بسم الله الرحمن الرحيم

اَلحمدِ لِلّهِ الذی هدانا لِهذا و ما کُنا
لِنهتدی لَو لا اَن هدانا اللّه

دانشکده علوم، گروه فیزیک

پایان نامه دکتری فیزیک گرایش حالت جامد

عنوان پایان نامه:

بررسی نظری خواص الکترونی و اپیتکی نانو لوله‌های کربنی تک‌جداره و پیپادها

نگارش:

طیبه مولاروی

اساتید راهنما:

دکتر سید محمد حسینی، دکتر احمد کمپانی و Prof. Claudia Ambrosch-Draxl

استاد مشاور:

دکتر ناصر شاه طهماسبی

بهار ۸۹

"اللهم یا من لایصفه نعت الواصفین"

"ای پروردگاری که هیچ وصافی وصف تو نتواند کرد."

پروردگارا سپاس تورا گویم که اهل حمدی و شایسته ستایش. مرا مشمول لطف خود ساختی و نعمت خود را بر من تمام کردی و چنان کردی که من از شکر و سپاسگزاری آن عاجزم. با من احسان فرمودی قبل از آنکه از تو درخواست کنم و به من عنایت کرده و امور مرا کفایت فرمودی در حالیکه من خود عاجز از انجام کار خود بودم. هرگاه سوال کردم بدون آنکه روی در هم کشی عطا فرمودی و مرا رهین منت خود ساختی، خدایا هر وقت اراده کردم و به سوی تو روی نیاز آوردم مرا پذیرفتی، و در هر زمان نعمت تو بر تقاضای من سبقت داشت.

خدایا تورا به زبان و دل و اعضا و عقل و عمل حمد می کنم. حق حمدی که در خور شکر نعمت تو باشد اما هرگز به آن اندازه نمی توان شکر تو به جای آورد. حمدی که به قدر رضای تو از من باشد. شاکرترین بندگانت از شکر تو عاجز و عابدترین ایشان مقصورند.

خدایا سپاسگزاری من از نعم بی پایان تو ناچیزتر و عطایای تو افزونتر از شکر و سپاس است.

فرازهایی از صحیفه سجادیه

"من علمنی حرفاً فقد صیّرنی عبداً."

اکنون که به یاری پروردگار مهربان این پژوهش به پایان رسیده بر خود لازم می‌دانم که از تمامی اساتید گرانقدری که تاکنون در زمینه تحصیل و آموختن علم مرا یاری نموده‌اند تشکر و قدردانی کنم. به ویژه نهایت تشکر و سپاسگزاری را از جناب آقای دکتر سید محمد حسینی، دکتر احمد کمپانی و همچنین Prof. Claudia Ambrosch-Draxl ، اساتید راهنمای گرانقدر، و همچنین آقای دکتر ناصر شاه طهماسبی، استادمشاور گرامی، دارم که با راهنمایی‌ها و زحمات بی دریغ شان از آغاز تا انجام کار مرا یاری نمودند.

از مدیریت محترم گروه فیزیک جناب آقای دکتر میری به خاطر زحمات بی شائبه ایشان تشکر فراوان دارم. همچنین از اساتید محترم مدعو داخلی جناب آقای دکتر محمود رضایی رکن آبادی و دکتر ابراهیم عطاران، نماینده محترم تحصیلات تکمیلی جناب آقای دکتر هادی عربشاهی، و اساتید محترم مدعو خارجی جناب آقای دکتر فرشاد ابراهیمی از دانشگاه شهید بهشتی و جناب آقای دکتر صابر فرجامی شایسته از دانشگاه رشت، به خاطر تقبل زحمت مطالعه پایان نامه و حضور در جلسه دفاع نهایت تشکر را دارم.

در پایان جا دارد از تمامی اعضاء گروه آموزشی فیزیک و پدر و مادر عزیزم که دعای خیرشان همیشه بدرقه راهم بوده و مشوق اصلی ام، خواهر عزیزم فاطمه مولاروی و تمام دوستانی که یاری ام کردند قدردانی کنم.

