٢٠٣٣٠٥٠-١٥٤٤٩٣

دانشگاه رازی

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه دکتری رشته فیزیک

گرایش نانوتکنولوژی

عنوان پایان نامه:

بررسی خواص الکترونی نانوتیوبها و نانوریبونها

استاد راهنما:

دکتر رستم مرادیان

نگارش:

شاهدخت سهرابی ثانی

۱۳۹۰/۱/۲۰

مهر ۱۳۸۹

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
پژوهشگاه علوم و فناوری اطلاعات ایران
مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران
IRANDOC

۱۵۴۴۹۳

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات ، ابتکارات و
نوآوری های ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه
متعلق به دانشگاه رازی است.

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه دکتری رشته ی فیزیک

گرایش نانو تکنولوژی

نام دانشجو:

شاهدخت سهرابی ثانی

تحت عنوان:

بررسی خواص الکترونی نانولوله ها و نانوریبون ها

در تاریخ ۸۹/۷/۲۱ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه خوب به تصویب نهایی رسید.

۱- استاد راهنما	دکتر رستم مرادیان	با مرتبه ی علمی دانشیار	امضاء
۳- استاد داور داخل گروه	دکتر علی فتحعلیان	با مرتبه ی علمی استادیار	امضاء
۴- استاد داور خارج از گروه	دکتر سعید جلالی اسد آبادی	با مرتبه ی علمی استادیار	امضاء
۵- استاد داور خارج از گروه	دکتر غلامرضا راشدی	با مرتبه ی علمی استادیار	امضاء

به یاد پدرم

تقدیم به خانواده‌ام

چکیده

نانو ساختارها موادی هستند بااندازه هایی در حدود نانومترکه با توجه به شکل، اندازه وابعادشان خواصی متفاوت ازحالت توده ونیز متفاوت از حالت اتمی از خود نشان می‌دهند. نانو ساختار ها به شکلها واندازه های مختلف: نانو ذرات، نانو لوله های تک دیواره‌ی منفرد وکلاف، نانو جزیره ها، نانو ریبونها، و...سنتز وساخته می‌شوند و تحقیقات ومطالعات بسیاری رابه خود اختصاص داده اند. نانو ساختارها خواص مکانیکی، الکترونی، حرارتی وترابری منحصر به فردی از خود نشان می دهند. نانو لوله ها بسته به انحنایشان می توانند نانو سیمهای فلزی یا نیمه رسانا باشند. با توجه به خواص الکترونی یاد شده، سه نوع مختلف قطعه الکترونی بر اساس نانو لوله ها ساخته می‌شود. اولین آنها نانو لوله های نیمه رسانا هستند که مقداری نا خالصی بین آنها تزریق شده باشد. دومین دسته، اتصال دونانو لوله به یکدیگر است که حاصل آن نانو لوله ای است که برای ترابری بار در امتداد آن بسیار مناسب است و دسته سوم هم برقراری یک پل درمقیاس نانو مابین دو الکترود با فاصله‌ی کمتر از ۳۰^{nm} می باشد که می تواند به عنوان سیم کوانتمی در قطعات الکترونیک ملکولی بکاررود. از مهمترین خواص نانو لوله ها اسپین – الکترونیک یا اسپینترونیک است. در این حوزه، درجه آزادی اسپین الکترون برای انتقال و ذخیره اطلاعات و مخابرات قابل تنظیم و کنترل است. لذا نانولوله هابه عنوان رساناهایی به منظور ترابری اسپین در فواصل دور، ابزارهایی ایده آل به شمار می‌روند. نانولوله ها همچنین با داشتن مدول یانگ از مرتبه چندین TPa، خواص مکانیکی فوق العاده ای دارند واین سبب می شود که بتوان از آنها موادی با قدرت کشش بالا ساخت، بدون اینکه جسم دچار شکستگی و آسیب گردند.

محققان درمطالعه این مواد، روشها ومدلهای تجربی ونظری مختلفی بکار برده اند. در حوزه مطالعات نظری مدل بستگی محکم، نظریه تابعی چگالی و شبیه سازی دینامیک ملکولی از آن جمله است.

