١٢٩٨٤

دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه شیمی

پایان نامه‌ی دکتری رشته‌ی شیمی گرایش شیمی‌فیزیک

مطالعه جریان سیال درون نانولوله‌های خم‌دار با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

استاد راهنما:

دکتر حسن سبزیان

استاد مشاور:

دکتر محمود اشرفی‌زاده

پژوهشگر:

زهرا توانگر

۱۳۸۸/۱۰/۲۷

شهریور ماه ۱۳۸۸

۱۲۹۹۸۲

کلیه حقوق مادی مترتب بـر نتـایج مطالعـات،
ابتکارات و نوآوری های ناشی از تحقیق موضوع
این پایان نامه متعلق به دانشگاه اصفهان است.

شیوه نگارش پایان نامه
رعایت شده است
تحصیلات تکمیلی دانشگاه اصفهان

دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه شیمی

پایان نامه ی دکتری رشته ی شیمی گرایش شیمی‌فیزیک خانم زهرا توانگر

تحت عنوان

مطالعهٔ جریان سیال درون نانولوله‌های خم‌دار با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

در تاریخ ۱۳۸۸/۶/۱۶ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه عالی به تصویب نهایی رسید.

۱- استاد راهنمای پایان نامه	دکتر حسن سبزیان	با مرتبه‌ی علمی دانشیار شیمی‌فیزیک
۲- استاد مشاور پایان نامه	دکتر محمود اشرفی‌زاده	با مرتبه‌ی علمی استادیار مهندسی مکانیک
۳- استاد داور داخل گروه	دکتر سیدفوآد آقامیری	با مرتبه‌ی علمی استادیار مهندسی شیمی
۴- استاد داور داخل گروه	دکتر فردین خیراندیش	با مرتبه‌ی علمی استادیار فیزیک
۵- استاد داور خارج از گروه	دکتر سیدمجید هاشمیان‌زاده	با مرتبه‌ی علمی دانشیار شیمی‌فیزیک
۶- استاد داور خارج از گروه	دکتر حسن به‌نژاد	با مرتبه‌ی علمی دانشیار شیمی‌فیزیک

مدیر گروه شیمی

دکتر ایرج محمدپور بلترک

تقدیم به

پدر و مادر عزیزم

و همسر و پسر نازنینم پویا

بنام خدا

خدای را شاکرم که حق حیات و اندیشیدن را عطا فرمود و نعمت آموختن و تجربه کردن را ارزانی داشت.

بی‌شک انجام این پژوهش مرهون راهنمایی صبورانه و مشفقانه استاد ارجمندم جناب آقای دکتر حسن سبزیان است. خالصانه از ایشان بخاطر تمامی زحمات بی‌دریغ‌شان تشکر می‌کنم و سلامتی و سربلندی بیشتر ایشان را از درگاه خداوند مسئلت می‌کنم.

از همسر و پسر عزیزم سپاسگزارم که با احترام به کار من، در طول این دوره با من همراه و همدل بودند. همچنین از پدر و مادر مهربانم که دعای خیرشان در طی این مسیر همواره دستگیر من بوده‌است، تشکر می‌کنم.

از جناب آقای دکتر محمود اشرفی‌زاده استاد مشاور پایان‌نامه، جناب آقای دکتر حسن به‌نژاد و جناب آقای دکتر مجید هاشمیان‌زاده، اساتید صاحب‌نظر مدعو خارج، جناب آقای دکتر فردین خیراندیش و جناب آقای دکتر فؤاد آقامیری اساتید صاحب‌نظر مدعو داخل، به خاطر مطالعهٔ این پایان‌نامه و راهنمایی‌های ارزنده‌شان سپاسگزار و ممنونم.

چکیده

جریان سیال درون نانولوله‌ها می‌تواند تقلیدی از جریان سریع و گزینشی در کانال‌های زیستی باشد و اهمیت زیادی در سامانه‌های نانوالکترومکانیکی و زیستی دارد. استفاده از این ترکیبات در انتقال دارو به داخل سلول‌ها و یا حتی داخل بخش خاصی از سلول در بافت هدف، مورد توجه و مطالعه بوده‌است. جریان سیال در نانولوله‌ها کاربردهای متنوعی در نانوفنّاوری مخصوصاً در نانوماشین‌های با قسمت‌های متحرک دارد. برای مثال، انتقال سیال در سامانه‌های هیدرولیکی یا انتقال مولکولهای واکنش‌دهنده به داخل محفظه واکنش می‌تواند با استفاده از نانولوله‌های کربنی صورت گیرد. مطالعهٔ جریان گازها و مایعات درون نانولوله‌های کربنی می‌تواند راهی برای مطالعهٔ جریان مخلوط واکنش درون نانوواکنشگاه‌های آینده باز کند.

