

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

كَلَّمَكَ ١٤١٧



دانشگاه آزاد اسلامی
واحد شاهرود
دانشکده علوم پایه، گروه شیمی
پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد «M.Sc»
گرایش: شیمی فیزیک

عنوان:

مطالعه اثر سایز حلقه نانوتیوبهای زیگزاگ بورنیتريد بر روی جذب NO_2 و NH_3 به روش
DFT

استاد راهنما:
دکتر احسان زاهدی

استاد مشاور:
دکتر صفا علی عسگری

نگارش:
زهرا صدیقی

زمستان ۱۳۹۰



ISLAMIC AZAD UNIVERSITY

Shahrood Branch

Faculty of Science- Department of Chemistry

Thesis» M.Sc«

On physical Chemistry

Subject:

The Study of in Fluence of Bornitrid Zig-Zag Nanotube Ring Size on
Absorbance of NH^{\vee} and NO^{\vee} by using of DFT

Thesis Advisor:

Ehsan Zahedi Ph.D.

Consulting Advisor:

Safa Ali Asgari Ph.D

By:

Zahra Sedighi

Winter ۲۰۱۲



بسمه تعالی

تعهد نامه اصالت رساله پایان نامه

اینجانب دانش آموخته مقطع کارشناسی ارشد ناپیوسته / دکتری حرفه ای / دکترای تخصصی در رشته که در تاریخ از پایان نامه خود تحت عنوان "....."

..... " با کسب نمره و درجه دفاع نموده ام بدین وسیله متعهد می شوم:

۱) این پایان نامه / رساله حاصل تحقیق و پژوهش انجام شده توسط اینجانب بوده و در مواردی که از دستاوردهای علمی و پژوهشی دیگران (اعم از پایان نامه، کتاب، مقاله و...) استفاده نموده ام، مطابق ضوابط و رویه موجود، نام منبع مورد استفاده و سایر مشخصات آن را در فهرست مربوطه ذکر و درج کرده ام.

۲) این پایان نامه / رساله قبلاً برای دریافت هیچ مدرک تحصیلی (هم سطح، پایین تر یا بالاتر) در سایر دانشگاه ها و موسسات آموزش عالی ارائه نشده است.

۳) چنانچه بعد از فراغت تحصیل، قصد استفاده و هر گونه بهره برداری اعم از چاپ کتاب، ثبت اختراع و... از این پایان نامه داشته باشم، از حوزه معاونت پژوهشی واحد مجوزهای مربوطه را اخذ نمایم.

۴) چنانچه در هر مقطع زمانی خلاف موارد فوق ثابت شود، عواقب ناشی از آن را می پذیرم و واحد دانشگاهی مجاز است با این جانب مطابق ضوابط و مقررات رفتار نموده و در صورت ابطال مدرک تحصیلی ام هیچگونه ادعایی نخواهم داشت.

نام و نام خانوادگی

امضاء و تاریخ

تقدیم به:

همسر مهربان و دو فرزند عزیزم

بی شک قدم نهادن در مسیر علم و معرفت نیز از الطاف خداوند بزرگی است که با نعمتهای بی منتهایش آن هم در کانون گرم خانواده ، در کنار همسر فداکار و دو فرزند در اوج مهربانی و عشق و صفا ادامه تحصیل و خلق این اثر ناقابل را برایم ممکن ساخته است .
خداوندا باز هم به رسم تقدیر همچنان تو را می ستایم و برای خانواده وفادارم بهترینها را از درگاہت آرزومندم .

سپاسگذاری

قبل از هر چیز خداوند متعال را سپاس می گویم که توفیق نوشتن این پایان نامه را به من ارزانی داشته و جلوه های بیشتری از خلقت خویش را بر ما نمایان ساخت . در ادامه از زحمات بی دریغ استاد راهنمای ارجمندم جناب آقای دکتر احسان زاهدی و استاد مشاور محترم آقای دکتر صفا علی عسگری که در این مقطع با صبر و شکیبایی به من علم آموختند ، کمال تشکر و سپاس را دارم .

