۰).....

فهرست جداول

عنوان	صفحه
جدول ۱-۱ - دسته های مختلف نانولوله های کربنی بر اساس کایرالیتهی	۷
جدول ۱-۲ - پارامترهای ساختارهای بهینه شده نانولوله بورنیتريد حالت خالص (۴و۴) و حالت جایگزین شده با آرسنیک	۲۰
جدول ۲-۲ - پارامترهای ساختارهای بهینه شده نانولوله بورنیتريد حالت خالص (۵و۵) و مدل جایگزین شده با آرسنیک	۲۲
جدول ۳-۲ - پارامترهای ساختارهای بهینه شده نانولوله بورنیتريد حالت خالص (۶و۶) و مدل جایگزین شده با آرسنیک	۲۳
جدول ۴-۲ - ویژگی های کوانتومی مدل های آرمیچر (۴و۴)، (۵و۵) و (۶و۶)	۳۱
جدول ۵-۲ - پارامترهای NMR هسته های ^{15}N و ^{11}B در نانو لوله آرمیچر (۴،۴) بور نیتريد	۳۵
جدول ۶-۲ - پارامترهای NMR هسته های ^{15}N و ^{11}B در نانو لوله آرمیچر (۵،۵) بور نیتريد	۳۶
جدول ۷-۲ - پارامترهای NMR هسته های ^{15}N و ^{11}B در نانو لوله آرمیچر (۶،۶) بور نیتريد	۳۷
جدول ۸-۲ - پارامترهای NQR هسته های ^{15}N و ^{11}B در نانو لوله آرمیچر (۴،۴) بور نیتريد	۳۹
جدول ۹-۲ - پارامترهای NQR هسته های ^{15}N و ^{11}B در نانو لوله آرمیچر (۵،۵) بور نیتريد	۳۹
جدول ۱۰-۲ - پارامترهای NQR هسته های ^{15}N و ^{11}B در نانو لوله آرمیچر (۶،۶) بور نیتريد	۴۰
جدول ۱-۳ - طول پیوند و زاویه پیوند نانولوله بورنیتريد (۶و۰)	۴۳
جدول ۲-۳ - طول پیوند و زاویه پیوند نانو لوله بورنیتريد (۸و۰)	۴۵
جدول ۳-۳ - طول پیوند و زاویه پیوند نانو لوله بورنیتريد (۱۰و۰)	۴۶
جدول ۵-۳ - ویژگی های کوانتومی نانو لوله های بور نیتريد حالت زیگزاگ	۵۲
جدول ۶-۳ - پارامترهای NMR هسته های ^{15}N و ^{11}B در نانو لوله زیگزاگ (۶،۰) بور نیتريد	۵۴
جدول ۷-۳ - پارامترهای NMR هسته های ^{15}N و ^{11}B در نانو لوله زیگزاگ (۸،۰) بور نیتريد	۵۶