هدف از این تحقیق، مطالعهٔ جریان سیال درون نانولوله‌های مختلف می‌باشد که به روش دینامیک مولکولی صورت می‌گیرد. بدین منظور، مطالعهٔ جریان گازهای خالص و مخلوط آنها درون نانولوله‌های مختلف با قطر متفاوت صورت گرفته و خواص دینامیکی آنها مورد بررسی قرار گرفت. مطالعات مشابهی درون نانولوله‌های خم‌دار (CNTJ) صورت گرفت. یک CNTJ از سه بخش تشکیل می‌شود، دو نانولولهٔ تک‌دیواره (CNT1 و CNT2) و یک ناحیهٔ اتصال‌دهندهٔ دو نانولوله **J**. بنابراین یک CNTJ را می‌توان به صورت CNT1-**J**-CNT2 نشان داد.

در اولین بخش از این مطالعه، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جریان گاز کرهٔ سخت درون مدلی دوبعدی از نانولولهٔ کربنی با استفاده از یک برنامهٔ فرترن انجام شد. در این مطالعه، دیوارهٔ پتانسیل سخت دافعه، از طریق محاسبات از اساس در سطح نظری B3LYP /6-311++G(d,p) بر روی سامانه مرجع مولکول سیال–کرونن بدست آمد. نتایج این محاسبات نشان می‌دهد که با افزایش عدد اتمی گاز نجیب (He، Ne و Ar)، محل دیوارهٔ سخت نسبت به محل هستهٔ اتم‌های کربن نانولوله در فاصلهٔ دورتری قرار می‌گیرد. دامنهٔ این دیوارهٔ نوسانی با بزرگترشدن اندازهٔ گونهٔ موردنظر کوچکتر می‌شود که به برهم‌کنش قویتر ذره با دیواره و بنابراین مشارکت تعداد بیشتری اتم‌های کربن نانولوله در تعیین پتانسیل برهم‌کنش از فاصلهٔ خاصی از نانولوله مربوط می‌شود.

تأثیر چگالی ذره‌ای، دمای منبع، و برش‌های مختلف دوبعدی از یک CNT بر روی جریان گاز کرهٔ سخت بررسی گردید. نتایج نشان داد که با افزایش اندازهٔ ذره تعداد برخوردهای بین ذرات افزایش و تعداد برخوردهای با دیواره‌ها کاهش می‌یابد. فاصلهٔ طولی متوسط طی‌شده در هر گام زمانی، نشان داد که شکل دیوارهٔ پتانسیل دافعهٔ سخت نقش مهمی در زمینه آسانی عبور ذرات مختلف درون یک نانولوله ایفاء می‌کند. شبیه‌سازی جریان مخلوط‌های با غلظت متفاوت از دو گاز درون نانولوله‌های مختلف، نشان داد که غلظت گونه‌ها بر آسانی عبور آنها مؤثر است.

بررسی تأثیر حضور سیال درون نانولوله بر روی ساختار ابرمولکول حاوی سیال و نانولوله با روش نیمه‌تجربی CNDO/2 مورد مطالعه قرار گرفت. بدلیل تعداد زیاد اتم‌های سامانه و امکانات سخت‌افزاری موجود، استفاده از روش‌های قویتر برای تعیین ساختار امکان‌پذیر نبود. نتایج نشان دادند که انرژی برهم‌کنش سیال– نانولوله، با افزایش تعداد ذرات سیال در ابتدا با شیب ملایم‌تر و نهایتاً با شیب بزرگتری افزایش می‌یابد که منجر به انبساط و در نهایت، گسسته‌شدن ساختار نانولوله می‌شود.

در بخش دیگری از این مطالعه، جریان سیال‌های مولکولی ساده، نظیر منوکسیدکربن (CO) و دی‌اکسیدکربن (CO_2) از درون نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی صورت گرفت. اثرات اندازه و شکل این نانولوله‌ها بر روی دینامیک جریان گازهای خالص CO و CO_2 و هم‌چنین مخلوط آنها بررسی گردید. نتایج مطالعات نشان داد که در همهٔ نانولوله‌های کربنی، به جز برای نانولولهٔ کربنی (۲۱،۰)، جابجایی مولکول‌های CO از مولکول‌های CO_2 بیشتر است. شبیه‌سازی جریان گازهای خالص CO و CO_2 و هم‌چنین مخلوط آنها درون نانولولهٔ (۱۲،۱۲) تحت شرایط یکسان اما در دماهای مختلف نشان داد که ضریب نفوذ مولکول‌های CO و CO_2 با افزایش دما، افزایش یافته، اما این افزایش رفتار یکنواختی را در بازهٔ دمایی مورد مطالعه نشان نمی‌دهد. بررسی زوایای جهت‌یابی متوسط مولکول‌های CO و CO_2 نشان می‌دهد که نوع نانولوله و قطر آن، نوع مولکول‌های سیال و چگالی آنها در زاویه‌ای که محور مولکول‌ها نسبت به محور نانولوله می‌سازد مؤثر است. توزیع شعاعی متوسط تصویرشده بر یک برش عرضی برای دو نوع نانولوله که قطر یکسانی دارند نشان داد که نوع نانولوله، تأثیر مهمی بر توزیع مولکول‌های سیال دارد.

