



وزارت علوم، تحقیقات و فناوری



دانشگاه ملایر

دانشکده علوم پایه - گروه شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی (گرایش شیمی فیزیک)

بررسی جذب گاز اکسیژن بر نانوتیوب آلومینیوم فسفید در

حضور دوپینگ ژرمانیوم

به وسیله‌ی:

علیرضا کاظمی

استاد راهنما:

دکتر مهدی رضایی صامتی

استاد مشاور:

دکتر علیرضا سلیمانی

بهمن ۱۳۹۲

تقدیم به پدر و مادرم :

خدای را بسی شاکرم که از روی کرم، پدر و مادری فداکار  
نسبیم ساخته تا در سایه درخت پربر و وجودشان بیاسایم  
و از ریشه آنها شاخ و برگ گیرم و از سایه وجودشان در  
راه کسب علم و دانش تلاش نمایم. والدینی که  
بودنشان تاج افتخاری است بر سرم و نامشان دلیلی است  
بر بودنم، چرا که این دو وجود، پس از پروردگار، مایه  
هستی ام بوده اند دستم را گرفتند و راه رفتن را در این  
وادی زندگی پر از فراز و نشیب آموختند. آموزگاران که  
برایم زندگی، بودن و انسان بودن را معنا کردند.

با تقدیر و سپاس فراوان از:

استاد راهنما، جناب آقای دکتر مهدی رضایی صامتی و  
استاد مشاور، دکتر علیرضا سلیمانی که در مراحل از  
این پژوهش مرا همراهی و مساعدت فرمودند تشکر و  
قدردانی می‌نمایم.

و برای همه آنان از خداوند متعال آرزوی توفیق روزافزون  
در تمام مراحل زندگی را مسئلت می‌نمایم

نام خانوادگی دانشجو: کاظمی	نام: علیرضا
عنوان پایان نامه: بررسی جذب گاز اکسیژن بر نانوتیوب آلومینیوم فسفید در حضور دوپینگ ژرمانیوم	
استاد راهنما: دکتر مهدی رضایی صامتی استاد مشاور: دکتر علیرضا سلیمانی	
مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد	رشته: شیمی
دانشگاه ملایر- گروه: شیمی	تاریخ فارغ التحصیلی: بهمن ۱۳۹۲
تعداد صفحات: ۱۳۴	
کلید واژه: نانوتیوب آلومینیوم فسفید، دوپینگ ژرمانیوم، جذب، اکسیژن	

### چکیده:

در این پروژه اثر جایگزین شدن اتم ژرمانیوم و نیز جذب مولکول اکسیژن بر پارامترهای ساختاری و الکترونی نانولوله آلومینیوم فسفید مورد مطالعه قرار گرفته است. در این راستا رزونانس مغناطیس هسته (NMR)، رزونانس چهارقطبی هسته (NQR)، ساختارهای هومو-لومو و توصیف گرهای مولکولی کوانتومی مانند سختی، نرمی، پتانسیل شیمیایی، الکترونخواهی و الکترونگاتیویته با استفاده از تئوری تابع چگالی و روش B3LYP مجموعه پایه‌ای 6-31G\* محاسبه شده‌اند.

در این پژوهش، مدل‌های آرمیچر (۳،۳) و (۴،۴) و (۵،۵) و زیگزاگ (۰،۶) و (۰،۸) و (۰،۱۰) آلومینیوم فسفید در نظر گرفته شده است.

نتایج بررسی‌ها نشان داد که با جایگزین شدن اتم ژرمانیوم به جای اتم آلومینیوم، طول پیوندهای اطراف مرکز جایگزینی افزایش و زاویه پیوند کاهش و پارامترهای CSI به علت

الکترون دهندگی ژرمانیوم افزایش می‌یابد. گاف انرژی بین این اوربیتال‌ها در همه نانولوله‌های آلومینیوم فسفید آرمیچر و زیگزاگ با جایگزینی کاهش یافته است، که این کاهش منجر به افزایش رسانایی می‌گردد. همچنین برهمکنش اکسیژن بر سطح درونی و بیرونی نانولوله آلومینیوم فسفید (در حضور و غیاب ژرمانیوم) در حالت‌های مختلف مطالعه شد. نتایج نشان داد که انرژی برهمکنش اکسیژن با سطح نانولوله آلومینیوم فسفید در همه مدل‌های جذبی گرماده است. جایگزین شدن اتم ژرمانیوم در همه حالت‌های جذبی، سبب مطلوب تر شدن برهمکنش اکسیژن بر روی سطح نانولوله گردید.

