دانشکده علوم پایه

پایان‌نامه کارشناسی ارشد رشته فیزیک گرایش حالت‌جامد

مطالعه‌ی ساختارهای ممکن برای کربن و تعیین انرژی جذب مولکول-های CO، CO_2، SO، SO_2، CH_4، C_2H_6، NO و NO_2 بر روی صفحات گرافن

استاد راهنما:

دکتر علی مختاری

استاد مشاور:

دکتر ویشتاسب سلیمانیان

پژوهشگر:

مژگان جنت‌پور

آبان‌ماه۱۳۹۱

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات و نوآوری‌های ناشی از تحقیق موضوع این پایان‌نامه متعلق به دانشگاه شهرکرد است.

سپاس گزاری

و تعالی خدا را بنده نیازمند و گناهکار حقیر، سراپا تقصیر، بیکران الطاف بیکرانش شاکرم که حقیر را در طریق علم قرار داد تا بتوانم در زندگی همواره با توکل به او به دنبال کسب علم و معرفت و حقایق هستی باشم و تا مرز ممکن به او نزدیک شوم.

حال که با عنایت خاص پروردگار این اثر به پایان رسیده بر خود لازم می‌دانم از کسانی که در خلق این اثر مرا یاری نمودند تشکر و قدردانی نمایم از اساتید با کمالات و شایسته خود جناب آقای دکتر علی مختاری که در کمال سعه صدر هیچ گونه فروگذاری از هیچ کمکی در این عرصه به بنده دریغ ننموده و نسخه راهنمای این رساله را به عهده گرفتند کمال تشکر را دارم از جناب آقای دکتر یوشا سرمایه مایکیان جهت مشاوره این رساله را به عهده داشتند صمیمانه تشکر و قدردانی می‌نمایم از جناب آقای دکتر حسن ربانی و جناب آقای دکتر مصدق که زحمت بازخوانی و داوری این پایان‌نامه را متقبل شدند و با دقت فراوان گزارش مفیدی ارائه کردند از گروه فیزیک دانشگاه شهرکرد کمال تشکر و قدردانی را دارم.

و مادر عزیزتر از جانم، برادرهای مهربانم عباس و مهدی، خواهرهای نازنینم معصومه، مرضیه و هانیه به خاطر تمام همراهی‌ها، حمایت‌ها و پشتیبانی‌هایشان سپاس و تشکر ویژه دارم.

همچنین از تمامی دوستان همکلاسی خوبم، همکاران عزیز و همکاران بزرگوارم به خاطر تمام خوبی‌هایشان کمال تشکر و قدردانی را دارم.

این تلاش ناچیز را به

ساحت پاک امام زمان (عج)

و به

درتان پر مهر و سخاوتمند پدرم و قلب پاک و چشمان همیشه منتظر مادرم

که لحظات ناب زیستن، لذت دانستن، جسارت خواستن و عظمت رسیدن و همه و همه را مدیون حضور مقدسشان هستم

چکیده

در کار حاضر با استفاده از کد محاسباتی PWSCF و بر طبق محاسبات ابتدا به ساکن به بررسی حالت‌های انبوهه کربن در سه حالت الماس، گرافیت و گرافن پرداختیم و پس از بهینه‌سازی پارامترهای ساختاری مربوطه، نتایج به‌دست آمده را با تجربه مقایسه کردیم و با استفاده از نظریه تابعی چگالی و بر پایه تقریب شبه‌پتانسیل و تقریب شیب تعمیم یافته GGA، مدول حجمی، طول پیوند و انرژی همدوسی را تعیین کردیم. پس از بررسی کاربردهای گرافن ابریاخته گرافن را در ابعاد مختلف شبیه‌سازی کردیم. با انجام محاسبات کوانتومی برهم‌کنش مولکول‌های CO، CO_2، SO، SO_2، CH_4، C_2H_6، NO و NO_2 را بر روی ابریاخته گرافن به منظور تعیین انرژی جذب، بررسی کردیم. برای این منظور مولکول را در یک جهت‌گیری دلخواه و در فاصله مناسب از صفحه ابر یاخته قرار داده شد و به مولکول اجازه دادیم تا در هر سه راستا و حرکت کند و در پایدارترین موقعیت قرار گیرد. از طرفی اتم‌های کربن در صفحه را محدود به حرکت در دو راستای x و y کردیم و با استفاده از حل خودسازگار معادلات کوهن– شم ویژه‌حالت‌های تک‌ذره و ویژه مقادیر مربوطه را به‌دست آوردیم. سپس با محاسبه‌ی اختلاف انرژی بین مجموع مولکول جذب شده و صفحه و انرژی مولکول و صفحه مجزا، انرژی جذب مولکول بر روی ابر یاخته را به‌دست آوردیم و چگالی حالت‌های کلی و جزئی را در تمامی حالات به‌دست آوردیم. در هیچ‌کدام از مولکول‌های بررسی شده، مولکول تجزیه نشد و با صفحه ابریاخته برهمکنش نداد، به طور کلی در تمامی حالات تنها جذب فیزیکی مشاهده شد و فاصله مولکول نسبت به حالت اولیه افزایش یافت.

کلمات کلیدی: نظریه تابعی چگالی، شبه‌پتانسیل، گرافن، ابریاخته، انرژی جذب، انرژی همدوسی

فهرست مطالب

عنوان	شماره صفحه
فصل اول- مقدمه	۷
۱-۱ شبیه‌سازی رایانه‌ای	۷
۱-۲ نگاهی اجمالی به کربن و آلوتروپ‌های آن	۸
۱-۳ نانو	۹
۱-۳-۱ تاریخچه‌ی نانو	۹
۱-۳-۲ فن‌آوری نانو	۱۰
۱-۳-۳ تقسیم‌بندی نانو مواد	۱۰
۱-۴ خواص و ویژگی‌های مولکول‌های بررسی شده	۱۲
۱-۵ پیشینه تحقیق و بررسی منابع	۱۵
فصل دوم- نظریه‌ی تابعی چگالی	۱۷
۲-۱ معادله‌ی شرودینگر بس ذره	۱۷
۲-۲ نظریه‌های هارتری و هارتری- فوک	۱۹
۲-۳ روش توماس- فرمی	۲۱
۲-۳-۱ اتم توماس- فرمی	۲۳
۲-۳-۲ نواقص مدل توماس- فرمی	۲۴
۲-۳-۳ تصحیحات معادله توماس- فرمی	۲۶
۲-۴ نظریه تابعی چگالی	۲۸
۲-۴-۱ قضایای هوهنبرگ – کوهن	۲۸
۲-۴-۲ معادلات خودسازگار کوهن- شم	۳۰
۲-۴-۳ تابعی‌های تبادلی- همبستگی	۳۳
فصل سوم- آلوتروپ‌های کربن	۳۵
۳-۱ اتم کربن	۳۵
۳-۲ هیبریداسیون در آلوتروپ‌های کربن	۳۶
۳-۲-۱ اوربیتال‌های هیبریدی sp	۳۶
۳-۲- ۲ اوربیتال‌های هیبریدی sp^2	۳۶
۳-۲-۳ اوربیتال‌های هیبریدی sp^3	۳۸
۳-۳ آلوتروپ‌های مختلف کربن	۳۸
۳-۳-۱ الماس	۳۹
۳-۳-۲ ساختارهای گرافیتی	۴۰
۳-۳-۳ کربن آمورف یا کربن بی‌شکل	۴۲

