بسم الله الرحمن الرحيم
الحمد لله رب العالمين الرحمن الرحيم مالك يوم الدين
اهدنا الصراط المستقيم صراط الذين أنعمت عليهم غير المغضوب عليهم ولا الضالين

دانشگاه کاشان
دانشکده فیزیک
گروه فیزیک ماده چگال

پایان‌نامه

جهت اخذ درجه دکتری
در رشته فیزیک ماده چگال

عنوان:

محاسبه‌ی ابتدا به ساکن طیف فونونی، خواص مکانیکی و گرمایی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره‌ی خالص و آلاییده با اتم کبالت

استاد راهنما:
دکتر بهرام خوشنویسان
استاد مشاور:
دکتر فرامرز کنجوری

توسط:
حسن تشکری

خرداد ۱۳۹۳

بسمه تعالی

تاریخ:
شماره:
پیوست:

دانشگاه کاشان
دانشکده فیزیک

فرم مربوط به نتیجه برگزاری امتحان دفاع از پایان‌نامه دانشجو
مخصوص دانشجویان دوره دکتری Ph.D.

امتحان دفاع از پایان‌نامه **آقای حسن تشکری** دانشجوی دوره **دکتری** رشته **فیزیک** گرایش **ماده چگال** روز **دوشنبه** مورخ **۹۳/۰۳/۰۵** ساعت **۱۸:۰۰** در سالن **کنفرانس دانشکده علوم** با حضور هیئت داوران تشکیل و نظرات کلی آن‌ها که در فرم صورتجلسه دفاع از پایان‌نامه دکتری نامبرده منعکس شده در جدول زیر مندرج گردید.

اعضاء هیأت داوران

عنوان	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱. استاد راهنما :	دکتر بهرام خوشنویسان	دانشیار	
۲. استاد مشاور :	دکتر فرامرز کنجوری	استادیار	
۳.متخصصان وصاحب نظران داخل دانشگاه :	دکتر سید احسان روزمه	استادیار	
	دکتر ابراهیم حیدری	استادیار	
٤.متخصص وصاحب نظر خارج از دانشگاه:	پروفسور محمود رضایی رکن‌آبادی	استاد	
۵. نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه :	دکتر سید حسین رسا	استادیار	

با توجه به جمع بندی نظرات فوق پایان‌نامه **آقای حسن تشکری**

با نمره **به عدد:** ۱۹/۵۴

به حروف: نوزده و نیم و چهار صدم

و درجه عالی ☑ بسیار خوب ○ خوب ○ قابل قبول ○ غیرقابل قبول کمتر از ○ اعلام می‌گردد.

محمد رضا منصورنیا
مدیر تحصیلات تکمیلی

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
مدیریت تحصیلات تکمیلی و استعدادهای درخشان

آدرس: کاشان- بلوار قطب راوندی
کدپستی ۸۷۳۱۷-۵۱۱۶۷
تلفن ۵۵۵۲۹۲۵- دورنگار ۵۵۵۲۹۲۵
http : www.kashanu.ac.ir

برگ سبزی است تحفه درویش

تقدیم به

خانواده عزیزم

به ویژه «همسر و دختر مهربانم»

پدر خانم، مادر خانم، دوستان، برادران و خواهران عزیزم.

و با ذکر یادی از پدر و مادر مرحومم که همیشه در قلبم زنده هستند.

تشکر و قدردانی

سر بر آستان جلال پروردگار بی همتا می سایم که دگر بار توفیق اندوختن دانشی هر چند اندک را به من عطا فرمود.

اعتراف می کنم که نه زبان شکر تو را دارم و نه توان تشکر از بندگان تو...

در این جا بر خود لازم می دانم از تمامی اساتید بزرگوارم که در طول تحصیل مرا در کسب علم و معرفت و فضائل اخلاقی یاری نموده اند، تقدیر و تشکر نمایم.

از اساتید گرانقدر و بزرگوارم جناب آقای **دکتر بهرام خوشنویسان** و جناب آقای **دکتر فرامرز کنجوری** که به ترتیب مسؤلیت راهنمایی و مشاوره این جانب را در انجام تحقیق، پژوهش و نگارش این پایان نامه تقبل نموده اند، نهایت تشکر و سپاس گزاری را دارم.

بر خود لازم می دانم تا به رسم ادب از اساتید بزرگوار جناب آقای **پروفسور رضایی رکن آبادی**، جناب آقای **دکتر روزمه** و جناب آقای **دکتر حیدری** که قبول زحمت نموده و پایان نامه این جانب را مطالعه و داوری فرمودند، نهایت تشکر و قدردانی را داشته باشم.

در پایان از جناب آقای **دکتر رسا** که به عنوان نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه قبول زحمت نموده اند، سپاس گزاری می نمایم.

چکیده

به‌وسیله‌ی نظریه تابعی چگالی اختلالی، پاشندگی فونونی، چگالی حالت‌های فونونی، ظرفیت گرمایی ویژه و خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره باریک (دسته‌صندلی و زیگزاگ) با استفاده از شبه پتانسیل فوق نرم محاسبه شده‌است. بر اساس محاسبات انجام شده، گرچه مدول یانگ همه‌ی نانولوله‌ها از مرتبه‌ی ۱TPa است اما نانولوله‌های دسته‌صندلی دارای مدول یانگ تراکمی بزرگ‌تر، در حالی‌که نانولوله‌های زیگزاگ دارای مدول یانگ کششی بزرگ‌تری هستند. ظرفیت گرمایی ویژه نانولوله‌های کربنی باریک مستقل از کایرالیتی است و با افزایش شعاع کاهش می‌یابد، در حالی‌که برای نانولوله‌های کربنی پهن چنین نیست. همچنین وابستگی فرکانس مد تنفسی نانولوله‌های کربنی باریک به کایرالیتی مشاهده می‌شود.