فصل اول: مقدمه.....	۱
۱-۱- نانوچیست.....	۲
۱-۱-۱- اولین نانو چه بود؟.....	۲
۲-۱- نانو تکنولوژی.....	۳
۲-۲-۱- شاخه های نانو تکنولوژی.....	۴
۳-۱- تاریخچه نانو ذرات.....	۵
۴-۱- نانو مواد.....	۷
۲-۴-۱- روش های ساخت نانو مواد.....	۷
۳-۴-۱- دسته بندی نانومواد از لحاظ بعد.....	۸
۵-۵- دسته بندی نانومواد.....	۹
۶-۱- نانولوله ها.....	۱۲
۲-۶-۱- پیکربندی هندسی نانولوله ها.....	۱۲
۳-۶-۱- خواص نانولوله ها.....	۱۵
۷-۱- شکل های مختلف کربن.....	۱۵
۲-۷-۱- فولرن ها، خانواده جدید کربنی.....	۱۶
۸-۱- نانولوله های کربنی.....	۱۷
۲-۸-۱- روش های تولید نانولوله های کربنی.....	۱۸
۳-۸-۱- ویژگی های نانولوله های کربنی.....	۱۹
۹-۱- آنالوگ های معدنی نانولوله های کربنی.....	۲۰
۱۰-۱- نانولوله بورنیتريد.....	۲۰

۲۱	۱-۱۰-۲- روش های تولید نانولوله های بور نیتريد.....
۲۲	۱-۱۰-۳- خواص نانولوله های بور نیتريد.....
۲۲	۱-۱۰-۴- کاربرد نانولوله های بور نیتريد.....
۲۲	۱۱-۱- مروری بر مباحث مکانیک کوانتومی.....
۲۴	۱-۱۱-۲- تقریب هارتری فاک.....
۲۴	۱-۱۱-۳- محدودیت روش هارتری-فاک.....
۲۴	۱-۱۱-۴- تئوری تابعی دانسیته.....
	<b>فصل دوم: بررسی اثر دوپینگ ژرمانیوم بر روی ساختارهای نانولوله های آلومینیوم فسفید</b>
۲۶	<b>آرمیچر.....</b>
۲۷	۲-۱- مقدمه.....
۲۷	۲-۲- بررسی طول و زاویه پیوند.....
۳۲	۲-۳-۱- بررسی پارامتر NMR.....
۳۳	۲-۳-۲- بررسی پارامتر CSI برای نانولوله آلومینیوم فسفید آرمیچر.....
۳۶	۲-۳-۳- بررسی پارامتر CSA برای نانولوله آلومینیوم فسفید آرمیچر (۴،۴).....
۳۸	۲-۴-۱- بررسی پارامتر NQR.....
۳۹	۲-۴-۲- بررسی پارامتر NQR برای هسته $^{27}\text{Al}$ .....
۴۰	۲-۵- بررسی اوربیتال های مولکولی HOMO و LUMO.....
۴۶	۲-۶- توصیف گرهای پارامتر کوانتومی.....
	<b>فصل سوم: بررسی اثر دوپینگ ژرمانیوم بر روی ساختارهای نانولوله های آلومینیوم فسفید</b>
۴۹	<b>زیگزاگ.....</b>



