

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک گرایش اتمی مولکولی

اثر میدان های الکتریکی و مغناطیسی بر ساختار نانولوله‌ای اکسید روی

استادان راهنما:

دکتر ابراهیم قنبری

دکتر غلامرضا راشدی

پژوهشگر:

نسیم کوهی فایق

خرداد ماه ۱۳۹۲

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

سپاس فدایی را که اوّل و آفر وجود است، بی آنکه اوّلی بر او پیشی بگیرد یا آفری پس از او باشد؛ فدایی که دست هر چشمی از دامن دیدارش کوتاه است و فهم هر کبوتر توصیفگری از پرواز در آسمان وصفش عاجز. و با سپاس از اساتید ارجمند جناب آقای دکتر قنبری و دکتر راشدی که در تمامی مراحل کار با همراهی خالصانه‌ی فویش پشتیبانیه‌ی ممکنه برای من بودند و با صبر و موصله تمام کاستی‌های مرا نادیده گرفتند. و با تشکر از پدر و مادر، همسر و برادرانم که صبورانه با من همراه بودند و با پشتیبانی خود در تمامی مراحل مرا به هدفم نزدیک‌تر ساختند.

تقدیم به :

مهربان فرشتگانی که لحظات ناب باور بودن، لذت و غروردانستن، جسارت خواستن، عظمت رسیدن و تمام تجربه های یکتا و زیبای زندگیم مدیون حضور سبز آن هاست.

به پدرم: که از نگاهش صلابت، از رفتارش محبت و از صبرش ایستادگی را آموختم.

به مادرم: دریای بی کران فداکاری و عشق که وجودم برایش همه رنج بود و وجودش برایم همه مهر

و به همسر م: اسطوره زندگیم، پناه خستگی و امید بودنم.

چکیده

ذرات اکسید روی خواصی مانند نیمه رسانایی، پیزوالکتریک و پیروالکتریک از خود نشان می‌دهند. محاسبه ساختار الکترونی نشان می‌دهد که نانو لوله‌های اکسید روی، نیمه‌رسانا با شکاف باند مستقیم می‌باشند که شکاف باند آن‌ها تقریباً غیرحساس به کایرالیته و قطر نانولوله‌ها است. اکسید روی ساختار نواری دو بعدی از برگه‌های گرافیت مانند ZnO دارد. در این بررسی پاشندگی انرژی برای نانو لوله اکسید روی به روش بستگی قوی محاسبه شده است. برای این کار از فرمول بندی شرودینگر استفاده شده است. در این فرمول بندی توصیف ذرات بر اساس مکانیک موجی و توابع موج می‌باشد. پاشندگی انرژی برای نانو لوله اکسید روی در سه شکل زیگزاگ، آرمچر و کایرال محاسبه و با یکدیگر مقایسه شده، مقایسه آن‌ها نشان می‌دهد نانو لوله های ZnO، گاف الکتریکی یکسان دارند و شکاف نواری نانولوله‌ها نسبتاً غیر حساس به کایرالیته و قطر نانولوله‌هاست. خواص اپتیکی نانولوله‌های اکسید روی به طور قوی بستگی به جهت نور فرودی دارد. برای توصیف خواص اپتیکی ابتدا المان‌های ماتریس دو قطبی الکتریکی، در دو حالت، قطبش نور فرودی موازی با محور نانو لوله و همچنین نور قطبیده عمود بر محور نانولوله، برای هر سه حالت زیگزاگ، آرمچر و کایرال محاسبه شده، سپس به کمک المان‌های ماتریس پذیرفتاری خطی مرتبه اول در دو حالت نور موازی و عمود برای نانولوله-ها با کایرالیته دلخواه با استفاده از روش عددی به دست آمده است و نتایج به دست آمده با یکدیگر مقایسه شده اند.

کلیدواژه‌ها: نانولوله اکسید روی، شکاف نواری، خواص اپتیکی، المان‌های ماتریس دو قطبی و پذیرفتاری خطی

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱-۱	مقدمه.....
۲-۱	تعریف نانو تکنولوژی.....
۳-۱	پیوندهای ویژه ساختارهای نانو.....
۱-۳-۱	فعل و انفعالات واندروالس.....
۲-۳-۱	فعل و انفعالات دوقطبی - دو قطبی.....
۳-۳-۱	فعل و انفعالات یونی.....
۴-۱	تاریخچه ساختارهای اکسید روی.....
۵-۱	نانو ساختارهای اکسید روی.....
۱-۵-۱	نانو سیم‌ها و نانو میله‌ها.....
۱-۱-۵-۱	رشد محلول آب.....
۲-۱-۵-۱	رسوبدهی الکترونیکی.....
۲-۵-۱	نانو تسمه‌ها.....
۳-۵-۱	نانو حلقه‌ها.....
۴-۵-۱	نانو حلزون.....
۵-۵-۱	سایر نانو ساختارها.....
۶-۱	نواقص اکسیدروی.....
۷-۱	کاربردهای اکسیدروی.....
۱-۷-۱	حسگرها.....
۲-۷-۱	دیوهای منتشر کننده و تقویت کننده نور.....
۳-۷-۱	کانتیلور.....