در آخرین بخش از این مطالعه، بررسی جریان گازهای خالص CO و CO_2 و مخلوط آنها در سه نانولولهٔ خم‌دار، (۳،۸)-J-(۱۲،۱۲)، (۸،۱۲)-J-(۱۲،۸) و (۱۳،۰)-J-(۸،۸) به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انجام گرفت. در جریان گازهای CO/CO_2 درون نانولوله‌های دارای خم، صرفنظر از نوع نانولوله‌های سازندهٔ آن و شعاع آنها، همواره چگالی عددی مولکول‌های گاز در دومین نانولوله بیشتر است. مطالعات صورت گرفته نشان داد مولکول‌های گاز در ناحیهٔ خم انحراف شدیدی را تحمل می‌کنند که بدلیل تغییر ناگهانی تقارن میدان نیرو در مسیر حرکت مولکول‌ها در این ناحیه است. متوسط کسر مولکول‌هایی که می‌توانند کمتر از فاصلهٔ خاصی به دیوارهٔ نانولوله نزدیک شوند، به شکل ناحیهٔ اتصال‌دهندهٔ دو نانولوله بستگی دارد. توزیع شعاعی متوسط تصویرشده بر یک برش عرضی برای مولکول‌های CO و CO_2 در زمان‌های قبل و بعد از تعادل در جریان گازهای خالص CO و CO_2 و نیز مخلوط آنها درون CNTJهای مورد نظر دو نوع توزیع ستونی و استوانه‌ای برای مولکول‌های گاز درون هر دو نانولوله نشان داد.

واژه‌های کلیدی: شبیه‌سازی، نانولوله، جریان، سیال، دینامیک مولکولی غیرتعادلی

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول: مقدمات و مبانی نظری

۱-۱) مقدمه ۱

۱-۲) نانولوله‌های کربنی ۲

۱-۲-۱) سنتز نانولوله‌های کربنی ۵

۱-۳) روشهای محاسبه ساختار مولکولی ۷

۱-۳-۱) روش از اساس ۸

۱-۳-۱-۱) هارتری فاک ۸

۱-۳-۲) روش‌های نیمه‌تجربی ۹

۱-۳-۳) نظریه تابعیت چگالی ۱۰

۱-۳-۴) خطای پوش مجموع پایه ۱۲

۱-۳-۵) مکانیک مولکولی ۱۴

۱-۴) شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای ۱۸

۱-۴-۱) شبیه‌سازی‌های مونت‌کارلو ۱۹

۱-۴-۲) شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۲۰

۱-۴-۲-۱) روشهای لانژونی ۲۱

۱-۴-۲-۲) روشهای کوانتومی شبیه‌سازی ۲۲

۱-۴-۲-۳) دینامیک هامیلتونی ۲۳

۱-۴-۲-۴) دینامیک نیوتنی ۲۴

۱-۴-۳) فنون مورد استفاده در شبیه‌سازی ۲۸

۱-۴-۳-۱) شرایط مرزی دوره‌ای ۲۸

۱-۴-۳-۲) قطع پتانسیل ۳۰

۱-۴-۳-۳) فهرست همسایه‌های نزدیک ۳۲

۱-۴-۳-۴) تصحیح اثر تقریب قطع پتانسیل ۳۴

۱-۴-۴) برآورد خطاها ۳۶

عنوان | صفحه

۱-۴-۵) انتگرال‌گیری از معادلات حرکت ۳۷
۱-۴-۶) موقعیت‌ها و سرعت‌های اولیه ۳۹
۱-۴-۷) دینامیک مولکولی در دمای ثابت ۴۰
۱-۴-۸) دینامیک مولکولی در فشار ثابت ۴۲
۱-۴-۸) تعادل‌رسانی سامانه ۴۲
۱-۴-۹) محدودیت‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۴۴
۱-۴-۱۰) تحلیل نتایج ۴۵
۱-۴-۱۰-۱) انرژی کل ۴۵
۱-۴-۱۰-۲) ظرفیت گرمایی ۴۶
۱-۴-۱۰-۳) فشار ۴۶
۱-۴-۱۰-۴) دما ۴۷
۱-۴-۱۰-۵) تابع توزیع شعاعی ۴۷
۱-۵) اهداف تحقیق ۴۸

فصل دوم: محاسبات مقدماتی

۲-۱) مقدمه ۵۱
۲-۲) دینامیک مولکولی سیال در نانولولهٔ کربنی در دو بعد ۵۲
۲-۲-۱) تولید مختصات نانولوله‌های کربنی ۵۲
۲-۲-۲) محاسبه و شبیه‌سازی دیوارهٔ سخت نانولولهٔ کربنی ۵۳
۲-۲-۳) شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جریان یک گاز خالص درون مدل دوبعدی نانولوله‌های کربنی ۵۶
۲-۲-۴) شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جریان مخلوط گازها درون مدل دوبعدی نانولوله‌های کربنی ۶۵
۲-۳) کلاه‌های کربنی ۷۶
۲-۴) مطالعه تأثیر سیال بر نانولولهٔ کربنی به روش نیمه‌تجربی ۷۷

