

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

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



دانشگاه رازی

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته ی فیزیک

گرایش حالت جامد

عنوان پایان نامه:

بررسی چگالی حالت ترکیبی از صفحات گرافین و بورون نیتراید و مقایسه بایکدیگر

استاد راهنما:

دکتر حمزه موسوی

نگارش:

خیام دارابی

مهر ماه ۱۳۹۱

(من لم يشكر المخلوق لم يشكر الخالق)

پیش از آغاز بر خود واجب می دانم که از راهنمایی های بسیار ارزنده و زحمات بی شائبه ی استاد راهنمای ارجمندم، جناب آقای دکتر حمزه موسوی که دلسوزانه مسئولیت راهنمایی اینجانب را در این پایان نامه برعهده گرفتند تشکر و قدردانی نمایم. و همچنین از اساتید بزرگوارم جناب آقای دکتر رستم مرادیان و دکتر علی فتحعلیان به خاطر قبول زحمت مطالعه و داوری این پایان نامه بسیار متشکرم. در پایان از دوست بسیار عزیزم محمدبراتی به خاطر راهنمایی های دلسوزانه اش تشکر می کنم و از دختر و همسر مهربانم که با وجود تمام مشکلاتم مشوق و همراه من بودند تشکر می کنم.

چکیده:

بور، کربن و نیتروژن با اعداد اتمی ۵، ۶ و ۷ در یک سطر از جدول تناوبی عناصر قرار می گیرند. بور جزء شبه فلزات و کربن و نیتروژن غیر فلزند. به دلیل تشابه شکل هندسی ترکیب بورون نیتراید و گرافین به بررسی ترکیب این صفحات و بررسی خواص الکترونی آنها می پردازیم و با محاسبه چگالی حالتها برای چیدمانهای مختلف از صفحات گرافین و بورون نیتراید و مقایسه نتایج بدست آمده با هم، تأثیر چیدمان های مختلف را بر چگالی حالتها بررسی کنیم. به همین منظور ابتدا با استفاده از مدل تنگ بست و با در نظر گرفتن تقریب نزدیک ترین همسایه ها به محاسبه هامیلتونی پرداخته سپس این هامیلتونی را در تابع گرین محاسبه شده قرار می دهیم و با استفاده از تابع گرین چگالی حالتها را محاسبه می کنیم. این روش را برای چیدمانهای مختلف از صفحات گرافین و بورون نیتراید انجام می دهیم تا تأثیر این چیدمان ها را بر چگالی حالت ملاحظه کنیم.

کلمات کلیدی: گرافین، بورون نیتراید، تقریب تنگ بست، تابع گرین، چگالی حالتها

فهرست مطالب

۱ مقدمه ای بر نانوساختارهای کربنی و بورون نیتراید

- ۱-۱ فناوری نانو..... ۲
- ۲-۱ نانوساختارهای کربن ۳
- ۱-۲-۱ گرافیت ۵
- ۲-۲-۱ الماس ۷
- ۳-۲-۱ دوده ۸
- ۴-۲-۱ فولرین ها ۸
- ۵-۲-۱ نانو لوله های کربنی ۹
- ۶-۲-۱ گرافین ۱۰
- ۱-۶-۲-۱ روشهای ساخت گرافین ۱۱
- ۲-۶-۲-۱ خواص گرافین ۱۴
- ۳-۱ بورون نیتراید و گونه های مختلف آن ۱۷
- ۱-۳-۱ بورون نیتراید هگزا گونال (h-BN) ۱۸
- ۱-۲-۳-۱ بورون نیتراید مکعبی (c-BN) ۱۹
- ۳-۳-۱ بورون نیتراید نوع ورتزیت ۱۹
- ۴-۳-۱ نانولوله های بورون نیتراید ۲۰
- ۴-۱ روشهای تولید بورون نیتراید ۲۱

۲ معرفی مدل های بس ذره ای و تقریب تنگ بست

- ۱-۲ مقدمه ۲۳
- ۲-۲ جملات هامیلتونی در بلور یک جسم جامد ۲۳
- ۳-۲ مدل الکترونیهای بدون برهم کنش بلاخ ۲۵
- ۴-۲ معرفی مدل اتمی ژلیوم ۳۰
- ۵-۲ معرفی تقریب تنگ بست و مدل هابارد ۳۲