۱-۳-۱	مقدمه.....	۵۰
۲-۳-۲	بررسی طول و زاویه پیوند.....	۵۰
۳-۳-۳	بررسی پارامتر NMR.....	۵۵
۲-۳-۳	بررسی پارامتر CSI برای نانولوله آلومینیوم فسفید زیگزاگ.....	۵۵
۳-۳-۳	بررسی پارامتر CSA برای نانولوله آلومینیوم فسفید زیگزاگ.....	۵۸
۴-۳-۴	بررسی پارامتر NQR.....	۶۰
۲-۴-۳	بررسی پارامتر NQR برای هسته $^{27}\text{Al}$ .....	۶۰
۵-۳-۵	بررسی اوربیتال‌های مولکولی HOMO و LUMO.....	۶۲
۶-۳-۶	توصیف گرهای پارامتر کوانتومی.....	۶۷
فصل چهارم : بررسی اثر جذب مولکول اکسیژن بر روی خواص ساختاری نانولوله‌های		
آرمیچر و زیگزاگ آلومینیوم فسفید.....		
۱-۴-۱	مقدمه.....	۶۹
۲-۴-۲	مطالعه ساختاری و طول و زاویه پیوند.....	۷۲
۲-۴-۲	طول و زاویه پیوندی در ساختار آرمیچر (۴،۴).....	۷۲
۳-۴-۲	طول و زاویه پیوندی در ساختار زیگزاگ (۶،۰).....	۸۰
۳-۴-۳	بررسی پارامتر NMR.....	۸۶
۲-۴-۳	بررسی پارامتر CSI برای نانولوله آلومینیوم فسفید آرمیچر.....	۸۷
۳-۴-۳	بررسی پارامتر CSA برای نانولوله آلومینیوم فسفید آرمیچر.....	۹۲
۴-۴-۳	بررسی پارامتر CSI برای نانولوله آلومینیوم فسفید زیگزاگ.....	۹۲
۵-۴-۳	بررسی پارامتر CSA برای نانولوله آلومینیوم فسفید زیگزاگ.....	۹۷

۹۸	۴-۴- بررسی پارامتر NQR .....
۹۸	۴-۴-۲- بررسی پارامتر NQR در ساختار آرمیچر (۴،۴).....
۱۰۰	۴-۴-۳- بررسی پارامتر NQR در ساختار زیگزاگ (۶،۰).....
۱۰۲	۴-۵- بررسی اوربیتال‌های مولکولی HOMO و LUMO .....
۱۰۳	۴-۵- بررسی اوربیتال‌های مولکولی در ساختار آرمیچر (۴،۴).....
۱۰۹	۴-۵-۳- بررسی اوربیتال‌های مولکولی در ساختار زیگزاگ (۶،۰).....
۱۱۵	۴-۶- توصیف گره‌های پارامتر کوانتومی.....
۱۱۵	۴-۶-۱- ویژگی‌های کوانتومی و خواص جذبی در ساختار آرمیچر (۴،۴).....
۱۲۰	۴-۶-۲- ویژگی‌های کوانتومی و خواص جذبی در ساختار زیگزاگ (۶،۰).....
۱۲۵	۴-۷- نتیجه گیری.....
۱۲۸	منابع و مراجع.....

## فهرست جدول‌ها

عنوان

شماره صفحه

جدول ۱-۲) خواص ساختاری (طول و زاویه پیوندی) نانولوله‌های آلومینیوم فسفید آرمیچر خالص و جایگزین شده.....	۳۱
جدول ۲-۲) پارامتر NMR برای هسته‌های $^{27}\text{Al}$ و $^{31}\text{P}$ در نانولوله آرمیچر آلومینیوم فسفید (۳،۳).....	۳۴
جدول ۳-۲) پارامتر NMR برای هسته‌های $^{27}\text{Al}$ و $^{31}\text{P}$ در نانولوله آرمیچر آلومینیوم فسفید (۴،۴).....	۳۵
جدول ۴-۲) پارامتر NMR برای هسته‌های $^{27}\text{Al}$ و $^{31}\text{P}$ در نانولوله آرمیچر آلومینیوم فسفید (۵،۵).....	۳۷
جدول ۵-۲) پارامترهای NQR برای ساختارهای خالص و جایگزین شده آلومینیوم فسفید آرمیچر.....	۴۰
جدول ۶-۲) ویژگی‌های مولکولی کوانتومی نانولوله‌های آرمیچر آلومینیوم فسفید خالص و جایگزین شده.....	۴۸
جدول ۱-۳) خواص ساختاری (طول و زاویه پیوندی) نانولوله‌های آلومینیوم فسفید زیگزاگ خالص و جایگزین شده.....	۵۴
جدول ۲-۳) پارامتر NMR برای هسته‌های $^{27}\text{Al}$ و $^{31}\text{P}$ در نانولوله زیگزاگ آلومینیوم فسفید (۶،۰).....	۵۶
جدول ۳-۳) پارامتر NMR برای هسته‌های $^{27}\text{Al}$ و $^{31}\text{P}$ در نانولوله زیگزاگ آلومینیوم فسفید (۸،۰).....	۵۷
جدول ۴-۳) پارامتر NMR برای هسته‌های $^{27}\text{Al}$ و $^{31}\text{P}$ در نانولوله زیگزاگ آلومینیوم فسفید (۱۰،۰).....	۵۹
جدول ۵-۳) پارامترهای NQR برای ساختارهای خالص و جایگزین شده آلومینیوم فسفید زیگزاگ.....	۶۱