فصل سوم: مطالعهٔ جریان در نانولوله‌های کربنی خم‌دار

۳-۱) مقدمه ۸۱

عنوان | صفحه

۳-۲) بررسی جریان سیال درون نانولوله‌های کربنی (CNTs) ۸۱
۳-۲-۱) جزئیات محاسبات ۸۲
۳-۲-۲) نتایج و بررسی ۸۴
۳-۳) مطالعهٔ جریان گازهای CO و CO_2 درون نانولوله‌های کربنی خم‌دار (CNTJs) ۹۸
۳-۳-۱) ساخت نانولوله‌های کربنی خم‌دار ۹۸
۳-۳-۲) جزئیات محاسبات شبیه‌سازی جریان گازهای CO و CO_2 درون نانولوله‌های خم‌دار ۱۰۰
۳-۳-۳) نتایج و بررسی ۱۰۲

فصل چهارم: نتیجه‌گیری و کارهای آتی

۴-۱) نتیجه‌گیری ۱۱۶
۴-۲) پیشنهادی برای کارهای پژوهشی آتی ۱۱۹

پیوست‌ها ۱۲۰

پیوست ۱: برنامه فرترن برای تولید مختصات نانولوله‌های کربنی ۱۲۱
پیوست ۲: نمونه پرونده‌های ورودی برنامه G03 ..... ۱۲۶
پیوست ۳: برنامه فرترن برای به تعادل رساندن ذرات درون منبع ۱۲۸
پیوست ۴: برنامه فرترن برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۱۳۴
پیوست ۵: نمونه‌ای از پرونده‌های ورودی و خروجی نرم‌افزار DL-POLY برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جریان گاز در نانولوله‌های کربنی (CNTs) ۱۵۳
پیوست ۶: برنامه فرترن برای بدست‌آوردن نتایج موردنظر از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جریان گاز در نانولوله‌های کربنی (CNTs) ۱۵۸
پیوست ۷: برنامه فرترن برای تولید مختصات نانولولهٔ خم‌دار (CNTJ) ۱۶۲
پیوست ۸: برنامه فرترن برای بدست‌آوردن نتایج موردنظر از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جریان گاز در نانولوله‌های کربنی (CNTJ) ۱۷۶

منابع و مآخذ ۱۹۳

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل ۱-۱: نانولولهٔ کربنی چنددیواره و انواع مختلف نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره شامل نانولوله‌های زیگزاگ (m=0)، صندلی (m=n) و نانولوله‌های کایرال (m≠n≠0) ۴

شکل ۱-۲: وجود حلقه‌های پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی در نانولوله های کربنی می‌تواند ساختارهای حدواسطی ایجاد کند که امکان اتصال دو نانولوله را می‌دهد ۷

شکل ۱-۳: پتانسیل برهم‌کنش جفتی آرگون-آرگون (خط توپر) و پتانسیل جفتی مؤثر ۶-۱۲ لنارد-جونز متناظر آن (خط‌چین) ۱۶

شکل ۱-۴: ارتباط نمادین بین تجربه، مطالعات نظری و شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای ۲۱

شکل ۱-۵: نمایش شرایط مرزی دوره‌ای در دو بعد ۲۹

شکل ۱-۶: قرارداد نزدیک‌ترین تصویر و تقریب قطع پتانسیل. در اینجا مولکول شماره ۱ در مرکز یک سلول واحد در نظر گرفته می‌شود وبرهم‌کنش‌های آن با مولکول‌های مجاور تنها تا فاصلهٔ قطع حساب می‌شود ۳۱

شکل ۱-۷: کره قطع و پوسته اطراف آن برای مولکول شماره ۳۳

شکل ۱-۸: الف) پتانسیل لنارد-جونز منتقل‌شده(خط‌چین) و پتانسیل اصلی (خط توپر) ب) ضرب یک تابع تغییردهنده در تابع پتانسیل که در نزدیکی فاصله قطع اثر می‌کند ۳۵

شکل ۱-۹: سامانه در نزدیکی نقطه سه‌گانه ($T^*=0.722$, $\rho^*=0.844$, $r_c^* = 2.5$ $\Delta t^*=0.005$) است. الف) انرژی‌های پتانسیل، جنبشی وکل ب) فشار لحظه‌ای ج) پارامتر نظم انتقالی د) جذر متوسط مربعات جابجایی ۴۴

شکل ۱-۱۰: تابع توزیع شعاعی برای آرگون مایع و گاز. تابع توزیع شعاعی برای چگالی واحد به‌هنجار شده‌است ۴۸

شکل ۲-۱: آرایش نسبی تک‌پارها در ابرمولکول آرگون-کرونن که بری محاسبهٔ پتانسیل برهم‌کنش دیوارهٔ سخت استفاده شده‌است ۵۳

شکل ۲-۲: محل دیواره سخت نانولولهٔ کربنی بر اساس معیار $\varepsilon_T = 10(\frac{3}{2}k_B T)$ ۵۴

عنوان | صفحه

شکل ۲-۳: نمودار انرژی پتانسیل یکی از دو دیوارهٔ سخت برای برش دوبعدی خاصی از نانولولهٔ کربنی زیگزاگ (سمت راست) و صندلی (سمت چپ). مسیر یافتن انرژی پتانسیل دیواره برای این دیواره به صورت خط صاف روی مولکول کرونن نمایش داده شده‌است. در امتداد محور طولی (افقی)، شکل‌ها به مقیاس نیستند ۵۵