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
چکیده -----	۱
فصل اول : مقدمه و تاریخچه	
۱ - ۱ - بررسی های نانوتیوب های نیتريد بور -----	۳
۱-۱-۱ - BNNT نسبت به CNNT -----	۴
۲-۱ - بررسی های تئوری -----	۷
۱ - ۲ - ۱ - ساختار های الکترونیک -----	۷
۱ - ۲-۲ - مسائل تئوری دیگر -----	۹
۳-۱ - ساخت -----	۱۰
۱ - ۳ - ۱ - مکانیزم رشد -----	۱۰
۲-۳-۱ - تخلیه ی قوسی -----	۱۱
۳-۳-۱ - قطع لیزری -----	۱۱
۴-۳-۱ - سنتز شابلونی -----	۱۲
۵-۳-۱ - اتوکلاو -----	۱۳
۶-۳-۱ - سنگ شکن گلوله ای -----	۱۳
۷-۳-۱ - رسوب گذاری بخار شیمیایی و سنتز شیمیایی -----	۱۴
۸-۳-۱ - روش های دیگر -----	۱۵
۹-۳-۱ - خالص سازی BNNT -----	۱۶
۴-۱ - ساختار -----	۱۶
۱ - ۴ - ۱ - مدل بندی -----	۱۶
۲-۴-۱ - مورفولوژی -----	۱۷
۳-۴-۱ - مرتبه ی اتمی -----	۲۰
۵-۱ - ویژگی های فیزیکی -----	۲۱
۱-۵-۱ - ویژگی های الکتریکی -----	۲۱

۲۳	۲-۵-۱- ویژگی های مکانیکی
۲۵	۳-۵-۱- ویژگی های خیس کننده
۲۵	۴-۵-۱- پایداری گرمایی
۲۶	۶-۵-۱- خاصیت مغناطیسی
۲۷	۷-۵-۱- رسانش گرمایی
۲۹	۸-۵-۱- انتقال فاز فشار بالا
۳۰	۹-۵-۱- ویژگی های اپتیکال
۳۱	۶-۱- تغییر شکل
۳۲	۱-۶-۱- دوپه کردن
۳۳	۲-۶-۱- لایه گذاری
۳۴	۳-۶-۱- آرایش ذرات نانویی
۳۵	۴-۶-۱- برهم کنش های ضعیف
۳۷	۵-۶-۱- پیوند کووالانسی
۳۸	۶-۶-۱- کاربرد
۳۹	۷-۶-۱- ذخیره سازی هیدروژن
۴۰	۸-۶-۱- نانو فیلرهای موجود برای کامپوزیت ها
۴۱	۹-۶-۱- کاربردها و سازگاری زیستی
۴۲	۱۰-۶-۱- فعالیت های دیگر
۴۴	۷-۱- چکیده فصل

فصل دوم : روش های محاسبات کوانتومی

۴۷	۱-۲- مقدمه
۴۹	۲-۲- مکانیک مولکولی Molecular Mechanics
۵۱	۳-۲- روشهای نیمه تجربی Semi-Empirical methods
۵۱	۴-۲- روشهای <i>ab initio</i>
۵۱	۱-۴-۲- روش میدان خودسازگار (<i>SCF</i>) هارتری-فاک
۵۲	۲-۴-۲- همبستگی الکترونی
۵۳	۵-۲- روشهای فوق هارتری-فاک Post Hartree-Fock methods
۵۳	۱-۵-۲- نظریه خوشه های جفت شده (<i>CC</i>) Coupled-Cluster theory