- جدول ۳-۸- پارامترهای NMR هسته های ^{11}B و ^{15}N در نانو لوله زیگزاگ (۱۰،۰) بور نیتريد..... ۵۷
- جدول ۳-۹- پارامترهای NQR هسته های ^{11}B و ^{15}N در نانو لوله زیگزاگ بور نیتريد..... ۵۸
- جدول ۴-۱- طول پیوند و زاویه پیوند برهمکنش هیدروژن با سطح نانو لوله حالت خالص (۴و۴)..... ۶۴
- جدول ۴-۲- طول پیوند و زاویه پیوند برهمکنش هیدروژن با سطح نانو لوله حالت جایگزین شده (۴و۴)..... ۶۵
- جدول ۴-۳- طول پیوند و زاویه پیوند برهمکنش هیدروژن با سطح نانو لوله حالت خالص (۶و۰)..... ۷۰
- جدول ۴-۴- طول پیوند و زاویه پیوند برهمکنش هیدروژن با سطح نانو لوله حالت جایگزین (۶و۰)..... ۷۱
- جدول ۴-۵- انرژی جذب برهمکنش هیدروژن با سطح نانو لوله خالص و جایگزین شده (۴و۴)..... ۷۳
- جدول ۴-۶- انرژی جذب برهمکنش هیدروژن با سطح نانو لوله خالص و جایگزین شده (۶و۰)..... ۷۴
- جدول ۴-۷- ویژگی های کوانتومی مدل های (۴و۴) حالت خالص..... ۸۵
- جدول ۴-۸- ویژگی های کوانتومی مدل های (۴و۴) حالت جایگزین شده با As..... ۸۶
- جدول ۴-۹- ویژگی های کوانتومی مدل های (۶و۰) حالت خالص..... ۸۸
- جدول ۴-۱۰- ویژگی های کوانتومی مدل های (۶و۰) حالت جایگزین..... ۸۸
- جدول ۴-۱۱- پارامترهای NMR هسته های ^{11}B و ^{15}N در نانو لوله آرمچیر (۴،۴) بور نیتريد حالت (A)..... ۹۰
- جدول ۴-۱۲- پارامترهای NMR هسته های ^{11}B و ^{15}N در نانو لوله آرمچیر (۴،۴) بور نیتريد حالت (B)..... ۹۱
- جدول ۴-۱۳- پارامترهای NMR هسته های ^{11}B و ^{15}N در نانو لوله آرمچیر (۴،۴) بور نیتريد حالت (C)..... ۹۲
- جدول ۴-۱۴- پارامترهای NMR هسته های ^{11}B و ^{15}N در نانو لوله آرمچیر (۴،۴) بور نیتريد حالت (D)..... ۹۳
- جدول ۴-۱۵- پارامترهای NMR هسته های ^{11}B و ^{15}N در نانو لوله زیگزاگ (۶،۰) بور نیتريد حالت (A)..... ۹۴
- جدول ۴-۱۶- پارامترهای NMR هسته های ^{11}B و ^{15}N در نانو لوله زیگزاگ (۶،۰) بور نیتريد حالت (B)..... ۹۴
- جدول ۴-۱۷- پارامترهای NMR هسته های ^{11}B و ^{15}N در نانو لوله زیگزاگ (۶،۰) بور نیتريد حالت (C)..... ۹۵
- جدول ۴-۱۸- پارامترهای NMR هسته های ^{11}B و ^{15}N در نانو لوله زیگزاگ (۶،۰) بور نیتريد. حالت (D)..... ۹۵
- جدول ۴-۱۹- پارامترهای NQR هسته های ^{11}B و ^{15}N در نانو لوله بور نیتريد (۴و۴) حالت خالص..... ۹۶

جدول ۴-۲۰- پارامترهای NQR هسته های ^{15}N و ^{11}B در نانو لوله بور نیتريد (۴و۴) حالت جایگزین ۹۷

جدول ۴-۲۱- پارامترهای NQR هسته های ^{15}N و ^{11}B در نانو لوله بور نیتريد (۶و۰) حالت خالص ۹۸

جدول ۴-۲۲- پارامترهای NQR هسته های ^{15}N و ^{11}B در نانو لوله بور نیتريد (۶و۰) حالت جایگزین ۹۸

فصل اول

مقدمه

۱-۱- تاریخچه نانو تکنولوژی^۱ در دنیا

در طول تاریخ بشر از زمان یونان باستان، مردم و به خصوص دانشمندان آن دوره بر این باور بودند که می توان مواد را آن قدر به اجزاء کوچک تقسیم کرد تا به ذراتی رسید که خرد ناشدنی هستند و این ذرات بنیان مواد را تشکیل می دهند. شاید بتوان دموکریتوس فیلسوف یونانی را پدر فناوری و علوم نانو دانست چرا که در حدود ۴۰۰ سال قبل از میلاد مسیح او اولین کسی بود که واژه اتم را که در زبان یونانی به معنی تقسیم نشدنی است برای توصیف ذرات سازنده مواد به کار برد. در سال ۱۹۵۹ ریچارد فاینمن مقاله ای را درباره قابلیت های فناوری نانو در آینده منتشر ساخت. با وجود موقعیت هایی که توسط بسیاری تا آن زمان کسب شده بود ریچارد بی فاینمن را به عنوان پایه گذار این علم می شناسند.

۱-۲- نانو چیست؟

نانو تکنولوژی در ترجمه لفظ به لفظ به معنی تکنولوژی بسیار کوچک (نانو، به معنی بسیار بسیار کوچک، مقیاس^{-۹} ۱۰ کوچکتر) می باشد. نانو تکنولوژی، فن آوری تغییر در خواص مولکول های تشکیل دهنده مواد است و به همین دلیل مقیاس نانو بهترین تعریف برای تکنولوژی می باشد.