شکل ۲-۴: محل دیوارهٔ سخت انرژی پتانسیل برهم‌کنش متناظر با برش‌های دوبعدی نانولوله‌های کربنی (شکل ۲-۳)، زیگزاگ (راست) و صندلی (چپ) برای گونه‌های مختلف. اعداد محور عمودی فاصله اتم‌ها تا تصویر آنها بر روی سطح داخلی نانولوله را نشان می‌دهند ۵۶

شکل ۲-۵: طرحی از سامانهٔ شبیه‌سازی جریان سیال درون مدل دوبعدی نانولوله‌های کربنی . ۵۸

شکل ۲-۶: طرح هندسی که رابطه ۲-۶ را تفسیر می‌کند. در این شکل زاویه θ بزرگترین مقدار خود را داراست ۵۹

شکل ۲-۷: نمایش برخورد کلاسیکی یک ذره با دیواره سخت نانولوله در حین جریان سیال درون نانولوله ۶۱

شکل ۲-۸: تغییر چگالی عددی محلی در طول نانولولهٔ کربنی (۱۹،۱۹) در چهار مرحله (۲۵، ۵۰، ۷۵ و ۱۰۰ درصد) از زمان کل شبیه‌سازی (که بر حسب نانوثانیه) برای جریان مخلوط‌های He-Ar با غلظت‌های مختلف، N1/N2. زیرنویس‌های ۱ و ۲ به ترتیب بیانگر اتم‌های He و Ar می‌باشد ۷۶

شکل ۲-۹: دو نوع کلاه تولیدشده برای نانولوله‌های صندلی از نوع (۵،۵) و (۶،۶) (ردیف بالا) و دو نوع کلاه تولیدشده برای نانولوله‌های زیگزاگ از نوع (۱۰،۰) و (۱۲،۰) (ردیف پایین) به ترتیب با حلقه‌های پنج و شش ضلعی در مرکز ۷۸

شکل ۲-۱۰: نانولولهٔ (۱۶،۰) همراه با ۳۰ مولکول هلیم ۷۸

شکل ۲-۱۱: تغییرات انرژی کل، E_{tot}، (سمت چپ) و انرژی برهم‌کنش، E_{int}، (سمت راست) سامانه شامل نانولولهٔ (۱۶،۰) و هلیم، با افزایش تعداد اتم‌های هلیم (N) ۷۹

شکل ۲-۱۲: تغییرات طول متوسط پیوندهای کربن-کربن نانولوله حاوی اتم‌های هلیم (۱۶،۰) (سمت راست) و تغییرات فاصلهٔ متوسط بین اتم‌های هلیم همسایه (سمت چپ) با افزایش تعداد اتم‌های هلیم ۸۰

عنوان **صفحه**

شکل ۳-۱: تابعیت زمانی انرژی کل سامانه بر حسب زمان در طول شبیه‌سازی جریان گاز CO_2 درون نانولولهٔ (۱۳،۰) با گام‌های زمانی و مجموعه‌های مختلف ۸۵

شکل ۳-۲: تغییرات زمانی مربع جابجایی متوسط، MSD ($Å^2$) مولکول‌های CO در حین جریان درون نانولولهٔ کربنی (۱۳،۰) در دمای ۳۰۰ K، با مجموعه‌های NVT و NVE، با زمان کل شبیه‌سازی و اندازهٔ گام‌های زمانی و زمان‌های استراحت مختلف، که براساس جابجایی اتم‌های اکسیژن محاسبه شده‌است ۸۶

شکل ۳-۳: تغییرات زمانی متوسط مربع جابجایی ، MSD مولکول‌های CO و CO_2 در حین جریان گاز خالص درون نانولوله‌های کربنی مختلف در دمای ۳۰۰ K که براساس جابجایی اتم‌های اکسیژن محاسبه شده‌است. رفتار تقریباً مشابهی بر حسب جابجایی اتم‌های کربن بدست آمده‌است. MSD و زمان به ترتیب بر حسب $Å^2$ و ps داده شده‌است ۸۸

شکل ۳-۴: اثر دما بر تغییرات زمانی MSD مولکول‌های (الف) CO_2 و (ب) CO بر حسب جابجایی متوسط اتم‌های اکسیژن، که برای جریان گازهای CO_2 و CO خالص (ردیف بالا) و مخلوط $12CO/8CO_2$ آنها (ردیف پایین) درون نانولولهٔ (۱۲،۱۲) محاسبه شده‌است. MSD و زمان به ترتیب بر حسب $Å^2$ و ps داده شده‌است ۹۰

شکل ۳-۵: تغییرات زمانی مقادیر MSD محاسبه‌شده برای مولکول‌های گازهایCO و CO_2 براساس جابجایی اتم‌های اکسیژن، که در دمای ۳۰۰K در شبیه‌سازی جریان مخلوط‌های $7CO/5CO_2$، $10CO/7CO_2$ و $12CO/8CO_2$ به‌ترتیب از درون نانولوله‌های (۸،۸)، (۱۲،۸) و (۱۲،۱۲) حاصل شده‌است. MSD و زمان به ترتیب بر حسب $Å^2$ و ps داده شده‌است ۹۱