در تحقیق حاضر برای محاسبه‌ی اثر ناخالصی، یک اتم کبالت در مرکز یک یاخته بسیط نانولوله‌ی کربنی (۰و۵)، در نظر گرفته می‌شود. محاسبات انجام گرفته نشان می‌دهد که نانولوله‌ی کربنی خالص (۰و۵) نامغناطیده است در حالی‌که نانولوله‌ی کربنی آلاییده (۰و۵) مغناطیده می-باشد. مدول یانگ هر دو نانولوله از مرتبه ۱TPa است. نانولوله‌ی آلاییده (۰و۵) دارای مدول یانگ بزرگ‌تری است در حالی‌که نانولوله‌ی خالص (۰و۵) دارای ضریب پواسون بزرگ‌تری است. مد تنفسی به‌دست آمده از محاسبات فونونی توافق خوبی با مقدار تجربی دارد. وجود ناخالصی کبالت باعث افزایش فرکانس مد تنفسی شده‌است. همچنین می‌توان نتیجه گرفت که افزودن ناخالصی کبالت به نانولوله موجب کاهش ظرفیت گرمایی دستگاه می‌شود که این امر می تواند به کاربردهای عملی مهمی منجر گردد.

کلمات کلیدی: ۱) نظریه تابعی چگالی اختلالی ۲) کایرالیتی ۳) چگالی حالت‌های فونونی ۴) مدول یانگ ۵) مد تنفسی شعاعی ۶) ضریب پواسون ۷) طیف فونونی ۸) نانولوله‌ی کربنی تک‌دیواره ۹) ظرفیت گرمایی

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

پیش‌گفتار ۱

فصل۱ نظریه تابعی چگالی، تابعی چگالی اختلالی و دینامیک شبکه ۱۱

۱-۱. مقدمه ۱۱

۱-۲. مطالعه کوانتومی دستگاه‌های بس‌ذره‌ای ۱۳

۱-۳. تقریب بورن اوپنهایمر ۱۴

۱-۴. معادله شرودینگر بس‌الکترونی ۱۵

۱-۵. نظریه تابعی چگالی(DFT) ۱۶

۱-۵-۱. قضایای هوهنبرگ- کوهن ۱۷

۱-۵-۲. رهیافت کوهن- شم ۱۹

۱-۶. نظریه تابعی چگالی اختلالی ۲۱

۱-۷. دینامیک شبکه ۲۲

۱-۷-۱. تابع چگالی حالت‌های فونونی $g(\omega)$ ۲۵

فصل۲ نظریه کوانتومی ارتعاشات شبکه و بررسی خواص مکانیکی و گرمایی ۲۷

۲-۱. دینامیک بلور و ارتعاشات شبکه ۲۸

۲-۱-۱. بلور یک بعدی تک اتمی ۲۸

۲-۱-۲. بلور یک بعدی دو اتمی ۳۰

۲-۱-۳. بلور سه بعدی تک اتمی ۳۴

۲-۲. فونون ۳۵

۲-۳. بررسی خواص دینامیکی، مکانیکی و گرمایی ۳۶

۲-۳-۱. ثابت کشسانی شبکه و فرکانس‌های فونونی ۳۷

۲-۳-۲. مدول حجمی و تراکم‌پذیری ۴۷

۲-۳-۳. خواص گرمایی ۴۹

۲-۳-۴. توصیف کوانتومی ارتعاشات شبکه با تقریب شبه هارمونیک(QHA) ۵۲

فصل۳ تاثیر شعاع و کایرالیتی بر طیف فونونی، خواص مکانیکی و گرمایی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره‌ی باریک ۵۶

۳-۱. مقدمه ۵۶

۳-۲. روش محاسباتی ۵۸

۳-۳. تاثیر کایرالیتی بر طیف فونونی، خواص مکانیکی و گرمایی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره‌ی تقریباً هم قطر ۶۰
۳-۳-۱. خواص فونونی ۶۰
۳-۳-۲. خواص مکانیکی ۶۵
۳-۳-۳. خواص ترمودینامیکی ۶۸
۳-۴. تاثیر شعاع و کایرالیتی بر طیف فونونی، خواص مکانیکی و گرمایی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره‌ی باریک ۶۹
۳-۴-۱. خواص فونونی ۶۹
۳-۴-۲. خواص مکانیکی ۷۷
۳-۴-۳. خواص ترمودینامیکی ۸۷
۳-۵. نتیجه‌گیری ۹۰

فصل۴ تاثیر ناخالصی کبالت بر طیف فونونی، خواص مکانیکی و گرمایی نانولوله‌ی کربنی تک‌دیواره‌ی (۵،۰) ۹۳
۴-۱. مقدمه ۹۳
۴-۲. خواص فونونی ۹۴
۴-۳. خواص مکانیکی ۹۹
۴-۴. خواص ترمودینامیکی ۱۰۳
۴-۵. نتیجه‌گیری ۱۰۴

فصل۵ نتیجه‌گیری ۱۰۵
۵-۱. نتیجه‌گیری نهایی ۱۰۵
۵-۲. پیشنهادهایی برای ادامه تحقیق ۱۰۸
پیوست الف : مقایسه‌ی خواص مکانیکی و گرمایی نانولوله‌های کربنی (۳،۳) و (۵،۰) ۱۱۰
پیوست ب : فایل‌های مورد نیاز برای محاسبه‌ی خواص فونونی نانولوله‌ی کربنی (۵،۰)..... ۱۱۳
مراجع ۱۲۰

