

دانشگاه سبزگان

دانشکده علوم پایه

پایان نامه کارشناسی ارشد

تأثیر میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی روی خواص نانولوله‌های کربنی

از:

محمد اکبرزاده

استاد راهنما:

دکتر مجید سیفی

اسفند ۱۳۹۱

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

گرایش حالت جامد

عنوان:

تأثیر میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی روی خواص نانولوله‌های کربنی

از:

محمد اکبرزاده

استاد راهنما:

دکتر مجید سیفی

اسفند ۱۳۹۱

باشکر فراوان از تمام فکرها و دست‌هایی که مراد این کاریاری کردند.

| عنوان         | صفحه |
|---------------|------|
| فهرست مطالب   | ت    |
| فهرست جدول‌ها | چ    |
| فهرست شکل‌ها  | ح    |
| چکیده فارسی   | ز    |
| چکیده انگلیسی | ژ    |

### فصل اول: مقدمه‌ای بر کربن و اشکال مختلف آن در طبیعت

|  |    |
|--|----|
| ۱ مقدمه‌ای بر کربن و اشکال مختلف آن در طبیعت | ۲  |
| ۱-۱ مقدمه                                    | ۲  |
| ۲-۱ گونه‌های مختلف کربن در طبیعت             | ۲  |
| ۱-۲-۱ کربن بی‌شکل                            | ۲  |
| ۲-۲-۱ الماس                                  | ۲  |
| ۳-۲-۱ گرافیت                                 | ۳  |
| ۴-۲-۱ فولرن و نانولوله‌های کربنی             | ۳  |
| ۳-۱ نانولوله‌های کربنی                       | ۴  |
| ۱-۳-۱ ساختار و مشخصه‌یابی نانولوله‌های کربنی | ۴  |
| ۲-۳-۱ روش‌های ساخت نانولوله‌های کربنی        | ۶  |
| ۳-۳-۱ ویژگی‌های نانولوله‌های کربنی           | ۷  |
| ۴-۳-۱ کاربردهای نانولوله‌های کربنی           | ۸  |
| ۴-۱ سخن پایانی                               | ۱۱ |

### فصل دوم: بررسی ساختار گرافن و نانولوله‌های کربنی

|   |    |
|---|----|
| ۲ بررسی ساختار گرافن و نانولوله‌های کربنی | ۱۳ |
| ۱-۲ مقدمه                                 | ۱۳ |

|         |  |
|---------|--|
| ۱۳..... | ۲-۲ ساختار الکترونی کربن.....                              |
| ۱۳..... | ۱-۲-۲ اوربیتال 2p کربن.....                                |
| ۱۴..... | ۲-۲-۲ هیبریداسیون اوربیتال کربن.....                       |
| ۱۵..... | ۳-۲ ساختار هندسی گرافن و نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره..... |
| ۱۵..... | ۱-۳-۲ ساختار هندسی گرافن.....                              |
| ۱۷..... | ۲-۳-۲ ساختار هندسی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره.....       |
| ۲۲..... | ۴-۲ محاسبه ساختار الکترونی گرافن و نانولوله کربنی.....     |
| ۲۲..... | ۱-۴-۲ روش تنگ‌بست برای مواد کریستالی.....                  |
| ۲۵..... | ۱-۱-۴-۲ ساختار الکترونی گرافن.....                         |
| ۳۶..... | ۲-۱-۴-۲ ساختار الکترونی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره.....  |
| ۴۵..... | ۲-۴-۲ روش K.P.....   |
| ۴۵..... | ۱-۲-۴-۲ روش K.P در نانولوله‌های کربنی.....                 |

### فصل سوم: ساختار الکترونی نانولوله‌های کربنی در حضور میدان‌های مغناطیسی و الکتریکی

|         |   |
|---------|---|
| ۵۴..... | ۳ ساختار الکترونی نانولوله‌های کربنی در حضور میدان‌های مغناطیسی و الکتریکی.....       |
| ۵۴..... | ۱-۳ مقدمه.....  |
| ۵۴..... | ۲-۳ تأثیر میدان مغناطیسی روی ساختار الکترونی نانولوله‌های کربنی.....                  |
| ۵۴..... | ۱-۲-۳ روش تنگ‌بست.....  |
| ۵۶..... | ۱-۱-۲-۳ ساختار الکترونی نانولوله کربنی آرمچیر.....                                    |
| ۶۲..... | ۲-۱-۲-۳ ساختار الکترونی نانولوله کربنی زیگزاگ.....                                    |
| ۶۷..... | ۲-۲-۳ روش K.P.....  |
| ۶۸..... | ۱-۲-۲-۳ ساختار الکترونی نانولوله کربنی آرمچیر.....                                    |
| ۷۳..... | ۲-۲-۲-۳ ساختار الکترونی نانولوله کربنی زیگزاگ.....                                    |
| ۷۹..... | ۳-۳ تأثیر میدان الکتریکی روی ساختار الکترونی نانولوله‌های کربنی.....                  |
| ۸۱..... | ۱-۳-۳ نمودار انرژی پاشندگی نانولوله‌های کربنی آرمچیر فلزی در حضور میدان الکتریکی..... |
| ۸۳..... | ۲-۳-۳ گاف انرژی نانولوله‌های کربنی آرمچیر فلزی در حضور میدان الکتریکی.....            |