۳۸	۶-۲ سلول بسیط در گرافین
۳۹	۷-۲ محاسبه بردارهای پایه ی شبکه ی مستقیم و وارون در گرافین
۴۰	۸-۲ منطقه ی اول بریلون و ساختار باند در گرافین
	۳ معرفی تابع گرین و محاسبه ی چگالی حالتها
۴۴	۱-۳ پیش درآمدی بر مکانیک کوانتوم
۴۹	۱-۳-۱ تابع گرین برای الکترون های آزاد
۵۱	۱-۳-۲ تابع گرین در نمایش طیفی
۵۳	۲-۳ معادله حرکت وابسته به تابع گرین
۶۱	۳-۳ چگالی حالتها ی یک شبکه ی خطی با وجود باوجود یک اتم در سلول پایه
	۴ بررسی چگالی حالتها برای چیدمانهای مختلف از گرافین و بورون نیتراید
۶۴	۱-۴ بررسی چگالی حالت برای یک لایه گرافین
۶۸	۲-۴ بررسی چگالی حالت ها برای دو لایه گرافین
۶۹	۳-۴ بررسی چگالی حالت ها برای سه لایه گرافین
۷۱	۴-۴ بررسی چگالی حالتها برای چهار لایه گرافین
۷۴	۵-۴ بررسی چگالی حالت ها برای چیدمانهای مختلف از لایه های برون نیتراید
۷۸	۶-۴ بررسی چگالی حالتها برای آرایشی از یک لایه گرافین و یک لایه بورون نیتراید
۷۹	۷-۴ بررسی چگالی حالتها برای آرایشی از سه لایه گرافین و بورون نیتراید (AAA)
۸۰	۸-۴ بررسی چگالی حالتها برای آرایشی از سه لایه گرافین و بورون نیتراید (ABA)
۸۱	۹-۴ بررسی چگالی حالتها برای آرایشی از سه لایه گرافین و بورون نیتراید (ABC)
۸۱	۱۰-۴ بررسی چگالی حالتها برای آرایشی از چهار لایه گرافین و بورون نیتراید (AAAA)
۸۲	۱۱-۴ بررسی چگالی حالتها برای آرایشی از چهار لایه گرافین و بورون نیتراید (ABAB)
	۵ رسم نمودارها، بحث و نتیجه گیری
۸۵	۱-۵ رسم نمودارها
۸۵	۱-۱-۵ نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای یک لایه گرافین

- ۵-۱-۲ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای دو لایه گرافین (AA) ۸۶
- ۵-۱-۳ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای دو لایه گرافین (AB) ۸۶
- ۵-۱-۴ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای سه لایه گرافین (AAA) ۸۷
- ۵-۱-۵ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای سه لایه گرافین (ABA) ۸۷
- ۵-۱-۶ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای سه لایه گرافین (ABC) ۸۸
- ۵-۱-۷ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای چهار لایه گرافین (AAAA) ۸۸
- ۵-۱-۸ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای چهار لایه گرافین (ABAB) ۸۹
- ۵-۱-۹ مقایسه ی نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های A و AA و AAA و AAAA در گرافین ۸۹
- ۵-۱-۱۰ مقایسه ی نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های A و AB و ABA و ABAB در گرافین ۹۰
- ۵-۱-۱۱ مقایسه ی نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های A و ABC در گرافین ۹۰
- ۵-۱-۱۲ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای یک لایه بورون نیتراید ۹۱
- ۵-۱-۱۳ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای دو لایه بورون نیتراید (AA) ۹۱
- ۵-۱-۱۴ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای دو لایه بورون نیتراید (AB) ۹۲
- ۵-۱-۱۵ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای سه لایه بورون نیتراید (AAA) ۹۲
- ۵-۱-۱۶ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای سه لایه بورون نیتراید (ABA) ۹۳
- ۵-۱-۱۷ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای سه لایه بورون نیتراید (ABC) ۹۳
- ۵-۱-۱۸ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای چهار لایه بورون نیتراید (AAAA) ۹۴
- ۵-۱-۱۹ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای چهار لایه بورون نیتراید (ABAB) ۹۴
- ۵-۱-۲۰ مقایسه ی نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های A و AA و AAA و AAAA در بورون نیتراید ۹۵
- ۵-۱-۲۱ مقایسه ی نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای آرایش های A و AB و ABA و ABAB در بورون نیتراید ۹۵