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

فصل۱ نظریه تابعی چگالی، تابعی چگالی اختلالی و دینامیک شبکه ۱۱

فصل۲ نظریه کوانتومی ارتعاشات شبکه و بررسی خواص مکانیکی و گرمایی ۲۷
شکل۲-۱. شبکه یک بعدی با پایه تک اتمی ۲۸
شکل۲-۲. منحنی پراکندگی فونونی شبکه یک بعدی با ثابت شبکه a ۲۹
شکل۲-۳. شبکه یک بعدی با پایه دو اتمی ۳۰
شکل۲-۴. منحنی پراکندگی فونونی شبکه یک بعدی با ثابت شبکه a ۳۲

فصل۳ تاثیر شعاع و کایرالیتی بر طیف فونونی، خواص مکانیکی و گرمایی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره‌ی باریک ۵۶
شکل۳-۱. ساختار نواری فونونی و چگالی حالت‌های فونونی نانولوله کربنی (۵و۵) ۶۱
شکل۳-۲. ساختار نواری فونونی و چگالی حالت‌های فونونی نانولوله کربنی (۹و۰) ۶۲
شکل۳-۳. مدهای آکوستیکی نانولوله کربنی (۹و۰) ۶۲
شکل۳-۴. نمودار انرژی بر حسب $S=\frac{1}{2}(L-L_0)^2$ برای نانولوله (۵و۵) راست) تراکمی چپ) کششی ۶۶
شکل۳-۵. نمودار انرژی بر حسب $S=\frac{1}{2}(L-L_0)^2$ برای نانولوله (۹و۰) راست) تراکمی چپ) کششی ۶۷
شکل۳-۶. نمودار ظرفیت گرمایی نانولوله‌های کربنی (۵و۵) و (۹و۰) بر حسب دما ۶۹
شکل۳-۷. ساختار نواری فونونی و چگالی حالت‌های فونونی نانولوله کربنی (۳و۰) ۷۰
شکل۳-۸. ساختار نواری فونونی و چگالی حالت‌های فونونی نانولوله کربنی (۳و۳) ۷۱
شکل۳-۹. ساختار نواری فونونی و چگالی حالت‌های فونونی نانولوله کربنی (۶و۰) ۷۱
شکل۳-۱۰. ساختار نواری فونونی و چگالی حالت‌های فونونی نانولوله کربنی (۶و۶) ۷۲
شکل۳-۱۱. تغییرات سرعت‌های آکوستیکی عرضی (TA)، پیچشی (TW) و آکوستیکی طولی نانولوله‌های کربنی بر حسب شعاع ۷۳
شکل۳-۱۲. تغییرات ضریب کشسانی نانولوله‌های کربنی دسته صندلی و زیگزاگ بر حسب شعاع ۷۴
شکل۳-۱۳. تغییرات ضریب کشسانی نانولوله‌های کربنی بر حسب شعاع ۷۵
شکل۳-۱۴. تغییرات مدهای تنفسی محاسبه شده و مدهای تنفسی تجربی نانولوله‌های کربنی بر حسب شعاع ۷۷
شکل۳-۱۵. نمودار انرژی بر حسب $S=\frac{1}{2}(L-L_0)^2$ برای نانولوله (۳و۰) راست) تراکمی چپ) کششی ۷۸
شکل۳-۱۶. نمودار انرژی بر حسب $S=\frac{1}{2}(L-L_0)^2$ برای نانولوله (۳و۳) راست) تراکمی چپ) کششی ۷۸
شکل۳-۱۷. نمودار انرژی بر حسب $S=\frac{1}{2}(L-L_0)^2$ برای نانولوله (۶و۰) راست) تراکمی چپ) کششی ۷۹
شکل۳-۱۸. نمودار انرژی بر حسب $S=\frac{1}{2}(L-L_0)^2$ برای نانولوله (۶و۶) راست) تراکمی چپ) کششی ۷۹
شکل۳-۱۹. تغییرات مدول یانگ نانولوله‌های کربنی بر حسب شعاع ۸۱
شکل۳-۲۰. تغییرات مدول یانگ تراکمی و کششی نانولوله‌های کربنی بر حسب شعاع ۸۲
شکل۳-۲۱. نمودار شعاع بر حسب طول یاخته بسیط نانولوله (۳و۰) ۸۳
شکل۳-۲۲. نمودار شعاع بر حسب طول یاخته بسیط نانولوله (۳و۳) ۸۳

شکل۳-۲۳. نمودار شعاع بر حسب طول یاخته بسیط نانولوله (۰و۶) ۸۴
شکل۳-۲۴. نمودار شعاع بر حسب طول یاخته بسیط نانولوله (۵و۵) ۸۴
شکل۳-۲۵. نمودار شعاع بر حسب طول یاخته بسیط نانولوله (۰و۹) ۸۵
شکل۳-۲۶. نمودار شعاع بر حسب طول یاخته بسیط نانولوله (۶و۶) ۸۵
شکل۳-۲۷. تغییرات ضریب پواسون نانولوله‌های کربنی بر حسب شعاع ۸۶
شکل۳-۲۸. نمودار ظرفیت گرمایی نانولوله‌های کربنی (۳و۳) و (۰و۶) بر حسب دما ۸۷
شکل۳-۲۹. نمودار ظرفیت گرمایی نانولوله‌های کربنی زیگزاگ بر حسب دما ۸۸
شکل۳-۳۰. نمودار ظرفیت گرمایی نانولوله‌های کربنی دسته صندلی بر حسب دما ۸۸
شکل۳-۳۱. نمودار ظرفیت گرمایی نانولوله‌های کربنی باریک بر حسب شعاع در a) ۷۷K b) ۳۰۰K ۸۹