طیبه مولاروی

تقدیم به:

پدر و مادر عزیزم

به پاس مهربانی دریغ‌شان

چکیده

در این پژوهش ساختار الکترونی و خواص اپتیکی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره زیگزاگ، دسته صندلی و کایرال و همچنین پیپادها (نانو لوله‌های کربنی پر شده با مولکول‌های نیمرسانا)، به کمک نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل در چار چوب نظریه تابعی چگالی هوهنبرگ، کوهن و شم با تقریب شیب تعمیم یافته به کمک کدهای Wien2K انجام گرفته است.

اولین، دومین، سومین و چهارمین گذار اپتیکی برای انواع نانولوله‌های کربنی تک‌جداره با کایرالیتی، قطر و طول مختلف محاسبه شده است.

تمام توابع اپتیکی نظیر تابع دی‌الکتریک، شدت انتقال بین نواری، تابع اتلاف انرژی، هدایت اپتیکی، قاعده جمع قدرت نوسانگر، ضریب‌جذب، ضریب شکست، انعکاس و ضریب خاموشی در هر دو راستای میدان موازی (قطبش موازی) و عمود (قطبش عمودی) با محور نانولوله مورد مطالعه قرار گرفته است. طیف‌های اپتیکی محاسبه شده حول دو قطبش اعمالی کاملا ناهمسانگرد بوده و ثابت‌های اپتیکی به‌دست آمده در راستای میدان موازی نسبت به راستای عمودی بسیار بزرگتر است. برای محاسبه توابع اپتیکی از تبدیلات کرامرز- کرونیک استفاده شده است.

در نانولوله‌های فلزی نظیر (۳،۳) و (۴،۱) ابتدا محاسبات را بدون در نظر گرفتن سهم انتقالات درون نواری انجام داده و سپس محاسبات را با در نظر گرفتن سهم انتقالات درون نواری، علاوه بر انتقالات بین نواری، تکرار نموده‌ایم. نتایج به‌دست آمده در توافق خوبی با نتایج نظری و تجربی دیگران است.

سیستم‌های پیپاد مورد بررسی در این پژوهش شامل نانولوله‌های کربنی زیگزاگ (۱۰،۰) و (۱۲،۰) پر شده با پلی‌تایوفین می باشد. با ورود پلی تایوفین داخل نانولوله‌های کربنی، اثر حضور پلی تایوفین بر خواص الکترونیکی و اپتیکی این نانولوله‌ها بررسی شده است. به‌خصوص پیدایش ویژگی‌های جدید در تابع دی‌الکتریک و تابع اتلاف انرژی، ناشی از انتقالات اپتیکی بین حالت‌های پلی‌تایوفین و نانولوله، مورد مطالعه قرار گرفته است. همچنین مشخص شد که برهمکنش بین پلی‌تایوفین و نانولوله از نوع واندروالس می‌باشد.

با توجه به اینکه تاکنون مطالعاتی روی این‌گونه سیستم‌های پیپاد صورت نگرفته است، امیدواریم که نتایج ما بتواند جهت مطالعات نظری و تجربی آینده مفید واقع گردد.

Abstract

In this work, the electronic structure and the linear optical properties of the zigzag, armchair and chiral single walled carbon nanotubes (SWCNTs) and peapods (carbon nanotubes filled by organic molecules), were investigated using density functional theory (DFT). The calculations were performed by the full potential-linearized augmented plane wave method (FP-LAPW), employing Wien2K code, in the framework of DFT with generalized gradient approximation (GGA).

We have calculated first, second, third and fourth optical transitions in several SWNTs with different chiralities, diameters and lengths.

All optical spectra such as: dielectric function, joint density of states, loss function, optical conductivity, sum rule, absorption coefficient, refractive index, reflectivity and the extinction coefficient are calculated for both electric field polarizations, parallel and perpendicular to the tube axis. It is revealed that the optical spectra are anisotropic along the two axis and the optical constants for the parallel polarization is found to be much larger than perpendicular polarization. The Kramers-Kronig transformations have been used to obtain the optical spectra.

In the metallic nanotubes, like (3,3) and (4,1), the calculations were first done without considering the intraband transitions contribution and then we recalculated the optical spectra by adding the intraband transitions contribution, in addition to the interband transitions. The results are in good agreement with the other theoretical and experimental reports.