شکل ۳-۶: تصویر لحظه‌ای از شبیه‌سازی جریان گازهایCO و CO_2 درون نانولوله‌های (۱۳،۰) و (۸،۸) که زوایای جهت‌گیری و همچنین توزیع شعاعی مولکول‌ها را نشان می‌دهد ۹۴

شکل ۳-۷: توزیع شعاعی متوسط تصویرشده بر یک برش عرضی، محاسبه‌شده برای مولکول‌های گاز که برای شبیه‌ساری گازهای CO و CO_2 در شبیه‌سازی جریان گازهای خالص درون نانولوله‌های مختلف بدست آمده است. صفر محور افقی مرکز نانولوله و پیکان‌های واقع بر روی محور افقی، محل دیوارهٔ نانولوله‌های کربنی را نشان می‌دهد ۹۵

عنوان | صفحه

شکل ۳-۸: توزیع شعاعی متوسط تصویرشده بر یک برش عرضی، محاسبه‌شده برای گازهای CO و CO_2 در شبیه‌سازی جریان گازهای خالص درون نانولوله‌های کربنی (۸،۸) و (۱۰،۶). صفر محور افقی مرکز نانولوله و جفت پیکان‌های واقع بر بالا و پایین محور افقی، به ترتیب محل دیواره‌های نانولوله‌های (۸،۸) و (۱۰،۶) را نشان می‌دهد ۹۶

شکل ۳-۹: تأثیر دما بر متوسط توزیع شعاعی مولکول‌های CO_2 (ردیف بالا) و CO (ردیف پایین)، که برای جریان گازهای خالصCO و CO_2 (ستون چپ) و مخلوط $8CO/12CO_2$ آنها (ستون راست) درون نانولولهٔ کربنی (۱۲،۱۲) بدست آمده‌است. محل دیوارهٔ نانولوله که در ±22/8Å واقع است برای وضوح بهتر نشان داده نشده‌است. ۹۷

شکل ۳-۱۰: ساختار سه بعدی نانولولهٔ کربنی دارای اتصال (۳،۵)-**J**-(۷،۷) (سمت راست) که بر اساس ساختار متناظر دوبعدی آن بر روی صفحهٔ گرافیت(سمت چپ) ساخته شده‌است. زاویهٔ α برای توصیف جهت‌یابی مولکول‌ها نسبت به محور نانولوله‌ها نمایش داده شده‌است ۹۹

شکل ۳-۱۱: بخش‌هایی از CNT2 از نانولوله‌های دارای اتصال (۳،۸)-**J**-(۱۲،۱۲) (بالایی) و (۸،۱۲)-**J**-(۱۲،۸) (پایینی) که نشان‌دهندهٔ ساختارهای انتهایی به ترتیب هیدروژنی و کلاه کربنی است ۱۰۲

شکل ۳-۱۲: ساختار سه نانولولهٔ خم‌دار، CNT1-**J**-CNT2، به ترتیب از بالا به پایین: (۳،۸)-**J**-(۱۲،۱۲)، (۸،۱۲)-**J**-(۱۲،۸) و (۱۳،۰)-**J**-(۸،۸). اندازهٔ نانولوله‌ها به مقیاس نیستند. اتم‌های حلقه‌های پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی پررنگ شده‌اند ۱۰۳

شکل ۳-۱۳: تغییرات زمانی تعداد مولکول‌های CO (ستون راست) و CO_2 (ستون چپ) با گذشت زمان در CNT1، ناحیهٔ J و CNT2 از نانولوله‌های دارای اتصال (۳،۸)-**J**-(۱۲،۱۲)، (۱۳،۰)-**J**-(۸،۸) و (۸،۱۲)-**J**-(۱۲،۸) (به ترتیب از بالا به پایین) ۱۰۴

شکل ۳-۱۴: تصویر برش متقاطع از توزیع شعاعی مولکول‌های CO و CO_2 در شبیه‌سازی جریان گازهای خالص CO و CO_2 و مخلوط آنها در نانولوله‌های CNT1 و CNT2 از CNTJ نوع (۳،۸)-**J**-(۱۲،۱۲) قبل از تعادل. پیکان‌های واقع بر روی محور افقی، محل دیواره‌های نانولوله‌های کربنی را نشان می‌دهد ۱۱۰

شکل ۳-۱۵: مشابه با شکل ۳-۱۴ اما برای زمان‌های بعد از تعادل ۱۱۱

شکل ۳-۱۶: مانند شکل ۳-۱۴ اما برای CNTJ نوع (۱۳،۰)-**J**-(۸،۸) ۱۱۲

عنوان	صفحه
شکل ۳-۱۷: مانند شکل ۳-۱۶ اما برای زمان‌های بعد از تعادل	۱۱۳
شکل ۳-۱۸: مانند شکل ۳-۱۴ اما برای CNTJ نوع (۸،۱۲)-J-(۱۲،۸)	۱۱۴
شکل ۳-۱۹: مانند شکل ۳-۱۸ اما برای زمان‌های بعد از تعادل	۱۱۵