فصل۴ تاثیر ناخالصی کبالت بر طیف فونونی، خواص مکانیکی و گرمایی نانولوله‌ی کربنی تک‌دیواره‌ی(۰و۵) ۹۳
شکل۴-۱. نانولوله کربنی (۰و۵) آلاییده با کبالت ۹۶
شکل۴-۲. ساختار نواری فونونی و چگالی حالت‌های فونونی نانولوله کربنی خالص (۰و۵) ۹۶
شکل۴-۳. ساختار نواری فونونی و چگالی حالت‌های فونونی نانولوله کربنی آلاییده‌ی(۰و۵) ۹۷
شکل۴-۴. نمودار انرژی بر حسب $S=\frac{1}{2}(L-L_0)^2$ برای نانولوله‌ی خالص (۰و۵) راست) تراکمی چپ) کششی ۱۰۰
شکل۴-۵. نمودار انرژی بر حسب $S=\frac{1}{2}(L-L_0)^2$ برای نانولوله‌ی آلاییده (۰و۵) راست) تراکمی چپ) کششی ۱۰۰
شکل۴-۶. نمودار شعاع بر حسب طول یاخته بسیط نانولوله‌ی خالص (۰و۵) ۱۰۲
شکل۴-۷. نمودار شعاع بر حسب طول یاخته بسیط نانولوله‌ی آلاییده (۰و۵) ۱۰۲
شکل۴-۸. ظرفیت گرمایی نانولوله‌های کربنی (۰و۵) خالص و آلاییده ۱۰۳

فصل۵ نتیجه‌گیری ۱۰۵

فهرست جدول‌ها

عنوان **صفحه**

فصل۱ نظریه تابعی چگالی، تابعی چگالی اختلالی و دینامیک شبکه ۱۱

فصل۲ نظریه کوانتومی ارتعاشات شبکه و بررسی خواص مکانیکی و گرمایی ۲۷

فصل۳ تاثیر شعاع و کایرالیتی بر طیف فونونی، خواص مکانیکی و گرمایی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره‌ی باریک ۵۶

جدول۳-۱. سرعت مدهای آکوستیکی ۶۳

جدول۳-۲. ضریب کشسانی ۶۴

جدول۳-۳. مدهای تنفسی ۶۵

جدول۳-۴. مدول یانگ ۶۷

جدول۳-۵. سرعت مدهای آکوستیکی ۷۲

جدول۳-۶. ضریب کشسانی ۷۴

جدول۳-۷. مدهای تنفسی ۷۶

جدول۳-۸. مدول یانگ ۸۰

جدول۳-۹. ضریب پواسون ۸۶

فصل۴ تاثیر ناخالصی کبالت بر طیف فونونی، خواص مکانیکی و گرمایی نانولوله‌ی کربنی تک‌دیواره‌ی(۰و۵) ۹۳

جدول۴-۱. سرعت مدهای آکوستیکی ۹۷

جدول۴-۲. مدهای تنفسی ۹۸

جدول۴-۳. مدول یانگ ۱۰۱

فصل۵ نتیجه‌گیری ۱۰۵

پیش‌گفتار

تاریخچه - در بسیاری از نوشته‌های علمی، «کشف نانولوله‌های کربنی» به سومیو ایجیما در سال ۱۹۹۱ نسبت داده می‌شود. اما واقعیت آن است که سال‌ها قبل از آن مطالبی در مورد کشف نانولوله‌ی کربنی مطرح شده بود. در سال ۱۹۹۷ بوهم در مقاله‌ی خود اشاره کرد که کشف نانولوله‌ی کربنی به سال‌ها قبل از کشف ایجیما برمی‌گردد[۱]. در سال ۱۹۵۲ رادوشکویچ و لوکوانویچ در مجله‌ی شیمی-فیزیک شوروی، تصویری از نانوله‌های کربنی با قطر ۵۰ نانومتر را به چاپ رسانده بودند[۲]. در سال ۱۹۷۶ اُبرلین، اندو و کویاما گزارشی مبنی بر تولید «تارهای نازک توخالی» در مقیاس نانومتر به روش رشد با تبخیر ارائه کردند[۳]. در سال ۱۹۸۱ جمعی از دانشمندان اتحاد جماهیر شوروی نتایج مشخصه‌یابی نانوذرات کربنی را ارائه کرده و با استفاده از تصاویر TEM و الگوی پراش XRD حدس زدند که با خم شدنِ لایه‌های گرافن، استوانه‌های چند لایه‌ای تولید شده‌اند[۴]. در سال ۱۹۹۱ ایجیما در حالی که مشغول مطالعه نشست مواد بر روی کاتد، به هنگام ساخت فلورن‌ها به روش تخلیه قوس الکتریکی بود، موفق به مشاهده‌ی نانولوله‌های کربنی (به شکل چندین لوله هم‌محور) شد[۵]. کار بر روی نانولوله‌های کربنی ادامه داشت تا این‌که دو سال بعد نانولوله‌های تک دیواره توسط همین گروه کشف شدند[۶]، که پیشرفت بسیار بزرگی در ساخت نانولوله‌های کربنی محسوب می‌شد. در حالی که نانولوله‌های چند دیواره دارای قطری به اندازه چند ده نانومتر هستند نانولوله‌های تک دیواره دارای قطری برابر با یک تا دو نانومتر می‌باشند. در روش‌های متداول تولید نانولوله‌های کربن، تنها نانولوله‌های