- ۵-۱-۲۲ مقایسه ی نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های A و ABC در بورون نیتراید ۹۶
- ۵-۱-۲۳ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای آرایشی از یک لایه بورون نیتراید و یک لایه گرافین (AA) ۹۶
- ۵-۱-۲۴ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای برای آرایشی از یک لایه بورون نیتراید و یک لایه گرافین (AB) ۹۷
- ۵-۱-۲۵ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای آرایشی از سه لایه گرافین و بورون نیتراید (AAA) ۹۷
- ۵-۱-۲۶ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای آرایشی از سه لایه بورون نیتراید و گرافین (ABA) ۹۸
- ۵-۱-۲۷ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای آرایشی از سه لایه بورون نیتراید و گرافین (ABC) ۹۸
- ۵-۱-۲۸ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای آرایشی از چهار لایه بورون نیتراید و گرافین (AAAA) ۹۹
- ۵-۱-۲۹ رسم نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی برای آرایشی از چهار لایه بورون نیتراید و گرافین (ABAB) ۹۹
- ۵-۱-۳۰ مقایسه ی نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های (A و AA و AAA و AAAA) از گرافین و بورون نیتراید ۱۰۰
- ۵-۱-۳۱ مقایسه ی چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های A و AB و ABA و ABAB از گرافین و بورون نیتراید ۱۰۰
- ۵-۱-۳۲ مقایسه ی نمودار چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های A و ABC از گرافین و بورون نیتراید ۱۰۱
- ۵-۲ بحث و نتیجه گیری : ۱۰۲
- ۶ منابع و مراجع ۱۰۳

فهرست جداول

- جدول شماره ۱-۱: برآورد بازارهای جهانی نانو در سال های اخیر ۳
- جدول شماره ۲-۱: مقایسه ی استحکام و چگالی مواد مختلف ۱۷
- جدول شماره ۳-۱: مقایسه خواص کربن و بورون نیتراید ۲۰

فهرست اشکال

- شکل ۱-۱: الوتروپهای کربن ۴
- شکل ۲-۱: اوربیتالهای $2s$ و $2p$ ۴
- شکل ۳-۱: اوربیتالهای هیبریدی sp ۵
- شکل ۴-۱: توزیع چگالی باریک پیوند σ ۵
- شکل ۵-۱: توزیع چگالی باریک پیوند π ۵
- شکل ۶-۱: ساختار گرافیت ۶
- شکل ۷-۱: نوع پیوندها در گرافین ۷
- شکل ۸-۱: نوع پیوندها در گرافین ۷
- شکل ۹-۱: الماس و هیبریداسیون sp^3 در آن ۸
- شکل ۱۰-۱: فولرین C_{60} ۹
- شکل ۱۱-۱: نانولوله های کربنی (a) تک جداره (b) چند جداره ۱۰
- شکل ۱۲-۱: ساختار شبکه ی گرافین: زیر شبکه های مختلف با دو رنگ متفاوت مشخص شده اند ۱۱
- شکل ۱۳-۱: اولین عکس چاپ شده از گرافین. عکس به روش AFM از گرافین. میله ی مقیاس $1(\mu m)$ است. ارتفاع های مختلف نشان داده شده بر روی شکل نشان دهنده ی تعداد لایه های اتمی متفاوت از کربن است. ۱۲
- شکل ۱۴-۱: گرافین در زیر میکروسکوپ نوری. چپ: گرافین یک یا چند لایه روی اکسید سیلیکن که کاملاً در زیر میکروسکوپ نوری متفاوت هستند. راست: گرافین تک لایه و چند لایه که مشخص است [۱۹] ۱۳
- شکل ۱۵-۱: ۱۳
- شکل ۱۶-۱: ساختار شماتیک سطح گرافین ۱۴
- شکل ۱۷-۱: کمینه گرافین. مستقل از تحرک پذیری حامل های بار، در نمونه های مختلف از گرافین رسانش نقطه ی خنثی گرافین (بدون حامل های بار) در داده های آزمایشگاهی ثابت است (نقاط تو خالی) و مقدار $4e^2/h$ را دارد. ۱۵