- ۳-۲-۱ گاف انرژی نانولوله‌های کربنی آرمچیر (۵,۵) در حضور میدان الکتریکی ..... ۸۴
- ۳-۲-۲ گاف انرژی نانولوله‌های کربنی آرمچیر (۸,۸) در حضور میدان الکتریکی ..... ۸۵
- ۳-۲-۳ گاف انرژی نانولوله‌های کربنی آرمچیر (۱۰,۱۰) در حضور میدان الکتریکی ..... ۸۶
- ۳-۴ پیشنهاد برای کارهای آینده ..... ۸۸
- مراجع ..... ۹۰

| عنوان   | صفحه |
|---|------|
| جدول ۱-۲: پارامترهای مورد استفاده در تعیین ویژه مقادیر انرژی باندهای $\pi$ گرافن در منطقه اول بریلوئن | ۳۰   |
| جدول ۲-۲: مقایسه گاف انرژی بر حسب شعاع نانولوله برای نانولوله‌های زیگزاگ نیمه‌رسانا توسط روش تنگ‌بست  | ۴۴   |
| جدول ۳-۲: مقایسه گاف انرژی بر حسب شعاع نانولوله برای نانولوله‌های زیگزاگ نیمه‌رسانا توسط روش K.P      | ۵۲   |
| جدول ۱-۳: گاف انرژی محاسبه شده برای نانولوله آرمچیر (۹,۹) توسط دو روش تنگ‌بست و K.P                   | ۷۱   |
| جدول ۲-۳: پارامترهای $t_1$ و $t_2$ در روش رولینگ  | ۸۰   |
| جدول ۳-۳: مقادیر گاف انرژی نانولوله (۵,۵) در حضور میدان الکتریکی در نقطه $k = 0$                      | ۸۴   |
| جدول ۴-۳: مقادیر گاف انرژی نانولوله (۵,۵) در حضور میدان الکتریکی در نقطه $k = 2\pi/3a$                | ۸۴   |
| جدول ۵-۳: مقادیر گاف انرژی نانولوله (۸,۸) در حضور میدان الکتریکی در نقطه $k = 0$                      | ۸۵   |
| جدول ۶-۳: مقادیر گاف انرژی نانولوله (۸,۸) در حضور میدان الکتریکی در نقطه $k = 2\pi/3a$                | ۸۵   |
| جدول ۷-۳: مقادیر گاف انرژی نانولوله (۱۰,۱۰) در حضور میدان الکتریکی در نقطه $k = 0$                    | ۸۶   |
| جدول ۸-۳: مقادیر گاف انرژی نانولوله (۱۰,۱۰) در حضور میدان الکتریکی در نقطه $k = 2\pi/3a$              | ۸۶   |



| عنوان  | صفحه |
|--|------|
| شکل ۱-۱: ۲ ساختار اصلی کربن موجود در طبیعت. الف) گرافیت، ب) الماس.....   | ۳    |
| شکل ۱-۲: مولکول $C_{60}$ که یک فولرن است در این شکل نشان داده شده است.....   | ۳    |
| شکل ۱-۳: اولین تصویر ارائه شده از نانولوله کربنی توسط ایچیمما.....   | ۴    |
| شکل ۱-۴: صفحه گرافن پیچیده شده به صورت نانولوله.....   | ۵    |
| شکل ۱-۵: تصاویر HRTEM از نانولوله‌های تک‌دیواره خوشه‌ای. الف) تصویر سطح مقطع خوشه، ب) تصویر طولی.....  | ۵    |
| شکل ۱-۶: نمایی از یک نانولوله کربنی چنددیواره.....   | ۶    |
| شکل ۲-۱: آرایش الکترونی اوربیتالی اتم کربن.....  | ۱۳   |
| شکل ۲-۲: اوربیتال $2p_x$ دارای شکل دمبلی با دو بازو است، بازوی تیره دامنه مثبت و بازوی روشن دامنه منفی دارد.....   | ۱۴   |
| شکل ۲-۳: الف) ساختار ۲ بعدی هیبرید $sp^2$ ب) تصویری از هیبریداسیون $sp^2$ در گرافن؛ پیوندهای $\sigma$ ، پیوندهای $\pi$ .....   | ۱۵   |
| شکل ۲-۴: در این شکل دو بردار پایه‌ی صفحه گرافن و دو نوع کربن A و B نشان داده شده است.....  | ۱۶   |
| شکل ۲-۵: الف) یاخته واحد شبکه مستقیم گرافن، ب) یاخته ویگنر-سایتز شبکه معکوس گرافن.....   | ۱۷   |
| شکل ۲-۶: در این شکل بردارهایی که تولید انواع نانولوله را می‌کنند نشان داده شده است. یاخته واحد یک نانولوله (۸,۴) نیز نشان داده شده است (مستطیلی که با بردارهای $C_h$ و $T$ ساخته شده است)..... | ۱۸   |
| شکل ۲-۷: الف) نانولوله‌ی زیگزاگ (۰, ۱۲)، ب) نانولوله‌ی آرمچیر (۶, ۶)، ج) نانولوله چیرال (۴, ۶).....  | ۲۰   |
| شکل ۲-۸: انرژی باندهای $\sigma$ و $\pi$ گرافن با توجه به سطح فرمی.....   | ۲۵   |
| شکل ۲-۹: ساختار الکترونی گرافن در مدل تنگ‌بست برای الکترون‌های $\pi$ در منطقه اول بریلوئن برای تقریب نزدیکترین اولین همسایه.....   | ۳۰   |
| شکل ۲-۱۰: نمودار تراز باند $\pi^*$ مربوط به تقریب نزدیکترین اولین همسایه گرافن در منطقه اول بریلوئن.....   | ۳۱   |
| شکل ۲-۱۱: نمودار تراز باند $\pi$ مربوط به تقریب نزدیکترین اولین همسایه گرافن در منطقه اول بریلوئن.....   | ۳۱   |
| شکل ۲-۱۲: ویژه مقادیر انرژی در طول خطوط با بیشترین تقارن در منطقه اول بریلوئن گرافن برای تقریب نزدیکترین اولین همسایه.....   | ۳۲   |
| شکل ۲-۱۳: ساختار الکترونی گرافن برای الکترون‌های $\pi$ در منطقه اول بریلوئن برای تقریب نزدیکترین اولین همسایه با $s_1 = 0$ .....   | ۳۳   |
| شکل ۲-۱۴: نمودار ویژه مقادیر انرژی در دو بعد در طول خطوط با بیشترین تقارن در منطقه اول بریلوئن برای تقریب نزدیکترین اولین همسایه با $s_1 = 0$ .....  | ۳۳   |