درفصل اول این پایان نامه تاریخچه ای از نانو ساختارها و مقدمه ای از خواص مختلف فیزیکی، شیمیایی، ترابری، اپتیکی و... آنها ونیز توضیحاتی در باره ساختار هندسی نانو لوله ها ارایه می شود. معرفی اجمالی نظریه تابعی چگالی و محاسبات ساختار نواری به فصل دوم اختصاص داده شده است. در فصل سوم نانوریبونها معرفی وساختار هندسی وخواص الکترونی آنها شرح داده شده است. همچنین اثر جذب گازهای O_2 وN_2 بر ساختار الکترونی نانو ریبونهای گرافنی آرمچیر در فصل سوم بررسی شده است. در فصل چهارم مقدمه ای از خواص وویژگیهای نیمه رسانای اکسید روی همچنین خواص نانو لوله تک دیواره اکسید روی ارایه شده است. در پایان، خواص الکترونی کلاف نانو لوله اکسید روی مطالعه شده است. نتیجه این مطالعات این است که ساختار الکترونی نانو لوله تک دیواره ZnO در حالت منفرد با ساختار الکترونی آن در حالت کلاف متفاوت است واز نیمه رسانایی در حالت منفرد به فلزی در حالت کلاف تغییر می کند.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول ساختارهای جدید : نانو ساختارها	۱
۱-۱ مقدمه	۲
۱-۲ خواص و کاربردهای نانوساختارها	۳
۱-۲-۱ خواص کلی	۳
۱-۲-۲ خواص ترابری فنون	۵
۱-۲-۳ خواص اپتیکی	۵
۱-۲-۴ خواص الکترونی	۶
۱-۳ نانولوله های کربنی	۱۰
۱-۳-۱ کربن	۱۰
۱-۳-۲ فولرنها	۱۲
۱-۳-۳ ساختار فولرنها	۱۲
۱-۳-۴ نانولوله های کربنی	۱۴
۱-۳-۵ ساختار هندسی نانولوله ها	۱۵
۱-۴ خواص نانولوله ها	۲۲
فصل ۲ آشنایی بانظریه تابعی چگالی	۲۴
۲-۱ مقدمه	۲۵
۲-۲ مدل توماس – فرمی	۲۷
۲-۳ قضیه هوهنبرگ – کوهن	۳۲
۲-۴ معادلات کوهن – شم	۳۸
۲-۵ تقریب چگالی جایگزیده(LDA)	۴۱
۲-۶ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)	۴۲
۲-۷ محاسبه ساختار نواری	۴۲
۲-۷-۱ روش یاخته ای	۴۲
۲-۷-۲ روش امواج تخت تقویت شده	۴۵
فصل ۳ بررسی خواص الکترونی نانوریبونهای گرافنی آرمچیر	۴۹
۳-۱ مقدمه	۵۰

۳-۲ ساختار گرافن ۵۱
۳-۳ خواص نانوریبونهای گرافنی ۵۳
۳-۴ جذب گاز بر روی نانو لوله هاونانو ریبونها ۵۵
۳-۴-۱ جذب گاز برروی نانولوله ها ۵۵
۳-۴-۲ جذب گاز برروی نانوریبونها ۶۱
۳-۵ مطالعات ونتایج ما ۶۲
۳-۵-۱ اثر جذب گاز O_2وN_2بر ساختار نواری
نانوریبونهای گرافنی آرم چیر ۶۲
۳-۵-۲ اثر غلظت گاز O_2وN_2 جذب شده بر خواص
الکترونی نانوریبونهای گرافنی آرم چیر ۶۸
فصل ۴ بررسی خواص الکترونی کلاف نانولوله های اکسید روی ۷۵
۴-۱ مقدمه ۷۶
۴-۲ ساختارهای ZnO ۷۹
۴-۲-۱ خواص ساختارهای ZnO ۷۹
۴-۲-۲ خواص نانوساختارهای ZnO ۸۱
۴-۳ نانولوله های ZnO ۸۲
۴-۳-۱ نانولوله های ZnOتک دیواره ۸۲
۴-۳-۲ مطالعه ساختار الکترونی نانولوله های
کلاف ZnO(۰و۹) ۸۶
واژه نامه ۹۴

فهرست شکلها

شکل — صفحه

شکل۱-۱: ۷

نمودار سطوح ا نرژی برای فلزات،نیمه رساناهاو عایقها. کادرهای سایه دارنوارهای ظرفیت اشغال شده،کادرهای سفید نوارهای رسانش (در صفر مطلق)وپیکانها انرژی گاف نـواری را نشان می دهند.

شکل ۱-۲: ۸

ساختار نواری نیمه رساناهای گاف مستقیم وغیر مستقیم.پیکانها پایین تـرین گـذار بـین نوارهای ظرفیت ورسانش را نشان می دهند.برای نیمه رسانای گاف غیر مستقیم تغییـری در k نیز ضروری است.

شکل۱-۳: ۱۰

مقایسه‌ی سطوح انرژی نیمه‌رسانای توده بانقاط کوانتمی و ملکولهای متنـاظر.الکترونهـای نیمه رسانا در نوارها، والکترونهای ملکولها در اربیتالهای ملکولی قرار دارند. پیکانهـا انـرژی گاف نواری را برای نیمه‌رسانای توده،وبـالاترین اربیتـال ملکـولی اشـغال شـده(HOMO) وپایین ترین اربیتال ملکولی اشغال نشده(LUMO)در ملکول رانشان می‌دهند. در مقیاس نانومتری، ساختار الکترونی نقاط کوانتمی نیمه‌رسـانا مـابین نوارهـا و اربیتالهـای ملکـولی است.