- شکل ۱-۲۰: قرار گرفتن صفحات بورون نیتراید h-BN بر روی یکدیگر ۱۸
- شکل ۱-۲۱: بورون نیتراید هگزاگونال ۱۸
- شکل ۱-۲۲: نوع مکعبی بورون نیتراید (c-BN) ۱۹
- شکل ۱-۲۳: بورون نیتراید نوع (w-BN) ۱۹
- شکل ۱-۲۴: نانولوله های برون نیتراید ۲۰
- شکل ۲-۲: سلول بسیط و بردارهای شبکه مستقیم گرافین ۳۸
- شکل ۲-۱: زیر شبکه های مثلثی براوه گرافین ۳۸
- شکل ۲-۳: منطقه ی اول بریلوئن در گرافین ۴۰
- شکل ۳-۱: شبکه ی خطی با وجود یک اتم در سلول پایه ۶۱
- شکل ۴-۱: یک اتم کربن و نزدیکترین همسایه های آن ۶۶
- شکل ۴-۲: ناحیه اول بریلوئن ۶۸
- شکل ۴-۳: آرایش لایه های گرافین در حالت AB ۶۹
- شکل ۴-۴: آرایش لایه های گرافین در حالت AA ۶۹
- شکل ۴-۵: آرایش AAA شکل ۴-۶: آرایش ABC ۷۰
- شکل ۴-۷: آرایش ABA ۷۰
- شکل ۴-۸: آرایش لایه های گرافین در حالت AAAA ۷۲
- شکل ۴-۹: آرایش لایه های گرافین در حالت ABAB ۷۳
- شکل ۴-۱۰: ساختار شبکه بورون نیتراید و بردارهای شبکه مستقیم ۷۴
- شکل ۴-۱۱: آرایش G-B ۷۸
- شکل ۴-۱۲: وضعیت قرار گرفتن لایه های گرافین و بورون نیتراید در دو آرایش مختلف ۷۹
- شکل ۴-۱۳: وضعیت قرار گرفتن لایه های گرافین و بورون نیتراید در دو آرایش مختلف ۸۰
- شکل ۴-۱۴: وضعیت قرار گرفتن لایه های گرافین و بورون نیتراید در دو آرایش مختلف ۸۱
- شکل ۴-۱۵: آرایش لایه های گرافین و بورون نیتراید در حالت B-G-B-G ۸۲

فهرست نمودارها

- نمودار ۱-۳: نمایش نقاط تکینه ۵۹
- نمودار ۲-۳: بادر نظر گرفتن مقدار کوچک نقاط تکینه حذف می شوند ۵۹
- نمودار ۱-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای یک لایه گرافین ۸۵
- نمودار ۲-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای دولایه گرافین (AA) ۸۶
- نمودار ۳-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای دولایه گرافین (AB) ۸۶
- نمودار ۴-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای سه لایه گرافین (AAA) ۸۷
- نمودار ۵-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای سه لایه گرافین (ABA) ۸۷
- نمودار ۶-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای سه لایه گرافین (ABC) ۸۸
- نمودار ۷-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای چهار لایه گرافین (AAAA) ۸۸
- نمودار ۸-۵: حالتها بر حسب انرژی برای چهار لایه گرافین (ABAB) ۸۹
- نمودار ۹-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های A و AA و AAA و AAAA در گرافین ۸۹
- نمودار ۱۰-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های A و AB و ABA و ABAB در گرافین ۹۰
- نمودار ۱۱-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های A و ABC در گرافین ۹۱
- نمودار ۱۲-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای یک لایه بورون نیتراید ۹۱
- نمودار ۱۳-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای دولایه بورون نیتراید (AA) ۹۱
- نمودار ۱۴-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای دولایه بورون نیتراید (AB) ۹۲
- نمودار ۱۵-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای سه لایه بورون نیتراید (AAA) ۹۲
- نمودار ۱۶-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای سه لایه بورون نیتراید (ABA) ۹۳
- نمودار ۱۷-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای سه لایه بورون نیتراید (ABC) ۹۳
- نمودار ۱۸-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای چهار لایه بورون نیتراید (AAAA) ۹۴
- نمودار ۱۹-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای چهار لایه بورون نیتراید (ABAB) ۹۴
- نمودار ۲۰-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های A و AA و AAA و AAAA در بورون نیتراید ۹۵
- نمودار ۲۱-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های A و AB و ABA و ABAB در بورون نیتراید ۹۵
- نمودار ۲۲-۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های A و ABC در بورون نیتراید .. ۹۶