۱۴-۷-۱ سلولهای خورشیدی.....۱۴

۱۴-۷-۱ استفاده از آرایه نانو سیم اکسیدروی.....۱۴

فصل دوم: محاسبه ساختار نواری اکسید روی

۱-۲ مقدمه.....۱۶

۲-۲ ترازهای الکترونی در پتانسیل دوره ای.....۱۶

۱-۲-۲ قضیه بلاخ.....۱۷

۲-۲-۲ شرط مرزی بورن -ورن کارمن.....۱۸

۳-۲ روش بستگی قوی.....۱۹

۱-۳-۲ مقدمه.....۱۹

۲-۳-۲ توصیف روش بستگی قوی.....۱۹

۳-۳-۲ فرمول بندی روش بستگی قوی.....۲۱

۴-۲ بردارهای اساسی نانو لوله ها.....۲۳

۱-۴-۲ بردار کایرال.....۲۴

۲-۴-۲ بردار انتقال.....۲۴

۵-۲ پارامترهای اساسی نانولوله ها.....۲۴

۶-۲ روابط پاشندگی انرژی برای نانو لوله های اکسید روی.....۲۵

۱-۶-۲ محاسبه عناصر ماتریس پاشندگی.....۲۵

۲-۶-۲ بردارهای شبکه وارون.....۲۷

۳-۶-۲ محاسبه و رسم نمودارهای پاشندگی انرژی برای اکسید روی.....۲۹

فصل سوم: فرمول بندی پارامترها

۱-۳ مقدمه.....۳۳

۲-۳ مفهوم اپتیک غیرخطی.....۳۳

۳-۳ توصیف برهمکنشهای اپتیکی غیرخطی.....۳۶

۱-۳-۳ تولید بسامد مجموع و تفاضل.....۳۶

- ۳۸ ۱-۱-۳-۳ تولید بسامد مجموع
- ۳۸ ۲-۱-۳-۳ تولید بسامد تفاضل
- ۳۹ ۲-۳-۳ تولید هماهنگ مرتبه دوم
- ۴۰ ۴-۳ پارامترهای اپتیکی نوسانی
- ۴۰ ۵-۳ فرمول بندی کلی پذیرفتاری غیر خطی
- ۴۳ ۶-۳ نظریه مکانیک کوانتومی پذیرفتاری اپتیکی غیر خطی
- ۴۷ ۷-۳ پذیرفتاری اپتیکی خطی
- ۵۰ ۸-۳ پذیرفتاری مرتبه دوم

فصل چهارم: محاسبه بردار دوقطبی الکتریکی برای نانو لوله های اکسید روی

- ۵۹ ۱-۴ قطبش پذیری موازی
- ۶۲ ۱-۱-۴ محاسبه دو قطبی الکتریکی برای نانو لوله زیگزاگ
- ۶۴ ۲-۱-۴ بردار دوقطبی الکتریکی برای نانو لوله آرمچر
- ۶۵ ۳-۱-۴ بردار دوقطبی الکتریکی برای نانو لوله کایرال
- ۶۶ ۲-۴ قطبش پذیری عمودی
- ۷۱ ۳-۴ پذیرفتاری خطی

جمع بندی مطالب و نتیجه گیری

پیشنهادات

منابع

فهرست شکل‌ها

صفحه	عنوان
۱۹.....	شکل ۱-۲ نمایش تابع موج حالت پایه.....
۲۰.....	شکل ۲-۲ نمایش تابع موج حالت $\psi_A + \psi_B$
۲۰.....	شکل ۳-۲ نمایش تابع موج حالت $\psi_A - \psi_B$
۳۱.....	شکل ۶-۲ نمودار ترازهای انرژی نانولوله آرمچر (۵,۵).....
۳۱.....	شکل ۷-۲ نمودار ترازهای انرژی نانولوله زیگزاگ (۹,۰).....
۳۲.....	شکل ۸-۲ نمودار ترازهای انرژی کایرال (۲,۸).....
۳۸.....	شکل ۱-۳ الف) نمودار ترازهای انرژی تولید بسامد مجموع، ب) ترسیم هندسی تولید بسامد مجموع.....
۳۹.....	شکل ۲-۳ الف) نمودار ترازهای انرژی تولید بسامد تفاضل، ب) ترسیم هندسی تولید بسامد تفاضل.....
.....	شکل ۳-۳ الف) نمودار ترازهای انرژی تولید هماهنگ مرتبه دوم، ب) ترسیم هندسی تولید هماهنگ مرتبه دوم.....
۳۹	
۶۴.....	شکل ۱-۴ برداردوقطبی الکتریکی با قطبش موازی برای نانولوله اکسید روی (۹,۰).....
۶۵.....	شکل ۲-۴ برداردوقطبی الکتریکی با قطبش موازی برای نانولوله اکسید روی (۵,۵).....
۶۶.....	شکل ۳-۴ برداردوقطبی الکتریکی با قطبش موازی برای نانولوله اکسید روی (۲,۸).....
۶۷.....	شکل ۴-۴ الف) وضعیت اتم های A بعد از چرخیده شدن، ب) وضعیت غیرچرخیده اتم A در مبدأ و سه همسایه نزدیک آن، اتم های B.....
۷۰.....	شکل ۵-۴ برداردوقطبی الکتریکی با قطبش عمودی برای نانولوله اکسید روی، در حالت زیگزاگ (۹,۰).....
۷۰.....	شکل ۶-۴ برداردوقطبی الکتریکی با قطبش عمودی برای نانولوله اکسید روی، در حالت آرمچر (۵,۵).....
۷۱.....	شکل ۷-۴ برداردوقطبی الکتریکی با قطبش عمودی برای نانولوله اکسید روی، در حالت کایرال (۲,۸).....