شکل ۱-۴ : ۱۱

ساختارهای گرافیت، الماس، ملکولC_{60} و یک نانو لوله کربنی.

شکل ۱-۵: ساختار $C_{۶۰}$. ۱۳

شکل ۱-۶: ساختار $C_{۷۰}$. ۱۴

شکل ۱-۷: ۱۵

دو فرم از نانولوله های کربنی، a : ساختار یک نانو لوله چند دیواره.

b : ساختار یک کلاف لوله های تک دیواره.

شکل ۱-۸: ساختار ورقه گرافن ۱۷

شکل ۱-۹ : ۱۸

سه نوع نانو لوله : a) : $\theta=30°$ آرایه آرم چیر b) : $\theta=0°$ آرایه زیگزاگ

C): $\theta\neq0°$ or $30°$ آرایه کایرال.

شکل ۳-۱ : ۵۲

شبکه گرافن . بردارهای $\vec{a_1}$ و $\vec{a_2}$ بردارهای پایه شبکه هستند.

شکل ۳-۲ : ۵۳

(a)یک نانوریبون گرافنی زیگزاگ، و(b) یک نانوریبون گرافنی آرم‌چیر. در جهت خطوط خط چین، دستگاهها دوره ای هستند .

شکل ۳-۳ : ۵۴

ساختارهای الکترونی نانوریبونهای گرافنی آرم چیر با پهناهای مختلف n=6 (a و n=7 (b) و n=8 (c)

شکل ۳-۴ : ۵۵

a,b: ساختار نواری نانوریبونهای گرافنی آرم چیر باپهناهای مختلف .

c,d :ساختار هندسی این نانوریبونها وقتی که با NO_2 و NH_2 لبه دار شده اند.طول پیوندها از a_1 تا a_6 به ترتیب برابر ۱/۳۶ و۱/۴۰ و۱/۳۹ و۱/۳۷ و۱/۴۲ ۱/۳۷ انگستروم وزوایا ی γ_1تا γ_4 به ترتیب برابر ۱۲۲/۸ و۱۲۰/۶ و۱۱۷/۵ و۱۲۶/۶ درجه است.

شکل ۳-۵: ۵۶

ساختارهای نواری نزدیک سطح فرمی در a نانولوله کربنی (۱۰و۰) با جذب NH_3 وb نانولوله خالص وc نانولوله کربنی (۱۰و۰) باجذب NO_2 .

شکل ۳-۶: ۵۷

چگالی حالتهای الکترونی متناظر با ساختارهای نواری شکل ۳-۵.

شکل ۳-۷: ۵۸

نانولوله هامی توانند گاز را درون خود ذخیره نمایند.

شکل ۳-۸ : ۵۹

جذب گاز O_2 بر روی نانو لوله های آرم چیر وزیگزاگ.

شکل ۳-۹: ۶۰

چگالی حالتها برای نانو لوله (۱۰و۰) خالص ونانولوله (۱۰و۰)با جذب O_2.

شکل ۳-۱۰: ۶۰

چگالی حالتها برای نانو لوله (۵و۵) خالص ونانولوله (۵و۵)با جذب O_2.

شکل۳-۱۱ : ۶۳

(a) سه یاخته واحد نانوریبون کربنی آرم چیر با لبه های هیدروژنه که در آن هر یاخته واحد پهنایی برابر دو شش گوش دارد. دستگاه در جهت محور افقی دوره ای است . (b)، دو ابریاخته از دستگاه مورد نظر را نشان می دهد.

شکل ۳-۱۲: ۶۴

ساختار نواری نانوریبون گرافنی آرم چیربا لبه های هیدرژنه(HEAGNR). گاف انرژی برابر ۰/۲۱eV می باشد.

شکل ۳-۱۳ : ۶۵

اکسیژن (بالایی) و نیتروژن (پایینی)جذب شده برروی HEAGNR .

هر سه یاخته واحد، یک ملکول گاز O_2 یا N_2 جذب نموده است .

شکل ۳-۱۴ : ۶۶

ساختار نواری نانوریبون کربنی آرم چیر با لبه هیدرژنه که در آن هر سه ابریاخته یک ملکول اکسیژن جذب کرده است.

شکل ۳-۱۵: ۶۷

ساختار نواری نانوریبون کربنی آرم چیر با لبه هیدرژنه که در آن هر سه ابریاخته یک ملکول نیترژن جذب کرده است.

شکل ۳-۱۶: ۶۸

یک یاخته واحد HEAGNR با پهنای ۱/۹۶۷nm. هر یاخته واحد شامل ۳۴ اتم کربن و ۴ اتم هیدروژن است .