The peapod systems, that were investigated in this work, are the zigzag (10,0) and (12,0) carbon nanotubes, filled with polythiophene. By encapsulation of the polythiophene into the zigzag nanotubes, we tried to found out how the presence of the polythiophene inside the cavity can alter the electronic and optical properties of these nanotubes. In particular, we inspect new features in the dielectric and the loss functions due to the new transitions between the states of the polythiophene and the nanotube. It is revealed that these systems are almost exclusively van-der-Waals bound.

Up to our knowledge there has not been any calculation on this type of peapod systems so far, so our results can be useful for the future theoretical and experimental studies on these systems.

« فهرست مطالب »

عنوان **صفحه**

پیش گفتار ۱

فصل اول:

معرفی نانو لوله‌های کربنی

۱-۱ تاریخچه فن‌آوری نانو ۴

۱-۲ اهمیت نانو ابعاد ۵

۱-۳ شاخه‌های فن‌آوری نانو ۶

۱-۳-۱ نانو فن‌آوری مرطوب ۶

۱-۳-۲ نانو فن‌آوری خشک ۶

۱-۳-۳ نانوفن‌آوری محاسباتی ۷

۱-۴ خواص نانو مواد ۷

۱-۵ آلوتروپ‌های کربن ۸
۱-۵-۱ گرافیت ۱۰
۱-۵-۲ نانو لوله های کربنی ۱۰
۱-۵-۲-۱ خواص نانو لوله‌های کربنی ۱۲
۱-۵-۲-۲ کاربردهای نانولوله‌های کربنی ۱۴
۱-۵-۲-۳ روش‌های تولید نانولوله های کربنی ۱۶
۱-۵-۲-۳-۱ تبخیر لیزری ۱۷
۱-۵-۲-۳-۱-۱ ویژگی **CNT** های تولید شده با روش تبخیر لیزری ۱۸
۱-۵-۲-۳-۲ لایه نشانی بخار شیمیایی **CVD** ۱۹
۱-۵-۲-۳-۳ تخلیه قوس الکتریکی ۲۰

فصل دوم:

ساختار نانو لوله‌های کربنی

۲-۱ ساز و کارهای پیوندی در نانولوله‌های کربنی ۲۵
۲-۲ صفحه مختصات گرافنی ۲۶
۲-۳ انواع نانولوله‌ها ی کربنی ۲۸
۲-۴ محاسبات ساختاری نانولوله‌های کربنی ۳۱
۲-۴-۱ شعاع نانولوله‌های کربنی ۳۲
۲-۴-۲ زاویه کایرال در نانولوله‌های کربنی ۳۳
۲-۴-۳ ارتباط بین مولفه‌های کایرال لوله داخلی و خارجی نانولوله‌های کربنی دو دیواره ۳۴

فصل سوم:

خواص اپتیکی

۳-۱ تابع دی الکتریک $\varepsilon(\omega,q)$ ۳۸
۳-۲ روابط کرامرز – کرونیگ ۴۲
۳-۳ قاعده جمع قدرت نوسانگر ۴۵

۴-۳ شدت انتقال بین نواری $J_{CV}(E)$ ۴۷
۵-۳ طیف اتلاف انرژی الکترون(EELS) ۴۹

فصل چهارم:

معرفی روش‌های نظری

۱-۴ سیستم‌های بس ذره‌ای ۵۳
۲-۴ تقریب بورن - اپن هایمر ۵۵
۳-۴ تقریب هارتری ۵۵
۴-۴ تقریب هارتری- فوک- اسلیتر ۵۷
۵-۴ نظریه تابعی چگالی ۵۸
۶-۴ معادلات کوهن- شم ۵۹
۷-۴ تقریب چگالی موضعی LDA ۶۲
۸-۴ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) ۶۳
۹-۴ روش های حل معادلات کوهن-شم ۶۳
۱۰-۴ روش امواج تخت تقویت شده (APW) ۶۴
۱۱-۴ روش امواج تخت تقویت شده خطی (LAPW) ۶۴
۱۲-۴ روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل(FP-LAPW) ۶۵

فصل پنجم:

نتایج

۱-۵ مقدمه ۶۸
۲-۵ روش محاسبات ۶۹
۳-۵ نانولوله های کربنی تک جداره ۷۱
۱-۳-۵ نانولوله کربنی زیگزاگ (۱۳،۰) ۷۱
۱-۱-۳-۵ ساختار نواری ۷۱
۲-۱-۳-۵ بررسی خواص اپتیکی نانولوله کربنی زیگزاگ (۱۳،۰) ۷۳
۱-۲-۱-۳-۵ تابع دی الکتریک ۷۴

۵-۳-۱-۲-۲ ضریب جذب ۷۸
۵-۳-۱-۲-۳ هدایت اپتیکی ۷۹
۵-۳-۱-۲-۴ قاعده جمع قدرت نوسانگر ۸۰
۵-۳-۱-۲-۵ شدت انتقال بین نواری JCV(E) ۸۲
۵-۳-۱-۲-۶ طیف اتلاف انرژی الکترون EELS ۸۳
۵-۳-۲ نانولوله کربنی کایرال (۱،۴) ۸۵
۵-۳-۲-۱ ساختار الکترونی ۸۵
۵-۳-۲-۲ بررسی خواص اپتیکی نانولوله کربنی کایرال (۴،۱) ۸۷
۵-۳-۲-۲-۱ تابع دی الکتریک ۸۷
۵-۳-۲-۲-۲ ضریب جذب ۹۱
۵-۳-۲-۲-۳ شدت انتقال بین نواری ۹۲
۵-۳-۲-۲-۴ هدایت اپتیکی ۹۳
۵-۳-۲-۲-۵ طیف اتلاف انرژی الکترون EELS ۹۴
۵-۳-۲-۲-۶ قاعده جمع قدرت نوسانگر ۹۵
۵-۳-۲-۲-۷ طیف های اپتیکی نانولوله (۴،۱) با در نظر گرفتن انتقالات درون نواری ۹۶
۵-۳-۳ نانولوله کربنی دسته صندلی(۳،۳) ۹۹
۵-۳-۳-۱ ساختار نواری ۹۹
۵-۳-۳-۲ بررسی توابع اپتیکی نانولوله کربنی دسته صندلی(۳،۳) ۱۰۱
۵-۳-۴ خلاصه نتایج محاسبات انواع نانولوله های کربنی تک جداره ۱۰۵
۵-۳-۴-۱ ساختار الکترونی ۱۰۵
۵-۳-۴-۲ خواص اپتیکی ۱۰۹
۵-۴ پیپادها ۱۱۴
۵-۴-۱ پلی تایوفین داخل نانولوله کربنی (۱۰،۰) ۱۱۴
۵-۴-۱-۱ ساختار نواری ۱۱۵
۵-۴-۱-۲ خواص اپتیکی ۱۱۸
۵-۴-۲ پلی تایوفین داخل نانولوله کربنی(۱۲،۰) ۱۲۲

۵-۴-۲-۱ ساختار نواری..... ۱۲۲
۵-۴-۲-۲ خواص اپتیکی..... ۱۲۵
۵-۵ نتیجه‌گیری..... ۱۳۰
فهرست مراجع ۱۳۳
پیوست:
فعالیت‌های پژوهشی..... ۱۳۶

پیش گفتار

پیدایش فن‌آوری نانو موجب انقلابی عظیم در تمامی ابعاد زندگی بشری اعم از الکترونیک، پزشکی، صنایع نظامی و فضایی شده است. کوچک تر نمودن اندازه و ابعاد قطعات الکترونیکی در سالهای اخیر پیامدهای شگرفی را در زمینه کاهش قیمت و افزایش قدرت کامپیوترها و وسایل الکترونیکی در نقل و انتقال اطلاعات داشته است. کشف فولرین در سال ۱۹۸۵ در واقع نقطه‌ای آغازین برای کشف نانولوله‌های کربنی بود که در سال ۱۹۹۱ توسط سامیو ایجیما (از شرکت NEC ژاپن) صورت گرفت[۲-۱] . در میان انبوهی از مواد نانو متری که هر کدام از توان بالایی برای استفاده در سیستم‌های میکرو - نانو برخوردارند، نانولوله‌های کربنی اهمیت و جایگاه ویژه‌ای دارد، خواص جالب توجه نانولوله‌های کربنی از قبیل رسانندگی بالا، استحکام مکانیکی، چگالی کم و پایداری بالا سبب شده است که در سالهای اخیر مورد توجه فراوان پژوهشگران قرار بگیرند. کارهای نظری و عملی زیادی نیز بر روی ساختار اتمی و ساختارهای الکترونی نانولوله‌ها متمرکز شده است. کوشش‌های گسترده‌ای نیز به‌منظور بررسی خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی شامل: مدول یانگ و استحکام کششی، ساز وکار عیوب و اثر تغییر شکل نانولوله‌ها بر