- ۵۴-۲-۵-۲- روش برهمکنش آرایشها (CI) (Configuration Interaction) -----
- ۵۵-۳-۵-۲- نظریه اختلال مولر-پلست Møller-Plesset Perturbation Theory -----
- ۵۶-۶-۲- سری پایه Basis Set -----
- ۵۶-۱-۶-۲- مقدمه -----
- ۵۶-۲-۶-۲- توابع پایه Basis Functions -----
- ۵۸-۳-۶-۲- مجموعه پایه حداقل (مینیم) Minimal Basis Set -----
- ۵۹-۷-۲- تئوری تابعیت چگالی Density Functionl Theory -----
- ۶۱-۸-۲- منظور از محاسبات کامپیوتری در شیمی چیست؟ -----
- ۶۲-۹-۲- ارزیابی مسیرها در يك واکنش شیمیایی -----
- ۶۲-۱۰-۲- انواع محاسبات -----
- ۶۲-۱۱-۲- تعیین انرژی برای هر وضعیت مولکولی -----
- ۶۳-۱۲-۲- بهینه‌سازی هندسه -----
- ۶۳-۱۳-۲- جستجوی حالت گذار -----
- ۶۴-۱۴-۲- حوزه‌ی روش‌های مکانیک کوانتمی -----
- ۶۵-۱۵-۲- اصل طرد -----
- ۶۶-۱۶-۲- توابع موج ساده شده -----
- ۶۶-۱۷-۲- توابع موج هارتری-فوک -----
- ۶۷-۱۸-۲- بسط محاسبه‌ی تابع موج -----
- ۶۷-۱-۱۸-۲- برهمکنش پیکربندی -----
- ۶۹-۲-۱۸-۲- نظریه‌ی اختلال میلر-پلست -----
- ۷۰-۳-۱۸-۲- نظریه‌ی تابع چگال -----
- ۷۰-۱-۳-۱۸-۲- اربیتال‌های کوهن-شم -----
- ۷۱-۱۹-۲- RHF و UHF -----
- ۷۱-۲۰-۲- همگرایی SCF -----
- ۷۲-۲۱-۲- انتخاب يك مجموعه‌ی حالت پایه -----
- ۷۳-۲۲-۲- اضافه نمودن تابع پایه‌ی اضافی (EBF) -----
- ۷۳-۲۳-۲- بکار بردن يك مجموعه‌ی حالت پایه -----
- ۷۴-۲۴-۲- چندگانگی بار و اسپین -----

۷۵	-----	۲۵-۲ معيارهاي همگرايي
۷۶	-----	۲۶-۲ UHF در برابر RHF
۷۶	-----	۲۷-۲ تخمين اوليهي ضريبهاي MO
فصل سوم : روش کار، محاسبات و نتیجه گیری		
۷۹	-----	۱-۳ جزئیات محاسباتی
۷۹	-----	۲-۳ مطالعه جذب آمونیاک بر روی نانوتیوب بورنیتريد ۳-۰
۸۱	-----	۳-۳ مطالعه جذب آمونیاک بر روی نانوتیوب بورنیتريد ۴-۰
۸۳	-----	۴-۳ مطالعه جذب آمونیاک بر روی نانوتیوب بورنیتريد ۵-۰
۸۵	-----	۵-۳ مطالعه جذب آمونیاک بر روی نانوتیوب بورنیتريد ۶-۰
۸۷	-----	۶-۳ مطالعه جذب آمونیاک بر روی نانوتیوب بورنیتريد ۷-۰
۸۸	-----	۷-۳ مطالعه جذب آمونیاک بر روی نانوتیوب بورنیتريد ۸-۰
۹۰	-----	۸-۳ مطالعه جذب آمونیاک بر روی نانوتیوب بورنیتريد ۹-۰
۹۲	-----	۹-۳ مطالعه جذب آمونیاک بر روی نانوتیوب بورنیتريد ۱۰-۰
۹۷	-----	۱۰-۳ مطالعه جذب NO _۲ بر روی نانوتیوب بورنیتريد
۹۸	-----	فهرست منابع غير فارسی
۱۱۴	-----	چکیده انگلیسی

فهرست جداول

عنوان	صفحه
جدول (۱-۳). انرژی جذب نانوتیوب های بورنیتريد ۳-۰ تا ۱۰-۰ بعد از جذب NH_3	۹۴
جدول (۲-۳). انرژیهای هومو-لومو-گپ انرژی نانوتیوبهای بورنیتريد ۳-۰ تا ۱۰-۰ قبل از جذب	۹۵
جدول (۳-۳). انرژیهای هومو-لومو-گپ انرژی نانوتیوبهای بور نیتريد ۳-۰ تا ۱۰-۰ بعد از جذب NH_3	۹۵
جدول (۴-۳). میزان بار انتقال یافته در نانوتیوبهای بورنیتريد ۳-۰ تا ۱۰-۰ بعد از جذب NH_3	۹۶
جدول (۵-۳). فاصله ی جذب بور با NH_3 در نانوتیوب های بورنیتريد ۳-۰ تا ۱۰-۰	۹۶

