

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

تقدیم به

خانواده‌ی

عزیزم

پدر مهربان، مادر فداکار و خواهر و برادران عزیزم

به پاس زحمات جبران ناپذیرشان

پروردگارا ...

هیچ کس به پایان و نهایت شکرگزاری تو نمی رسد، مگر این که احسان و نیکی تو شکری دیگر را بر او واجب نماید و هر چه قدر در طاعت و فرمانبرداری تو کوشش کند، باز به خاطر فضل و احسان بی انتهای تو عاجز و ناتوان است.

خدایا، همیشه در لحظات سخت زندگی با خود می گویم: شاید این همان آزمایشی باشد که تو در پشت این پرده ی تاریک می خواهی تصویر زیبایی از زندگی برایم بسازی، پس ای خدا مرا به اندازه ی توانم بیازما و صبوری بیاموز.

به من کمک کن تا قبول کنم، تا دانسته هایم در مقابل دانش لایتناهی تو ندانستنی بیش نیست و بدانم که دانایی تو بیشتر از آنی است که من می دانم و آن همه راحتی به اندازه ی یک قطره جز به یاری تو، دانستن نمی توانم.

خدایا

هر آنکه تو را دارد، همه چیز دارد

و

هر آنکه تو را ندارد، هیچ ندارد.

سپاس گزاری...

سپاس خداوندی را که به من آموخت در لحظه های شادی شکرگزار باشم و فراموش نکنم، تمام داشته ها و دانسته هایم از لطف بی منت اوست و آموخت که در لحظه های اندوهم صبور باشم که همه ی غم ها رفتنی است و سربلند کسی است که مطیع تقدیر و حکمت الهی باشد.

اینک به پاس لطف الهی که پایان نامه ی حاضر، آماده شده است بر خود واجب می دانم از حمایت های بی دریغ، بذل توجه و مساعدت های استاد راهنمایم جناب آقای دکتر جهان بین و استاد مشاورم جناب آقای دکتر راستکار سپاس گزاری نمایم که در ارایه این پروژه بنده را یاری نمودند.

از جناب آقای دکتر قلعه اسدی، مدیر محترم گروه شیمی و از جناب آقای دکتر فیروزنیا که داوری پایان نامه ام را به عهده گرفتند، نهایت سپاس را دارم.

از خانواده ام که همواره مشوق اصلی من در مسیر علم و تحصیل بوده و تمام موفقیت هایم را مرهون زحمات بی دریغ ایشان بوده ام و بوسه می زنم بر دستان پدر و مادر عزیز و مهربانم که توانستم زیر سایه ی مهربانی و صبوری هایشان در راه کسب علم و دانش قدم بردارم.

از دوستان عزیزم که هیچ گاه مرا در لحظات سخت تنها نگذارند، سپاس گزارم.

وحیده نصیرزاده

شهریور ماه ۱۳۹۰

تبریز-ایران

چکیده

هدف از این تحقیق مطالعه‌ی برهم‌کنش مولکول‌های SO_2 با نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره خالص و آلاییده شده با اتم‌های بور و نیتروژن با استفاده از روش‌های *ab initio* می‌باشد. نتایج بدست آمده حاکی از این است که برهم‌کنش نانولوله‌های آلاییده شده با بور، با مولکول‌های SO_2 بزرگ‌تر از برهم‌کنش نانولوله‌های کربنی خالص و N-آلاییده شده با SO_2 می‌باشد. لذا این ترکیبات می‌توانند به عنوان پایه‌ای برای حسگرهای مناسب SO_2 پیشنهاد شوند.

کلمات کلیدی: نانولوله، *ab initio*، SO_2 ، انرژی جذب.