فهرست جدول‌ها

عنوان **صفحه**

جدول ۲-۱: ضرایب چندجمله‌ای برازش‌شده ($\sum_{i=0} a_i x^i$ که x مختصهٔ فاصلهٔ عرضی است) برای توصیف دیوارهٔ سخت برهم‌کنش اتم گازهای بی‌اثر مختلف با نانولوله‌های کربنی دوبعدی مختلف در دمای ۳۰۰K ۵۷

جدول ۲-۲: مقادیر مسافت متوسط طی‌شده توسط ذرات در بین برخوردهای متوالی ذره- ذره، λ_P، ذره- دیواره، λ_W، متوسط تعداد برخورد هر ذره با دیواره n_W، و با ذرات دیگر، n_P و فاصلهٔ محوری طی‌شده متوسط در هر گام زمانی، $\bar{x}$ ، بدست آمده برای جریان هلیم درون نانولوله‌های مختلف. اعداد داخل کمانک‌ها، انحراف معیار را نشان می‌دهد ۶۲

جدول ۲-۳: شاخص‌های جریان محاسبه‌شده برای ذرات کرهٔ سخت گازهای خالص He، Ne و Ar درون نانولوله‌های مختلف در دمای ۳۰۰K. اعداد داخل کمانک‌ها، انحراف معیار کمیت مربوطه را نشان می‌دهد ۶۴

جدول ۲-۴: شاخص‌های جریان محاسبه‌شده برای ذرات کرهٔ سخت مخلوط گازی He-Ar درون مدل دوبعدی نانولولهٔ (۱۹،۱۹) با قطر ۲۵/۹ Å و به طول ۲۰۵ Å در دمای ۳۰۰ K. زیرنویس‌های 1 و 2 به‌ترتیب نشانگر اتم‌های He و Ar هستند. کلیهٔ طول‌ها بر حسب Å می‌باشند. اعداد داخل کمانک‌ها، انحراف معیار کمیت مربوطه را نشان می‌دهد ۶۹

جدول ۲-۵: شاخص‌های جریان محاسبه‌شده برای ذرات کرهٔ سخت مخلوط گازی He-Ar درون مدل دوبعدی نانولولهٔ (۲۵،۲۵) با قطر ۳۴/۱ Å و به طول ۲۰۵ Å در دمای ۳۰۰ K. زیرنویس‌های 1 و 2 به‌ترتیب نشانگر اتم‌های He و Ar هستند. کلیهٔ طول‌ها بر حسب Å می‌باشند. اعداد داخل کمانک‌ها، انحراف معیار کمیت مربوطه را نشان می‌دهد ۷۰

جدول ۲-۶: شاخص‌های جریان محاسبه‌شده برای ذرات کرهٔ سخت مخلوط گازی He-Ar درون مدل دوبعدی نانولولهٔ (۳۰،۰) با قطر ۲۳/۵ Å و به طول ۲۰۵ Å در دمای ۳۰۰ K. زیرنویس‌های 1 و 2 به‌ترتیب نشانگر اتم‌های He و Ar هستند. کلیهٔ طول‌ها بر حسب Å می‌باشند. اعداد داخل کمانک‌ها، انحراف معیار کمیت مربوطه را نشان می‌دهد ۷۱

عنوان | صفحه

جدول ۲-۷: شاخص‌های جریان محاسبه‌شده برای ذرات کرهٔ سخت مخلوط گازی He-Ar درون مدل دوبعدی نانولولهٔ (۴۰،۰) با قطر Å ۳۱/۵ و به طول Å ۲۰۵ در دمای K ۳۰۰. زیرنویس‌های 1 و 2 به‌ترتیب نشانگر اتم‌های He و Ar هستند. کلیهٔ طول‌ها بر حسب Å می‌باشند. اعداد داخل کمانک‌ها، انحراف معیار کمیت مربوطه را نشان می‌دهد ۷۲

جدول ۲-۸: شاخص‌های جریان محاسبه‌شده برای ذرات کرهٔ سخت مخلوط گازی He-Ne درون مدل دوبعدی نانولولهٔ (۴۰،۰) با قطر Å ۳۱/۵ و به طول Å ۲۰۵ در دمای K ۳۰۰. زیرنویس‌های 1 و 2 به‌ترتیب نشانگر اتم‌های He و Ne هستند. کلیهٔ طول‌ها بر حسب Å می‌باشند. اعداد داخل کمانک‌ها، انحراف معیار کمیت مربوطه را نشان می‌دهد ۷۳

جدول ۲-۹: شاخص‌های جریان محاسبه‌شده برای ذرات کرهٔ سخت مخلوط گازی He-Ne درون مدل دوبعدی نانولولهٔ (۱۹،۱۹) با قطر Å ۲۵/۹ و به طول Å ۲۰۵ در دمای K ۳۰۰. زیرنویس‌های 1 و 2 به ترتیب نشانگر اتم‌های He و Ne هستند. کلیهٔ طول‌ها بر حسب Å می‌باشند. اعداد داخل کمانک، انحراف معیار کمیت مربوطه را نشان می‌دهد ۷۴