۳-۴ گرافین ۴۳
۳-۴-۱ ساخت گرافین ۴۴
۳-۴-۲ ساختار نواری گرافین و فرمیون‌های دیراک ۴۵
۳-۴-۳ کاربردهای گرافین ۴۹
۳-۴-۴ جذب ۵۱
۳-۴-۵ مطالعه‌ای بر کارهای ابتدا به ساکن بر روی گرافین ۵۲

فصل چهارم-بررسی خواص ساختاری و الکترونی حالت‌های انبوه کربن و جذب بر روی صفحه گرافین ۵۴
۴-۱ ساختار الماس ۵۵
۴-۱-۱ بهینه‌سازی پارامترهای الماس ۵۵
۴-۲ ساختار گرافیت ۵۷
۴-۲-۲ بهینه‌سازی پارامترهای گرافیت ۵۷
۴-۳ ساختار گرافین ۵۹
۴-۳-۱ بهینه‌سازی پارامترهای گرافین ۶۱
۴-۴ بررسی خواص ساختاری الماس- گرافیت- گرافین ۶۲
۴-۴-۱ محاسبه‌ی انرژی همدوسی E_c ۶۳
۴-۵ خواص الکترونی ۶۳
۴-۵-۱ نوارهای انرژی و چگالی حالت‌ها ۶۳
۴-۶ بررسی جذب مولکول‌های گازی بر روی صفحه گرافین ۶۵
۴-۷ شبیه‌سازی ابریاخته گرافین ۶۶
۴-۸ محاسبه انرژی مولکول‌های مورد بررسی ۶۸
۴-۹ مولکول CO بر روی صفحه گرافین ۷۱
۴-۱۰ مولکول CO_2 بر روی صفحه گرافین ۷۵
۴-۱۱ مولکول NO بر روی صفحه گرافین ۷۸
۴-۱۲ مولکول NO_2 بر روی صفحه گرافین ۸۰
۴-۱۳ مولکول CH_4 بر روی صفحه گرافین ۸۲
۴-۱۴ مولکول C_2H_6 بر روی صفحه گرافین ۸۴
۴-۱۵ مولکول SO بر روی صفحه گرافین ۸۶
۴-۱۶ مولکول SO_2 بر روی صفحه گرافین ۸۸
نتیجه‌گیری ۸۹
واژه‌نامه ۹۰
مراجع ۹۱

فهرست شکل‌ها و نمودارها

عنوان	شماره صفحه
شکل ۲-۱ مقدار $\gamma(N,Z)$ برای ۱۱۷۸ اتم و یون	۲۵
شکل ۳-۱ هیبریداسیون sp	۳۶
شکل ۳-۲ هیبریداسیون sp^2	۳۷
شکل ۳-۳ هیبریداسیون sp^3	۳۸
شکل ۳-۴ نمایش طرحواره آلوتروپ‌های کربن	۳۹
شکل ۳-۵ یاخته قراردادی اتم کربن در ساختار الماس	۴۰
شکل ۳-۶ یاخته قراردادی اتم کربن در ساختار الماس شش‌گوشه	۴۰
شکل ۳-۷ یکا یاخته ۱×۱ گرافیت	۴۱
شکل ۳-۸ نانولوله کربن	۴۱
شکل ۳-۹ فولورن	۴۲
شکل ۳-۱۰ صفحه گرافین	۴۲
شکل ۳-۱۱ گرافین پایه‌ای برای ساختارهای گرافیتی؛از راست به چپ: فولورن- نانولوله کربن- گرافیت	۴۴
شکل ۳-۱۲ نمایی از صفحه گرافین	۴۵
شکل ۳-۱۳ منطقه اول بریلوئن	۴۶
شکل ۳-۱۴ نمودار انرژی برحسب k	۴۸
شکل ۳-۱۵ مکان‌های مختلف جذب بر روی صفحه گرافین	۵۲
نمودار ۴-۱ انرژی کل بر حسب انرژی قطع الماس	۵۶
نمودار ۴-۲ انرژی کل بر حسب تعداد نقاط شبکه وارون برای ساختار	۵۶
نمودار ۴-۳ انرژی کل بر حسب انرژی قطع چگالی برای الماس	۵۶
نمودار ۴-۴ انرژی کل بر حسب حجم الماس	۵۶
شکل ۴-۱ نمایی از ساختار الماس	۵۸
شکل ۴-۲ نمایی از ساختار گرافیت	۵۸
نمودار ۴-۵ انرژی کل بر حسب انرژی قطع چگالی برای گرافیت	۵۸
نمودار ۴-۶ انرژی کل بر حسب انرژی قطع گرافیت	۵۸
نمودار ۴-۷ انرژی کل بر حسب حجم یاخته گرافیت	۵۸
نمودار ۴-۸ انرژی کل بر حسب تعداد نقاط k گرافیت	۵۸
نمودار ۴-۹ انرژی کل بر حسب c/a ساختار گرافیت	۵۹
شکل ۴-۳ نمایی از ساختار گرافین	۶۰
نمودار ۴-۱۰ انرژی کل بر حسب انرژی قطع چگالی برای گرافین	۶۰
نمودار ۴-۱۱ انرژی کل بر حسب انرژی قطع گرافین	۶۰
نمودار ۴-۱۲ انرژی کل بر حسب تعداد نقاط شبکه وارون برای ساختار گرافین	۶۰