فهرست اشکال

عنوان	صفحه
شکل (۱-۱) -----	۴
شکل (۲-۱) -----	۴
شکل (۳-۱) -----	۶
شکل (۴-۱) -----	۹
شکل (۵-۱) -----	۱۵
شکل (۶-۱) -----	۱۹
شکل (۷-۱) -----	۲۰
شکل (۸-۱) -----	۲۰
شکل (۹-۱) -----	۲۱
شکل (۱۰-۱) -----	۲۳
شکل (۱۱-۱) -----	۲۶
شکل (۱۲-۱) -----	۲۹
شکل (۱۳-۱) -----	۳۲
شکل (۱۴-۱) -----	۴۲
شکل (۱-۳). شکل هندسی بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد ۳-۰ قبل از جذب	۸۰
شکل (۲-۳). شکل هندسی بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد ۳-۰ بعد از جذب NH_3	۸۰
شکل (۳-۳). شکل هندسی بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد ۴-۰ قبل از جذب	۸۲
شکل (۴-۳). شکل هندسی بهینه شده ی نانوتیوب بورنیتريد ۴-۰ بعد از جذب NH_3	۸۲
شکل (۵-۳). شکل هندسی بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد ۵-۰ قبل از جذب	۸۳
شکل (۶-۳). شکل هندسی بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد ۵-۰ با جذب NH_3	۸۴
شکل (۷-۳). شکل هندسی بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد ۶-۰ قبل از جذب	۸۵
شکل (۸-۳). شکل هندسی بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد ۶-۰ با جذب NH_3	۸۵

- شکل (۹-۳). شکل هندسی بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد ۰-۷ قبل از جذب-----۸۷
- شکل (۱۰-۳). شکل هندسی بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد ۰-۷ پس از جذب NH_3 ---۸۷
- شکل (۱۱-۳). شکل هندسی بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد ۰-۸ قبل از جذب -----۸۹
- شکل (۱۲-۳). شکل هندسی بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد ۰-۸ پس از جذب NH_3 ----۸۹
- شکل (۱۳-۳). شکل هندسی بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد ۰-۹ قبل از جذب-----۹۰
- شکل (۱۴-۳). شکل هندسی بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد ۰-۹ بعد از جذب NH_3 ----۹۱
- شکل (۱۵-۳). شکل هندسی بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد ۰-۱۰ قبل از جذب -----۹۲
- شکل (۱۶-۳). شکل هندسی بهینه شده نانوتیوب بورنیتريد ۰-۱۰ بعد از جذب NH_3 --۹۳

چکیده

در این تحقیق اثرساز حلقه ی نانوتیوبهای زیگزاگ بورنتری ۰-۳ تا ۰-۱۰ بر روی جذب NO_2 و NH_3 مورد بررسی قرار می گیرد.، که اتصال NH_3 و NO_2 فقط از ناحیه اتم N با کمترین دافعه فضایی و درپایدارترین کنفورمرها مورد مطالعه قرار گرفته است .

برای این منظور، قبل از بهینه سازی ساختارهای نانوتیوب جذب شده با NH_3 ، این مولکول در فاصله 1.65 \AA از اتم بور قرار داده شد ، سپس مولکول NH_3 در لایه پنجم نانوتیوب های بورنتری بر روی یکی از اتمهای های بور قرار گرفت . بهینه سازی ساختارها قبل و بعد از جذب با کمک نرم افزار گوسین ۰۳ و با استفاده از روش تئوری تابع چگال (DFT) و در سطح محاسباتی $\text{B}^3\text{LYP}/6\text{-}31\text{G}^*$ انجام پذیرفت .

محاسبات NBO ، بر روی ساختارهای بهینه شده مولکولها بعد از جذب NH_3 ، با روش B^3LYP و سری پایه $6\text{-}31\text{G}^{**}$ ، با نرم افزار گوسین ۰۳ صورت گرفت .

بعد از بهینه سازی ساختارها ، تغییرات طول پ یوندها قبل و بعد از جذب در موضع جذب ، انرژی جذب ، انرژی های هومو، لومو، گپ انرژی ، میزان بار انتقال یافته و فاصله جذب در هر یک از نانوتیوب های زیگزاگ بورنتری مورد بررسی قرار گرفت .

مولکول نانوتیوبهای بورنتری ۰-۳ تا ۰-۱۰ با استفاده از نرم افزار Chem Bio Office ترسیم شده است .