شکل ۳-۱۷: ۶۹

چهار یاخته واحدنانوریبون کربنی آرم چیر با لبه های هیدروژنه و پهنای ۱ /۹۶۷nm دستگاه در جهت محور y دوره ای است .

شکل ۳-۱۸: ۷۰

جذب نیتروژن بر روی نانوریبون گرافنی آرم چیربالبه های هیدروژنه. هر سه یاخته واحدیک ملکول نیتروژن جذب کرده است و پارامترهای بهینه سازی روی شکل نشان داده شده است .

شکل ۳-۱۹: ۷۰

جذب اکسیژن بر روی نانوریبون گرافنی آرم چیر با لبه های هیدروژنه. هر سه یاخته واحد یک ملکول گاز اکسیژن جذب نموده است .

شکل ۳-۲۰: ۷۱

چگالی حالتهای نانوریبون گرافنی آرم چیر خالص با لبه های هیدرژنه(HEAGNR).

شکل ۳-۲۱: ۷۲

چگالی حالتهای HEAGNR که ملکولهای اکسیژن را با غلظت C=0/08823 جذب نموده است.

شکل ۳-۲۲: ۷۳

کاهش گاف انرژی بر حسب غلظت O_2 جذب شده .در غلظت بحرانی c=۰/۱۰۹ یک گذار فاز نیمه رسانا - فلز اتفاق می افتد .

شکل ۳-۲۳: ۷۳

کاهش گاف انرژی بر حسب غلظت N_2 جذب شده .

شکل ۴-۱: ساختارنانو جزیره های مختلف ZnO ۷۷

شکل ۴-۲: ساختار ZnO ۷۹

شکل ۴-۳: ۸۳

تصویر نانولوله ZnO که با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی گرفته شده است.

شکل ۴-۴: ۸۳

تصویرنانوسیمهای ZnO که بااستفاده ازمیکروسکوپ الکترونی روبشی گرفته شده است

شکل ۴-۵: ۸۴

ساختار نواری و چگالی حالتها برای یک نانو لوله آرم چیر ZnO تک دیواره (۵و۵)

شکل ۴-۶: ۸۵

ساختار نواری و چگالی حالتها برای یک نانولوله زیگزاگ ZnO تک دیواره (۰و۹)

شکل ۴-۷: ۸۶

ساختار نشان دهنده نانولوله ZnO، (۰و۹)

شکل۴-۸: ۸۷

یک ابریاخته کلاف نانولوله ZnO (۰و۹).

شکل ۴-۹: ۸۹

انرژی اندر کنش بین لوله ای در واحد طول بر حسب تابعی از فاصله بین لوله ای برای نانولوله کلاف ZnO (۰و۹). انرژی اندرکنشی بین لوله ای در ۳/۱۴Å برای نانولوله های کلاف اکسید روی کمینه می شود، این، فاصله تعادلی کلاف است.

شکل ۴-۱۰ ..... ۸۹

(a): دو نانولوله ZnO تک دیواره منفرد در کلاف که دو اتم یکسان (Zn یا O) کنار یکدیگر قرار گرفته اند . θ زاویه چرخش یکی از این اتمها نسبت به اتم دیگر است .

(b) : انرژی اندر کنش بین لوله ای بر حسب θ که در آن کمینه انرژی در θ=30° اتفاق می‌افتد.

شکل ۴-۱۱: ۹۰

ساختار نواری نانولوله ZnO منفرد (۰و۹) در امتداد محور .

شکل ۴-۱۲: ۹۱

ساختار نواری نانولوله ZnO کلاف در امتداد جهتهای تقارنیR-Λ-Γ-Δ-X منطقه اول بریلوین.

شکل ۴-۱۳: ۹۲

چگالی حالتها برای نانولوله کلاف ZnO .

شکل ۴-۱۴: ۹۳

سهم اربیتالهای 4s , 3p, 3d اتم Zn در چگالی حالت نانولوله کلاف ZnO(۹۰و) .

جدول۴-۱: ۸۱

برخی از خواص فیزیکی مهم ZnO .