- شکل ۲-۱۵: ساختار الکترونی گرافن برای الکترون‌های  $\pi$  در منطقه اول بریلوئن برای تقریب نزدیکترین سومین همسایه..... ۳۵
- شکل ۲-۱۶: ویژه مقادیر انرژی در طول خطوط با بیشترین تقارن در منطقه اول بریلوئن گرافن برای تقریب نزدیکترین سومین همسایه..... ۳۵
- شکل ۲-۱۷: ویژه مقادیر انرژی در دوبرد در طول خطوط با بیشترین تقارن در منطقه اول بریلوئن..... ۳۶
- شکل ۲-۱۸: بردارهای موج مجاز برای الف) نانولوله‌های فلزی ب) نانولوله‌های نیمه‌رسانا..... ۳۷
- شکل ۲-۱۹: شماتیک یک نانولوله آرمچیر..... ۳۹
- شکل ۲-۲۰: ساختار الکترونی نانولوله کربنی آرمچیر (۵,۵)..... ۴۰
- شکل ۲-۲۱: ساختار الکترونی نانولوله کربنی آرمچیر (۸,۸)..... ۴۰
- شکل ۲-۲۲: شماتیک یک نانولوله کربنی زیگزاگ..... ۴۱
- شکل ۲-۲۳: ساختار الکترونی نانولوله کربنی زیگزاگ (۵,۰)..... ۴۲
- شکل ۲-۲۴: ساختار الکترونی نانولوله کربنی زیگزاگ (۶,۰)..... ۴۲
- شکل ۲-۲۵: ساختار الکترونی نانولوله کربنی زیگزاگ (۹,۰)..... ۴۳
- شکل ۲-۲۶: ساختار الکترونی نانولوله کربنی زیگزاگ (۱۰,۰)..... ۴۳
- شکل ۲-۲۷: ساختار الکترونی نانولوله کربنی زیگزاگ (۱۱,۰)..... ۴۴
- شکل ۲-۲۸: گاف انرژی بر حسب شعاع نانولوله برای نانولوله‌های زیگزاگ توسط روش تنگ‌بست..... ۴۵
- شکل ۲-۲۹: ساختار باند نانولوله کربنی آرمچیر (۶,۶) در روش K.P..... ۴۸
- شکل ۲-۳۰: ساختار باند نانولوله کربنی آرمچیر (۹,۹) در روش K.P..... ۴۸
- شکل ۲-۳۱: ساختار باند نانولوله کربنی زیگزاگ فلزی (۹,۰) در روش K.P..... ۴۹
- شکل ۲-۳۲: ساختار باند نانولوله کربنی زیگزاگ فلزی (۱۲,۰) در روش K.P..... ۴۹
- شکل ۲-۳۳: انرژی پراکندگی بر حسب طول موج برای نانولوله کربنی (۹,۰)، توسط دو روش تنگ‌بست و روش K.P (باندهای متناظر با کمترین مقادیر  $(k_{\theta}(N))$  بدست آمده است..... ۵۰
- شکل ۲-۳۴: ساختار باند نانولوله کربنی زیگزاگ نیمه‌رسانا (۷,۰) در روش K.P..... ۵۰
- شکل ۲-۳۵: ساختار باند نانولوله کربنی زیگزاگ نیمه‌رسانا (۰,۸) در روش K.P..... ۵۱
- شکل ۲-۳۶: انرژی پراکندگی بر حسب طول موج برای نانولوله کربنی (۱۰,۰)، توسط دو روش تنگ‌بست و روش K.P (باندهای متناظر با کمترین مقادیر  $(k_{\theta}(N))$  بدست آمده است..... ۵۱