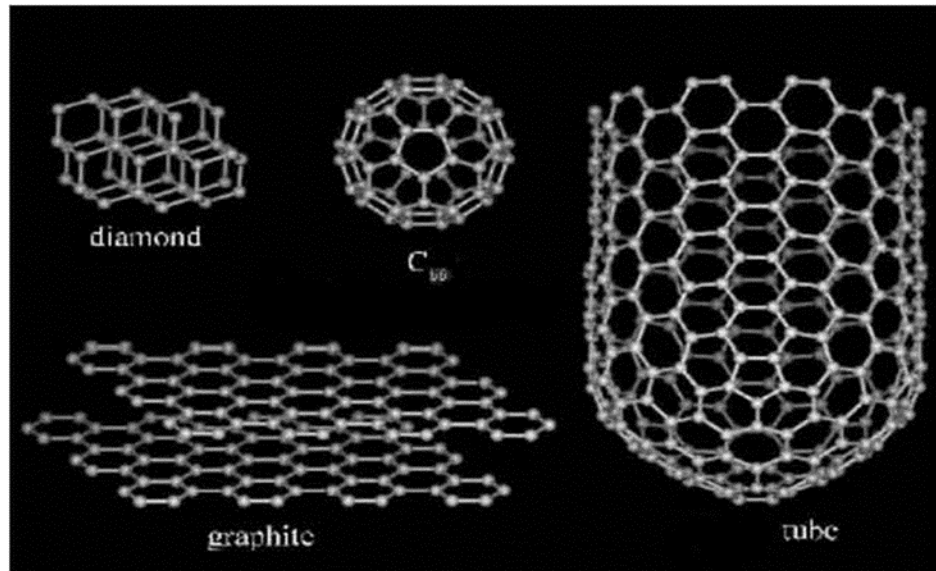
۱-۳- نانولوله های کربنی و روش های ساخت آنها

^۱ Nano technology

• نانو لوله‌های کربنی

یکی از اکتشافات بزرگ مربوط به نانو تکنولوژی، کشف نانو لوله^۱ است. نانو لوله‌ها صفحاتی از اتم‌های کربن هستند که درون قسمتی غلطک مانند حرکت می‌کنند و در ظاهر شبیه توری‌های سیمی هستند که بر روی یک سمت آن‌ها پوششی قرار گرفته باشد. نانولوله کربن، لوله کربنی تو خالی است. نانو لوله‌های کربنی از منابع کربنی مانند گرافیت یا گازهای هیدروکربنی به وسیله روش‌های مختلف تولید می‌شوند. این مواد به علت داشتن خواصی مانند سطح ویژه زیاد ($700-1000 \text{ m}^2/\text{gr}$)، استحکام زیاد و خصوصیات الکتریکی و الکترونیکی استثنایی موارد کاربرد زیادی از جمله استفاده به عنوان پایه کاتالیست، تقویت مکانیکی پلیمرها و کمپوزیت‌ها و ساخت قطعات الکترونیکی دارند. آنها ۱۰ برابر از فولاد محکم‌ترند در حالی که وزنشان یک ششم وزن فولاد است. این امتیاز باعث شده است که آن‌ها اولین انتخاب برای ساختن پل‌ها، هواپیماها و حتی سفینه‌های فضایی باشند. خواص ویژه و منحصر به فرد آن از جمله مدول یانگ بالا و استحکام کششی خوب و ماهیت کربن مانند وزن کم، پایداری بالا جهت انجام فرایندها و نسبت به فلزات ارزان‌تر بودن آن باعث شده شاهد تحقیقات مهمی در روش‌های رشد نانولوله‌ها باشیم. نانو لوله‌ها از فولاد سخت‌تر، از آلومینیوم سبک‌تر و از مس ضریب هدایت بیشتری داشته و نیمه‌هادی کربن یکی از عناصر شگفت‌انگیز طبیعت است که به چهار صورت مختلف در طبیعت یافت می‌شود. همه این چهار شکل، جامد هستند و در ساختار آن‌ها اتم‌های کربن به صورت کاملاً منظم در کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند. این چهار ماده عبارتند از: گرافیت، الماس، نانولوله‌ها و باکی بال‌ها. (شکل ۱-۱)

^۱ Nanotube



شکل (۱-۱) صورت های مختلف کربن در طبیعت

هریک از نانولوله‌ها دارای خواص ویژه‌ای هستند که در زیر چند ویژگی مشترک آنها را بررسی می‌کنیم:

۱- خواص مکانیکی

نانولوله‌ها دارای پیوندهای محکمی در بین اتم‌هایشان می‌باشند و به همین علت در برابر نیروهای کششی مقاومت و استحکام زیادی از خود نشان می‌دهند.

۲- خواص فیزیکی

مهم‌ترین خاصیت فیزیکی نانولوله‌ها، «هدایت الکتریکی» آنهاست. هدایت الکتریکی نانولوله‌ها بسته به زاویه و نوع پیوندها، از دسته‌ای به دسته دیگر کاملاً متفاوت است؛ هر اتم در جایگاه خود در حال ارتعاش است، وقتی که یک الکترون (یا بار الکتریکی) وارد مجموعه ای از اتم‌ها می‌شود، ارتعاش اتم‌ها بیشتر شده و در اثر برخورد با یکدیگر بار الکتریکی وارد شده را انتقال می‌دهند.

• انواع مختلف نانولوله‌ها