فصل ۱

آشنایی با ساختارهای جدید:

نانو ساختارها

۱ – ۱ مقدمه

نانو ساختار ها موادی با ابعاد پایین هستند که از لحاظ اندازه بین اتمها یا ملکولها و جامدات توده ای می باشند . یک نانو ساختار به صورت ساختاری که اندازه آن درحدود ^{nm}۱۰۰-۱ است تعریف می شود. این مواد جدید که امروزه روشهای سنتز و تولید آنها گسترش یافته ،خواص فیزیکی و شیمیایی متفاوتی نسبت به حالت توده و نیز متفاوت از خواص فیزیکی و شیمیایی اتمها و ملکولهای تشکیل دهنده آنها دارند . این خواص شدیدا به اندازه و شکل آنها بستگی دارد و به وسیله اثرات اندازه کوانتمی کنترل می شوند. به طور کلی درمطالعات مربوط به نانو ساختار ها بر روی توانایی اصلاح مواد تمرکز می شود، به طوری که خواصی داشته باشند که در حالت توده آنها وجود ندارد. این خواص شامل خواص الکترونی، ساختاری، مغناطیسی، اپتیکی، ابررسانایی، ترابری و فرو الکتریک مواد است. انواع نانو ساختار ها شامل نقاط کوانتمی ، نانو بلورها و خوشه ها، ملکولهای بزرگ و باکی بالها، نانولوله ها، نانو ریبونها و انواع مواد با اندازه کاهش یافته است. نانو ساختار ها می توانند آزادانه وجود داشته یا درون محیط یا ماده بسته ای قرار گرفته یا در مواد دیگر جاسازی شده باشند. بررسی ساختار الکترونی موادی که اندازه محدود دارند در فهم قطعات اپتوالکترونی، الکترونی و...اهمیت اساسی دارد. همچنین خواص ساختاری مواد و درک این که چگونه خواص توده ای آنها تحت اثر قرار می گیرند مهم است و مورد توجه می باشد.

نانو ساختارهای دو بعدی (یا چاه های کوانتمی) [۱] به طور گسترده ای توسط مدار های مجتمع نیمه رسانا مطالعه شده اند[۲] .

اخیرا نانو ساختار های یک بعدی مانند سیمها، میله ها،کمربندها ولوله ها برای مطالعه وتحقیق درمورد کاربرد های منحصر به فردشان در فیزیک مزوسکوپیک وساخت قطعات نانو مقیاس شدیدا مورد توجه قرار گرفته اند[۳]. به طور کلی برای مطالعه خواص ترابری الکتریکی وحرارتی یاخواص مکانیکی و وابستگی این خواص به کاهش اندازه وابعاد(یااثرات محدودیت کوانتمی)، نانو ساختار های یک بعدی، دستگاه های مناسبی می باشند. نانولوله-های کربنی ملکولهایی استوانه ای شکل هستند که فقط از اتمهای کربن تشکیل شده اند. می توان نانو لوله ها را به صورت استوانه هایی یکپارچه که از ورقه گرافیتی با ساختار شبکه شش گوشی شکل گرفته است تصور نمود. نانولوله های کربنی به صورت تک دیواره با قطری در حدود ^{nm}۱۰-۱یا به صورت نانولوله های چنددیواره با قطرهایی در حدود ^{nm}۳۰-۵ و نیز با طولی از حدود چند نانومتر تا چند میلیمتر می توانند وجود داشته باشند[۴] . خواص نانولوله هابسیار وابسته به ساختار اتمی آنهاست. به محض کشف نانولوله ها، تحقیقات نظری و

تجربی گسترده ای بر روی آنها و خواص متنوعی که دارند آغاز شد [۵]. ملکول کروی $C_{۶۰}$ در سال ۱۹۸۵توسط کروتو و اسمالی به طور تجربی که با تبخیر لیزری گرافیت انجام شد کشف گردید[۶]. بعدا نانولوله های کربنی از طریق تحقیقاتی که بر روی فولرنها انجام می گرفت توسط آی جیما در سال ۱۹۹۱ کشف شد[۷].گروه کروتو و اسمالی روش اساسی تولید ملکول $C_{۶۰}$ را آشکار کردند و نشان دادند که ملکول $C_{۶۰}$ یک ماده مجتمع بسته پایدار است .کاربعدی توسط کراچمر و هافمن بود که ملکولهایی بزرگتر از فولرنها را از طریق فرایند های تخلیه قوس الکتریکی تولید کردند و بر وجود ساختار کروی $C_{۶۰}$ صحه گذاشتند[۸]. آی جیما با استفاده از میکروسکوپ الکترونی عبوری، دوده کربن را به دقت مورد بررسی و مطالعه قرار داد که این منجر به کشف نانو لوله ها شد .کشف اولیه او نانولوله های کربنی چند دیواره بود و بعدا در سال ۱۹۹۳ خبر تولید اولین نانولوله های کربنی تک دیواره در گزار شهایی مستقل از هم اعلام گردید[۹].