- شکل ۲-۳۷: گاف انرژی بر حسب شعاع نانولوله برای نانولوله‌های زیگزاگ توسط روش K.P. ۵۲.....
- شکل ۳-۱: ساختار الکترونی نانولوله کربنی آرمچیر (۹,۹) در حضور میدان مغناطیسی برای مقادیر مختلف  $\phi$  (a) ، ۰ (b) ، ۰/۲۵ (c) ، ۰/۵ (d) ، ۱ ..... ۵۸
- شکل ۳-۲: ساختار الکترونی نانولوله کربنی آرمچیر (۱۳,۱۳) در حضور میدان مغناطیسی برای مقادیر مختلف  $\phi$  (a) ، ۰ (b) ، ۰/۲۵ (c) ، ۰/۵ (d) ، ۱ ..... ۵۹
- شکل ۳-۳: گاف انرژی بر حسب شار مغناطیسی عبوری از سطح مقطع نانولوله برای نانولوله‌های (a) (۹,۹) ، (b) (۱۳,۱۳) ..... ۶۰
- شکل ۳-۴: مقایسه گاف انرژی بر حسب شار مغناطیسی عبوری از سطح مقطع نانولوله برای نانولوله‌های مختلف (۹,۹) ، (۱۰,۱۰) ، (۱۱,۱۱) و (۱۲,۱۲) ..... ۶۰
- شکل ۳-۵: گاف انرژی بر حسب شعاع نانولوله برای نانولوله‌های آرمچیر در  $\phi = 0.25$  ..... ۶۱
- شکل ۳-۶: گاف انرژی بر حسب شعاع نانولوله برای نانولوله‌های آرمچیر در  $\phi = 0.5$  ..... ۶۱
- شکل ۳-۷: ساختار الکترونی نانولوله کربنی زیگزاگ (۹,۰) در حضور میدان مغناطیسی برای مقادیر مختلف  $\phi$  (a) ، ۰ (b) ، ۰/۲۵ (c) ، ۰/۵ (d) ، ۱ ..... ۶۳
- شکل ۳-۸: ساختار الکترونی نانولوله کربنی زیگزاگ (۱۰,۰) در حضور میدان مغناطیسی برای مقادیر مختلف  $\phi$  (a) ، ۰ (b) ، ۰/۲۵ (c) ، ۰/۳۳ (d) ، ۰/۵ ..... ۶۴
- ۳-۹: گاف انرژی بر حسب شار مغناطیسی عبوری از سطح مقطع نانولوله برای نانولوله (۹,۰) ..... ۶۵
- شکل ۳-۱۰: گاف انرژی بر حسب شار مغناطیسی عبوری از سطح مقطع نانولوله برای نانولوله‌های (a) (۱۰,۰) ، (b) (۱۱,۰) ..... ۶۵
- شکل ۳-۱۱: مقایسه گاف انرژی بر حسب شار مغناطیسی عبوری از سطح مقطع نانولوله برای نانولوله‌های مختلف زیگزاگ فلزی و نیمه‌رسانا ..... ۶۶
- شکل ۳-۱۲: گاف انرژی بر حسب شعاع نانولوله برای نانولوله‌های زیگزاگ فلزی (a)  $\phi = 0.25$  ، (b)  $\phi = 0.5$  و نانولوله‌های زیگزاگ نیمه‌رسانا در (c)  $\phi = 0.25$  و (d)  $\phi = 0.25$  ..... ۶۷
- شکل ۳-۱۳: ساختار الکترونی نانولوله کربنی (۶,۶) در حضور میدان مغناطیسی برای مقادیر مختلف  $\phi$  (a) ، ۰ (b) ، ۰/۲۵ (c) ، ۰/۵ (d) ، ۱ در روش K.P. ..... ۶۸
- شکل ۳-۱۴: ساختار الکترونی نانولوله کربنی (۹,۹) در حضور میدان مغناطیسی برای مقادیر مختلف  $\phi$  (a) ، ۰ (b) ، ۰/۲۵ (c) ، ۰/۵ (d) ، ۱ در روش K.P. ..... ۶۹
- شکل ۳-۱۵: گاف انرژی بر حسب شار مغناطیسی عبوری از سطح مقطع نانولوله برای نانولوله‌های (a) (۶,۶) ، (b) (۹,۹) در روش K.P. ..... ۷۰
- شکل ۳-۱۶: مقایسه گاف انرژی بر حسب شار مغناطیسی عبوری از سطح مقطع نانولوله برای نانولوله‌های مختلف (۶,۶) ، (۷,۷) ، (۸,۸) ، (۹,۹) و (۱۰,۱۰) توسط روش K.P. ..... ۷۰