جدول ۲-۱۰: شاخصه‌های جریان محاسبه‌شده برای ذرات کرهٔ سخت مخلوط گازی He-Ne درون مدل دوبعدی نانولولهٔ (۲۵،۲۵) با قطر Å ۳۴/۱ و به طول Å ۲۰۵ در دمای K ۳۰۰. زیرنویس‌های 1 و 2 به ترتیب نشانگر اتم‌های He و Ne هستند. کلیهٔ طول‌ها بر حسب Å می‌باشند. اعداد داخل کمانک، انحراف معیار کمیت مربوطه را نشان می‌دهد ۷۵

جدول ۳-۱: ویژگی‌های CNTها و چگالی عددی مولکولی گازهای مورد استفاده در مطالعهٔ اولیهٔ جریان گازها در نانولوله‌های ساده ۸۲

جدول ۳-۲: ضرایب نفوذ (یا انتقال)، D_μ، معرفی‌شده در معادلهٔ ۳-۱، که برای جریان گازهای CO و CO_2 درون نانولوله‌های مختلف بدست آمده است. این مقادیر براساس جابجایی اتم‌های اکسیژن حاصل شده‌است ۸۹

جدول ۳-۳: وابستگی زمانی ضرایب نفوذ (انتقال)، ، مولکول‌های CO و CO_2 که برای شبیه‌سازی MD-NVT جریان گازهای خالص CO و CO_2 و مخلوط $12CO/8CO_2$ آنها درون نانولولهٔ (۱۲،۱۲) حاصل شده‌است ۹۰

جدول ۳-۴: مقادیر متوسط زوایای جهت‌گیری (درجه) مولکول‌ها نسبت به محور نانولوله، در شبیه‌سازی جریان گازهای خالص درون نانولوله‌های مختلف ۹۲

عنوان | صفحه

جدول ۳-۵: ویژگی‌های نانولوله‌های خم‌دار، CNT1-**J**-CNT2، و تعداد مولکول‌های گاز مورد استفاده در این پایان‌نامه برای مطالعهٔ جریان گازهای CO و CO_2 درون نانولوله‌های خم‌دار(N_C(**J**)، تعداد اتم‌های کربن در ناحیهٔ اتصال J و ($N_{C\text{-}C}$(**J**)، تعداد پیوندهای C-C در کوتاهترین مسیر بین پنج و هفت‌ضلعی در ناحیهٔ اتصال J و NCO و N_{CO2} تعداد مولکول‌های CO و CO_2 در CNTJ می‌باشند ۱۰۱

جدول ۳-۶: زمان تعادل، t_{eq}، برای تغییرات چگالی عددی در شبیه‌سازی جریان گازهای خالص CO، CO_2 و مخلوط آنها درون CNTJهای مختلف و تعداد متوسط مولکول‌ها در سه بخش CNTJ بعد از تعادل ۱۰۵

جدول ۳-۷: زاویهٔ جهت‌گیری متوسط (درجه) بین محورهای مولکول‌های CO و CO_2 و محور نانولوله ۱۰۶

جدول ۳-۸: متوسط کسر مولکول‌های گاز در هر یک از سه ناحیهٔ CNTJ که به فاصله‌ای کمتر از ۳ Å به دیوارهٔ داخلی CNTJ نزدیک می‌شوند ۱۰۸

فصل اول

مقدمات و مبانی نظری

۱-۱) مقدمه

علم نانو مطالعه پدیده‌ها و بکارگیری مواد در مقیاس اتمی، مولکولی و ماکرومولکولی می‌باشد. خواص مواد در این مقیاس ، تا حد زیادی با خواص در مقیاس‌های بزرگ‌تر فرق دارد. به عبارت دیگر، علم نانو مطالعه پدیده‌ها در مقیاس نانومتر می‌باشد. توانایی ایجاد و مدیریت ذرات و اشیاء در این مقیاس با هدف تهیه مواد جدید که خواص و در نتیجه کاربردهای ویژه‌ای دارند، فناوری نانو نام دارد. روشن است که علم نانو بعنوان پیش‌نیاز فناوری نانو باید مورد توجه قرار گیرد.

علم نانو یک همگرایی از فیزیک، شیمی، زیست‌شناسی، علم مواد و تعداد دیگری از شاخه‌های علوم است که دربارهٔ بکارگیری و توصیف خواص مواد در مقیاس‌های آنگستروم تا میکرون بحث می‌کند.

فکر آغازین در فناوری نانو توسط ریچارد فاینمن[1] در سال ۱۹۵۹ مطرح گردید. وی عنوان کرد که با فراگیری دانش و مهارت دانشمندان در زمینهٔ ساخت ترانزیستورها و سایر قطعات در مقیاسهای کوچک، خواهیم توانست آنها را کوچکتر ساخته تا نهایتاً به محدودهٔ طبیعی خودشان در مرز عدم قطعیت کوانتومی نزدیک شویم.

فناوری نانو در یک تقسیم‌بندی کلی به سه شاخه تقسیم می‌شود.

---

[1] Richard Feynman