۱-۲ خواص و کاربرد های نانو ساختار ها

۱-۲-۱ خواص کلی

در مقایسه با مواد توده ای، مواد نانو ساختاری که دارای ابعاد پایینی هستند و با توجه به مساحت سطح بزرگ و اثرات محدودیت کوانتمی، خواص گرمایی، شیمیایی، الکترونی و اپتیکی متفاوتی از خود نشان می دهند. وقتی که مواد به صورت نانو ساختار سنتز می شوند نقطه ذوب شان شدیدا کاهش می یابد[۱۰]. برای سایز نانو ذرات هنوز یک تعریف جهانی ارایه نشده است. تعداد بسیاری از مقالات، یک نانو ذره را به صورت ماده ای که حداقل یک بعد آن کمتر از ۱۰۰^{nm} است تعریف می کنند. از زمان رومیها نانو ذرات فلزی به عنوان رنگدانه های تزیینی به کاربرده می شده است. در سال های اخیر، نانو ذرات فلزی توجه بسیار زیادی از محققین را به خود جلب کرده است و این به دلیل اثری است که اندازه و شکل نانو ذرات بر روی خواص اپتیکی آنها می گذارد. برای مثال رنگ طلا دُر شکل توده آن زرد است. اما رنگ فیلمهای نازک طلا به نظر آبی می رسند. وقتی که اندازه ذره تا حدود ۳^{nm} کاهش می یابد این تغییر رنگ از آبی به بنفش، قرمز و نارنجی تغییر می کند [۱۱]. تغییر رنگ در طلا نتیجه ذرات فلزی است. الکترونهای رسانش در پاسخ میدان الکتریکی متناوب حاصل از تابش الکترومغناطیس فرودی (نورفرودی)، نوسان می کنند میدان الکتریکی نور فرودی یک دوقطبی را در نانو ذرات فلزی ایجاد می کند (القا می کند). یک نیروی بازگرداننده در نانو ذرات فلزی سعی می کند این تغییررا جبران کند، که حاصل طول موج تشدید یکتایی می باشد. این پاسخ نانو ذرات فلزی به نور فرودی در یک طول موج خاص، به عنوان تشدید پلاسمون سطحی جایگزیده معروف است. نانو ذرات فلزی همچنین به عنوان عوامل رنگ کننده برای

آشکارسازی ملکولهای زیستی به کار می روند. نانو ذرات Fe_3O_4 با قطرهایی در حدود ^{nm}۱۰۰-۵ خواص ابرپارامغناطیس دارند. آنها به میدان مغناطیسی جذب می شوند، اما پس از حذف میدان مغناطیسی، هیچ خاصیت مغناطیسی باقی نمی گذارند[۱۲]. می توان آنها را به عنوان عوامل پیوند برای جدا کردن ملکول مورد نظر از محیط اطرافش با اعمال میدان مغناطیسی به کار برد. نانو ذرات ابر مغناطیس همچنین به عنوان عوامل کنتراست برای افزایش وضوح تصویر برداری مغناطیسی (MRI) به کار برده می شوند [۱۳].

در یک مجموعه مطالعات محققان از روشهای اسپکتروسکوپی به منظور بررسی و مطالعه ذوب حرارت نوری و تغییر شکل نانو میله های طلا که در محلولهای میسلی پراکنده شده بودند بهره بردند [۱۴]. آنها در یافتند که هنگامی که نانو میله ها تحت اثر پالسهای لیزری با انرژی متوسط قرار گرفتند، نانو میله ها ذوب شده و به صورت ذرات کروی تغییر شکل یافتند. در انرژی های بالاتر، نانو میله ها خرد شدند و سپس به صورت ذرات کروی با ابعاد کوچکتر تغییر شکل یافتند.آنها همچنین مشخص کردند که یک انرژی متوسط در حدود ۶۰ فمتو ژول برای ذوب یک نانو میله منفرد طلا که در یک محیط آبکی قرار گرفته لازم است [۱۴].

فهم خواص مکانیکی نانو ساختارها برای ساخت و سنتز و اصلاح این مواد که دارای مقیاس اتمی هستند ضروری می باشند. زیرا وقتی که ابعاد از میکرو به نانو کاهش می یابد رفتار این ساختار ها کاملامتفاوت می شود. برای مثال، سختی و استرس بدست آمده از یک ماده چند بلوری نوعی، با کاهش اندازه دانه های آن به حد میکرومتر، افزایش می یابد[۱۵]. هنگامی که اندازه دانه ها کاهش می یابد، مساحت مرز های آنها افزایش می یابد و بدینوسیله با مسدود کردن در رفتگیها، ماده محکمتری بدست می آید. با این حال محققان در شبیه سازیهایشان یک رفتار متناقض در مقیاس نانو متری کشف کردند. آنها اندازه دانه های نمونه های نانو بلوری مس و پالادیم را کاهش داده به طوری که نمونه ها نرم تر شدند [۱۶]. این رفتار غیر عادی در واقع ناشی از حرکتهای لغزشی در مساحتهای مرز دانه است. در نتیجه هنگامی که اندازه دانه کاهش می یابد، استحکام ماده چند بلوری ابتدا افزایش یافته و سپس کاهش می یابد. یک پارامتر طول برای هر ماده جامد وجود دارد که مستحکم ترین وضعیت آن را بدست می دهد. برای نانو مواد مس و پالادیم، این پارامتر طول به ترتیب در حدود ^{nm}۱۹/۳ و ^{nm}۱۱/۲می باشد. در واقع این نتایج بر اساس مطالعات دستگاه های صفربعدی است که برای دستگاه های یک بعدی نیز می توان آن را بدست آورد.