فصل اول	فهرست مطالب	صفحه
۱- مقدمه.....		۱
۱-۱- شاخه‌های نانو تکنولوژی.....		۲
۱-۱-۱- نانوذرات.....		۳
۱-۱-۱-۱- نانو ساختارها.....		۳
۱-۲-۱-۱- نانولوله کربنی.....		۳
۲-۱- ساختار نانولوله‌های کربنی.....		۴
۳-۱- اشکال مختلف یک نانولوله.....		۵
۱-۳-۱- نانولوله‌های کربنی تک دیواره.....		۶
۲-۳-۱- نانولوله‌های کربنی چند دیواره.....		۶
۴-۱- مقایسه‌ی نانولوله‌های تک دیواره و چند دیواره.....		۶
۵-۱- سمیت نانولوله‌های کربنی.....		۷
۶-۱- مزایای نانولوله‌های کربنی.....		۸
۷-۱- کاربرد نانولوله‌های کربنی.....		۹
۸-۱- نانولوله‌های کربنی آلائیده شده.....		۹
۹-۱- انواع اصلی آلائیدن.....		۱۰
۱-۹-۱- تغییر خواص در نانولوله‌های کربنی آلائیده شده.....		۱۱
۱۰-۱- پیشینه‌ی پژوهش.....		۱۲
۱-۱۰-۱- مطالعه‌ی جذب مولکول‌های گازی بر روی نانولوله‌های کربنی.....		۱۳
۱۱-۱- محاسبات نظری.....		۱۴
۱-۱۱-۱- نظریه‌ی تابعی چگالی محاسباتی.....		۱۷
۱-۱۱-۱-۱- نظریه‌ی تابعی چگالی توماس-فرمی.....		۱۷
۲-۱-۱۱-۱- معادلات کوهن-شم.....		۱۸
۲-۱۱-۱- تقریب‌های تابعی تبادلی-همبستگی.....		۱۹
۱-۲-۱۱-۱- تقریب چگالی موضعی.....		۲۰
۲-۲-۱۱-۱- تقریب چگالی اسپینی موضعی.....		۲۰
۳-۲-۱۱-۱- تقریب گرادیان تعمیم یافته.....		۲۰
۳-۱۱-۱- نحوه محاسبات کوهن-شم.....		۲۱
۴-۱۱-۱- روش‌های محاسبات در شیمی محاسبه‌ای.....		۲۱
۱-۴-۱۱-۱- مکانیک مولکولی.....		۲۱

۲۱	۱-۱۱-۴-۲- محاسبات نیمه تجربی.....
۲۲	۱-۱۱-۴-۳- محاسبات آغازین.....
۲۲	۱-۱۱-۴-۳-۱- روش نظریه‌ی تابعی چگالی.....
۲۳	۱-۱۲- هدف از پژوهش.....
۲۴	فصل دوم.....
۲۵	۲- مقدمه.....
۲۶	۱-۱-۲- انرژی همبستگی الکترون.....
۲۷	۲-۱-۱-۲- تابعی تصحیح گرادیانی GGA و تابعی‌های هیبریدی.....
۲۸	۲-۲- روش‌های محاسباتی و نحوه‌ی انتخاب تابعی‌های هیبریدی و الگوریتم‌های بهینه‌سازی.....
۲۹	۲-۳- محاسبات پارامترهای ساختاری SO ₂ : زاویه، طول پیوند و مرتبه پیوند آن.....
۲۹	۲-۴- محاسبه‌ی سطوح انرژی ساختارها.....
۲۹	۲-۵- محاسبه‌ی انرژی اتصال انواع سیستم‌های SO ₂ + نانولوله.....
۳۰	۲-۶- محاسبه‌ی فاصله‌ی تعادلی SO ₂ - نانولوله (d) بعد از بهینه‌سازی.....
۳۰	۲-۷- محاسبه‌ی زاویه‌ی تعادلی SO ₂ - نانولوله (Θ) بعد از بهینه‌سازی.....
۳۰	۲-۸- محاسبه‌ی اختلاف نوار HOMO-LUMO سیستم SWCNT+SO ₂ و نانولوله‌ی تنها.....
۳۰	۲-۹- محاسبه‌ی انتقالات بار از نانولوله به سولفوردی‌اکسید.....
۳۱	۲-۱۰- محاسبه‌ی گشتاورهای دوقطبی سیستم‌های بهینه شده‌ی SO ₂ تنها و SO ₂ + نانولوله.....
۳۱	۲-۱۱- محاسبه‌ی طیف‌های ارتعاشی ساختار SO ₂ و سیستم‌های SO ₂ + نانولوله.....
۳۳	فصل سوم.....
۳۴	۳- مقدمه.....
۳۴	۳-۱- نحوه‌ی انتخاب تابعی‌های هیبریدی و الگوریتم‌های بهینه‌سازی.....
۳۷	۳-۱-۱- نتیجه‌گیری.....
۳۸	۳-۲- نمایش اشکال سیستم‌های SO ₂ + نانولوله.....
۳۸	۳-۳- محاسبات پارامترهای ساختاری SO ₂ : زاویه، طول پیوند و مرتبه پیوند آن.....
۴۳	۳-۳-۱- نتیجه‌گیری.....
۴۴	۳-۴- بررسی پایداری سیستم‌ها.....
۴۵	۳-۴-۱- مقایسه پایداری سیستم‌ها.....
۴۵	۳-۴-۲- نتیجه‌گیری.....
۴۶	۳-۵- بررسی انرژی اتصال انواع سیستم‌های SO ₂ + نانولوله.....