شکل ۴-۸ قسمت حقیقی پذیرفتاری نانولوله های اکسید روی (۹,۰) و (۵,۵) و (۲,۸) با قطبش موازی ۷۳

شکل ۴-۹ قسمت حقیقی پذیرفتاری نانولوله های اکسید روی (۹,۰) و (۵,۵) و (۲,۸) با قطبش

عمود ۷۳

شکل ۴-۱۰ مقایسه قسمت حقیقی پذیرفتاری خطی نانولوله زیگزاگ در دو حالت قطبش عمود بر محور

نانولوله و قطبش موازی با محور نانولوله ۷۴

شکل ۴-۱۱ مقایسه قسمت حقیقی پذیرفتاری خطی نانولوله آرمچر در دو حالت قطبش عمود بر محور

نانولوله و قطبش موازی با محور نانولوله ۷۴

شکل ۴-۱۲ مقایسه قسمت حقیقی پذیرفتاری خطی نانولوله کایرال در دو حالت قطبش عمود بر محور

نانولوله و قطبش موازی با محور نانولوله ۷۵

فصل اول

نانوساختارهای اکسید روی

۱-۱ مقدمه

فهم و ادراک این که در دنیا چیزهایی وجود دارند که با چشم غیر مسلح دیده نمی‌شوند، به تاریخچه حضور بشر بر روی کره‌ی زمین باز می‌گردد. توسعه علوم طبیعی به منظور توانایی بهتر در فهم دنیا و فرایندهایی که در دنیا انجام می‌شود، از موارد مورد توجه در دنیای ریز مقیاس است. بنابراین، توسعه و ایجاد روش‌های جدید تصویر سازی میکروسکوپی، اهمیت خاصی می‌یابد. در دنیای میکروسکوپی، با بهبود گستره دید اشیاء که به وسیله بالا بردن قدرت تشخیص میکروسکوپی به دست می‌آید، می‌توان به این روش‌ها دست یافت. تبدیلات فضایی در دنیای نانو فقط به یک جهت محدود نمی‌شود. خیلی قبل از این که ابزاری برای مشاهده مولکول‌ها در دسترس باشد، نظریه‌ای در مورد جهت‌گیری فضایی اتم‌ها در مولکول‌ها و جامدات در سامانه‌های توزیعی^۱ و روی سطوح توسعه پیدا کرد. اصل بنیادی این نظریه، پیش‌بینی وجود مواد سازنده کوچک است که به فیلسوف‌های قدیمی یونان باز می‌گردد^۲ و نام اتم نیز از کلمه یونانی به معنای واحد کوچک نامرئی گرفته شده است. این فرضیه به وسیله دالتون^۳ با کشف استوکیومتری در سامانه‌های کمی مواد، تایید شد. واکنش‌های شیمیایی شامل ضرایب ثابت جرم و واکنش دهنده است. طبق سیستماتیک عناصر شیمیایی، این عناصر به وسیله دوبر^۴، مایر^۵ و مندلیف^۶، در جدول تناوبی عناصر طبقه‌بندی شدند و به وسیله مدل‌های ساختار داخلی اتم‌ها تکمیل شدند. نظریه‌ای جدید در مورد اتصالات فضایی اتم‌ها ایجاد شد: نظریه باندهای شیمیایی. این نظریه نه تنها ضرایب اتم‌های درگیر در واکنش را مشخص می‌کند، بلکه نظم و قرارگیری فضایی اتم‌ها و یا گروه اتم‌ها را مشخص می‌کند. امروزه

^۱ Disperse Systems

^۲ Leukip & Demokrit

^۳ Dalton

^۴ Dobereiner

^۵ Meyer

^۶ Mendeleev

می‌دانیم که تنوع بسیار زیاد جامدات معدنی و موجودات زنده مربوط به نظم و قرارگیری فضایی پیوندهای شیمیایی است. علم هندسه و استوکیومتری جنبه‌های شیمیایی مولکول‌ها و جامدات را بیان می‌کند. پایداری و دینامیک تغییرات شیمیایی به وسیله نرخ واکنش‌های ممکن که وابسته به ترمودینامیک و سینتیک است، مشخص می‌شود.