روش مفید دیگری بر اساس تشدید نوسان به منظور اندازه گیری خواص مکانیکی یک نانو ساختار یک بعدی منفرد انجام شده است [۱۷]. محققان یک انتهای یک نانو لوله کربنی را به سطح یک نگهدارنده نمونه در میکروسکوپ الکترونی عبوری متصل کردند، و یک نانو ذره را به انتهای آزاد نانولوله وصل نمودند. با اندازه

گیری فرکانس تشدید، مدول یانگ این نانو لوله را اندازه گیری نمودند. در واقع این روش را می توان برای اندازه گیری پارامتر های مکانیکی نانو سیمها گسترش داد.

۱-۲-۲ خواص ترابری فنون

تا کنون خواص ترابری الکترون به طور گسترده ای مورد مطالعه قرار گرفته است. امامطالعه خواص ترابری فنون در نانو ساختار های یک بعدی خیلی زیاد گزارش نشده است. هنگامی که ابعاد یک نانو ساختار به مرتبه متوسط مسیر آزاد فنون کاهش می یابد، هدایت گرمایی به علت پراکندگی در مرز ها کاهش می یابد. مطالعات نظری پیشنهاد می کنند که هنگامی که شعاع یک نانو سیم سیلیکون کوچکتر از ۲۰^{nm} می شود، رابطه پاشندگی فنون باید اصلاح شود (در نتیجه محدودیتهای فنونی)، طوری که سرعتهای گروه فنون به طور قابل ملاحظه ای از مقدار توده آن کمتر می شود[۱۸]. همچنین شبیه سازی های دینامیک ملکولی نشان داده اند که مقدار هدایتهای گرمایی نانوسیمهای سیلیکون دو برابر کمتر از آن در مورد توده سیلیکون در مرتبه دمایی ۲۰۰k تا ۵۰۰k می باشد [۱۹]. کاهش هدایت گرمایی در برخی کاربرد ها مانند سرمایش ترموالکتریک و تولید توان، مطلوب است، اما برای کاربرد های دیگر مانند الکترونیک و فوتونیک رجحانی ندارد. به طور نظری پیش بینی شده است که خواص ترمو الکتریک نانو سیمها را می توان با تعیین دقیق قطر آنها و غلظت حاملها و ترکیباتشان به طور قابل ملاحظه ای بهبود بخشید [۲۰]. این پیش بینی هنوز نیاز به اندازه گیری تجربی هدایت گرمایی، ضرایب سیبک، تحرک پذیری حامل ها، و هدایت الکتریکی نانو سیمهای مختلف دارد. دستگاه های ترمو الکتریک خوب شامل نانو سیمهای ساخته شده از Bi، BiSb, Bi_2Te_3 می باشد [۲۱]. نانو سیمهای ابرشبکه Si/SiGe نیز اخیراساخته و توسعه داده شده اند [۲۲].