خواص الکتریکی آنها صورت گرفته است. می‌توان گفت این علاقه ویژه به نانولوله‌ها از ساختار و ویژگی‌های بی‌نظیر آن‌ها سرچشمه می‌گیرد.

یکی از معروف‌ترین، مهم‌ترین و پرکاربردترین نانولوله‌های کربنی، نانولوله‌های کربنی تک‌جداره (SWCNT) می‌باشد، که استوانه‌هایی توخالی از صفحات گرافیتی هستند و دارای نسبت طول به قطر حدودا ۱۰۰۰ می‌باشد. به‌طوری‌که آنها را می‌توان به‌صورت ساختارهای یک بعدی در نظر گرفت. این مواد دارای خواص الکتریکی، اپتیکی، مکانیکی و حرارتی جالب توجه و منحصر به‌فردی هستند[۳]. یک نوع ساختار بسیار جذاب و مورد توجه، نانولوله‌های کربنی پرشده با مولکولهای نیمرساناست که پیپاد(peapod) نام دارند و به‌علت برهمکنش بین مولکول و نانولوله، دارای خواص فیزیکی جالب توجه‌ای بوده و به‌نظر می‌رسد که می‌توانند کاربرد ویژه و گسترده‌ای در بسیاری از زمینه‌ها داشته باشند.

در این کار پژوهشی نیز خواص الکترونیکی و اپتیکی انواع مختلف نانولوله‌های کربنی تک جداره و همچنین پیپادها (نانولوله‌های پر شده با مولکول‌های نیمرسانا) با استفاده از اصول اولیه بررسی شده است.

در فصل اول به معرفی نانولوله‌های کربنی پرداخته و در ادامه در فصل دوم ساختار و سازوکار پیوندی نانولوله‌ها مورد مطالعه قرار گرفته است. خواص اپتیکی و همچنین روش‌های نظری مورد استفاده در محاسبات به‌ترتیب در فصل‌های سوم و چهارم و در نهایت نتایج مربوط به محاسبات این پژوهش در فصل پنجم ارائه گردیده است.

فصل اوّل

معرفی نانولوله‌های کربنی

۱-۱ تاریخچه فن‌آوری نانو

علم نانو و علوم مرتبط با آن جدید نیستند چرا که صدها سال است که شیمیدان‌ها از فن آوری‌های مربوط به علم نانو در کار خود استفاده کرده‌اند که بی‌شباهت به روش‌های به‌کار گرفته امروزی نیستند. پنجره‌های رنگارنگ کلیساهای قرون وسطی، شمشیرهای یافت شده در حفاری-های سرزمین‌های مسلمان همگی گویای این مطلب است که بشر مدت‌هاست که از برخی شگردهای این فن‌آوری در بهینه کردن فرایندها و ساخت باکیفیت‌تر اشیاء بهره می‌برده است، اما تنها به‌دلیل پیشرفت کم فن‌آوری و نبود امکانات و ابزارهای امروزی مانند میکروسکوپ نیرو اتمی، میکروسکوپ تونلی پیمایشی و غیره نتوانسته حوزه مشخصی برای این فن‌آوری تعیین کند. اولین جرقه فن‌آوری نانو در سال ۱۹۵۹ زده شد. در آن سال ریچارد فاینمن طی یک سخنرانی با عنوان " There is plenty room at the bottom " ایده فن‌آوری نانو را مطرح ساخت. اما واژه فن‌آوری نانو اولین بار توسط نوریوتاینگوچی استاد دانشگاه علوم توکیو در سال ۱۹۷۴ مطرح گردید. او در مقاله‌ای با نام"مفهوم اساسی فن‌آوری نانو" اشاره می‌کند که فن‌آوری نانو اساسا مجموعه‌ای از فرایندهای تفکیک، ادغام و تشکیل مواد در حد یک اتم یا یک مولکول است. در سال۱۹۷۷ این تعریف به‌طور وسیع‌تر توسط دکتر درکسلر(نویسنده کتاب‌های موتور خلقت) در انستیتوی فن‌آوری ماساچوست ارائه شد. فن‌آوری نانو و نانوعلوم در اوایل دهه ۱۹۸۰ با تولد علم کلاستر و اختراع میکروسکوپ تونلی روبشی آغاز به کار کرد. این توسعه سبب کشف فلورین در