۲-۱ تعریف نانو تکنولوژی

شاخه‌ی نانو فناوری از دهه‌های ۱۹۵۰ و ۱۹۶۰ آغاز می‌گردد، وقتی که اکثر مهندسين به چیزهای بزرگ و نه به چیزهای کوچک، فکر می‌کردند. آن دوره عصر ماشین‌های بزرگ، بمب‌های بزرگ اتمی، جت‌های بزرگ و نقشه‌های بزرگ برای فرستادن انسان به فضا بود. آسمان خراش‌های بزرگ مثل مرکز تجارت جهانی در سال ۱۹۷۰ تکمیل شد و در سایر شهرهای بزرگ برج‌های بلندی احداث شدند. بزرگ‌ترین تانکرهای حمل نفت جهان، بزرگ‌ترین کشتی‌های مسافری، پل‌ها، آزاد راه‌های طولانی و نیروگاه‌های بزرگ همه و همه محصول آن عصر بودند. ولیکن در همان دوره محققینی بودند که تمرکزشان بر چیزهای کوچک بود. در دهه‌های ۱۹۵۰ و ۱۹۶۰، صنعت الکترونیک، حرکت هرگز متوقف نشدنی خود را در جهت کوچک‌تر کردن چیزها آغاز کرد. اختراع ترانزیستور در سال ۱۹۴۷ و اولین مدار مجتمع در سال ۱۹۵۹ شروع عصر مینیاتوری کردن الکترونیک بود. یک جورهایی همین ادوات کوچک بودند که ساخت چیزهای بزرگ مثل فضا پیماها را ممکن ساختند. برای چندین دهه‌ی بعد با افزایش تقاضا برای کاربردهای محاسباتی سنگین و کامپیوترهای قوی، ترانزیستورها و مدارات مجتمع، کوچک و کوچک‌تر می‌شدند تا جایی که در سال ۱۹۸۰ دانشمندان حدی را برای این سیر پیش‌بینی کردند و جستجو برای روش‌های کاملاً جدید و متفاوت شروع شد. در حالی که مهندسين الکترونیک سرگرم کوچک‌تر کردن چیزها بودند، مهندسين و دانشمندان از سایر شاخه‌های علوم بر چیزهای کوچک یعنی اتم‌ها و مولکول‌ها متمرکز شدند. بعد از شکافت موفق اتم قبل از جنگ جهانی دوم، دانشمندان تلاش می‌کردند تا به ذرات تشکیل دهنده‌ی اتم و نیروهای نگه‌دارنده‌ی آن‌ها شناخت پیدا کنند. در همان زمان، شیمیدان‌ها بر روی ترکیب اتم‌ها با یکدیگر و ساخت مولکول‌های جدید فعالیت می‌کردند و به موفقیت‌های مهمی در تبدیل مولکول‌های پیچیده‌ی نفت به انواع پلاستیک‌های سودمند، نائل شدند. در همان اثناء، محققین علوم زیستی کشف کردند که اطلاعات ژنتیکی در سلول‌های بلند بدن بر روی مولکول‌های بلند و پیچیده‌ای به نام DNA ذخیره شده است (در حدود ۲ متر DNA درون هر سلول بسته‌بندی شده است!). این فعالیت‌ها بر روی هم منجر به فهم بهتری از مولکول‌ها شد و در دهه‌ی ۱۹۸۰ افق‌های کاملاً تازه‌ای در تحقیقات مهندسی گشوده شد.

بنابراین، ریشه‌های فناوری نانو در امتزاج سه خط فکری فیزیک اتمی، شیمی و الکترونیک شکل گرفت. در همان دهه بود که شاخه‌ی جدیدی از مطالعات به نام "فناوری نانو" یا نانو تکنولوژی نام گذاری شد. این نام جدید توسط یک دانشمند به نام اریک^۱ ترویج شد. او اشاره کرد که فناوری نانو، خیلی قبل تر در سال ۱۹۵۹ در یک سخنرانی فراموش شده توسط برنده‌ی جایزه‌ی نوبل، ریچارد فاینمن^۲، پیش‌بینی شده بود. او در دسامبر ۱۹۵۹ یک سخنرانی عمومی تحت عنوان "در آن پایین فضای بزرگی وجود دارد" ارائه کرد. او پیش‌بینی کرد که روزی خواهد رسید که تمام محتویات کتب کتابخانه‌های بزرگ دنیا را بتوان درون چیزی به اندازه‌ی یک ذره‌ی غبار جا داد. هر چند در آن زمان فقط عده‌ی خیلی متوجه منظور او شدند، اکنون تصور می‌شود که حوزه‌ی جدید فناوری نانو از همان سخن معروف فاینمن الهام گرفته باشد.

او ایده‌ی ساخت ماشین‌ها و ادوات مکانیکی از اتم‌های منفرد را مطرح کرده بود. چنین ماشین‌هایی در حقیقت مولکول‌های مصنوعی بودند که اتم به اتم ساخته می‌شدند و ابعاد مولکول حاصله، ممکن بود که از نانومتر هم تجاوز کند و همین ایده‌ی دستکاری اتم‌ها بود که جوهره‌ی نانوفناوری را شکل می‌داد. اما در آن زمان نه تنها این دستکاری غیر ممکن می‌نمود، بلکه، افراد چندانی هم نبودند که بدانند این کار به چه دردی خواهد خورد. به هر حال، در کسلر، با تحقیقات کاملاً تازه‌ای به نگرش فاینمن جان دوباره‌ای بخشید و کمک کرد تا افکار عمومی با مفاهیم اولیه‌ی نانوفناوری آشنا شوند. هر چند نانوفناوری به دهه‌ی ۵۰ بر می‌گردد، اما مهمترین تحولات در این زمینه در چند سال اخیر رخ داده است. در اواخر دهه‌ی ۹۰ بودجه‌ی تحقیقاتی زیادی از طرف منابع دولتی و شرکت‌ها به این ورطه سرازیر شد. در این دوره‌ی چند ساله، دولت‌های بزرگ در دنیا سه برنامه‌ی تحقیقاتی بزرگ و بسیاری برنامه‌های کوچک‌تر شامل ابتکار ملی نانوفناوری در امریکا و شاخه‌ی نانوفناوری تحقیقات اروپا را آغاز کردند. ژاپن هم برنامه‌ی عظیم نانوفناوری خودش را داشت که بودجه‌ی آن از صنایع خصوصی و نهادهای دولتی هم چون وزارتخانه‌های صنایع و بازرگانی تامین می‌شد [۱].