- نمودار ۵-۲۳: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای آرایشی از یک لایه بورون نیترایدویک لایه گرافین (AA) ۹۶
- نمودار ۵-۲۴: چگالی حالت بر حسب انرژی برای برای آرایشی از یک لایه بورون نیترایدویک لایه گرافین (AB) ۹۷.....
- نمودار ۵-۲۵: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای برای آرایشی از سه لایه بورون نیترایدو گرافین (AAA) . ۹۷
- نمودار ۵-۲۶: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای آرایشی از سه لایه بورون نیترایدو گرافین (ABA) ۹۸
- نمودار ۵-۲۷: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای آرایشی از سه لایه بورون نیترایدو گرافین (ABC) ۹۸
- نمودار ۵-۲۸: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای آرایشی از چهار لایه بورون نیترایدو گرافین (AAAA) .. ۹۹
- نمودار ۵-۲۹: چگالی حالتها بر حسب انرژی برای چهار لایه بورون نیترایدو گرافین (ABAB) ۹۹
- نمودار ۵-۳۰: چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های (A و AA و AAA و AAAA) از بورون نیترایدو گرافین ۱۰۰
- نمودار ۵-۳۱: چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های A و AB و ABA و ABAB از گرافین و بورون نیتراید ۱۰۰
- نمودار ۵-۳۲: چگالی حالتها بر حسب انرژی در یک نمودار برای آرایش های A و ABC از گرافین و بورون نیتراید ۱۰۱

پیشگفتار :

علم نانو یا ساختارهای ریز یکی از برجسته ترین علوم نوین دنیا است. گرافین صفحه ای به ضخامت یک اتم می باشد و دارای ساختار لانه زنبوری (شش ضلعی) است. از زمان ساخت گرافین در سال ۲۰۰۴ به دلیل ویژگی های الکترونی استثنایی و با توجه به ویژگی انتقال بالستیک بار به وسیله گرافین در کاربردهای نانو الکترونیک بسیار مورد توجه قرار گرفته است. به دلیل مشابهت های ساختاری گرافین و بورن نیتراید ، ساختار باند آنها می تواند منجر به خواص جالبی در سیستم های مرکب از این دو شود. با محاسبه چگالی حالت ها و بررسی آن می توان درباره خواص مواد یاد شده از لحاظ رسانایی یا نارسانایی اظهار نظر نمود، ضمناً می توان چگالی حالت بدست آمده را در گامهای بعدی برای بررسی رسانندگی گرمایی و الکتریکی این مواد در صورت حضور یا عدم حضور میدان های الکتریکی و مغناطیسی مورد استفاده قرارداد.

فصل (۱)