فصل اول

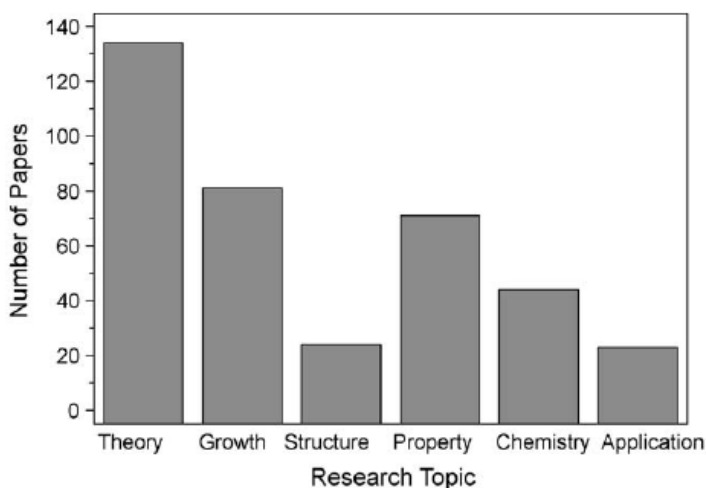
مقدمه و تاریخچه

۱ - ۱ - بررسی های نانوتیوب های نیتريد بور

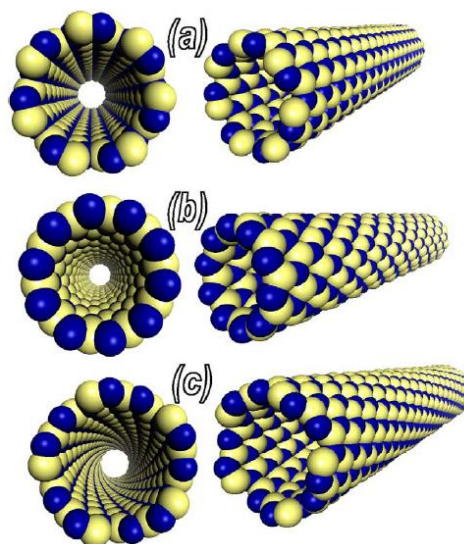
یک نانوتیوب های نیتريد بور BNNT می توان به عنوان یک لایه ی BN شش وجهی چرخیده شده یا به عنوان یک نانوتیوب های کربنی CNT تصور کرد ، که در آن اتم های متناوب B,N به طور کامل جایگزین اتم های C می شود (شکل ۱) . مشابه با CNT و BNNT خصوصیات کایرالیته دارو که یک پارامتر ژئومتری مهم محسوب می شود . اما برای آنها کایرالیته نقش مهمی در تعیین ویژگی های الکتریکی ایفا می کند .

در سال ۱۹۸۱ ، ایشی ، اکتشاف نانو ساختار های یک بعدی BN را گزارش داد که ساختار هایی شبیه بامبو داشتند . این ساختار ها به عنوان نورن بلور های BN نام گذاری شدند . به هر حال BN موجود در مقیاس نانو با یک ساختار استوانه ای کامل در ابتدا به طور تئوری در سال ۱۹۹۴ پیش بینی شد و سپس به طور تجربی توسط تخلیه ی قوسی در سال ۱۹۹۵ مورد سنتز قرار گرفت . در چند سال بعد ، بسیاری از بررسی ها روی سنتز BNNT متمرکز شده است که بعد از آن طبقه بندی ساختاری مطرح می شود . روش های متنوع از قبیل قطع لیزری ، رسوب بخار شیمیایی CVD ، سنگ شکن لوله ای ، واکنش جایگزینی اختراع شد و برای سنتز BNNT به کار رفت . این روش ها سنتز با درجه خلوص ، ضخامت و ساختار های مختلف ، BNNT را ارائه می دهد به طوری که بتواند شرایط را برای بررسی ویژگی های فیزیکی جدید مهیا سازد . به هر حال برای بررسی شیمیایی BNNT ، مقادیر زیاد BNNT با درجه خلوص بالا موجود نیست . بنابراین فعالیت های مربوط به آن طی سال های ۲۰۰۳ تا ۲۰۰۵ به منحصه ی ظهور درآمد . کاربردهای واقعی BNNT هنوز هم در بازار دیده نمی شود . تنها اما برخی از اکتشافات در سطح آزمایشگاهی به طور موفق انجام شده است که از جمله ی آن می توان به ارائه ی کامپوزیته های سرامیکی و پلیمری و ذخیره سازی هیدروژن اشاره کرد . در حقیقت در مقایسه با تعداد محدودی از فعالیت های تجربی ، مقالات بیشتری در حیطه تئوری به چاپ رسیده است . موضوعات مورد بررسی شامل ساختار الکترونیک BNNT ، میزان سازی مشخصه ها ، ذخیره سازی هیدروژن ، ویژگی های مغناطیسی ، محرک های دینامیک مولکولی می باشد . شکل ۲ اعداد و ارقام