۱-۳ پیوندهای ویژه ساختارهای نانو

علاوه بر ترکیبات اولیه، فعل و انفعالات بین اتم‌ها، خواص مواد و در نتیجه خواص ابزار را تعیین می‌کنند. بنابراین اطلاعات درباره‌ی پیوندهای شیمیایی در یک وسیله برای عملکرد آن لازم است. جدا از خواص شناخته شده از مواد کپه‌ای^۳، خواص سطحی، به‌ویژه خواص فصل مشترک، با کاهش اندازه ساختار تأثیر زیادی نشان می‌دهد. خواص مواد در ابعاد میکروسکوپی اغلب به طور چشم‌گیری از خواص مواد کپه‌ای متفاوت است. علاوه بر نقش

بر اهمیت سطوح و فصل مشترک‌ها، نقش تک پیوندها نیز نسبت به مجموع پیوندها در ساختار نانو خیلی بی‌اهمیت و جزئی ناست. اغلب تک پیوندها یا تک مولکول‌ها^۱ خواص و عملکرد ساختار نانو را تعیین می‌کنند. به طور معمول، تمام انواع فعل و انفعالات مثبت بین ذرات، پیوندها را ایجاد می‌کنند. فعل و انفعالات بین اتم‌ها، گروه‌های اتم‌ها، یون‌ها و مولکول‌ها می‌توانند به طور گسترده با توجه به ویژگی‌هایشان و استحکامشان تغییر کنند. برای تشخیص این فعل و انفعالات به طبقاتی تحت عنوان انواع پیوند دسته بندی شده‌اند. این دسته بندی به خوبی برای تشریح پیوندها مناسب است. در مقایسه با شیمی مصنوعی کلاسیک^۲ که در آن پیوندهای قوی مهم است، در نانو تکنولوژی اغلب پیوندهای ضعیف و متوسط دارای اهمیت ویژه‌ای هستند. اهمیت پیوندهای ضعیف با افزایش اندازه‌ی توده‌های^۳ ساخته شده افزایش می‌یابد که قابل مقایسه با آنچه که در طبیعت اتفاق می‌افتد، است. در حالی که در مورد پیوندهای قوی شناسایی انواع پیوندها آسان است، ناحیه‌ی پیوندهای ضعیف از طریق وجود هم‌زمان چند فعل و انفعال با محدوده‌ی وسیعی از استحکام و ویژگی تعیین می‌شود. ابعاد مولکولی فقط از طریق توپولوژی^۴ پیوندهای کووالانت توصیف نمی‌شوند. دیگر انواع پیوندها و نیز فعل و انفعالات ضعیف، اساساً به تشکیل و نگهداری هندسه‌های معین کمک می‌کنند و بنابراین باید مورد بررسی قرار گرفته شوند. از این رو بخش‌های بعدی، طبقه‌بندی کلیدی پیوندهای شیمیایی را معرفی کرده و در مورد اهمیت آن‌ها در نانو تکنولوژی بحث می‌کند.

۱-۳-۱ فعل و انفعالات و اندروالس

تمام لایه‌های اتم‌ها، با یکدیگر واکنش می‌دهند. وقتی اتم‌ها به یکدیگر نزدیک می‌شوند، الکترون‌های یک اتم باعث تغییر شکل^۵ توزیع الکترون‌های اتم دیگر می‌شوند. این تغییر شکل، توزیع بار الکتریکی را در مسیری تغییر می‌دهد که مجموع انرژی دو اتم نزدیک شونده، کمتر از مجموع انرژی اتم‌های اولیه شود. این اختلاف در انرژی استحکام پیوند را تعیین می‌کند. اگر این اثر از طریق دیگر پیوندها تحت تأثیر قرار گرفته نشود (برای مثال، از طریق تبادل الکترون‌ها)، انرژی پیوند کاملاً پایین است. پیوند و اندروالس پیوند ضعیفی بوده و در دمای اتاق، پیوند بین تک اتم‌ها می‌تواند به آسانی با حرارت فعال شود و شکسته شود.

با این وجود پیوندهای و اندروالس اهمیت ویژه‌ای در نانو تکنولوژی دارند، به این دلیل که واحدهای سازنده معمولاً جامدها بوده و شامل مولکول‌ها به جای تک اتم‌ها هستند. اگر دو یا بیشتر از دو اتم از طریق پیوندهای

^۱ Single molecules

^۲ Classical Synthetic chemistry

^۳ Aggregates

^۴ Topology

^۵ Deformation

قوی یونی، کوالانت، کئوردینانس یا پیوند فلزی بهم متصل شوند، آنگاه فعل و انفعالات لایه‌های الکترون با سطوح و مولکول‌ها از طریق پیوندهای واندروالس است. در نتیجه هنگامی که تعداد اتم‌ها در یک مولکول افزایش می‌یابد، این مولکول قادر به پیوستن به یک زیر لایه تنها بر اساس پیوندهای واندروالس است. نتیجه این اثر، کاهش فشار بخار ترکیبات مشابه با افزایش اندازه مولکولی است. بنابراین پیوند واندروالس یک نوع پیوند پایه بوده که به دلیل اثر اشتراکی^۱ تعدادی از اتم‌های پیوند شده به یکدیگر مهم است. تحریک مولکول‌ها از طریق اندازه آن‌ها تعیین می‌شود. پارامتر دیگر تفکیک جزئی^۲ پیوندهای واندروالس از طریق حرکت‌های درون مولکولی است. اگر اتم‌ها یا گروه‌های اتم‌ها، تنها از طریق پیوندهایی که به طور آزاد چرخش می‌کنند متصل شوند، چرخش یک قسمت از مولکول به این ترتیب می‌تواند سبب جدایی پیوند مربوطه شود. با پیوندهای تثبیت شده^۳، تمام پیوندها در یک حالت شراکتی^۴ توزیع و پخش می‌شوند. پیوندهای واندروالس نقش مهمی در فعل و انفعالات ترکیبات آبریز^۵ دارند. همچنین این پیوندها برای سلول‌های زنده مخصوصاً در ایجاد ساختار سه بعدی پروتئین‌ها لازم هستند. در سلول‌ها، فعل و انفعالات آبریز شرطی لازم برای ترکیب غشاهای دولایه چربی و دربرداری پروتئین‌های غشایی^۶ در این لایه هستند. در مقایسه با چنین ساختارهایی در طبیعت، فعل و انفعالات واندروالس در نانو تکنولوژی مخصوصاً در زمینه شیمی فرامولکولی^۷ برای آرایش توده‌های مولکولی پیچیده‌ای که بر اساس واحدهای کوچک‌تر بوده، مهم هستند.