- شکل ۳-۱۷: گاف انرژی بر حسب شعاع نانولوله برای نانولوله‌های آرمچیر در  $\varphi = 0.25$  توسط روش K.P ..... ۷۱
- شکل ۳-۱۸: گاف انرژی بر حسب شعاع نانولوله برای نانولوله‌های آرمچیر در  $\varphi = 0.5$  توسط روش K.P ..... ۷۲
- شکل ۳-۱۹: ساختار الکترونی نانولوله کربنی  $(9,0)$  در حضور میدان مغناطیسی برای مقادیر مختلف  $\varphi$  (a)  $\varphi = 0$  (b)  $\varphi = 0.25$  (c)  $\varphi = 0.5$  (d)  $\varphi = 0.75$  در روش K.P ..... ۷۳
- شکل ۳-۲۰: ساختار الکترونی نانولوله کربنی  $(10,0)$  در حضور میدان مغناطیسی برای مقادیر مختلف  $\varphi$  (a)  $\varphi = 0$  (b)  $\varphi = 0.25$  (c)  $\varphi = 0.5$  (d)  $\varphi = 0.75$  در روش K.P ..... ۷۴
- شکل ۳-۲۱: ساختار الکترونی نانولوله کربنی  $(11,0)$  در حضور میدان مغناطیسی برای مقادیر مختلف  $\varphi$  (a)  $\varphi = 0$  (b)  $\varphi = 0.25$  (c)  $\varphi = 0.5$  (d)  $\varphi = 0.75$  در روش K.P ..... ۷۵
- شکل ۳-۲۲: گاف انرژی بر حسب شار مغناطیسی عبوری از سطح مقطع نانولوله برای نانولوله زیگزاگ  $(9,0)$  در روش K.P ..... ۷۶
- شکل ۳-۲۳: گاف انرژی بر حسب شار مغناطیسی عبوری از سطح مقطع نانولوله برای نانولوله زیگزاگ  $(10,0)$  در روش K.P ..... ۷۶
- شکل ۳-۲۴: گاف انرژی بر حسب شار مغناطیسی عبوری از سطح مقطع نانولوله برای نانولوله زیگزاگ  $(11,0)$  در روش K.P ..... ۷۷
- شکل ۳-۲۵: مقایسه گاف انرژی بر حسب شار مغناطیسی عبوری از سطح مقطع نانولوله برای نانولوله‌های زیگزاگ  $(9,0)$  و  $(6,0)$  ..... ۷۸
- شکل ۳-۲۶: مقایسه گاف انرژی بر حسب شار مغناطیسی عبوری از سطح مقطع نانولوله برای نانولوله‌های زیگزاگ نیمه‌رسانا در روش K.P ..... ۷۸
- شکل ۳-۲۷: گاف انرژی بر حسب شعاع نانولوله برای نانولوله‌های زیگزاگ فلزی (a)  $\varphi = 0.25$  (b)  $\varphi = 0.5$  در روش K.P ..... ۷۸
- شکل ۳-۲۸: گاف انرژی بر حسب شعاع نانولوله برای نانولوله‌های زیگزاگ نیمه‌رسانا  $(\vartheta = 1)$  در (a)  $\varphi = 0.17$  (b)  $\varphi = 0.83$  و نانولوله‌های زیگزاگ نیمه‌رسانا  $(\vartheta = -1)$  در (a)  $\varphi = 0.17$  (b)  $\varphi = 0.83$  در روش K.P ..... ۷۹
- شکل ۳-۲۹: ساختار الکترونی نانولوله کربنی آرمچیر  $(5,5)$  در میدان الکتریکی عمودی:  $V/\text{\AA}$  ۰/۴، ۰/۳، ۰/۲، ۰/۱، ۰/۰۵،  $E=0$  ..... ۸۲
- شکل ۳-۳۰: ساختار الکترونی نانولوله کربنی آرمچیر  $(8,8)$  در میدان الکتریکی عمودی:  $V/\text{\AA}$  ۰/۴، ۰/۳، ۰/۲، ۰/۱، ۰/۰۵،  $E=0$  ..... ۸۲
- شکل ۳-۳۱: ساختار الکترونی نانولوله کربنی آرمچیر  $(10,10)$  در میدان الکتریکی عمودی:  $V/\text{\AA}$  ۰/۴، ۰/۳، ۰/۲، ۰/۱، ۰/۰۵،  $E=0$  ..... ۸۳
- شکل ۳-۳۲: نمودار گاف انرژی بر حسب میدان الکتریکی برای نانولوله  $(5,5)$  در نقطه  $k = 2\pi/3a$  ..... ۸۴

شکل ۳-۳۳: نمودار گاف انرژی بر حسب میدان الکتریکی برای نانولوله (۸,۸) در نقطه  $k = 2\pi/3a$  ..... ۸۵

شکل ۳-۳۴: نمودار گاف انرژی بر حسب میدان الکتریکی برای نانولوله (۱۰,۱۰) در نقطه  $k = 2\pi/3a$  ..... ۸۶

## چکیده

تأثیر میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی روی خواص نانولوله‌های کربنی

محمد اکبرزاده

در این تحقیق، خواص الکترونی نانولوله‌های کربنی تحت تأثیر میدان‌های خارجی توسط مدل تنگ‌بست مورد مطالعه قرار گرفته است. نانولوله‌های کربنی هنگامی که از روش زون-فولدینگ استفاده می‌کنیم و از اثرات پیچش و هیبریداسیون اوربیتال‌های  $\pi$  و  $\sigma$  صرف‌نظر می‌کنیم با توجه به قطر و آرایش مارپیچیشان می‌توانند یک فلز یا نیمه‌رسانا باشند. ابتدا، با استفاده از تقریب تنگ‌بست رابطه انرژی پراکندگی گرافن را محاسبه می‌کنیم و سپس با اعمال شرایط مرزی مناسب، انرژی پراکندگی نانولوله کربنی را بدست می‌آوریم. در نهایت، به ترتیب میدان‌های مغناطیسی و الکتریکی خارجی موازی و عمود بر محور نانولوله اعمال می‌کنیم. میدان مغناطیسی ساختار باند را تغییر خواهد داد، حالت تبهگنی را از بین می‌برد، و گاف انرژی را کاهش می‌دهد. گاف انرژی بین صفر و یک مقدار محدود به عنوان تابعی از شار مغناطیسی  $\Phi$  نوسان می‌کند، و وابستگی شدیدی به شدت میدان و انواع نانولوله‌های کربنی نشان می‌دهد، و به طور معکوس متناسب با شعاع نانولوله است. این نتایج همچنین به خوبی در روش K.P دوباره بدست آمده است. در میدان الکتریکی عمودی، ما اثر پیچش نانولوله را تنها با استفاده اوربیتال  $\pi$  در محاسبات تنگ‌بست در نظر می‌گیریم. محاسبات برای نانولوله‌های آرمچیر نشان می‌دهد که ساختار باند نانولوله تغییر می‌کند، تمام حالت‌های تبهگنی شکافته شده است، همچنین بیشترین تبهگنی در منطقه اول بریلوئن ( $k = \pi/a$ ) از بین رفته است، و نقاط فرمی به سمت نقاط  $\Gamma$  انتقال داده می‌شود.