دقیقی را برای مقالاتی نشان می دهد که تاکنون در رابطه با BNNT به چاپ رسیده اند. بسیاری از این کارها جنبه ی تئوری و بررسی سنتزی داشته ، در ح الیکه بررسی های صورت گرفته روی شیمی و کاربردهای آن به خاطر دشواری های موجود در بدست آوردن نمونه های مترکم پرکیفیت و مناسب برای این نوع تحقیقات ، نسبتا کم است .



شکل (۱-۲)



شکل (۱-۱)

۱-۱-۱ - BNNT نسبت به CNNT

BN یک ترکیب دوتایی است که سازنده ی عناصر گروه سه و پنج در جدول تناوبی می باشد ، به هر حال به خاطر ساختار مشخص آن و ویژگی ها و شباهت های چند شکلی ، BN در مقایسه با دیگر گروههای ترکیبات سه و پنج معمول به سیستم C نزدیک است . در اینجا به طور مختصر BNNT را با OVT مقایسه می کنیم و آن را به طور خلاصه در جدول یک ارائه می دهیم . توضیحات دقیق ویژگی های BNNT در بخش های بعد ارائه خواهد شد . مواد BN به خاطر آنالوگ های تماما کربنی یشان ، ایزو الکترونیک هستند اما ممان های دو قطبی محلی به خاطر اختلاف در الکترونگاتیویته اتم های B, N دارند . پیوند B-N شامل مولفه های یونی مهم است . این قطبیت می تواند به طور قابل توجهی حالت های الکترونی مولکولی و جامدات را به همراه ویژگی های اپتیکال سیستم تغییر دهد که این کار با تغییر ویژگی اوربیتال های مولکولی جلوتر انجام می شود . مشهودترین و بارزترین اختلاف بین BNNT و CNT در ظاهر قابل دید آنهاست : BNNT سفید خالص هستند (برخی اوقات به خاطر تهی جاهای N تا حدی زرد نشان می دهند) در حالیکه CNT سیاه هستند که تصویر آن را در شکل ۳ می بینید . شکاف باند BNNT گزارش می شود که بین ۵.۰ , ۶.۰ eV باشد که

این مسئله به کالیرالیته ی تیوب بستگی ندارد . این موضوع عایق سازی الکتریکی خوبی را اراده می دهد . در حالیکه CNT می تواند یک فلز یا یک نیمه رسانا با پهنای باند باریکی باشد . این اختلاف در ساختار الکترونیک باعث تابش مختلف لومیناسنس می شود : BNNT تحت القای الکترونها یا فوتونها لومیناسنس بنفش یا فرابنفشی دارند ، در حالیکه CNT می تواند نور مادون قرمز تابش دهد و طول موج آن به کالیرالیته بستگی دارد . به علاوه در شروع تفاوت های متقارن BNNT تنها یک حالت فونون فلان رامان در 1370 cm^{-1} دارد در حالیکه CNT یک باند ظاهری G در 1580 cm^{-1} و یک باند القا شده ی D در 1350 cm^{-1} دارد . هر دو نوع تیوب حالت های تنفس شعاعی RBM دارند اما فرکانس های آنها تا حدی متفاوت است .

CNT و BNNT هر دو ویژگی های مکانیک بسیار خوبی دارند : مدول یانگ در CNT پیش بینی می شود که به یک سطح TPa برسد . مدول یانگ BNNT کمی ، کم تر است و در حدود $0.7 - 0.9$ TPa می باد البته بر طبق محاسبات تئوری . به هر حال از لحاظ تجربی هر دو مدول یانگ BNNT و CNT در مدل های ساخته شده با روش های مختلف متفاوت است . برخی اوقات داده های BNNT به خاطر سنتز بالاتر دما و تبلور بهتر حتی از CNT هم بهتر می شوند . با توجه به ویژگی های گرمایی CNT محاسبه می شود که از لحاظ رسانش گرمایی بالا بسیار متغیر کننده به نظر بیاید (6000 w/mk) . برای BNNT دو مقاله ی تئوری پیش بینی های کاملاً متفاوتی ارائه می دهد : یک مقاله مقادیر بیش از CNT را محاسبه کرده و مقاله ی دیگر بسیار پایین تر از 0 w/mk یک بررسی تجربی جدید نشان می دهد که در ضخامت های مشابه ، رسانش گرمایی BNNT در مقایسه با CNT خواهد بود . در کنار این موارد BNNT پایداری اکسایشی و گرمایی بهتری از CNT دارد .