نمودار ۴-۱۳ انرژی کل بر حسب a گرافین ۶۰
نمودار ۴-۱۴ انرژی کل بر حسب c گرافین ۶۱
نمودار ۴-۱۵ انرژی کل بر حسب حجم یکا یاخته در دو فاز الماس و گرافیت ۶۳
نمودار ۴-۱۶ نوارهای انرژی برای ساختار الماس ۶۴
نمودار ۴-۱۷ نوارهای انرژی برای ساختار گرافین ۶۴
نمودار ۴-۱۸ نوارهای انرژی برای ساختار گرافیت ۶۴
نمودار ۴-۱۹ چگالی حالت‌ها برای ساختار الماس ۶۴
نمودار ۴-۲۰ چگالی حالت‌ها برای ساختار گرافین ۶۴
نمودار ۴-۲۱ چگالی حالت‌ها برای ساختار گرافیت ۶۴
نمودار ۴-۲۲ نمودار انرژی بر حسب فاصله ۶۶
شکل۴-۴ نمایی از صفحه ۳×۳ ۶۶
شکل۴-۵ ابر یاخته ۵×۵ ۶۸
شکل۴-۶ ابر یاخته ۴×۴ ۶۸
شکل۴-۷ ابر یاخته ۳×۳ ۶۸
شکل۴-۸ مولکول CO بر روی ابر یاخته ۴×۴ ۷۱
شکل۴-۹ مولکول CO بر روی ابر یاخته ۳×۳ ۷۱
شکل۴-۱۰ مولکول CO بر روی ابر یاخته ۵×۵ ۷۲
نمودار۴-۲۳ چگالی حالت‌های CO بر روی صفحه ۴×۴ ۷۲
نمودار۴-۲۴ چگالی حالت‌های CO بر روی صفحه ۵×۵ ۷۲
نمودار۴-۲۵ چگالی حالت‌ها برای مجموع صفحه و مولکول CO به همراه چگالی حالت‌های جزئی... ۷۳
نمودار ۴-۲۶ مجموع چگالی حالت‌های جزئی برای اوربیتال p و s اتم‌های صفحه و چگالی حالت‌های ... ۷۳
شکل ۴-۱۱ مولکول CO به صورت عمود بر روی ابر یاخته ۳×۳ ۷۳
نمودار۴-۲۷ چگالی حالت‌ها برای مجموع صفحه و مولکول CO در حالت عمود به همراه چگالی... ۷۴
شکل ۴-۱۲ مولکول CO_2 بر روی ابر یاخته ۳×۳ ۷۵
نمودار ۴-۲۸ مجموع چگالی حالت‌های جزئی برای اوربیتال p و s اتم‌های صفحه و چگالی حالت‌های ... ۷۵
نمودار۴-۲۹ چگالی حالت‌ها برای مجموع صفحه و مولکول CO_2 به همراه چگالی حالت‌های جزئی ۷۶
نمودار۴-۳۰ مجموع چگالی حالت‌های جزئی برای اوربیتال p و s اتم‌های صفحه و چگالی حالت‌های ... ۷۶
شکل ۴-۱۳ مولکول CO_2 به صورت عمود بر روی صفحه ۳×۳ ۷۷
نمودار۴-۳۱ چگالی حالت‌ها برای مجموع صفحه و مولکول CO_2 به همراه چگالی حالت‌های جزئی ... ۷۷
نمودار ۴-۳۲ مجموع چگالی حالت‌های جزئی برای اوربیتال p و s اتم‌های صفحه و چگالی حالت‌های ... ۷۸
نمودار۴-۳۳ چگالی حالت‌ها برای مجموع صفحه و مولکول NO به همراه چگالی حالت‌های جزئی... ۷۹
نمودار۴-۳۴ مجموع چگالی حالت‌های جزئی برای اوربیتال p و s اتم‌های صفحه و چگالی حالت‌های ... ۷۹
شکل ۴-۱۴ مولکول NO بر روی ابر یاخته ۳×۳ ۸۱

شکل ۴-۱۵ مولکول NO_2 بر روی ابر یاخته ۳×۳ ۸۱
نمودار۴-۳۵ چگالی حالت‌ها برای مجموع صفحه و مولکول NO_2 به همراه چگالی حالت‌های جرئی ... ۸۱
نمودار ۴-۳۶ مجموع چگالی حالت‌های جزئی برای اوربیتال p و s اتم‌های صفحه و چگالی حالت‌های ... ۸۱
شکل ۴-۱۷ مولکول CH_4 بر روی ابر یاخته ۳×۳ ۸۲
نمودار ۴-۳۷ چگالی حالت‌ها برای مجموع صفحه و مولکول CH_4 به همراه چگالی حالت‌های جرئی.. ۸۳
نمودار۴-۳۸ مجموع چگالی حالت‌های جزئی برای اوربیتال p و s اتم‌های صفحه و چگالی حالت‌های... ۸۳
نمودار۴-۳۹ چگالی حالت‌ها برای مجموع صفحه و مولکول C_2H_6 به همراه چگالی حالت‌های جرئی... ۸۵
نمودار ۴-۴۰ مجموع چگالی حالت‌های جزئی برای اوربیتال p و s اتم‌های صفحه و چگالی حالت‌های جزئی.. ۸۵
نمودار۴-۴۱ چگالی حالت‌ها برای مجموع صفحه و مولکول SO به همراه چگالی حالت‌های جرئی... ۸۶
شکل ۴-۱۸ مولکول SO بر روی ابر یاخته ۳×۳ ۸۷
نمودار۴-۴۲ مجموع چگالی حالت‌های جزئی برای اوربیتال p و s اتم‌های صفحه و چگالی حالت‌های ... ۸۷
شکل ۴-۱۹ مولکول SO_2 بر روی ابر یاخته ۳×۳ به همراه چگالی حالت‌های جرئی.. ۸۸
نمودار۴-۴۳ چگالی کل حالت‌ها برای مجموع صفحه و مولکول SO_2 ۸۸
نمودار ۴-۴۴ مجموع چگالی حالت‌های جزئی برای اوربیتال p و s اتم‌های صفحه و چگالی حالت‌های ... ۸۸