کلید واژه‌ها: گرافن، نانولوله کربنی، روش تنگ‌بست، تئوری K.P، میدان مغناطیسی، میدان الکتریکی.

**Abstract****Influence of Electric and Magnetic Fields on Properties of Carbon Nanotubes**

Mohammad Akbarzadeh

In this research, electronic properties of Carbon Nanotubes subject to the influence of external fields are studied by Tight-binding model. A Carbon Nanotubes can be either a metal or semiconductor depending on their diameters and helical arrangement when we use zone-folding method and ignore effects of curvature and hybridization of  $\pi$  and  $\sigma$  orbitals. At first, by using the tight-binding approximation we calculated energy dispersion relation of Graphene and then by applying appropriate boundary conditions, we obtaining energy dispersion of Carbon Nanotube. Finally, we applied external magnetic and electric fields parallel and perpendicular to the nanotube axis, respectively. The magnetic field will modify the band structure, destroy the state degeneracy, and alter the energy gap. The energy gap oscillate between zero and a finite value as a function of magnetic flux  $\phi$ , exhibit rich dependence on the field strength and types of carbon nanotubes, and is inversely proportional to the radius of nanotube and the energy spectra approach those of a graphite sheet. This results also is well reproduced in K.P method. In transverse electric field, we include curvature effect of the Nanotube by using only  $\pi$  orbitals in our tight-binding calculations. The calculations show that the bandstructure of a Nanotube is modified, split all states degeneracy, also the large degeneracy at the first Brillouin zone boundary is lifted, and the Fermi points shift toward the  $\Gamma$  point.

**Keyword:** Graphene, Carbon Nanotubes, Tight-binding method, K.P theory, Magnetic field, Electric field

# فصل اول

مقدمه ای بر کربن و اشکال  
مختلف آن در طبیعت



## ۱ مقدمه‌ای بر کربن و اشکال مختلف آن در طبیعت

### ۱-۱ مقدمه

کربن با عدد اتمی ۶ در گروه ششم جدول تناوبی قرار دارد. هر اتم غیر پیوندی در کربن دارای ساختار  $1s^2 2s^2 2p^2$  است. به منظور ایجاد پیوند کووالانسی، یکی از الکترون‌های تراز  $2s$  به تراز  $2p$  منتقل شده و اوربیتال‌های هیبریدی به یکی از سه حالت زیر تشکیل می‌شود [۱]. در اولین حالت، الکترون  $2s$  با یکی از الکترون‌های  $2p$  هیبرید<sup>۱</sup> می‌شود، بنابراین دو اوربیتال  $sp^1$  تشکیل می‌شود که باهم زاویه  $180^\circ$  درجه می‌سازند. در دومین حالت الکترون  $2s$  با دو الکترون  $2p$  هیبرید می‌شود و سه اوربیتال  $sp^2$  تشکیل می‌شود که تحت زاویه  $120^\circ$  درجه از هم جدا شده‌اند و در یک صفحه قرار دارند. در سومین حالت، یک الکترون  $2s$  با سه الکترون از  $2p$  هیبرید می‌شود و محصول پیوند  $sp^3$  با چهاروجهی مشخص می‌شود و تحت زاویه  $109.5^\circ$  درجه از هم جدا شده‌اند [۲]. این عنصر ترکیب اصلی موجودات زنده را در بر گرفته است و از دیرباز برای انسان به صورت دوده و ذغال چوب شناخته شده بود. گونه‌های متفاوت دیگری از کربن نیز وجود دارند که تفاوت این گونه‌ها صرفاً به شکل‌گیری اتم‌های کربن نسبت به هم یا به ساختار شبکه‌ای آنها برمی‌گردد.

### ۱-۲ گونه‌های مختلف کربن در طبیعت

انواع مختلف کربن که تاکنون در طبیعت مشاهده شده‌اند به صورت زیر می‌باشند.

#### ۱-۲-۱ کربن بی‌شکل

از سوختن ناقص بسیاری از هیدروکربن‌ها و یا مواد آلی (مثل چوب یا پلاستیک) ماده سیاه رنگی به جا می‌ماند که کربن بی‌شکل یا آمورف نام دارد. این ماده که پس مانده سوخت ناقص مواد آلی است از دیرباز جهت تولید انرژی بشر قرار می‌گرفت. ذغال چوب و ذغال سنگ از انواع مواد کربن بی‌شکل هستند که انسان با سوزاندن آنها انرژی زیادی را بدست می‌آورد.