۱-۳-۲ برهمکنش دوقطبی - دو قطبی^۸

به دلیل وجود اختلاف در الکترونگاتیویته، مولکول‌های شامل اتم‌های متفاوت به طور طبیعی یک توزیع الکترونی ناهمگن^۹ نشان می‌دهند. تنها زمانی که پیوندها متقارن است، این توزیع در محیط مشهود و آشکار نیست. به عبارت دیگر، پلاریته الکتریکی مولکول مشاهده می‌شود. چنین مولکول‌هایی با یک لحظه دوقطبی شدن یا بیشتر، یکدیگر را جذب می‌کنند. شدت پلاریته، قدرت برهمکنش دوقطبی - دو قطبی را تعیین می‌کند.

^۱ Cooperative Effect

^۲ Partial Dissociation Cooperative Effect

^۳ Fixed Bonds

^۴ Cooperative Manner

^۵ Hydrophobic Compound

^۶ Membranous Proteins

^۷ Supramolecular

^۸ Dipole-Dipole Interaction

^۹ Inhomogeneous

برهمکنش‌های دوقطبی - دوقطبی در مواردی تنها با گذشت نیمی از لحظه دوقطبی دائمی مشاهده می‌شود. چون لایه الکترون می‌تواند از طریق میدان خارجی تغییر شکل دهد، مولکول با یک لحظه دو قطبی دائمی شدن، قادر به القا تغییر شکل بوده و در نتیجه پلاریزاسیون در یک لحظه ایجاد می‌شود.

بهره انرژی در چنین مواردی معمولاً کمتر از برهمکنش لحظات دو قطبی دائمی است. انرژی‌های پیوندی از طریق تمایل لایه الکترون به پلاریزه شدن تعیین می‌شود. اگر این قابلیت کم باشد (لایه‌های سخت)، در این لحظات تنها دوقطبی ضعیف القا می‌شود و بنابراین پیوندهای ایجاد شده ضعیف هستند و در لایه‌هایی با قابلیت زیاد پلاریزاسیون (لایه‌های نرم)، دو قطبی‌های قابل توجهی می‌توانند القا شوند. برهمکنش‌های دوقطبی - دوقطبی به طور گسترده توزیع می‌شوند. از آنجایی که این دسته مسئول برهمکنش‌های غیر مشخص می‌باشند، به عنوان اثرات ناخواسته در میکروتکنولوژی به شمار می‌آیند. این برهمکنش‌ها در رسوب روی سطوح یا پیوند غیر مشخص تک ذرات یا تک مولکول‌ها بوجود می‌آیند. اتم‌های سنگین با الکترون‌های بسیار زیاد، لایه‌های الکترونی که به سهولت قابل پلاریزه شدن هستند را نشان می‌دهند، به طوری که آن‌ها به جذب سطحی غیر مشخص حساس هستند. در راکتورهای گازی مانند تجهیزات خلأ، جذب سطحی غیر مشخص از طریق گرم شدن سطوح راکتور و زیر لایه‌ها به واسطه فعال‌سازی حرارتی و جذبی^۱ به حداقل می‌رسد. برای خنثی‌سازی فرایندهای جذب سطحی ناخواسته در فرایندهای فاز مایع، عناصر بسیار خالص و حلال‌ها استفاده می‌شوند. پیوندهای دوقطبی متصل شده، در چین خوردگی‌های^۲ سه بعدی یا آرایش سوپر مولکول‌ها یا ماکرو مولکول‌های مصنوعی استفاده می‌شوند. کاربرد پیوندهای عمومی برای طراحی معماری نانو مولکولی^۳ در نانو تکنولوژی هنوز راه درازی در مقایسه با آنچه در طبیعت به اثبات رسیده است، دارد.

۱-۳-۳ برهمکنش‌های یونی

در جایی که اختلاف زیادی در الکترونگاتیویته اتم‌ها وجود دارد، انتقال یک یا بیشتر از یک الکترون از قسمت واکنش دهنده با الکترونگاتیویته کم به زیاد مشاهده می‌شود. پیوند به وجود آمده از طریق الکترون‌های پیوندی تعیین نمی‌شود بلکه از طریق برهمکنش‌های یون‌های ایجاد شده در اثر انتقال الکترون تعیین می‌شود. استحکام این پیوند قابل مقایسه با پیوند کووالنت است. بنابراین این پیوند یک برهمکنش شیمیایی قوی است. فعل و انفعالات صرفاً الکترواستاتیک بین اتم‌های یونیزه شده، نظیر نمک‌ها، در نانو تکنولوژی کمتر مورد توجه هستند. در مقایسه با این دسته، یون‌های مولکولی و هم‌چنین چند یونی‌ها مورد توجه خاصی قرار می‌گیرند. ماکرومولکول‌ها اغلب