چند دیواره تشکیل می‌شوند. برای تولید نانولوله‌های کربن تک‌دیواره، از افزودن فلزاتی مانند کبالت به الکترود گرافیتی استفاده می‌شود. ساخت نانولوله‌های تک‌دیواره، امکان آزمایش برخی از نظریه‌های موجود را فراهم آورده‌است. روش دیگری برای ساخت نانولوله‌های کربن تک‌دیواره در سال ۱۹۹۶ توسط اسمالی و همکارانش ارائه گردید[۷]. این روش شامل تبخیر به‌وسیله لیزر بود. در این روش نانولوله‌های منظم به‌صورت گروهی تولید می‌شوند (کلافی از نانولوله‌های تک دیواره در یک شبکه شش ضلعی منتظم).

روش ساخت نانولوله‌های کربنی - برای اولین بار نانولوله‌های کربنی توسط روش تخلیه قوس الکتریکی به هنگام رشد فلورن، رشد یافتند. در حال حاضر روش‌های مختلفی برای تولید آنها به‌کار گرفته می‌شود. از جمله‌ی آنها روش تبخیر لیزری[۸] و روش رسوب بخار شیمیایی[۹] است. در روش-های تولید نانولوله‌های کربنی، بسته به شرایط حاکم بر دستگاه، شکل‌های مختلفی از نانولوله‌ها رشد می‌یابند. نانولوله‌های تک دیواره به صورت دسته و یا به صورت تک نانولوله هستند. علاوه بر نانولوله‌های تک دیواره، نانولوله‌های کربنی چند دیواره نیز تولید می‌شوند. این نانولوله‌ها شامل ۲ تا ۳۰ نانولوله هم‌محور، با قطرهای متفاوت هستند که فاصله هر دو دیواره از یکدیگر ۳/۴۱Å است.

استحکام نانولوله‌ها - نانولوله‌های کربنی با خصوصیات هندسی مختلف دارای خواص فیزیکی متفاوتی هستند. نانولوله‌های کربنی دارای استحکام کششی بالایی بوده و از این لحاظ به‌عنوان مقاوم‌ترین ماده، شناخته شده‌اند. این استحکام به دلیل پیوندهای کوالانسی sp^2 بین اتم‌های کربن است. در سال ۲۰۰۰ یک نانولوله کربنی چند دیواره مورد آزمایش قرار گرفت و مشاهده شد که دارای استحکام کششی ۶۳ گیگا پاسکال است[۱۰].

خواص الکترونی - اخیراً با مطالعه تئوری بر روی خواص الکترونی نانولوله‌های تک‌دیواره کربنی، پیش‌بینی شده‌است که این نوع از نانولوله‌ها بسته به پارامترهای ساختاری‌شان می‌توانند فلز یا نیم‌رسانا باشند[۱۱-۱۳].

مدل بستگی قوی در چارچوب رهیافت زون- فولدینگ تصویر تقریبی از ساختار نواری نانولوله‌های تک‌دیواره کربنی نزدیک سطح فرمی ارائه می‌کند. این مدل کاملاً اثرات هیبریدشدگی خاص sp^2 ناشی از انحنای نانولوله را نادیده می‌گیرد و این انحراف منجر به اختلاط نوارهای π و σ می‌شود، که این مسأله برای نانولوله‌هایی با قطر کوچک مهم است. محاسبات بستگی قوی نشان می‌دهد نانولوله‌های (n,m) با |n-m| که مضربی از ۳ است، نیم‌رساناهایی با گاف بسیار کوچک و نانولوله‌های دیگر نیم‌رساناهایی‌با گاف بزرگ هستند[۱۴]. محاسبات ابتدا به ساکن مبتنی بر نظریه‌ی تابعی چگالی با استفاده از شبه پتانسیل و تقریب چگالی موضعی برای برهم‌کنش تبادلی- همبستگی، نشان داده‌اند که اثرات هیبریدشدگی مضاعف می‌تواند در نانولوله‌هایی با شعاع کوچک اتفاق افتد که به‌طور قابل‌توجهی ساختار الکترونی آنها را تغییر می‌دهد[۱۵]. به‌علاوه در این نظریه یک نوار تبهگن منفرد در نانولوله‌های کربنی زیگزاگ (۰وn) با (۹و...وn=۶)، پایین‌تر از آنچه که توسط مدل بستگی قوی ارائه شده بود[۱۵]، پیش‌بینی شد. برای نانولوله‌ی (۰و۶) نوار مذکور نوار ظرفیت را قطع می‌کند و این به معنای فلز بودن نانولوله است. در مورد نانولوله‌ی (۰و۷) گاف نواری بسیار کوچک است، اما برای نانولوله‌ی (۰و۹) این گاف نواری نسبت به نتایج حاصل از تقریب بستگی قوی بیش‌تر است. از سوی دیگر محاسبات ابتدا به ساکن مبتنی بر نظریه‌ی تابعی چگالی نشان می‌دهد که برای نانولوله‌هایی با قطرهای بزرگتر از۱nm، اثرات هیبریدشدگی مضاعف مهم نیست.

در نانولوله‌های کربنی چند دیواره و کلافی از نانولوله‌های تک‌دیواره، تقارن کم‌تر نسبت به تقارن موجود در نانولوله‌های تک‌دیواره منفرد، منجر به ایجاد یا محو شدن گاف نواری می‌شود[۱۶, ۱۷].