به منظور خلاصه کردن ، از یک طرف هر دو نمونه ی تیوب در کاربردهای مشابهی به خاطر شباهت ویژگی هایشان استفاده می شوند . به عنوان برای تقویت مکانیکی یا بهبود رسانش گرمایی مواد ماتریس . از طرف دیگر تفاوت های موجود بین آن دو آشکار است . BNNT فیلر های مناسبی برای عایق بندی مواد است ، در حالیکه CNT معمولاً برای بهبود رسانش الکتریکی پلیمر ها استفاده می شود . در برخی از موارد هر دو نوع تیوب در ابزار اپتیکال به کار رفته و ممکن است محدوده ی طول موج متفاوتی داشته باشد .



شکل (۳-۱)

۲-۱ - بررسی های تئوری

۱ - ۲ - ۱ - ساختارهای الکترونیک

BNNT از لحاظ تئوری اول پیش بینی شد و بعد از آن ساختارهای الکترونیک آن با استفاده از روش های پیوندی محکم مورد بررسی قرار گرفت . معلوم شده است که همه ی BNNT هوا نیمه رسانایی هستند که پهنای باند مستقیم یا غیرمستقیم آنها بیش از μev می باشد . BNNT با ضخامت های بزرگتر شکاف باند بیش تری دارد که میزان اشباع سازی آن متناظر با شکاف باند یک BN شش وجهی است که تصویر آن را در شکل ۴ می بیند . شایان ذکر است که مجموع محاسبات انرژی به خاطر محدودیت روش های پیوندی محکم ، کمیاب است . بررسی های بعدی بر اساس محاسبات کاربردی - چگالی محلی LDA می باشد که تأیید می کند که از لحاظ انرژی این ماده برای چند لایه شدن یک ورقه ی BN شش وجهی در یک BNNT جهت تشکیل CNT از ورقه های گرانیتهی ، بسیار مطلوب تر است . به علاوه جزئیات دقیق تری در مورد ساختارهای الکترونیک وجود دارد . از یک طرف طبق آنالیز پیچیده شدن باند ، BNNT نیمه رساناهای شکاف دار بیشتری هستند که شکاف مستقیم آنها برای تیوب های o, n و شکاف غیرمستقیم آنها برای تیوب های n, n می باشد . از طرف دیگر تأثیرات هیبریدیلاسیون می تواند اتفاق بیفتد که دلیل آن این است که انحای تیوب ، تا حد قابل توجهی شکاف باند BNNT را کاهش می دهد . برای (o, n) در BNNT $n > 12$ می باشد ضخامت بزرگتر از 0.95nm ، حالت پیوندی به نظر می رسد که هیچ نقشی در تعیین شکاف لوله ایفا نکند . شکاف ها بر طبق LDA ، در اطراف 4ev پایدارند . معلوم شده است که LDA ممکن است شکاف باند را پایین تر از حدود مورد نظر تخمین بزند به این ترتیب این میزان منطقی است . در محاسبه ی دیگر که از تئوری کاربردی چگالی استفاده می شود ، شکاف باند BNNT به تدریج در 5.03ev اشباع می شود که دلیل آن افزایش در ضخامت است .

روش های مختلفی برای تنظیم ساختار الکترونیک BNNT ارائه شده که شامل روش های فیزیکی از قبیل به کارگیری میدان الکتریکی یا روش های شیمیایی یا کشیدگی از قبیل دوپه کردن ، ایجاد نقص یا تغییر سطح می باشد . روش ها و گونه های انتخاب شده و منابع مربوط در جدول ۲ خلاصه بندی شده است . روش های فیزیکی می تواند به طور مستقیم شکاف باند BNNT را کاهش دهد ، در حالیکه روش های شیمیایی معلوم شده است که باعث تنظیم شکاف باند از طریق ایجاد انرژی مستقر در شکاف می شود . به عنوان مثال با به کارگیری یک میزان الکتریکی 0.2V/A° ، شکاف باند یک BNNT مستقیماً از 4.5ev به حدود