^۱ Desorption

^۲ Folding

^۳ Molecular Nanoarchitecture

انبوهی از گروه‌های عامل مشابه را نشان می‌دهند. اگر این گروه‌ها قادر به یونیزه شدن باشند و به آسانی بتوانند یونیزه شوند (برای مثال در نتیجه فرایندهای جداسازی)، این اثر در ماکرو مولکول‌های چند یونی اتفاق می‌افتد. آن‌ها نه تنها می‌توانند با یون‌های کوچک با بار مخالف واکنش دهند، بلکه با اجزای چند یونی با بار مشابه نیز واکنش می‌دهند که این مسئله منجر به ایجاد و پایدارسازی لایه‌های بسیار نازک چند تایی یا توده‌های مولکولی پیچیده می‌شوند. بارهای سطحی، دافعه الکترواستاتیک و پیوندهای الکترواستاتیک برای ساخت ماکرومولکول‌ها، توده‌های سوپر مولکولی، مایسل^۱ها و ذرات نانو در فاز مایع لازم است. سامانه‌های ناهمگن نانو می‌توانند از طریق تنظیم و اصلاح بارهای سطحی ایجاد، پایدار و یا متلاشی شوند [۲].

۴-۱ تاریخچه ساختارهای اکسید روی

در سال‌های اخیر علاقه به مطالعه ساختارهای اکسید روی شدیداً افزایش یافته است. محور این مطالعات عمدتاً بر روی شکل‌های مختلف نانو ساختارها اعم از نانوتسمه، نانوفتر و نانوسیم است. ذرات اکسید روی خواصی مانند نیمه‌رسانایی، پیزوالکتریک و پیروالکتریک از خود نشان می‌دهند. این خواص بی‌نظیر باعث می‌شود که ذرات اکسید روی یکی از غنی‌ترین مواد نانو ساختاری باشند. اکسید روی به دلیل خواص ویژه که بستگی به آلاییدن یا وارد کردن ناخالصی دارد، سالیان سال مورد توجه بوده است؛ این خواص شامل محدوده هدایت الکتریکی مثل هدایت از نوع n و p ، عبور دهی بالا، پیزوالکتریسته، نیمه‌ها دی بودن در یک فاصله عریض از E ، فرو مغناطیس در دمای اتاق، اثرات نوری مغناطیسی و اثرات حسی - شیمیایی است که با توجه به تهیه آن در ابعاد نانومتری، می‌توان به‌دستگاه‌ها و وسایل جدید هم دست یافت. اکسید روی نیمه‌رسانایی با پهنای گاف انرژی $3/3$ الکترون ولت و میزان انرژی برانگیختگی $6/6$ میلی‌الکترون ولت است [۱ و ۲].

۵-۱ نانو ساختارهای اکسید روی

با استفاده از روش تصعید حرارتی فاز جامد-بخار، تحت شرایط ویژه، می‌توان نانوشانه‌ها، نانوحلقه‌ها، نانوفنرها، نانوتسمه‌ها، نانوسیم‌ها و نانو قفسه‌هایی از اکسید روی ایجاد کرد. این نانو ساختارها به دلیل داشتن خاصیت زیست سازگاری می‌توانند کاربردهای جدیدی در الکترونیک نوری، حسگرها، ترانسفورماتورها و پزشکی داشته باشند. در ابتدا نانو ساختارهایی را مطالعه می‌کنیم که به روش رسوب دهی شیمیایی بخار با کاتالیست یا بدون کاتالیست به‌دست می‌آیند.

۱-۵-۱ نانوسیم‌ها و نانومیله‌ها

برای دست‌یابی به آرایش و چیدمانی عمودی و منظم از نانوسیم‌های اکسید روی، می‌توان از روش جامد-مایع-بخار استفاده کرد. در این روش زیر لایه در معرض منبع تولید بخار تا حد اشباع قرار می‌گیرند، تا حدی که بلورهای جامد از سطح کاتالیزور طلا نمایان شوند. از جمله شاخص‌های مهم در این فرایند، فشار جزئی اکسیژن و فشار محفظه است، یعنی می‌توان با افزایش میزان اکسیژن، به نانوسیم، نانوشانه و نانوصفحه یا ورقه نیز دست یافت. برای رسیدن به رشد بلوری هم‌بافته، می‌توان به رشد اکسید روی بر روی یاقوت با زاویه ۳۰ درجه نسبت به زیر لایه نرمال اشاره کرد. در مورد نانوستون‌ها نیز روش اکسیداسیون سولفیدروی در کوره لوله‌ای تحت دمای ۹۵۰ درجه سانتیگراد با استفاده از زیر لایه اکسید آلومینیوم پیشنهاد می‌شود [۳]. در ادامه به دو روش از روش‌های تولید نانوسیم‌های اکسید روی اشاره می‌کنیم.

۱-۵-۱-۱ رشد محلول آب

گروه‌های زیادی، رشد نانوسیم‌ها و دیگر نانوساختارها را با استفاده از روش محلول آبی گزارش داده‌اند. از مقدمات تهیه نانوسیم چرخشی استفاده از لایه‌ای از اکسیدروی است که عمدتاً برای تامین آن از محلول نترات اکسید روی و هگزا متیل تتر، استفاده می‌شود. یون‌های هیدروکسید معمولاً از تجزیه هگزا متیل تتر تولید شده و با روی، برای تشکیل اکسید روی واکنش می‌دهند.