۱-۲-۳ خواص اپتیکی

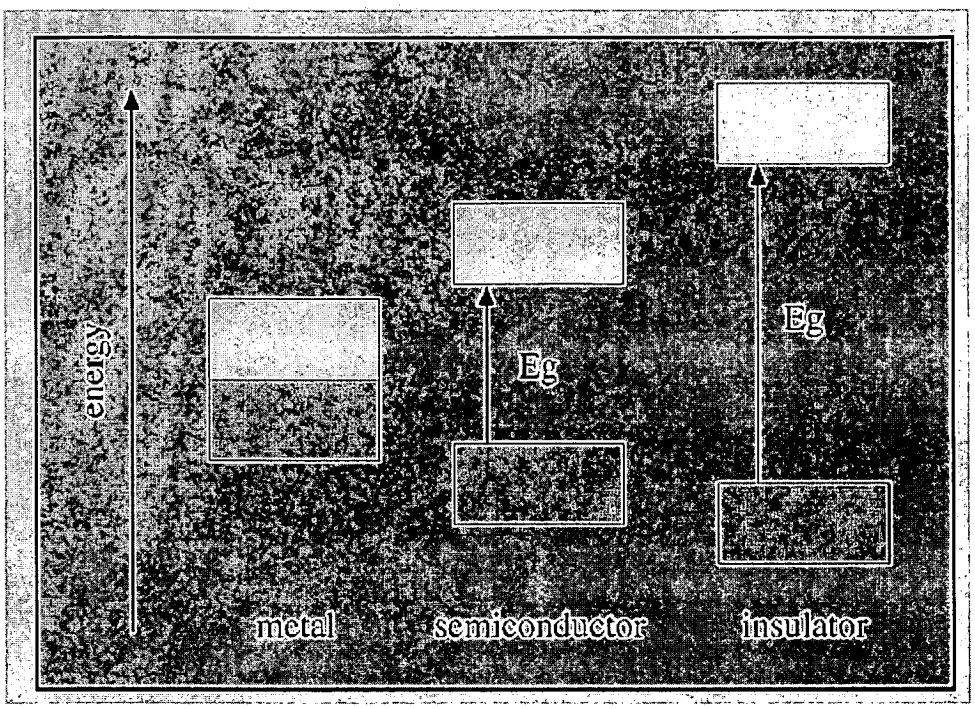
همانند نقاط کوانتمی، هنگامی که قطر نانو سیمهابه کمتر از حد بحرانی یعنی شعاع بوهر می رسد اثرات محدودیت کوانتمی نقش مهمی در تعیین سطوح انرژی آنها بازی می کند. نشان داده شده است که لبه جذب نانو سیمهای Si در مقایسه با سیلیکون توده با گاف نواری غیر مستقیم (در حدود ۱/۱eV)، به طور قابل ملاحظه ای جابه جایی آبی پیدا می کند [۲۳]. همچنین طبیعت منفصل و تیزی در فتولومینسانس لبه باند نسبتاقوی در طیف جذبی مشاهده شده است. منشا این ویژگیهای اپتیکی از اثرات محدودیت کوانتمی است، گرچه حالتهای سطحی نیز ممکن است در آن موثر باشد [۲۴]. به علاوه

تغییر جهت رشد برای این نانو سیمهای سیلیکون منجر به خصوصیات اپتیکی متفاوتی شد. برای مثال نانو سیمهای جهت <100> یادآور خصوصیت قوی نقطه بحرانی در ساختار نواری سیلیکون با افزایش آرام گذار اپتیکی فنون می شود، در حالی که نانو سیمهای سیلیکون جهت <110> گذار های نوع ملکولی را به طور متمایزی نشان دادند. سیمهای جهت <100> همچنین انرژی اکسیتون بالاتری نسبت به جهت <110> از خود به نمایش گذاشتند.

۱-۲-٤ خواص الکترونی

مواد معدنی دارای سه نوع ساختار الکترونی هستند: فلزات، نیمه رسانا ها و عایقها. در این مواد ، اربیتالهای اتمی همپوشانی می کنند و در نتیجه سطوح انرژیشان تقریبا پیوسته می شود طوری که آنها را به عنوان باند یا نوار انرژی می شناسیم. ساختار الکترونی فلزات طوری است که نوار آنها به صورت جزئی پر شده است، نیمه رسانا ها یک نوار پردارند (نوار ظرفیت) که از نوار رسانش به وسیله گاف نواری E_g جدا می شود. عایقها هم از نظر ساختار الکترونی مثل نیمه رساناها هستند با این تفاوت که گاف نواری آنها بزرگتر از عایقهاست (شکل۱-۱). گاف نواری فلزات کمتر از حدود ۰/۱ eV ، در نیمه رسانا ها بین ۰/۵eV تا ۳/۵eV ودر عایقها بزرگتر از ۴eV است. با این حال، بین ساختار الکترونی ملکولها و مواد حالت جامد مانند نیمه رساناها اختلافات اساسی وجود دارد. یک الکترون که در شبکه جامد حرکت می کند در حالت کلی به صورت شکل اصلاح شده موج الکترون آزادی است که تحت اثر بار های نقطه ای محصور شده یعنی اتمها حرکت می کند. درمدل الکترون آزاد، ممنتم الکترون متناسب است با k بردار موج که با رابطه زیر به طول موج مربوط می شود:

$$K = \frac{2\pi}{\lambda} \qquad (۱-۱)$$



شکل۱-۱. نمودار سطوح ا نرژی برای فلزات، نیمه رساناها و عایقها. کادر های سایه دار نوارهای ظرفیت اشغال شده،کادرهای سفید نوارهای رسانش (در صفر مطلق) وپیکانها انرژی گاف نواری را نشان می دهد.

در حل معادله شرودینگر برای یک الکترون بر حسب طول موج آن (وبنابر این k)، انرژی در یک بعد به صورت زیر نوشته می شود:

$$E = \frac{h^2 K^2}{8\pi^2 m} \qquad (۲-۱)$$

که در آن E انرژی الکترون، m جرم و k بردار موج آن است. نمودار ساختار نواری ساده شده شکل (۱-۱) را می توان بر حسب k دوباره رسم کرد (شکل ۱-۲).