کاربرد نانولوله‌ها در نانوالکترونیک - یکی از کاربردی‌ترین شاخه‌های نانوتکنولوژی، نانوالکترونیک است که با کوچک شدن ابعاد قطعات الکترونیکی علاوه بر افزایش سرعت پردازش، توان مصرفی آنها نیز کاهش می‌یابد.

نانوساختارهایی مانند نانولوله‌ها کاربرد زیادی در طراحی قطعات الکترونیکی دارند. نانولوله‌ها، ساختارهای یک بعدی نوینی برای انتقال بار و ترابرد الکترون هستند و از این‌رو اهمیت به‌سزایی در ساخت ابزارهای الکترونیکی و فوتونیکی مدرن ایفا می‌کنند.

نانولوله‌ها را به دلیل ساختار لوله‌ای شکل‌شان می‌توان به صورت گرافن لوله شده در نظر گرفت که بر اساس راستای چرخش صفحات دسته بندی می‌شوند و می‌توانند خاصیت فلزی یا نیم‌رسانایی از خود نشان دهند.

از دیگر خصوصیات نانولوله‌ها رسانایی گرمایی بسیار بالای آنها در راستای لوله است. در حالی که در جهت عمود بر لوله عایق هستند.

این ویژگی‌ها و همچنین ویژگی‌های دیگر باعث شده که نانولوله‌های کربنی در صنعت، قابلیت‌های کاربردی فراوانی داشته باشد. از کاربردهای صنعتی نانولوله‌ها می‌توان به استفاده در دیودها و ترانزیستورها و ساخت سلول‌های خورشیدی اشاره کرد.

آلایش نانولوله‌های کربنی - از آن‌جایی که خواص نانولوله‌های کربنی قویاً وابسته به دستگاه الکترونی جایگزیده می‌باشد، بدیهی است که هر تغییر و تبدیل (شیمیایی) بر خواص آنها تأثیر می‌گذارد. در نتیجه با انتخاب شایسته‌ی نوع تغییر و اصلاح، می‌توان خواص الکترونی و مغناطیسی یک نانولوله‌ی کربنی را به‌طور دلخواه میزان و تنظیم کرد. کنترل و تنظیم خواص الکترونی را می‌توان به روش آلایش نانولوله‌ی کربنی انجام داد.

ریخت‌شناسی نانولوله‌ها به این معنی است که احتمالات و امکانات زیادی در شیوه‌ی آلاییدن نانولوله-های کربنی و به موجب آن تغییر دادن خواص فیزیکی، الکترونی و مغناطیسی آنها وجود دارد.

مسیر طولانی توصیف خواص ترابرد الکترونی در نانولوله‌های تک‌دیواره (SWCNTs)، چند دیواره (MWCNTs) و در حالت خاص، نانولوله‌های آلاییده، در پیش روی محققین قرار دارد. ناخالصی‌ها بر خواص نانولوله‌های مورد استفاده در دستگاه‌های ترابرد الکترونی تأثیر زیادی داشته و می‌تواند منجر

به بهبود بازدهی آنها شوند. به عنوان مثال آلاییدن نانولوله‌های کربنی فرصت‌های بیشتری را در زمینه ترابرد در مقایسه با آلاییدن انبوهه‌ی نیم‌رساناهای متداول در اختیار پژوهشگران قرار می‌دهد. مکان‌های رسوب اتم‌های ناخالصی در نانولوله اغلب از نظر شیمیایی فعال‌ترین موقعیت‌ها هستند، و از آن‌جا که این مکان‌ها در تمام سطح قابل دسترس هستند، بنابراین خواص نانولوله‌های آلاییده بسیار تغییر می-کند[۱۸].

در دهه‌های اخیر خواص ویژه‌ی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره توجه بسیاری از شیمیدان‌های تحلیلی در زمینه‌ی حسگرهای الکتروشیمیایی را به خود جلب کرده‌است. بعضی از مولکول‌های زیستی توسط نانولوله‌های کربنی خالص جذب نمی‌شوند[۱۹]، لذا مطالعات تئوری و تجربی زیادی برای بهبود کارایی نانولوله‌های کربنی خالص به‌عنوان حسگر انجام شده و به این نتیجه رسیده‌اند که آلاییدن نانولوله این مشکل را بر طرف می‌سازد. از جمله‌ی این تحقیقات، ناخالص کردن نانولوله‌های تک‌دیواره‌ی کربنی با اتمهای نیتروژن و بور است که منجر به بهبود خاصیت حسگری نانولوله مذکور می‌شود[۲۰]. از دیگر کاربردهای نانولوله‌های آلاییده با نیتروژن می‌توان به امکان استفاده از آنها در جذب ناخالصی‌های سمی حل‌شده در آب، کادمیوم (Cd^{2+}) و فنول (phenol)، اشاره کرد[۲۱].

اخیراً رقابتی در یافتن روشی برای تفکیک نانولوله‌های کربنی فلز در دستگاه‌هایی شامل انواع مختلفی از نانولوله‌ها (فلز، نیمرسانا) به وجود آمده‌است. وارد کردن ناخالصی شیمیایی روشی مناسب برای کنترل ساختار نواری الکترونی نانولوله‌های کربنی می‌باشد و با توسعه‌ی روش‌های سنتز، انواع مختلفی از آنها ساخته شده‌است[۲۲, ۲۳]. از جمله‌ی این ناخالصی‌ها می‌توان به اتم‌های بور و نیتروژن اشاره کرد که گزینه‌ی مطلوبی برای آلاییدن نانولوله‌های کربنی فلزی بوده و منجر به مشاهده‌ی خاصیت نیم‌رسانایی در نانولوله‌های مذکور شده‌اند[۲۴].