فهرست جدول‌ها

عنوان **شماره صفحه**

جدول ۴-۱ نتایج مربوط به پارامتر شبکه a الماس در مقایسه با نتایج دیگران ۵۶

جدول ۴-۲ نتایج مربوط به پارامترهای a و c گرافیت در مقایسه با نتایج دیگران ۵۹

جدول ۴-۳ انرژی همدوسی، مدول انبوهه، مشتق مدول انبوهه و طول پیوند... ۶۲

جدول ۴-۴ انرژی برای ابریاخته های متفاوت با شبه‌پتانسیل‌های متفاوت ۶۷

جدول ۴-۵ مؤلفه‌ی x، y و z مولکول CO قبل از قرار دادن بر روی صفحه ۶۸

جدول ۴-۶ مؤلفه‌ی x، y و z مولکول CO_2 قبل از قرار دادن بر روی صفحه ۶۸

جدول ۴-۷ مؤلفه‌ی x، y و z مولکول NO قبل از قرار دادن بر روی صفحه ۶۹

جدول ۴-۸ مؤلفه‌ی x، y و z مولکول NO_2 قبل از قرار دادن بر روی صفحه ۶۹

جدول ۴-۹ مؤلفه‌ی x، y و z مولکول SO قبل از قرار دادن بر روی صفحه ۶۹

جدول ۴-۱۰ مؤلفه‌ی x، y و z مولکول SO_2 قبل از قرار دادن بر روی صفحه ۶۹

جدول ۴-۱۱ مؤلفه‌ی x، y و z مولکول CH_4 قبل از قرار دادن بر روی صفحه ۶۹

جدول ۴-۱۲ مؤلفه‌ی x، y و z مولکول C_2H_6 قبل از قرار دادن بر روی صفحه ۷۰

جدول ۴-۱۳ پارامترهای بهینه شده مولکول در یاخته مکعبی ۷۰

جدول ۴-۱۴ انرژی به دست آمده برای مولکول‌ها در یاخته مکعبی ۷۰

جدول ۴-۱۵ انرژی جذب مولکول CO بر روی ابریاخته گرافین ۷۱

فصل اول

مقدمه

۱-۱شبیه‌سازی رایانه‌ای

یکی از برجسته‌ترین کاربردهای عملی رایانه‌ها شبیه‌سازی دستگاه‌های کوانتومی است. تاکنون تنها برای دستگاه‌های کوانتومی بسته، یعنی دستگاه‌های که با محیط اطراف برهم‌کنش ندارند، امکان شبیه‌سازی دقیق وجود داشته است، اما مارتین کلیچ همکارانش[۱]، نشان دادند که دستگاه‌های باز کوانتومی را که با محیط اطرافشان برهم‌کنش دارند نیز می‌توان به خوبی با رایانه شبیه‌سازی کرد و دریچه‌ای تازه به سوی کاربردهای مهم رایانه‌ها در فیزیک ماده چگال، شیمی کوانتومی و حتی زیست‌شناسی گشودند. به کمک شبیه‌سازی رایانه‌ای می‌توان مواد چگال را در سطح اتمی بررسی کرد. شبیه‌ساز یک مدل از دستگاه حقیقی ایجاد می‌کند و خواص آن را کشف می‌کند. در حالت‌های بسیاری مطالعات شبیه‌سازی به نتایج نزدیک به تجربه می‌رسد. مدل‌سازی به وسیله مکانیک‌کوانتومی دقیق‌ترین روش است که در محاسبه انرژی بکار می‌رود و به پیش‌بینی ساختارهای تعادلی حالت‌جامد و دستگاه‌های مولکولی کمک می‌کند. چنین مدل‌سازی‌هایی پیش‌بینی‌های کمی را برای گستره بزرگی از دستگاه‌ها ممکن می‌سازد، که به نوع ماده محدود نیستند. از جمله روش‌های بررسی کوانتومی دستگاه‌های فیزیکی، می‌توان به روش نظریه تابعی چگالی اشاره کرد که در سال ۱۹۶۴ توسط هوهنبرگ و کوهن ارائه و در سال ۱۹۶۵ توسط کوهن - شم کامل‌تر شد، اشاره کرد. در این نظریه حالت پایه گاز الکترونی برهم‌کنش‌دار به گاز الکترونی بدون برهم‌کنش که تحت‌تأثیر پتانسیل مؤثر قرار دارد، نگاشت داده می‌شود. این نگاشت در اصل خواص حالت پایه دستگاه را به صورت دقیق بیان می‌کند.

۱-۲ نگاهی اجمالی به آلوتروپ‌های کربن از جمله گرافین

کربن ششمین عنصر فراوان جهان است که برای اولین بار به صورت زغال‌سنگ کشف شد و در سال ۱۷۸۹ به وسیله لاوازیر نامگذاری شد. کربن به صورت آلوتروپ‌های مختلف وجود دارد که همه‌ی آنها از نظر ترمودینامیکی پایدار هستند و برای واکنش به دمای بالا نیاز دارند. کربن به دلیل داشتن هیبرید sp^2 و sp^3 خواص الکترونی و ساختاری جالبی را نشان می‌دهد[۲]. الماس سخت‌ترین صورت کربن و یکی از مشهورترین آلوتروپ‌های آن است که در آن هر اتم کربن با ۴ اتم دیگر پیوند کووالانسی به صورت چهاروجهی دارد. این چهاروجهی‌ها در کنار هم یک شبکه سه‌بعدی تشکیل می‌دهند. گرافیت یک ماده کربنی نرم است که در سال ۱۷۸۹ در یونان کشف شد و به دلیل رنگ سیاهش به عنوان ابزاری برای نوشتن مورد استفاده قرار می‌گیرد. در گرافیت اتم کربن در یک آرایش سه‌بعدی به سه اتم دیگر در صفحه متصل می‌شود که چنین پیوندی منجر به ساختار دوبعدی با هیبرید sp^2 می‌شود. هر دو لایه گرافیت به کمک نیروی ضعیف واندروالس با یکدیگر پیوند دارند که این نیروی واندروالس منجر به پیوند ضعیفی بین لایه‌ها می‌شود و دلیلی بر نرم بودن این فاز از کربن است. کربن بی‌شکل یک نام برای کربنی است که هیچ ساختار بلوری ندارد و گاهی اوقات در آنها یک نظم کوتاه برد مشاهده می‌شود ولی هیچگاه در آنها یک الگوی بلندبرد مشاهده نمی‌شود. فولرن مولکولی با اندازه‌ی متغییر است که کاملاً از کربن تشکیل شده است و می‌تواند شکل یک کره‌ی توخالی، بیضوی یا لوله‌ای را به خود بگیرد[۳]. نانولوله‌های کربن یک شکل دیگر از مولکولهای کربن به صورت استوانه هستند که دارای خواص جدید و کاربردهای فراوان هستند. نانولوله‌ها مقاوم هستند و خواص الکتریکی و رسانایی گرمایی بالایی دارند[۴].

گرافین یک صفحه با ضخامت یک اتم از اتم‌های کربن است که در یک شبکه لانه زنبوری دو بعدی (شبکه شش گوشه) قرار می‌گیرد. در یک صفحه گرافین، هر اتم کربن با سه اتم کربن دیگر پیوند دارد. سه پیوند کربن با زوایای مساوی ۱۲۰ درجه نسبت به هم قرار می‌گیرند و در ایده‌آل‌ترین حالت یک شش‌ضلعی منتظم را ایجاد می‌کنند ولی در برخی مواقع شکل قرارگیری اتم‌ها به حالت پنج‌ضلعی یا هفت‌ضلعی تغییر می‌یابد. گرافین از جداسازی یک لایه تک‌اتمی از گرافیت به دست می‌آید. سپس لایه مذکور را روی ویفر سیلیکونی که قطر حفره‌های آن یک میکرومتر است قرار می‌دهند[۵]. گرافینی را که به شکل استوانه‌ای کوچک در می‌آید نانولوله‌کربنی می‌نامند که یک سمت این استوانه لایه‌ی به ضخامت یک اتم دارد و انتهای این نانولوله ممکن است باز یا بسته باشد. گرافین در واقع نازکترین و قویترین ماده است و از نظر عبور جریان الکتریکی به اندازه‌ی مس رسانا است. همچنین از نظر رسانایی گرمایی بالاترین عملکرد را به خود اختصاص می‌دهد. این آلوتروپ کربن تقریباً شفاف است. با این حال به اندازه‌ای تراکم دارد که حتی هلیوم که دارای کوچکترین مولکول‌های گازی است نمی‌تواند از آن عبورکند. اتم‌های کربن در گرافین دارای هیبرید sp^2 هستند که از ترکیب یک اوربیتال s و دو اوربیتال p تشکیل شده‌اند و به دلیل آزاد بودن یک الکترون در سومین اوربیتال p دارای رسانندگی الکتریکی می‌باشند. وجود این تک اوربیتال غیرهیبریدی به گرافین به عنوان یک ترکیب کربنی اهمیت خاصی بخشیده است که می توان به قابلیت آن در جذب مولکول‌های گازی اشاره کرد. همچنین گرافین با داشتن سطح مؤثری به میزان ۲۶۳۰ متر مربع بر گرم قادر به جذب بالای مولکول‌های زیستی است. به طور کلی گرافین با ساختار نواری خاص، فرمیون‌های بدون جرم و وجود بارهای آزاد دارای کاربردهای بسیاری در نانوالکتریک‌ها، نانوساختارها، حسگرها و باتری‌ها است[۶].