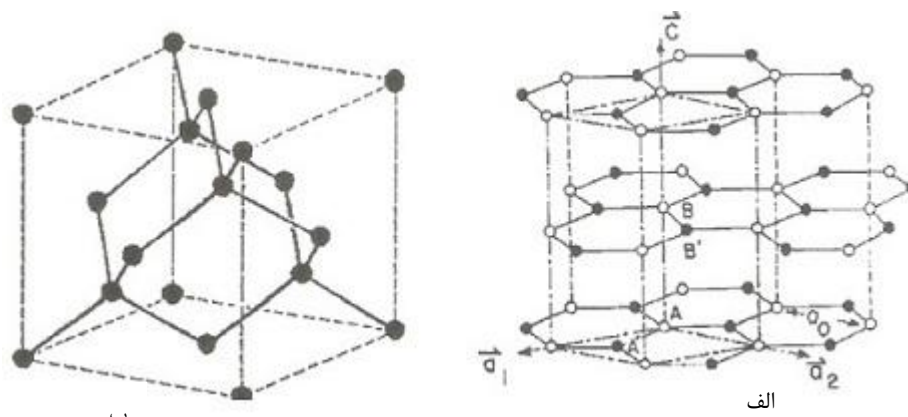
#### ۱-۲-۲ الماس

الماس گونه شناخته شده دیگری از کربن می‌باشد که دارای ساختار بلوری منظمی است. در ساختار الماس، اتم‌های کربن هیبریداسیون  $sp^3$  دارند و شبکه آن از اتم‌های کربنی تشکیل شده که هر اتم کربن با چهار اتم کربن دیگر پیوند برقرار کرده است. اتم‌های الماس در یک شبکه fcc با ثابت شبکه  $a = 0.356 \text{ nm}$  قرار دارند. طول پیوند کربن-کربن در این ساختار برابر  $0.15 \text{ nm}$  گزارش شده است. این نوع از ساختار کربن شفاف، بسیار سخت و پایدار است و به این ترتیب جزء مواد عایق طبقه بندی می‌شود [۳،۲]. این ماده به دلیل سختی بالا تمام عناصر موجود در طبیعت را می‌خراشد و از این رو در تراش فلزات سخت، سرامیک‌ها و شیشه از آن استفاده می‌کنند.

<sup>۱</sup> Hybrid

۳-۲-۱ گرافیت<sup>۱</sup>

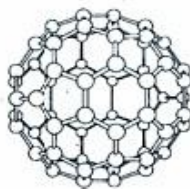
گرافیت یکی دیگر از گونه‌های کربن است که به رنگ تیره وجود دارد. گرافیت از دیرباز جهت نوشتن به کار می‌رفته است. گرافیتی که در طبیعت یافت می‌شود معمولاً دارای ناخالصی‌هایی می‌باشد و کربن خالص نیست. هیبریداسیون اتمهای کربن در گرافیت  $sp^2$  است و به صورت لایه‌ای از شش ضلعی‌های کربنی تشکیل شده است. پیوندهایی که اتمهای کربن در یک صفحه با هم برقرار می‌کنند از نوع کووالانسی و بسیار قوی می‌باشد، ولی پیوند بین صفحات ضعیف و از نوع واندروالسی است. در راستای دوبرعده در یک صفحه، گرافیت رسانای بسیار خوبی می‌باشد [۴].



شکل ۱-۲: ساختار اصلی کربن موجود در طبیعت. الف) گرافیت، ب) الماس [۴].

۴-۲-۱ فولرن<sup>۲</sup> و نانولوله‌های کربنی<sup>۳</sup>

در سال ۱۹۸۵ ریچارد اسمالی<sup>۴</sup> ساختاری جدید از کربن را کشف کرد که فولرن نامگذاری شد [۵].  $C_{60}$  اولین فولرنی بود که کشف شد. این مولکول همانند یک توپ فوتبال کروی است و شامل ۶۰ اتم کربن می‌باشد. که در گوشه‌های شش ضلعی منتظم و تعدادی مشخص پنج ضلعی قرار دارد. سطح یک کره را نمی‌توان تنها با شش ضلعی‌های منتظم پوشش داد بنابراین اتم‌های کربن جهت قرارگیری بر روی یک سطح کروی ناچار هستند در بعضی از مکان‌ها تشکیل پنج ضلعی بدهند. مولکول  $C_{60}$  متشکل از ساختاری با ۲۰ شش ضلعی و ۱۲ پنج ضلعی است [۳].



شکل ۲-۱: مولکول  $C_{60}$  که یک فولرن است در این شکل نشان داده شده است [۳].

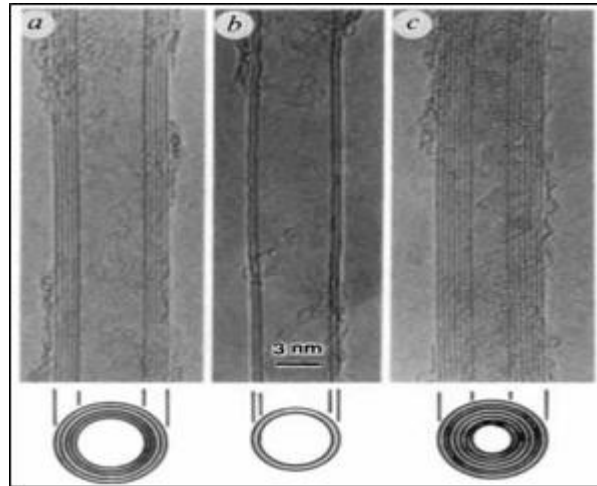
<sup>1</sup> Graphite

<sup>2</sup> Fullerene

<sup>3</sup> Carbon Nanotube

<sup>4</sup> Rick Smalley

بعد از گزارش کشف مولکول  $C_{60}$  دانشمندان زیادی شروع به انجام آزمایش‌های جدید جهت ساخت مولکول‌های جدید از کربن کردند. سرانجام در سال ۱۹۹۱ ایجیما<sup>۱</sup> موفق به کشف نانولوله‌های چند دیواره کربنی<sup>۲</sup> شد [۷،۶]. ایجیما اولین بار ساختار نانولوله‌های کربنی چنددیواره را زیر میکروسکوپ الکترونی خود مشاهده کرد (شکل ۱-۳).