می‌توان به نانولوله‌های کربنی برای ذخیره‌سازی هیدروژن امید داشت[۲۵, ۲۶]. ظرفیت بالای جذب هیدروژن توسط نانولوله‌های‌کربنی موضوع مطالعات بسیاری از محققان در این زمینه بوده‌است. طی

بررسی‌های انجام شده بر روی نانولوله‌های کربنی آلاییده با فلزهای قلیایی، افزایش ظرفیت جذب هیدروژن در این نانولوله‌ها نسبت به نانولوله‌های خالص گزارش شده‌است[۲۷].

به دلیل وجود خاصیت مغناطیسی ضعیف در نانولوله‌های کربنی خالص، آلاییدن آنها با اتم‌هایی که به نانولوله اسپین تزریق می‌کنند، باعث بهبود خواص مغناطیسی نانولوله و در نتیجه امکان استفاده از آنها در صنعت اسپینترونیک می‌شود. خواص ترابرد الکترونی نانولوله‌های کربنی آلاییده، به عنوان یک رسانای کوانتومی، هم به‌صورت تئوری[۲۸, ۲۹] و هم تجربی[۳۰, ۳۱] بررسی شده‌است. ترابرد اسپین قطبیده در یک نانولوله‌ی کربنی بستگی به پراکندگی الکترون- ناخالصی مغناطیسی دارد که جنبه‌های مختلف آن مطالعه شده‌است[۳۲-۳۷]. به‌عنوان مثال نشان داده شده است که حضور ناخالصی آهن در نانولوله-های کربنی دسته‌صندلی موجب پراکندگی قوی الکترون با یک جهت اسپین (بالا یا پایین) می‌شود[۳۶-۳۸].

به‌طور کلی آلاییدن نانولوله‌های کربنی با عناصر مختلف، دستاوردی امیدبخش برای کنترل خواص الکترونی، شیمیایی و مغناطیسی آنها و امکان استفاده مفیدتر در دستگاه‌های الکترونی و اسپینترونیک می‌باشد.

نانولوله‌های کربنی و کاهش ارتعاشات در سازه‌های مکانیکی - ارتعاش در همه جا وجود دارد و تقریباً همه چیز در حال ارتعاش است! در اکثر مواقع این ارتعاش به دلیل اتلاف انرژی و ایجاد صدای نامطلوب خوشایند نیست. بسیاری از سامانه‌های دینامیکی، در معرض حرکات ارتعاشی هستند که شدت حرکات ارتعاشی مذکور با نزدیک شدن به شرایط تشدید، بیشتر هم خواهد شد. وارد کردن میرایی به سامانه، منجر به تخفیف در لرزش‌ها و افزایش عمر خستگی قطعات سازه می‌شود. در حقیقت میرایی بالا از عوامل مهم طراحی اجزای ماشین‌ها و تجهیزات صنعتی و عامل بالقوه در بهبود مشخصه رصد کردن و نشانه‌گیری و دقت جنگ افزارها در سامانه‌های هوایی و زمینی است. بنابراین مهندسی قطعات

سازه‌ای با سطح بالایی از میرایی برای گستره وسیعی از کاربردها در سامانه‌های هوایی و مکانیکی ضروری به نظر می‌رسد.

با ظهور عرصه فناوری نانو و خواص منحصر بفرد نانومواد، امکان دستیابی به سختی و میرایی بالا توسط نانوکامپوزیت‌ها محقق شده است. نانولوله‌های کربنی دارای مدول یانگ بالا و استحکام کششی زیاد هستند، به همین دلیل گزینه‌ی خوبی برای به کارگیری به عنوان تقویت کننده در کامپوزیت‌ها به حساب می‌آیند.

کامپوزیت‌های تقویت شده با نانولوله‌های کربنی به خاطر کارایی و میرایی بالا، اخیراً مورد توجه بسیاری از محققین قرار گرفته‌اند[۳۹-۴۱]. میرایی بالای این نانولوله‌های کربنی به سبب اصطکاک بین ماده‌ی زمینه و نانولوله‌های کربنی و خود نانولوله‌ها است . ضریب میرایی این دستگاه بستگی به خواص جداگانه-ی ماده‌ی زمینه و نانولوله‌ها دارد. تغییر شکل ساختاری، کسر حجمی نانولوله‌ها و نیز تنش‌های برشی-بحرانی که در آنها لغزش‌های بین وجهی (بین سطحی) رخ می‌دهد، پارامترهایی هستند که با تعیین دقیق آنها می‌توان کامپوزیت‌های مبتنی بر نانولوله‌ی‌کربنی بهینه‌ای را از لحاظ میرایی تهیه کرد.

افزودن نانولوله‌های کربن به پلیمر موجب افزایش سختی، رسانش الکتریکی و استحکام برشی بین لایه‌ای کامپوزیت‌ها خواهد شد. به علاوه وجود نانولوله‌های کربن مقاومت در برابر خستگی و خزش را نیز افزایش می‌دهد. عمده کاربردهای این نانوکامپوزیت‌ها در مصارف نظامی و نیز هواپیماهای تجاری است که در آنها کاهش وزن نقش بسیار عمده‌ای را بازی می‌کند.

در مرجع[۴۲] کامپوزیت‌های تقویت شده با نانولوله‌های کربنی مورد بررسی قرار گرفته است. نشان داده شده است که درصد حجمی مختلف و نیز جهت‌گیری‌های مختلف نانولوله‌های کربنی تأثیر زیادی بر خواص مکانیکی و پاسخ‌های فرکانسی کامپوزیت دارند. با افزایش کسر حجمی از ۰٫۲۵٪ تا ۱۰٫۰٪، فرکانس کمترین مدها در حدود ۴۰۰٪ افزایش می‌یابد.