جدول ۳-۶) ویژگی‌های مولکولی کوانتومی نانولوله‌های زیگزاگ آلومینیوم فسفید خالص و جایگزین شده.....	۶۸
جدول ۴-۱) خواص ساختاری در جذب $O_2$ با حالت‌های مختلف بر روی نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید آرمیچر (۴،۴) خالص.....	۷۵
جدول ۴-۲) خواص ساختاری در جذب $O_2$ با حالت‌های مختلف بر روی نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید آرمیچر (۴،۴) جایگزین شده با ژرمانیوم.....	۷۸
جدول ۴-۳) خواص ساختاری در جذب $O_2$ با حالت‌های مختلف بر روی نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید زیگزاگ (۶،۰) خالص.....	۸۲
جدول ۴-۴) خواص ساختاری در جذب $O_2$ با حالت‌های مختلف بر روی نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید زیگزاگ (۶،۰) جایگزین شده با ژرمانیوم.....	۸۵
جدول ۴-۵) پارامترهای NMR برای هسته‌های $^{31}P$ و $^{27}Al$ در جذب $O_2$ بصورت عمودی و خارج از نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید آرمیچر (۴،۴).....	۸۸
جدول ۴-۶) پارامترهای NMR برای هسته‌های $^{31}P$ و $^{27}Al$ در جذب $O_2$ بصورت عمودی و درون نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید آرمیچر (۴،۴).....	۸۹
جدول ۴-۷) پارامترهای NMR برای هسته‌های $^{31}P$ و $^{27}Al$ در جذب $O_2$ بصورت موازی و خارج از نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید آرمیچر (۴،۴).....	۹۰
جدول ۴-۸) پارامترهای NMR برای هسته‌های $^{31}P$ و $^{27}Al$ در جذب $O_2$ بصورت موازی و درون نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید آرمیچر (۴،۴).....	۹۱
جدول ۴-۹) پارامترهای NMR برای هسته‌های $^{31}P$ و $^{27}Al$ در جذب $O_2$ بصورت عمودی و خارج از نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید زیگزاگ (۶،۰).....	۹۳
جدول ۴-۱۰) پارامترهای NMR برای هسته‌های $^{31}P$ و $^{27}Al$ در جذب $O_2$ بصورت عمودی و درون نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید زیگزاگ (۶،۰).....	۹۴

## فهرست جدول‌ها

عنوان

شماره صفحه

- 
- جدول ۴-۱۱) پارامترهای NMR برای هسته‌های  $^{27}\text{Al}$  و  $^{31}\text{P}$  در جذب  $\text{O}_2$  بصورت موازی و خارج از نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید زیگزاگ (۶،۰) ..... ۹۵
- جدول ۴-۱۲) پارامترهای NMR برای هسته‌های  $^{27}\text{Al}$  و  $^{31}\text{P}$  در جذب  $\text{O}_2$  بصورت موازی و درون نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید زیگزاگ (۶،۰) ..... ۹۶
- جدول ۴-۱۳) پارامتر NQR برای هسته‌ی  $^{27}\text{Al}$  در جذب مولکول  $\text{O}_2$  در حالت‌های مختلف بر روی نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید آرمیچر (۴،۴) خالص و جایگزین شده ..... ۱۰۰
- جدول ۴-۱۴) پارامتر NQR برای هسته‌ی  $^{27}\text{Al}$  در جذب مولکول  $\text{O}_2$  در حالت‌های مختلف بر روی نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید زیگزاگ (۰،۶) خالص و جایگزین شده ..... ۱۰۱