در کار حاضر به مطالعه‌ی ساختارهای ممکن برای کربن، کاربردهای گرافین و بررسی کارهای انجام‌شده بر روی آن می‌پردازیم. سپس محاسبات ابتدا به ساکن را بر روی حالت‌های انبوهه کربن به منظور تعیین مدول حجمی، طول پیوندها و انرژی همدوسی انجام می‌دهیم و پارامترهای ساختاری گرافین را بهینه می‌کنیم. صفحات گرافین به عنوان حسگرهای گازی استفاده می‌شوند و با محاسبات کوانتومی انرژی جذب مولکول‌های CO، CO_2، SO، SO_2، CH_4، C_2H_6، NO، NO_2 و O_2 را بر روی صفحات گرافین محاسبه خواهیم‌کرد[۷]. برای این کار لازم است ابتدا مکان‌های تعادلی اتم‌های کربن در این ساختار را بهینه کنیم و سپس با استفاده از حل خودسازگار معادلات کوهن-شم ویژه‌حالت‌های تک‌ذره و ویژه‌مقادیر مربوطه را به‌دست می‌آوریم و پس از آن نحوه جذب این مولکول‌های را بر روی این صفحات مطالعه می‌کنیم و به بررسی نمودار چگالی حالت‌ها برای مجموع مولکول و صفحه و مولکول تنها می‌پردازیم. در ادامه به طور مختصر به معرفی فن آوری و بررسی خواص و ویژگی‌های مولکول‌های بررسی شده می‌پردازیم.

۱-۳ نانو

از دیدگاه لغوی، کلمه نانو به معنای یک میلیاردم (10^{-9}) است و در اصل از یک واژه یونانی به معنای کوتوله گرفته شده است[۸]. علم نانو و فن آوری متکی بر آن یا به اختصار، فن آوری نانو در کنار علوم و فن آوری‌های مرتبط با زیست شناسی و ژنتیک مولکولی، علوم و فن آوری اطلاعات، مؤلفه‌های انقلاب سوم علمی- صنعتی عصر جدید را تشکیل می‌دهند. این انقلاب ادامه منطقی انقلاب‌های علمی اول و دوم است که منجر به پیدایش علوم و فن آوری های مقیاس‌های ماکرو و میکرو گشتند.

۱-۳-۱تاریخچه ی نانو

در طول تاریخ بشر از زمان یونان باستان، مردم و به‌خصوص دانشمندان آن دوره بر این باور بودند که مواد را می‌توان آنقدر به اجزاء کوچک تقسیم کرد تا به ذراتی رسید که خرد ناشدنی هستند و این ذرات بنیان مواد را تشکیل می‌دهند، شاید بتوان دموکریتوس فیلسوف یونانی را پدر فن آوری و علوم نانو دانست چرا که در حدود ۴۰۰ سال قبل از میلاد مسیح او اولین کسی بود که واژه‌ی اتم را که به معنی تقسیم نشدنی در زبان یونانی است برای توصیف ذرات سازنده مواد به کار برد. با تحقیقات و آزمایش‌های بسیار، دانشمندان تاکنون ۱۰۸ نوع اتم و تعداد زیادی ایزوتوپ کشف کرده‌اند. آنها همچنین پی‌برده‌اند که اتم‌ها از ذرات کوچکتری مانند کوارک‌ها و لپتون‌ها تشکیل شده‌اند. با این حال این کشف‌ها در تاریخ پیدایش این فن آوری پیچیده زیاد مهم نیست. علم نانو ایجاد دانش‌های بنیادی برای اعمال کنترل کامل بر ساختار و عملکرد ماده فیزیکی در مقیاس‌های اتمی و مولکولی را هدف خود برای اعمال کنترل کامل بر ساختار و عملکرد ماده فیزیکی در مقیاس‌های اتمی و مولکولی را قرار داده است و فن آوری نانو نوید می‌دهد که این دانش‌ها در آینده‌ای نه چندان دور در قالب مهندسی در آیند. از طریق فن آوری نانو خواهیم توانست با جای‌گذاری تک اتم‌ها و تک مولکول‌ها در کنار یکدیگر از پایین به بالا ساختارهای نوینی را که به نانو ساختارها موسوم‌اند و دارای خواص و عملکردهای کاملا نوین هستند، به وجود آوریم. با استفاده از این ساختارها دستگاه‌ها، ادوات و قطعات فوق ریزی که در مقیاس‌های طولی و زمانی بسیار تقلیل یافته فعالیت می‌کنند، تولید نماییم. نانو ساختارها سنگ بنای فن آوری نانو هستند.

۱-۳-۲ فن آوری نانو

فن آوری نانو واژه‌ای است کلی که به تمام فن آوری‌های پیشرفته در عرصه کار با مقیاس نانو اطلاق می‌شود. معمولاً منظور از مقیاس نانو ابعادی در حدود ۱ تا ۱۰۰ نانو متر است. اولین جرقه فن آوری نانو (البته در آن زمان هنوز به این نام شناخته نشده بود) در سال ۱۹۵۹ زده شد. در این سال ریچارد فاینمن طی یک سخنرانی با عنوان «فضای زیادی در سطوح پایین وجود دارد» ایده فن آوری نانو را مطرح ساخت. وی این نظریه را ارائه داد که در آینده‌ای نزدیک می‌توانیم مولکول‌ها و اتم‌ها را به صورت مستقیم دستکاری کنیم. واژه فن آوری نانو اولین بار توسط نوریوتاینگوچی استاد دانشگاه علوم توکیو در سال ۱۹۷۴ بر زبان‌ها جاری شد. او این واژه را برای توصیف ساخت مواد (وسایل) دقیقی که تغیرات ابعادی آن‌ها در حد نانومتر می‌باشد، به کار برد. در سال ۱۹۸۶ این واژه توسط کی اریک درکسلر در کتابی تحت عنوان: «موتور آفرینش: آغاز دوران فن آوری نانو» بازآفرینی و تعریف مجدد شد. وی این واژه را به شکل عمیق‌تری در رساله دکترای خود مورد بررسی قرار داده و بعدها آن را در کتابی تحت عنوان «نانوسامانه‌ها ماشین‌های مولکولی چگونگی ساخت و محاسبات آن‌ها» توسعه داد. تفاوت اصلی فن آوری نانو با فن آوری‌های دیگر در مقیاس مواد و ساختارهایی است که در این فن آوری مورد استفاده قرار می‌گیرند.