کاربرد نانولوله‌های کربنی برای طراحی نانوحسگرها - حسگرها در حوزه‌های مختلف علوم و مهندسی، مانند مسائل زیست‌محیطی، کنترل فرآیندهای شیمیایی، کاربردهای پزشکی، مسائل امنیتی و مواردی از این دست، نقش مهمی ایفا می‌کنند.

به منظور توسعه‌ی مواد و فنآوری‌های مربوط به حسگرها، مطالعات و تحقیقات گسترده‌ای برای بالا بردنِ حساسیت و سرعت پاسخ‌دهی، هزینه‌ی کمتر و بیشتر شدنِ قابلیت اطمینان آنها صورت گرفته‌است. در این راستا کوچک‌سازی ابعاد حسگرها از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است؛ زیرا کاهش ابعاد حسگرها حساسیت آنها را افزایش می‌دهد. همچنین با کوچک‌سازی آنها می‌توان تعداد بسیار بیشتری از حسگرها را در یک بسته‌ی کوچک به شکل مجتمع با عملکرد بالا قرار داد. به علاوه استحکام حسگرها در ابعاد کوچک بیشتر است. به همین دلیل نانوحسگرها مورد توجه بسیار از محققین علوم و مهندسی قرار گرفته است.

در سال‌های اخیر، استفاده از نانولوله‌های کربنی و ورقه‌های گرافن برای طراحی نانوحسگرها به خاطر قابلیتشان در فرکانس‌های بالا تا حد تراهرتز مورد توجه قرار گرفته است. به علاوه این مواد به سبب ابعاد کوچکشان حتی تعداد بسیار اندکی از اتم‌ها و مولکول‌ها در اطراف آنها می‌توانند فرکانس تشدیدی و سرعت امواج را در آنها تغییر دهند.

روش‌های طراحی نانوتشدیدگرها به دو گروه عمده تقسیم می‌شوند که اولین آن مبتنی بر ارتعاشات[۴۳-۴۵] و دیگری مبتنی بر انتشار موج می‌باشد[۴۶]. علاوه بر تلاش‌های آزمایشگاهی، که البته معمولا بسیار پر هزینه و با دشواری مواجه است، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی[۴۳-۴۵] و رهیافت‌های مکانیک محیط‌های پیوسته[۴۷-۵۲] نیز برای بررسی حسگرهای نانوتشدیدگر به کار می‌روند.

نخستین بار پانکارال و همکاران ایده‌ی استفاده از نانولوله‌های کربنی را به عنوان نانومیزان‌ها[1] با حساسیت بالا مطرح کردند[۵۳]. پنگ و همکاران به طور تجربی از نانولوله‌های کربنی با قطر سه و نیم نانومتر و طول سی‌صد نانومتر به عنوان حسگر جرم با حساسیت آتوگرم (g $۱۰^{-۱۸}$) در دمای اتاق استفاده کردند[۵۴]. آنها موفق شدند فرکانس‌های تشدید با فرکانس بیش از ۳/۱ گیگا هرتز را توسط نانولوله‌ها تولید کنند. به علاوه با کاهش ابعاد و استفاده از مواد پوششی این مقدار به بیش از ۱۰ گیگاهرتز افزایش یافت. لساگن و همکاران، با استفاده از نانوله‌های کربنی با قطر یک نانومتر و طول ۹۰۰ نانومتر، توانستند در دمای اتاق حسگرهای بسیار حساس جرم با دقت ۲۵ زپتوگرم (g ۲۵×۱۰^{-۲۱}) بسازند[۵۵]. در کار دیگری چیو و همکاران موفق شدند با نانولوله‌هایی به قطر یک و طول ۱۵۰ نانومتر، با اتم‌های جذب شده‌ی آرگون، حساسیت ۰/۰۶۶ زپتوگرم را تجربه کنند[۵۶]. همچنین حساسیت ۱/۷ یوکتوگرم (g $۱/۷\times۱۰^{-۲۴}$) یعنی معادل جرم یک پروتون، توسط کاست و همکاران گزارش شده است[۵۷].

از سوی دیگر فعالیت‌های زیادی نیز برای شبیه‌سازی رفتار نانولوله‌های کربنی صورت گرفته است. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به منظور به کارگیری در محاسبات مربوط به نانوساختارها تعمیم داده شده است. آرش و همکاران مطالعاتی را بر کاربرد نانولوله‌های تک دیواره به عنوان حسگرهای تشدیدگر برای آشکارسازی اتم‌های یک گاز نادر خاص با بررسی خواص ارتعاشی حسگرها با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی را آغاز کردند[۴۳]. آنها برای تعیین حساسیت حسگر، پارامتر $100(f_0 - f_{atoms})f_0$ را معرفی کردند که در آن f_0 و f_{atoms} به ترتیب فرکانس‌های تشدید نانو لوله‌ی کربنی در غیاب گاز و در حضور گاز هستند. این پارامتر درصد تغییر فرکانس را به خاطر حضور اتم‌های گاز نشان می‌دهد. آنها در محاسبات خود اثر گازهای هلیوم، نئون و کریپتون را بر نانولوله‌های کربنی (۸و۸) به طول ۴/۹۲ نانومتر با دو شرط مرزی یک سر آزاد و دوسر بسته بررسی کردند. نتیجه‌ی آشکارسازی اتم‌های هلیوم، نئون و

[1] Nanobalances