مقدمه ای بر نانو ساختارهای کربنی و بورون
نیتراید

۱-۱ فناوری نانو

در دودده اخیر فناوری نانو بسیار مورد توجه قرار گرفته است. فناوری نانو یک روش مناسب برای ساخت و سر هم بندی ساختارهای کارآمد دارای حداقل یک بعد نانومتری است. چنین ساختارهایی به دلیل اندازه اشان دارای خصوصیات و رفتارهای شیمیائی و فیزیکی متفاوت از توده و در بعضی از موارد بهبود یافته هستند. وقتی که ابعاد در محدوده میان اتم ها و مواد توده ای یعنی 10^{-9} تا 10^{-7} یعنی (۱-۱۰۰) نانو متر قرار گیرند، اشیاء اغلب رفتار فیزیکی بسیار متفاوتی نسبت به اتم ها و مواد توده ای از خود نشان میدهند. خصوصیات مواد در مقیاس نانو را نمی توان ضرورتاً با توجه به ویژگیهای مواد در مقیاسهای بزرگتر پیش بینی کرد. تغییرات مهم در رفتار مواد نه تنها در اثر تغییرات مداوم رفتاری مواد در اندازه کوچک، بلکه بواسطه ظهور پدیده های جدید ایجاد میشوند. اگر بتوانیم اندازه و شکل را کنترل کنیم، خواهیم توانست خصوصیات مواد و عملکرد قطعاتی را که هم اکنون میسازیم بهبود دهیم. ساخت، ترکیب و مجتمع سازی چنین قطعاتی در مقیاس نانو، انقلابی در علم و فناوری ایجاد می کند تا ما بتوانیم اصول و خصوصیات پنهان آنها را کشف کرده و به کار گیریم. فناوری نانو، به دلیل گسترده بودن بر طیف وسیعی از فعالیت ها و فناوری ها تاثیر داشته و اهمیت زیادی در پیشرفت بخشهای مختلف دارد. پیوند علوم مواد، فیزیک، شیمی و علوم مهندسی در حوزه نانو تکنولوژی، عرصه ای را بوجود می آورد که ماشین آلات و محصولات خود آراینده از اتمهای اولیه ارزان ساخته شوند. نانو تکنولوژی، ساخت ابزارهای مولکولینوین و منحصر به فرد را با بکارگیری خواص شیمیایی کاملاً شناخته شده اتمها و مولکولها (نحوه پیوند آنها به یکدیگر) ارائه میدهد. مهارت مورد نظر در این تکنولوژی، دستکاری اتمها بطور جداگانه و جای دادن دقیق آنها در مکانی است که برای رسیدن به ساختار دلخواه و ایده آل مورد نیاز میباشد. این قابلیت تقریباً حاصل شده است. بازده پیشبینی شده از تسلط بر این تکنولوژی بسیار فراتر از موفقیتهایی است که تاکنون انسان بدانها نائل گشته است. بدین ترتیب انسان در معرض یک انقلاب تسریع شده و قدرتمند ناشی از علم نانو تکنولوژی است. بیش از ۴۰ سال پیش بود که ریچارد فینمن تکنولوژیای را تجسم کرد که با نهایت استفاده از جعبه ابزار طبیعت، اجسام را اتم به اتم یا مولکول به مولکول می ساخت در دو دهه اخیر شاهد اولین جرقه های این تجسم بوده ایم و برخی نوآوری ها و کشفیات کلیدی در این مدت مشاهده شده اند، مثلاً میکروسکوپ تونلی روبشی^۱ که می تواند تصویری از یک اتم منفرد به ما بدهد و با مهارت آن را

1-Scanning tunneling microscopy

کنترل کند و یا خانواده‌های از مولکولها نظیر فولرین ها و نانولوله های کربنی که خواص منحصر به فردی دارند را تصویرسازی کرده و خواصشان را کنترل نماید. اگر تمامی اهداف مطرح شده برای علم نانو تکنولوژی برآورده شوند، یک پایه تکنولوژیکی جدید پدید خواهد آمد که اثرات اجتماعی و اقتصادی اساسی خواهد داشت کلید تکنولوژی تنها در دانش آن نیست، بلکه در ترکیب دانش و مهندسی می باشد. بی تردید رشد و توسعه هر فناوری جدید نیازمند اطلاعات امیدوارکننده از چشم انداز اقتصادی آن می باشد. هیچ فناوری جدیدی بدون امید به آینده ای روشن و بطور مشخص بدون امید به سودآوری نمی تواند مورد اقبال و توجه قرار گیرد فناوری نانو نیز از این قاعده مستثنی نیست، لذا سرمایه گذاران و منابع مالی تا وقتی که از سودآوری سرمایه های خود مطمئن نشوند به سرمایه گذاری در فناوری نانو نخواهند پرداخت و واضح است که توسعه بدون سرمایه گذاری معنی ندارد. در همین راستا، علی رغم مشکلات بسیار زیادی که برای برآورد بازارهای فعلی و تخمین بازارهای آینده محصولات فناوری نانو وجود دارد، برخی از شرکتهای اقتصادی مطالعات گسترده ای در این زمینه انجام داده و ارقامی را ارائه نموده‌اند که همگی موید گسترش شگفت انگیز این بازار است معروفترین این ارقام، پیش بینی بازار سالانه ۱۰۰۰ میلیارد دلاری برای فناوری نانو در سالهای ۲۰۱۱ تا ۲۰۱۵ توسط بنیاد ملی علوم آمریکا است.