۱-۵-۱-۲ رسوب‌دهی الکترونیکی

گروه‌های مختلف با استفاده از زیر لایه SnO_2 آلاییده با آهن، توانستند نانوستون‌های متفاوتی با قطر بین صد تا ۳۰۰ نانومتر و ارتفاع ۴۰۰ تا ۹۰۰ نانومتر با تغییر شاخص‌هایی چون چگالی، زمان رسوب‌گذاری و مدت زمان حمام حرارتی تهیه کنند. از سوی دیگر تهیه لایه‌های نازک به روش رسوب دهی الکتریکی نیز گزارش شده است. تحقیقات نشان داده است که از جمله مزایای رشد به روش رسوب الکتریکی، تهیه فیلم‌هایی با کیفیت بالاست که با افزایش میزان آنیل شدن شاهد پیک‌های تیز در دیاگرام مربوط به پدیده نشر خواهیم بود. شاخص‌های این روش بر شکاف باند انرژی مؤثر است. علاوه بر این، ضخامت فیلم نیز بر آن مؤثر است که از تفاوت در ابعاد ذره و میزان عیوب ناشی می‌شود. در تهیه لایه‌های اکسید روی متخلخل به روش رسوب‌دهی الکتریکی از زیر لایه‌های شیشه‌ای اکسید ایندیم آلاییده با قلع و روکشی از پلی‌استایرن استفاده می‌شود. در نتیجه، اکسید روی در منافذ زیر لایه نفوذ می‌کند. الکترولیت مصرفی در این روش محلول آبی نترات روی است. همان‌طور که گفته شد از روش رسوب‌دهی الکتریکی می‌توان نانوسیم‌های با قطر ۱۵ تا ۹۰ نانومتر را در بین منافذ قالب آندی آلومینا رسوب داده و در مجاورت هوا تحت دمای ۳۰۰ درجه به اکسید روی تبدیل نمود [۴].

۱-۵-۲ نانوتسمه‌ها

استفاده از پودر اکسید روی به عنوان منبع اولیه بدون حضور کاتالیست، نانوتسمه‌هایی با طول ده‌ها تا صدها میکرومتر، به دست خواهد داد. در مورد تهیه نانوساختارها با ضخامتی کمتر مثلاً ده نانومتر طبق آنچه که در نانوتسمه‌ها داریم می‌توان به کمک پلاریزاسیون به نانوحلقه و نانوماریچ که ناشی از کاهش انرژی حاصل از بارهای قطبی، سطح مخصوص و دفرمه شدن الاستیک است، دست یافت. هنگامی که در سال ۲۰۰۱ نانوتسمه‌های نیمه‌رسانا کشف شدند [۵]. تحقیقات بر روی نانوساختارهایی که حداقل دارای یک بعد نانومتری هستند به سرعت توسعه پیدا کرد زیرا این مواد کاربردهای وسیع و جدیدی در اپتیک، الکترونیک نوری، کاتالیزورها و پیزوالکتریک دارند. نانوتسمه‌های اکسیدی نیمه‌رسانا گروه بی‌نظیری از مواد با ترکیب شیمیایی و ساختارهای بلوری جالب هستند. نانوتسمه‌ها از اکسیدهای نیمه‌رسانای روی، قلع، کادمیم و گالیم و با استفاده از تبخیر پودرهای تجاری اکسید این فلزات در دمای بالا حاصل می‌شوند. این نانوتسمه‌ها خالص، یک شکل و دارای بلورهای منفرد هستند. ساختار هندسی ویژه این شبه‌تسمه‌ها باعث ایجاد بلورهای اکسیدی نیمه‌رسانا با کاتیون‌هایی با ظرفیت متفاوت و خواص جالب در آن‌ها می‌شود. ترانزیستورهای اثر میدانی، حسگرهای نانو مقیاس بسیار حساس گازها و نانو حامل‌های ساخته شده از نانوتسمه‌های منفرد، نمونه‌ای از آن‌ها هستند. انتقال حرارتی نیز در طول نانوتسمه‌ها اندازه‌گیری شده است. به علت خاصیت پیزوالکتریکی نانوحلقه‌ها، نانوتسمه‌ها و نانوفرهای سنتزی اخیر می‌توان از آن‌ها در کاهنده‌ها، افزاینده‌ها و حسگرهای نانو مقیاس استفاده کرد [۶].

۱-۵-۳ نانوحلقه‌ها

در بین اکسیدهای کارکردی، پروسکیت، دوتیل، فلئوئورید کلسیم و ورتزیت، اکسیدروی تنها ماده‌ای است که هر دو ویژگی پیزوالکتریکی و نیمه‌رسانایی را از خود نشان می‌دهد. این ماده ساختارهای گوناگونی دارد که بسیار غنی‌تر از انواع نانو مواد شناخته شده مانند نانولوله‌های کربنی هستند. با استفاده از روش تصعید حرارتی حالت جامد و با کنترل سرعت رشد، دمای رشد موضعی و ترکیب شیمیایی مواد می‌توان دسته‌ی وسیعی از نانوساختارهای اکسید روی را سنتز کرد. نانوحلزون‌ها، نانوفرها و نانوحلقه‌های یکپارچه و بدون درز اکسید روی، نیتريد گالیم، نیتريد آلومینیم، سولفید روی و سلنید کادمیم، چند عضو مهم از خانواده ورتزیت هستند که در ساخت مواد پیزوالکتریک، الکترونیک نوری و لیزر اهمیت و کاربرد فراوان دارند. دو ویژگی مهم این خانواده تقارن غیرمرکزی و سطوح قطبی آن‌ها است. به عنوان مثال اکسید روی ترکیبی است که به خوبی می‌تواند طرز قرار گرفتن کاتیون‌های zn^{+2} را در کنار آنیون‌های o^{-2} در یک ترکیب چهار وجهی نشان دهد. یک دو قطبی در طول محور مرکزی به وجود می‌آید و باعث ایجاد اختلاف سطح انرژی بین سطوح می‌شود. با کنار هم قرار دادن