شکل (۱-۱) ساختار زیگزاگ نانوذرات صفحه‌ای	۱۳
شکل (۲-۱) ساختار آرمیچر نانوذرات صفحه‌ای	۱۳
شکل (۳-۱) ساختار کایرال نانوذرات صفحه‌ای	۱۴
شکل (۴-۱) دسته بندی نانولوله‌ها بر اساس جهت لوله‌شدن صفحه‌ی گرافن	۱۴
شکل (۵-۱) ساختارهای مربوط به مولکول‌های C <sub>60</sub> و C <sub>70</sub>	۱۶
شکل (۶-۱) ساختارهای مربوط به نانولوله‌های تک جداره و چند جداره	۱۷
شکل (۱-۲) ساختارهای حالت خالص و جایگزین شده نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید آرمیچر (۳،۳)، (۴،۴) و (۵،۵)	۲۸
شکل (۲-۲) مدل‌های توپر، ساختارهای خالص و جایگزین شده برای نانولوله آلومینیوم فسفید (۳،۳)، (۴،۴) و (۵،۵)	۲۹
شکل (۳-۲) ساختارهای HOMO و LUMO نانولوله‌های آلومینیوم فسفید آرمیچر خالص (۳،۳)، (۴،۴) و (۵،۵)	۴۲
شکل (۴-۲) ساختارهای HOMO و LUMO نانولوله‌های آلومینیوم فسفید آرمیچر جایگزین شده (۳،۳)، (۴،۴) و (۵،۵)	۴۴
شکل (۱-۳) ساختارهای حالت خالص و جایگزین شده نانولوله‌ی آلومینیوم فسفید زیگزاگ (۰،۶)، (۰،۸) و (۰،۱۰)	۵۱
شکل (۲-۳) مدل‌های توپر، ساختارهای خالص و جایگزین شده برای نانولوله آلومینیوم فسفید زیگزاگ (۰،۶)، (۰،۸) و (۰،۱۰)	۵۲
شکل (۳-۳) ساختارهای HOMO و LUMO نانولوله‌های آلومینیوم فسفید زیگزاگ خالص (۰،۶)، (۰،۸) و (۰،۱۰)	۶۳

- شکل ۳-۴) ساختارهای HOMO و LUMO نانولوله‌های آلومینیوم فسفید زیگزاگ جایگزین شده (۰،۶)، (۰،۸) و (۰،۱۰) ..... ۶۵
- شکل ۴-۱) جذب مولکول اکسیژن با حالت‌های مختلف روی ساختار آرمیچر (۴،۴) آلومینیوم فسفید خالص ..... ۷۳
- شکل ۴-۲) جذب مولکول اکسیژن با حالت‌های مختلف روی ساختار آرمیچر (۴،۴) آلومینیوم فسفید جایگزین شده با ژرمانیوم ..... ۷۷
- شکل ۴-۳) جذب مولکول اکسیژن با حالت‌های مختلف روی ساختار زیگزاگ (۰،۶) آلومینیوم فسفید خالص ..... ۸۱
- شکل ۴-۴) جذب مولکول اکسیژن با حالت‌های مختلف روی ساختار زیگزاگ (۰،۶) آلومینیوم فسفید جایگزین شده با ژرمانیوم ..... ۸۴
- شکل ۴-۵) اوربیتال‌های مولکولی HOMO و LUMO نانولوله‌های آلومینیوم فسفید آرمیچر (۴،۴) خالص در هنگام جذب مولکول اکسیژن ..... ۱۰۴
- شکل ۴-۶) اوربیتال‌های مولکولی HOMO و LUMO نانولوله‌های آلومینیوم فسفید آرمیچر (۴،۴) جایگزین شده با ژرمانیوم در هنگام جذب مولکول اکسیژن ..... ۱۰۷
- شکل ۴-۷) اوربیتال‌های مولکولی HOMO و LUMO نانولوله‌های آلومینیوم فسفید زیگزاگ (۰،۶) خالص در هنگام جذب مولکول اکسیژن ..... ۱۱۰
- شکل ۴-۸) اوربیتال‌های مولکولی HOMO و LUMO نانولوله‌های آلومینیوم فسفید زیگزاگ (۰،۶) جایگزین شده با ژرمانیوم در هنگام جذب مولکول اکسیژن ..... ۱۱۳