جدول شماره ۱-۱: برآورد بازارهای جهانی نانو در سال های اخیر

منبع	تخمین بازار جهانی	سال
German government(2001);CORDIS,1999	۳۱ تا ۵۵ میلیارد پوند	۲۰۰۱
Evolution capital,UK,2001	۱۰۵ میلیارد پوند	۲۰۰۵
US Nano Business Alliance,US,2001	۵۰۰ میلیارد پوند	۲۰۰۸
US Government(2001); Evolution capital,UK,2001	۷۰۰ میلیارد پوند	۲۰۱۰
US NSTC NSET sub-committee,2001	بیش از ۱۰۰۰ میلیارد دلار	۲۰۱۱-۲۰۱۵

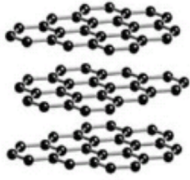
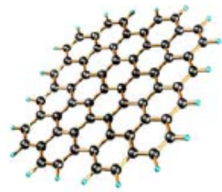

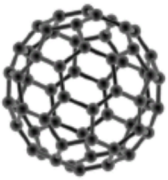
در پایان هر چند به درستی نمی توان بازار فناوری نانو را پیش بینی کرد. اما اطلاع یافتن از بزرگی این بازار و قابلیت‌های عملی آن برای سرمایه گذاران بسیار حیاتی است و بر اهمیت روزافزون مشارکت در این حوزه جدید از فناوری دلالت می کند.

۱-۲ نانو ساختارهای کربن^۱

کربن ششمین عنصر جدول تناوبی و اولین عنصر از گروه (IVA) است. کربن به صورت مشخص یک نافلز است و بیشتر به صورت ترکیب در زغال سنگ، گاز طبیعی، کانی های کربنات دار مانند سنگ آهک

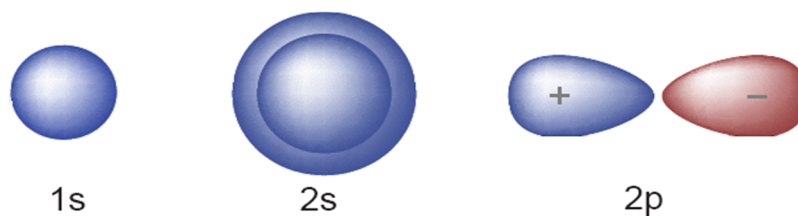
1 -Carbon allotropes

وهمچنین در موجودات زنده گیاهی و حیوانی وجود دارد. این عنصر به صورت طبیعی در الماس و گرافیت یافت می شود. کربن نسبتاً کم اثر بوده بطوری که در طبیعت به حالت آزاد بسیار فراوان است. عنصر کربن در طبیعت به اشکال مختلفی موجود است از جمله این اشکال می توان به گرافیت (از چندلایه های گرافین تشکیل شده است)، الماس، دوده (کربن بی شکل یا آمورف)، فولرین و نانولوله ها اشاره کرد [۱].

3D	graphite	sp^2	$\sigma, \pi, \text{van der Waals}$	
2D	graphene	sp^2	σ, π	
1D	CNTs	sp^2 (deformed)	more σ , less π	
0D	fullerenes	sp^2 (deformed)	more σ , less π	

شکل ۱-۱: الکترونیهای کربن

یک اتم کربن منفرد دارای آرایش الکترونی $1s^2 / 2s^2 2p^2$ است. که شکل اوربیتالهای $1s, 2s, 2p$ به صورت شکل (۱-۳) می باشد.



شکل ۲-۱: اوربیتالهای $1s$ و $2s$ و $2p$