سال [۱]۱۹۸۵ و نانولوله‌های کربنی در سال ۱۹۹۱ توسط سامیو ایجیما (از شرکت NEC ژاپن) شد[۲]. درسال ۱۹۹۳ اولین نقاط کوانتومی با کیفیت بالا تولید شد. تحول دیگر این فن‌آوری مربوط به ساخت نانو بلورهای نیمرسانا است که منجر به افزایش سریع تعداد نانوذرات اکسید فلزی نقاط کوانتومی گردید. میکروسکوپ نیرو اتمی پنج سال بعد از میکروسکوپ تونلی روبشی اختراع شد تا با کمک آن بتوان اتمها را بررسی کرد. در سال۱۹۹۶ اولین کنفرانس اروپایی فن آوری نانو برگزار شد .

۱-۲ اهمیت نانو ابعاد:

دلایل زیادی برای اهمیت نانو ابعاد وجود دارد ، که بعضی از آنها به شرح زیر است :

۱- خصوصیات مواد در اندازه‌های نانومتری دچار تغییراتی می‌شود و با طراحی مواد نانومتری تغییر در خصوصیات ماکروسکوپیک و میکروسکوپیک ماده مانند رنگ ، خواص مغناطیسی، دمای ذوب و ... بدون تغییر ترکیبات شیمیایی آن ممکن می‌شود .

۲- از جمله خصوصیت مواد بیولوژیکی و زنده، سازماندهی منظم آنها در ابعاد نانومتری است و توسعه در زمینه نانو فن‌آوری به ما اجازه خواهد داد که تولیدات نانو ابعادی ساخت بشر را در داخل سلولهای زنده قرار دهیم . همچنین این کار باعث خواهد شد که با استفاده از خود چینی طبیعت بتوان مواد جدیدی را ساخت. مطمئناً این کار باعث ایجاد ترکیبات بیولوژی جدید در ارتباط با علم مواد را سبب خواهد شد.

۳- ترکیبات نانومتری دارای نسبت سطح به حجم بسیار زیادی هستند (حجم کمی دارند اما سطح زیادی را پوشش می‌دهند) و لذا استفاده از آنها در مواد کامپوزیتی دارو رسانی در بدن و ذخیره انرژی به شکل شیمیایی (مانند گاز طبیعی و هیدروژن) بسیار ایده‌آل خواهد بود .

۴- سیستم‌های ماکروسکوپیک ساخته شده از نانو ساختارها می‌توانند چگالی بسیار بیشتری نسبت به مواد ساخته شده از میکروساختارها داشته باشند و همچنین هدایت الکتریکی بهتری دارند. با استفاده ازبرهمکنش نانو ساختارها مفاهیم جدیدی در ابزارهای

الکترونیکی، مانند مدارهای کوچکتر و سریعتر، کارایی بسیار پیشرفته‌تر و مصرف برق بسیار کمتر پدید می‌آید .

۱-۳ شاخه‌های فن‌آوری نانو :

فن‌آوری نانو منحصر به یک رشته خاص نیست، بلکه به صورت میان رشته‌ای است یعنی به علوم مختلف وابسته است. با استفاده از پیشرفت‌های علوم مختلف می‌توان به پیشرفت‌های فن‌آوری نانو دست یافت. بنابراین کاربردهای متفاوتی را می‌توان برای این فن آوری متصور شد. مانند کاربردهای الکترونیکی پزشکی، زیستی و ... که از نظر رشته‌ای ارتباط خاصی با یکدیگر ندارند . لذا ممکن است فن‌آوری نانو رشته‌ای کاملاً گسسته به نظر آید که موضوعات آن هیچ ارتباطی با هم ندارند.