# فصل اول

مقدمه





## ۱-۲- نانو تکنولوژی:

طراحی، ساخت، توسعه و استفاده از محصولاتی که اندازه آن‌ها در بازه ۱ تا ۱۰۰ نانومتر قرار دارند، نانو تکنولوژی نامیده می‌شود. بطور کلی واژه نانو تکنولوژی اولین بار توسط نوریوتاینگوچی استاد دانشگاه علوم توکیو در سال ۱۹۷۴ میلادی بر زبان جاری شد، او این واژه را برای توصیف ساخت مواد یا وسایل دقیقی که اندازه‌ی ابعادی آنها در حدود ۱ میکرون بود بیان کرد [۳]. همچنین با اینکه تعاریف زیادی برای نانو تکنولوژی وجود دارد، ننی تعریفی از نانو تکنولوژی را ارائه داده است که در برگرنده هر سه تعریف ذیل می‌باشد [۴]:

۱- توسعه فناوری و تحقیقات در سطوح اتمی، مولکولی و یا ماکرومولکولی در مقیاس اندازه‌ای ۱ تا ۱۰۰ نانومتر.

۲- خلق و استفاده از ساختارها و ابزار سیستمهایی که به خاطر اندازه کوچک یا حد میانه آنها، خواص و عملکرد نوینی دارند.

۳- توانایی کنترل یا دستکاری در سطوح اتمی.

نانو یک مقیاس جدید در فناوری‌ها و یک رویکرد جدید در تمام رشته‌ها است و این توانایی را به بشر می‌دهد تا با دخالت خود در ساختار مواد و در ابعاد بسیار ریز به طراحی و ساخت دست بزند و در تمام فناوری‌هایی که بشر در حال حاضر به آن دست یافته است اثر بگذارد. واقعیت آن است که در این مقیاس بسیاری از قوانین فیزیک کلاسیک از درجه اعتبار ساقط گردیده و ماهیت فیزیک کوانتومی محقق می‌گردد. علیرغم آنکه در سال‌های اخیر به نانو تکنولوژی توجه زیادی شده اما نانو تکنولوژی یک علم نوظهور نیست بلکه مبحثی کاملاً متداول در بین محققان، رسانه‌های خبری، جامعه سرمایه‌گذاری و ... می‌باشد و تنها در سال‌های اخیر توجه بیشتری به این واژه شده است. هر چند مبالغه نیست اگر گفته شود نانو تکنولوژی موجب تغییر ماهیت در بیشتر صنایع می‌شود.

نانو تکنولوژی توانمندی تولید مواد، ابزارها و سیستم‌های جدید با در دست گرفتن کنترل در سطوح مولکولی و اتمی و استفاده از خواصی است که در آن سطوح ظاهر می‌شود.

از همین تعریف ساده بر می آید که نانوتکنولوژی یک رشته نیست، بلکه رویکردی جدید در تمام رشته‌ها است. برای نانوتکنولوژی، کاربردهایی را در حوزه‌های مختلف از جمله غذا، دارو، تشخیص پزشکی، بیوتکنولوژی، الکترونیک، کامپیوتر، ارتباطات، حمل و نقل، انرژی، محیط زیست، مواد، هوافضا و امنیت ملی بر شمرده‌اند. کاربردهای وسیع این عرصه به همراه اثرات اجتماعی، سیاسی و حقوقی آن، این فناوری را به عنوان یک زمینه فرارشته‌ای و فرابخشی مطرح نموده است. به طوری که به نظر می آید هر صنعتی که در امر سرمایه‌گذاری در نانوتکنولوژی کوتاهی کند، خود را در معرض خطر قرار خواهد داد.