۱-۳-۳تقسیم‌بندی نانو مواد

به طور کلی نانو مواد به ۵ دسته کلی تقسیم می‌شوند: نانو مواد صفر بعدی، نانو مواد یک بعدی، نانو مواد دو بعدی و نانو مواد سه بعدی. در ادامه به بررسی این پنج دسته و زیر شاخه‌های آنها می‌پردازیم.

نانو مواد صفر بعدی

در تعاریف متداول، برای نقطه، بعدی در نظر نمی گیرند، زیرا طول و پهنا و ضخامت ندارد. در مورد یک نانو ماده نیز در صورتی که تمام ابعاد ماده اندازه‌ی کمتر از ۱۰۰ نانو متر داشته باشد، آن را نانو ماده صفر بعدی می‌نامیم[۹]. این دسته از نانو مواد به سه دسته فولرن، نانو پودر و نانو نقاط کوانتومی تقسیم می‌شوند که در ادامه به توضیح آنها می‌پردازیم.

فولورن: همان‌طور که در بخش‌های قبل گفته شد فولرن یکی از آلوتروپ‌های کربن است که از گرما دادن به گرافیت ساخته می‌شود. به جهت شباهت شکل آن به توپ فوتبال، به آن باکی بال نیز می‌گویند. فولرن خود انواع گوناگون و متعددی دارد و می‌تواند به صورت کره، بیضی‌گون، یا استوانه باشد.

نانو پودر: پودرها ذرات ریزی هستند که از خرد کردن قطعات جامد و بزرگ، یا ته‌نشین شدن ذرات جامد معلق در محلول‌ها به‌دست می‌آیند. بنابراین، نانوپودرها را می‌توان مجموعه‌ی از ذرات دانست که اندازه‌ی آنها کمتر از ۱۰۰ نانومتر است.

نانو نقاط کوانتومی: نقاط کوانتومی، به خاطر کوچک بودنشان، دسته‌ی منحصر به فردی از نیمه‌رساناها به شمار می‌روند. پهنای آنها، بین ۲ تا ۱۰ نانومتر، یعنی معادل کنار هم قرار گرفتن ۱۰ تا ۵۰ اتم است. در این ابعاد کوچک، مواد رفتار متفاوتی دارند و این رفتار متفاوت قابلیت‌های بی‌سابقه‌ای در کاربردهای علمی و فنی به نقاط کوانتومی می‌بخشد.

نانو مواد یک بعدی

برخی از اجسامی که در اطراف ما قرار دارند همچون یک خط راست یا خمیده هستند. این مواد در یک بعد، اندازه‌ای بیشتر از دو بعد دیگر دارند. ابعاد برخی از نانو مواد نیز به گونه‌ای است که تنها در یک راستا اندازه‌ای بزرگ‌تر از اندازه ضلع مکعب گفته شده (۱۰۰ نانو متر) دارند. این نانو مواد را با عنوان نانو مواد یک‌بعدی می‌شناسیم. می‌توان از نانو مواد یک بعدی نانو سیم‌ها، نانو لوله‌ها را نام برد.

نانو سیم: نانوسیم نانوساختاری با قطری در مقیاس نانومتر است. همچنین می‌توان نانوسیم‌ها را به‌عنوان ساختارهایی با ضخامت یا قطری در اندازه‌ی ده‌ها نانومتر یا کم‌تر، و طولی نامشخص تعریف کرد. اثرات مکانیک کوانتومی، در این مقیاس‌ها اهمیت می‌یابد و همین منجر به ابداع واژه‌ی سیم کوانتومی شده است. انواع بسیار مختلفی از نانوسیم‌ها وجود دارند، شامل فلزی (مثل نیکل، پلاتین، طلا)، نیمه‌رسانا (مثل سیلیسیم، ایندیوم فسفاید، نیترید گالیوم و غیره)، و نارسانا (مثل سیلیس، تیتانیا).

نانو لوله: نانو لوله‌ها از کنار هم قرار گرفتن اتم‌ها در یک ساختار استوانه‌ای شکل تو خالی پدید می‌آیند. این ساختارها می‌توانند از کنار هم قرار گرفتن اتم‌های یک نوع عنصر و گاهی نیز چند نوع عنصر تشکیل شوند، مانند نانولوله‌های کربن. نانو لوله‌ها خواص منحصر به فردی دارند و از نظر رفتار الکتریکی، فیزیکی، شیمیایی، نوری و مکانیکی بسیار متفاوت از دیگر مواد هستند و کاربردهای بالقوه‌ی بسیاری برای آن‌ها در نظر گرفته شده است.

نانو مواد دو بعدی

گروهی از نانو مواد مانند صفحاتی گسترده با ضخامت حدود چند نانومتر هستند و در دو راستا اندازه‌های بزرگتر از ۱۰۰ نانومتر دارند که آنها را در دسته نانو مواد دو بعدی قرار می دهیم. نانو روکش‌ها و نانولایه‌ها و صفحات گرافین در این دسته قرار دارند.

نانو روکش‌ها: پوششی با ضخامت نانومتری یا پوششی که از مواد نانومتری در آن استفاده شود. نانو روکش به ماده‌ای گفته می‌شود که در مقیاس نانو ساخته شده و به عنوان روکش، پوشاننده یا محافظ برای دیگر مواد به کار می‌رود. نانو روکش‌ها در زمینه‌هایی مختلفی از جمله الکترونیک، مواد غذایی، وسایل نقلیه و غیره استفاده می‌شوند.

صفحات گرافین: صفحات گرافین (با ضخانتی به اندازه قطر یک اتم کربن و کمتر از ۱ نانو متر) نیز که به تازگی تولید شده‌اند، نوعی دیگر از نانو مواد دو بعدی هستند. البته صفحات گرافین قبل از این نیز شناخته شده بودند و می‌دانستیم که گرافیت (کربن) از کنار هم قرار گرفتن صفحات گرافین تشکیل شده است. اتم‌های کربن در این ساختار با پیوند بسیار محکم کوالانسی به یکدیگر چسبیده‌اند. از این رو، این ماده استحکام بسیار بالایی دارد.

نانو مواد سه بعدی

دسته‌ای دیگر از مواد وجود دارند که در هر سه بعد اندازه‌ای بیش از ۱۰۰ نانو متر دارند این نانو مواد در هر سه راستا بزرگ تر از ابعاد مکعب گفته شده هستند. از نانو مواد سه بعدی می توان نانو کامپوزیت و مواد نانو حفره‌ای را نام برد.