برخی از محققین این حوزه را به سه گروه تقسیم‌بندی می‌کنند که عبارتند از:

- نانو فن‌آوری مرطوب
- نانو فن‌آوری خشک
- نانو فن‌آوری محاسباتی

۱-۳-۱ نانو فن‌آوری مرطوب :

این شاخه به مطالعه سیستم‌های زنده‌ای می‌پردازد که اساساً در محیط‌های آبی وجود دارند . در این شاخه ساختمان مواد ژنتیکی، غشاءها و سایر ترکیبات سلولی در مقیاس نانو متر مورد مطالعه قرار می‌گیرند . پژوهشگران موفق شده‌اند ساختارهای زیستی فراوانی تولید کنند که بتوان نحوه عملکرد آنها را در مقیاس نانویی کنترل کرد. این شاخه در برگیرنده علوم پزشکی، دارویی و به طور کلی علوم و روش‌های مرتبط با زیست فن‌آوری است .

۱-۳-۲ نانو فن‌آوری خشک:

این شاخه ، از علوم پایه مانند شیمی و فیزیک مشتق می‌شود و به مطالعه ساختارهای موادی از قبیل کربن ، سیلیکون و مواد غیر آلی و فلزی می‌پردازد . نکته قابل توجه این است

که الکترون‌های آزاد که در فن‌آوری مرطوب موجب انتقال مواد و انجام واکنشها می‌شوند ،در فن‌آوری خشک خصوصیات فیزیکی ماده را پدید می‌آورند . در نانو فن‌آوری خشک کاربرد مواد نانویی در الکترونیک، مغناطیس و ابزارهای نوری مورد مطالعه قرار می‌گیرد. برای مثال طراحی و ساختن میکروسکوپ‌هایی که بتوان با استفاده از آنها مواد را در ابعاد نانو متر مورد مطالعه قرار داد .

۱-۳-۳ نانو فن‌آوری محاسباتی:

در بسیاری ازمواقع ابزار آزمایشگاهی موجود برای انجام برخی از آزمایشهای نانومتریک مناسب نیستند و لذا در چنین مواردی ، از رایانه‌ها برای شبیه‌سازی فرآیندها و واکنش‌های اتم‌ها و مولکول‌ها استفاده می‌شود. شناختی که به وسیله محاسبه به‌دست می‌آید، باعث می شود که زمان لازم برای پیشرفت نانو فن‌آوری خشک به طور محسوسی کاهش یابد و البته تاثیر مهمی در نانو فن‌آوری مرطوب نیز داشته باشد .

۱-۴ خواص نانو مواد

ما در دنیای ماکرومقیاس اطرافمان، مواد را با توجه به خواصشان دسته‌بندی می‌کنیم و سپس متناسب با این خواص، آنها را برای انجام کارهای مختلف انتخاب می‌کنیم. خواص مواد را می‌توان به دو بخش خواص فیزیکی و خواص شیمیایی تقسیم‌بندی کرد. رنگ، شفافیت، خواص الکتریکی، خواص مغناطیسی، سختی، حلالیت، نقطه ذوب و ... ویژگی‌هایی هستند که آنها را با نام خواص فیزیکی می‌شناسیم و سرعت واکنش، واکنش‌پذیری و .... از جمله خواص شیمیایی هستند. تجربه چند هزار ساله زندگی انسان به او نشان داده که در شرایط عادی، ویژگی‌های یک ماده خاص تا حد قابل قبولی ثابت است و به این دلیل است که ما می‌توانیم مواد را از روی خواصشان شناسایی کنیم. موضوع جذابیت مقیاس نانو نیز مربوط به خواص مواد است. یافته‌های دانشمندان نشان می‌دهد که خواص مواد در مقیاس نانو بسیار متفاوت از مقیاس ماکرو است. به عبارت دیگر اگر ذراتِ یک ماده خاص را در حد چند نانومتر (۱ تا ۱۰۰ نانومتر) کوچک کنیم، این ذرات ویژگی‌های متفاوتی با ذرات بزرگ