### ۱-۲-۲- شاخه‌های نانوتکنولوژی:

بطور کلی مطالعات نانوتکنولوژی را می‌توان به سه دسته تقسیم کرد. اگرچه روش‌های تحقیقاتی در آن‌ها با یکدیگر متفاوت است، اما این سه شاخه بطور کامل به یکدیگر مربوط هستند و پیشرفت در یکی از شاخه‌ها می‌تواند در شاخه‌های دیگر هم اثر بگذارد [۵].

#### الف) نانوتکنولوژی مرطوب<sup>۱</sup>:

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 نانومتر مورد مطالعه قرار می‌گیرد. پژوهشگران موفق شده‌اند ساختارهای زیستی فراوانی تولید کنند که نحوه عملکرد آنها در مقیاس نانویی کنترل می‌شود. این شاخه در برگیرنده علوم پزشکی، دارویی و به طور کلی علوم و روشهای مرتبط با زیست فناوری است.

#### ب) نانوتکنولوژی خشک<sup>۲</sup>:

این شاخه از علوم پایه شیمی و فیزیک مشتق می‌شود و به مطالعه تشکیل ساختارهای کربنی، سیلیکون و مواد غیر آلی و فلزی می‌پردازد. نکته قابل توجه اینست که الکترونهای آزاد که در فناوری مرطوب موجب انتقال مواد و انجام واکنش‌ها می‌گردند، در فناوری خشک

<sup>1</sup>. wet nanotechnology

<sup>2</sup>. dry nanotechnology

خصوصیات فیزیکی ماده را پدید می‌آورند. در نانو تکنولوژی خشک کاربرد مواد نانویی در الکترونیک، مغناطیس و ابزارهای نوری مورد مطالعه قرار می‌گیرد. برای مثال طراحی و ساختن میکروسکوپ هایی که بتوان با استفاده از آنها مواد را در ابعاد نانومتر دید.

### ج) نانو تکنولوژی محاسبه‌ای<sup>۱</sup>:

در بسیاری از مواقع ابزار آزمایشگاهی موجود برای انجام برخی از آزمایش‌ها در مقیاس نانومتر مناسب نیستند و یا آنکه انجام این آزمایش‌ها بسیار گران تمام می‌شود. در این حالت از رایانه‌ها برای شبیه سازی فرآیندها و واکنش‌های اتم‌ها و مولکول‌ها استفاده می‌شود. شناختی که به وسیله محاسبه به دست می‌آید، باعث شده است که زمان پیشرفت نانو تکنولوژی خشک به چند دهه کاهش یافته و البته تأثیر مهمی در نانو تکنولوژی مرطوب نیز خواهد داشت.

### ۱-۳- تاریخچه نانو ذرات:

در طول تاریخ بشر از زمان یونان باستان، مردم و به خصوص دانشمندان آن دوره بر این باور بودند که مواد را می‌توان آنقدر به اجزاء کوچک تقسیم کرد تا به ذراتی رسید که خردناشدنی هستند و این ذرات بنیان مواد را تشکیل می‌دهند. 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 واژه‌ی اتم را که به معنی تقسیم‌نشدنی در زبان یونانی است برای توصیف ذرات سازنده مواد به کار برد. نقطه شروع و توسعه اولیه فناوری نانو به طور دقیق مشخص نیست. شاید بتوان گفت که اولین نانو تکنولوژیست‌ها شیشه‌گران قرون وسطایی بوده‌اند که از قالب‌های قدیمی<sup>۲</sup> برای شکل دادن شیشه‌هایشان استفاده می‌کرده‌اند. البته این شیشه‌گران نمی‌دانستند که چرا با اضافه کردن طلا به شیشه رنگ آن تغییر می‌کند. در آن زمان برای ساخت شیشه‌های کلیساهای قرون وسطایی از ذرات نانومتری طلا استفاده می‌شده است و با این کار شیشه‌های رنگی بسیار جذابی بدست می‌آمده است.

<sup>۱</sup>. computational nanotechnology

<sup>۲</sup>. medical forges