شکل ۱-۳: اولین تصویر ارائه شده از نانولوله کربنی توسط ایجیما [۷].

تقریباً ۲ سال بعد از کشف نانولوله‌های کربنی چنددیواره (۱۹۹۳)، نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره<sup>۳</sup> فقط شامل یک پوسته از اتمهای کربنی توسط دو گروه به طور جداگانه کشف شدند. یک گروه ایجیما و همکارانش در آزمایشگاه تحقیقاتی NEC و گروه دیگر به سرپرستی بتون<sup>۴</sup> در مرکز تحقیقاتی IBM در کالیفرنیا بودند. کارهای بعدی روی نانولوله‌های تک‌دیواره توسط ریچارد اسمالی و همکارانش در دانشگاه رایس<sup>۵</sup> انجام شد. آنها توانستند مقدار انبوهی نانولوله تک‌دیواره به قطر nm تولید کنند [۹،۸]. نانولوله‌های کربنی به دلیل خواص الکتریکی جالبی که دارند در قطعات الکتریکی موارد استفاده زیادی می‌توانند داشته باشند. این مواد به دلیل رسانش یک بعدی در مقیاس نانو می‌توانند جایگزین مناسبی برای فلزات و یا نیمرسانا باشند. نانولوله‌ها بنا بر پیکربندی هندسی خود می‌توانند خواص رسانایی و یا نیمرسانایی از خود نشان دهند و همین موضوع این مواد را از سایر مواد مشابه متمایز می‌کند. نانولوله‌ها علاوه بر سبک بودن، استحکامی چند برابر فولاد دارند [۱۰].

### ۱-۳ نانولوله‌های کربنی

#### ۱-۳-۱ ساختار و مشخصه‌یابی نانولوله‌های کربنی

نانولوله‌های کربنی بسته به ساختار و یا هدایت الکتریکی به چند نوع طبقه‌بندی می‌شوند. از جنبه ساختار به دو گروه نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره و چنددیواره تقسیم بندی می‌شوند [۱۱-۱۵]. نانولوله‌های کربنی تک دیواره، قطری حدود یک تا چند نانومتر دارند در حالی که نانولوله‌های کربنی چند دیواره متشکل از لوله‌های استوانه‌ای شکل متحدالمحور هستند و می-

<sup>1</sup> Iijima

<sup>2</sup> MWCNT

<sup>3</sup> SWCNT

<sup>4</sup> Bethune

<sup>5</sup> Rice University

توانند قطری از چند نانومتر تا صد نانومتر داشته باشند [۱۶-۱۸]. فاصله بین صفحات استوانه‌ای در نانولوله‌های کربنی چند-دیواره تقریباً  $0.345 \text{ nm}$  است که خیلی نزدیک به فاصله صفحات گرافیت از یکدیگر می‌باشد. همچنین نانولوله‌های کربنی از نظر الکتریکی به دو صورت رسانا و نیمه‌رسانا تقسیم‌بندی می‌شوند [۱۲، ۱۹، ۲۰].

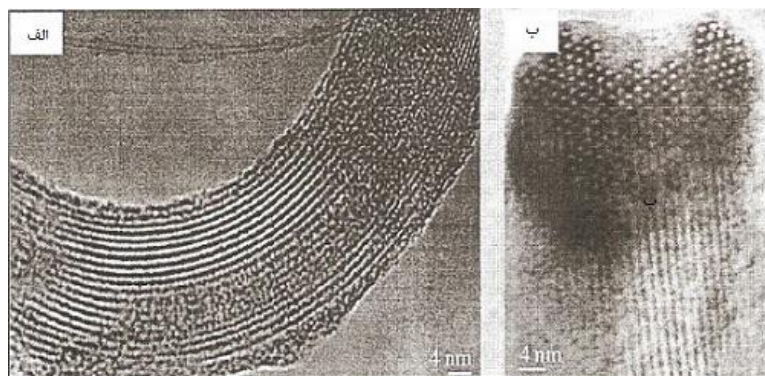
### الف) نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره

همانند  $C_{60}$  گرافیت یک شبکه سه بعدی از اتم کربن می‌باشد. یک لایه تکی از گرافیت، یک ماده دوبعدی که گرافن<sup>۱</sup> نامیده می‌شود را تشکیل می‌دهد. یک نانولوله تک‌دیواره را می‌توان به صورت یک صفحه گرافنی در نظر گرفت که پیچیده شده است. صفحه گرافن از ساختار لانه زنبوری اتم‌های کربنی تشکیل شده که هر اتم کربن در یک نقطه از شبکه شش ضلعی قرار دارد و با  $(n, m)$  نمایش داده می‌شود.



شکل ۱-۴: صفحه گرافن پیچیده شده به صورت نانولوله [۲۱].

معمولاً نانولوله‌های تک‌دیواره به طور مجزا از هم بدست نمی‌آیند و اغلب ساختار خوشه‌ای<sup>۲</sup> شکل دارند. این ساختار خوشه-ای از نانولوله‌هایی تشکیل شده‌اند که به طور موازی در کنارهم قرار گرفته باشند. نیرویی که نانولوله‌ها را در این این ساختار کنارهم قرار داده است، نیروی واندروالس بین لوله‌ها می‌باشد.



شکل ۱-۵: تصاویر HRTEM از نانولوله‌های تک‌دیواره خوشه‌ای. الف) تصویر سطح مقطع خوشه، ب) تصویر طولی [۲۲].

<sup>۱</sup> Graphene

<sup>۲</sup> Rope