۱-۴خواص و ویژگی‌های مولکول‌های بررسی شده

مولکول NO_2

دی‌اکسید نیتروژن یک گاز قرمز- قهوه‌ای و بسیار برهم‌کنش پذیر است که در همه گازهای شهری حضور دارد که یک گاز اکسید کننده بسیار قوی و پایدار است. و به طور طبیعی به کمک فرآیندهای بیولوژیکی در خاک و اکسیداسیون آمونیوم به وجود می‌آید. منبع عمده و مهم تولید NO_2 توسط انسان سوختن سوخت‌های فسیلی در موتور وسایل نقلیه و صنایع است. این آلاینده‌ها در ابتدا به صورت مولکول NO هستند که در طی فرآیند اکسیداسیون در اتمسفر به NO_2 تبدیل می‌شوند. که سرعت این اکسیداسیون به میزان O_3 و NO موجود در اتمسفر بستگی دارد. NO_2 در ابتدا بر دستگاه ریوی انسان اثر می‌گذارد و سبب ایجاد سوزش شدید در دستگاه ریوی انسان می‌شود. تنگی نفس، اختلالات تنفسی و بیماری‌های ریوی از دیگر اثرات این گاز سمی است. برهم‌کنش این گاز با آب اثرات مخربی بر روی محیط زیست و زندگی موجودات زنده دارد که می‌توان به باران‌های اسیدی، کاهش سرعت رشد گیاهان و فرسایش فلزات ذکر کرد.

مولکول NO

مونواکسید نیتروژن یک گاز بی‌رنگ و بی‌بو است که به راحتی در آب حل می‌شود. این مولکول در اثر سوختن سوخت‌های فسیلی به دست می‌آید. این گاز همچنین در طی فرآیندهای جوشکاری و دود حاصل از انفجار ایجاد می‌شود. گاز NO در اثر برهم‌کنش با اکسیژن و یا اوزون در اتمسفر به گاز NO_2 تبدیل می‌شود. سرعت این واکنش‌ها به دما، میزان تمرکز سایر گازها و نور خورشید بستگی دارد. در سال ۱۹۹۲ نشان داده شد که مولکول ساده NO که به عنوان یک آلوده کننده هوا شهرت داشت یک مولکول پیام رسان است که علائمی را بین سلول‌های بدن جابجا می‌کند. تمامی مولکول‌های پیام رسانی که قبلاً شناخته شده‌اند، مولکول‌های پیچیده‌ای هستند که با اتصال به گیرنده‌های خاص در غشاء سلولی عمل می‌کنند. نیتریک اکسید برای حفظ فشار خون و برقـــــراری حافظه بلند مدت ضروری است. این مولکول همچنین در بدن به پاسخ دادن دستگاه ایمنی به مهاجم خارجی کمـــــک می‌کند و میانجی فاز استراحت انقباض روده‌ای در هضم غذا است. به دلیل کشف نقش فیزیولوژیکی NO لوویس ایگنارو، رابرت اف فورچ گات و فرید مراد برنده جایزه نوبل ۱۹۹۸ شدند[۱۰].

مولکول CO

گاز کربن‌منوکسید، بی‌رنگ، بی‌مزه و بی‌بو است و در شرایط عادی از لحاظ شیمیایی بی‌اثر و طول عمر متوسط آن در اتمسفر حدود ۲/۵ ماه است. در حال حاضر مقدار منو اکسید کربن در اتمسفر بر روی گیاهان و اشیا بی‌اثر یا کم‌اثر است. در غلظت‌های زیاد منو کسید کربن، به علت تمایل زیاد به جذب هموگلوبین می‌تواند در متابولیسم تنفسی انسان به طور جدی اختلال ایجاد نماید.

غلظت منوکسید کربن در نواحی متراکم شهری که ترافیک سنگین و حرکت خودروها کند است، به میزان قابل توجه‌ای افزایش می‌یابد. منابع کربن، منوکسیدکربن طبیعی و انسانی هستند. طبق گزارش آزمایشگاه ملی آرگون، در اثر اکسیداسیون گاز متان حاصل از مرگ گیاهان سالانه ۱۳/۲ میلیون تن CO وارد طبیعت می‌شود. منبع دیگر تولید این ماده، متابولیسم انسانی است. بازدم شخصی که در حال استراحت است، به طور تقریبی حاوی یک ppm، CO است. از عوامل طبیعی تولید این آلاینده می‌توان به اکسید شدن متان حاصل از تجزیه‌ی ترکیب‌های آلی گوناگون اشاره کرد. اکسیدشدن و تبدیل آن به دی‌اکسیدکربن، جذب شدن توسط

برخی از گیاهان و جانداران ریز و شسته شدن با باران، راه‌های حذف آن از هوای اطراف است. هنگامی که این گاز را تنفس کنیم، به جای اکسیژن به هموگلوبین خون متصل می‌شود و ظرفیت حمل اکسیژن خون را کاهش می‌دهد. غلظت زیاد این گاز بسیار خطرناک است و حتی ممکن است به مرگ منجر شود.

مولکول CO_2

دی اکسید کربن یک گاز بی رنگ و بی اثر است و تقریباً ۱/۱۲ برابر سنگین تر از هوا است و به طور معمول به میزان ۰/۰۳ درصد در جو زمین حضور دارد. بوی کمی زننده‌ای دارد، مزه شیرین تندی دارد و به شدت با ثبات است. از لحاظ تجاری می‌تواند به مقادیر گوناگون توسط احتراق سوخت‌های محتوی کربن تولید شود. این مولکول می‌تواند به سه شکل گاز، مایع و جامد (یخ خشک) موجود باشد. دی‌اکسید کربن مایع برخلاف مایعی مانند آب، نمی‌تواند در شرایط معمولی جو به شکل مایع موجود باشد. اما شکل گازی آن می‌تواند تحت فشار، به شرط آنکه دما پایین تر از ۳۱ سانتی‌گراد باشد، به مایع تبدیل شود[۱۱].

مولکول SO_2

گاز دی‌اکسیدسولفور گازی بی‌رنگ با بویی نافذ مانند بوی گوگرد در حال سوختن است. حد تشخیص بو **۰/۱ تا ppm ۳** بوده و احساس سوزش و ناراحتی در غلظت **ppm** ۱/۹ به وجود می‌آید. تحت فشار و در دمای ۱۰- درجه سانتی‌گراد مایعی بی‌رنگ است. این ماده در آب حل شده و اسید سولفورو تولید می‌کند که در این حالت بسیار خطرناک است. دی‌اکسید گوگرد به طور عمده در اثر فعالیت‌هایی مانند سوختن زغال سنگ یا از نیروگاه‌های برق و نیز صنایع ذوب مس ایجاد می‌گردد. در طبیعت نیز در نتیجه فعالیت‌های آتشفشانی تولید می‌گردد. در صورت استنشاق مرگ‌آور است. به چشم‌ها و دستگاه تنفسی و ریه‌ها آسیب شدید وارد می‌کند. ممکن است عوارض با تأخیر ظاهر شوند. در حالت مایع باعث ایجاد یخزدگی می‌شود. دی‌اکسید گوگرد هم از فرآیندهای طبیعی و هم از فعالیت‌های انسان وارد هوا می‌شود. از جمله موارد طبیعی که دی‌اکسید گوگرد آزاد می‌کند، می‌توان به تجزیه و سوختن مواد آلی و آزاد شدن از سطح دریا و فوران‌های آتشفشانی اشاره کرد. انسان نیز با سوزاندن سوخت‌های فسیلی مقدار زیادی از این آلاینده را وارد هوا می‌کند. دی‌اکسید گوگرد در آب حل می‌شود و اسیدسولفوریک به وجود می‌آورد که ماده‌ای خورنده است و بافت‌های گیاهان و جانوران را در خود حل می‌کند و می‌تواند بیماری‌های تنفسی بسیاری را به وجود آورد. این گاز در اغلب مناطق صنعتی به عنوان آلوده کننده هوا شناخته می‌شود. بسیاری از خطرات ناشی از حضور این گاز در هوا به طور مستقیم به نحوه واکنش آن با سایر مواد و ترکیبات مربوط می‌شود. حضور این گاز در هوا باعث نابودی پوشش گیاهی و ایجاد خطر برای پرندگان و حیوانات می‌شود. تشکیل باران‌های اسیدی به دلیل وجود این گاز در اتمسفر بوده، لذا تا حد امکان باید از ورود این گاز به محیط جلوگیری کرده و در صورت لزوم، مقدار آن را کاهش داد. در محیط‌های آبی و دریایی، دی‌اکسید گوگرد تشکیل اسید سولفورو می‌دهد که برای حیات آبی خطرناک است. این گاز در افراد مبتلا به بیماری‌های قلبی، ریوی و آسم منجر به ایجاد ناراحتی‌های تنفسی و قلبی- عروقی می‌شود[۱۲].

مولکول CH_4

هر یک از چهار اتم هیدروژن به وسیله پیوند کووالانسی، یعنی با یک جفت الکترون اشتراکی به اتم کربن متصل شده است. وقتی کربن به چهار اتم دیگر متصل باشد، اوربیتال‌های پیوندی آن (اوربیتال‌های sp^3 که از اختلاط یک اوربیتال s و سه اوربیتال p تشکیل شده‌اند)، به سوی گوشه‌های چهار وجهی جهت‌گیری کرده‌اند. این آرایش چهار وجهی، آرایشی است که به اوربیتال‌ها اجازه می‌دهد تا سر حد امکان از یکدیگر فاصله بگیرند.

برای اینکه همپوشانی این اوربیتال‌ها با اوربیتال کروی اتم هیدروژن به گونه‌ای مؤثر صورت پذیرد و در نتیجه، پیوند محکم‌تری تشکیل شود، هر هسته هیدروژن باید در یک گوشه این چهار وجهی قرار بگیرد. ساختار چهار وجهی متان به وسیله پراش الکترونی که آرایش اتم‌ها را در این نوع مولکول‌های ساده به روشنی نشان می‌دهد، تایید شده است. ما به طور معمول، متان را با یک خط کوتاه برای نمایش هر جفت الکترون مشترک بین کربن و هیدروژن نشان خواهیم داد. برای آنکه توجه خود را بر روی الکترون‌ها به طور انفرادی متمرکز کنیم، گاهی ممکن است یک جفت الکترون را به وسیله یک جفت نقطه نشان دهیم. سرانجام، وقتی بخواهیم شکل واقعی مولکول را نمایش دهیم، از فرمول‌های سه بعدی استفاده می‌کنیم.

واحد ساختار این ترکیب غیر یونی، مولکول است، چه جامد باشد، چه مایع و چه گاز. به علت اینکه مولکول متان بسیار متقارن است، قطبیت‌های انفرادی پیوندهای کربن-هیدروژن، یکدیگر را خنثی می‌کنند، در نتیجه کل مولکول غیرقطبی است. نیروهای جاذبه موجود میان این مولکول‌ها غیرقطبی، به نیروهای واندروالسی محدود می‌شوند، این نیروهای جاذبه، در مورد این مولکول‌های کوچک، باید در مقایسه با نیروهای قدرتمند موجود بین مثلا یون‌های سدیم و کلرید ضعیف باشند. بنابراین، به آسانی می‌توان به وسیله انرژی گرمایی، بر این نیروهای جاذبه فایق آمد، به طوری که ذوب شدن و جوشیدن در دمای پایین صورت بگیرد، تعجب نخواهیم کرد، دمای ذوب در ۱۸۳- درجه سانتی‌گراد و دمای جوش در ۱۶۱/۵- درجه سانتی‌گراد قرار دارد در نتیجه ، متان در دماهای معمولی یک گاز است. متان، بی‌رنگ است و وقتی مایع شود، سبک‌تر از آب است (چگالی نسبی آن ۴ است). موافق با قاعده تجربی که می‌گوید: «هم‌جنس در هم‌جنس حل می‌شود»، متان فقط کمی در آب انحلال پذیر است، ولی در مایعات آلی مانند بنزین، اتر و الکل بسیار حل می‌شود. از نظر خواص فیزیکی، متان الگویی برای سایر اعضا خانواده آلکان‌هاست. متان، فرآورده پایانی تجزیه غیر هوازی (بدون هوا) گیاهان، یعنی شکستن بعضی از مولکول‌های بسیار پیچیده است. همچنین یکی از اجزاء اصلی (بیش از ۹۷٪) گاز طبیعی است. متان همان گاز قابل احتراق و منفجر شونده معادن زغال سنگ است و می‌توان خروج حباب‌های آن را به عنوان گاز مرداب در سطح مرداب‌ها مشاهده کرد. اگر متان بسیار خالص لازم داشته باشیم، می‌توان آن را به وسیله تقطیر جزء به جزء از سایر اجزاء تشکیل دهنده گاز طبیعی (که بیشتر آلکان‌ها هستند) جدا کرد. البته بیشتر گاز طبیعی، بدون خالص سازی، به عنوان سوخت مصرف می‌شود[۱۳].

مولکول C_2H_6

اتان، از نظر اندازه، بعد از متان است. با توجه به اینکه هر اتم کربن به چهار اتم دیگر متصل شده است، اوربیتال‌های پیوندی آن (اوربیتال sp^3) به سمت گوشه‌های یک چهاروجهی هدایت می‌شوند. همانند متان، پیوندهای کربن - هیدروژن از اوربیتال‌های sp^3 با اوربیتال‌های s هیدروژن نتیجه می‌شوند. پیوند کربن – کربن از همپوشانی دو اوربیتال sp^3 حاصل می‌گردد. پیوندهای کربن - هیدروژن و کربن - کربن دارای توزیع الکترونی یکسان هستند و به شکل یک استوانه‌ی متقارن در حول خطی که هسته اتم‌ها را به هم متصل می‌کنند، است. به علت این تشابه شکلی، پیوندها با همان نام پیوند (پیوند سیگما) خوانده می‌شوند. بنابراین زوایای پیوند و طول پیوندهای کربن - هیدروژن در اتان بایستی بسیار شبیه متان باشد. پراش الکترونی و مطالعات طیف سنجی این ساختمان را از هر جهت تائید می‌کند و این اندازه‌ها را برای هر مولکول به‌دست می‌دهد[۱۴].