۴۷	۳-۵-۱- مقایسه قدرت اتصال SO ₂ به سیستم‌ها.....
۴۷	۳-۵-۲- نتیجه‌گیری.....
۴۸	۳-۶- بررسی فاصله‌ی تعادلی SO ₂ -نانولوله (d) بعد از بهینه‌سازی.....
۴۹	۳-۶-۱- نتیجه‌گیری.....
۴۹	۳-۷- بررسی زاویه‌ی تعادلی SO ₂ -نانولوله (Θ) بعد از بهینه‌سازی.....
۵۱	۳-۷-۱- نتیجه‌گیری.....
۵۱	۳-۸- بررسی اختلاف نوار LUMO-HOMO سیستم SWCNT+SO ₂ و نانولوله‌ی تنها.....
۵۳	۳-۸-۱- مقایسه Δgap _(HOMO-LUMO) سیستم‌ها.....
۵۴	۳-۸-۲- نتیجه‌گیری.....
۵۴	۳-۹- بررسی انتقالات بار از نانولوله به سولفوردی‌اکسید.....
۵۶	۳-۹-۱- مقایسه انتقالات بار از نانولوله به مولکول سولفوردی‌اکسید در سیستم‌ها.....
۵۶	۳-۹-۲- نتیجه‌گیری.....
۵۶	۳-۱۰- بررسی گشتاورهای دوقطبی سیستم‌های بهینه شده‌ی SO ₂ تنها و SO ₂ +نانولوله.....
۵۷	۳-۱۰-۱- مقایسه گشتاورهای دوقطبی سیستم‌ها.....
۵۸	۳-۱۰-۲- نتیجه‌گیری.....
۵۸	۳-۱۱- بررسی طیف‌های ارتعاشی ساختار SO ₂ تنها و سیستم‌های SO ₂ + نانولوله.....
۶۰	۳-۱۱-۱- مقایسه فرکانس ارتعاشات سیستم‌ها.....
۶۰	۳-۱۱-۲- نتیجه‌گیری.....
۶۰	۳-۱۲- مولکول SO ₂ و ساختار آن.....
۶۲	۳-۱۳- چگالی الکترونی نانولوله‌های خالص و آلاینده‌شده با بور و نیتروژن.....
۶۵	نتیجه‌گیری.....
۶۶	پیشنهادات.....
۶۷	منابع و مآخذ.....

صفحه	فهرست اشکال
۴.....	شکل ۱-۱- افزایش انتشارات بر روی نانولوله‌ها در سال‌های اخیر.....
۵.....	شکل ۲-۱- نمایش دو قسمت متفاوت با خواص متفاوت.....
۵.....	شکل ۳-۱- نمایش شماتیک نانولوله‌ی تک دیواره (SWNT) و چند دیواره (MWNT) و معیوب.....
۶.....	شکل ۴-۱- نمایش سه بعدی انواع نانولوله‌های کربنی تک دیواره.....
۸.....	شکل ۵-۱- CNT های رسانا و نیمه رسانا.....
۱۰.....	شکل ۶-۱- انواع اصلی آلاییدن در مجموعه نانولوله‌های دودیواره.....
۱۱.....	شکل ۷-۱- چگالی حالات نانولوله کربنی صندلی شکل با بور و نیتروژن آلائیده شده.....
۱۳.....	شکل ۸-۱- مکان‌های جذبی مختلف مولکول‌های گازی بر روی نانولوله‌های تک‌دیواره.....
۱۳.....	شکل ۹-۱- برهم‌کنش مولکول‌های گازی متنوع بر روی نانولوله‌های کربن.....
۱۶.....	شکل ۱۰-۱- افزایش انتشارات بر روی مقالات DFT در سال‌های اخیر.....
۳۴.....	شکل ۱-۳- نمایش SO_2 تنها بعد از بهینه‌سازی.....
۳۹.....	شکل ۲-۳- نمایش SO_2 روی اتم کربن C_1 قبل (راست) و روی پیوند C_1-C_7 بعد (چپ) از بهینه‌سازی.....
۳۹.....	شکل ۳-۳- نمایش SO_2 روی مرکز شش ضلعی بالایی قبل (راست) و روی پیوند C_1-C_7 بعد (چپ) از بهینه‌سازی.....
۳۹.....	شکل ۳-۴- نمایش SO_2 روی مرکز پیوند $C_1 - C_5$ ، قبل (راست) و روی پیوند C_1-C_7 ، بعد (چپ) از بهینه‌سازی.....
۴۰.....	شکل ۳-۵- نمایش SO_2 روی اتم کربن متای N، قبل (راست) و روی اتم C_7 ، بعد (چپ) از بهینه‌سازی.....
۴۰.....	شکل ۳-۶- نمایش SO_2 روی اتم N قبل (راست) و روی همان اتم بعد (چپ) از بهینه‌سازی.....
۴۱.....	شکل ۳-۷- نمایش SO_2 روی مرکز شش ضلعی بالایی قبل (راست) و روی اتم C_2 بعد (چپ) از بهینه‌سازی.....
۴۱.....	شکل ۳-۸- نمایش SO_2 روی مرکز پیوند $C_2 - C_2$ اورتو- متای N قبل (راست) و روی اتم C_2 بعد (چپ) از بهینه‌سازی.....
۴۱.....	شکل ۳-۹- نمایش SO_2 روی اتم کربن C_2 متای B قبل (راست) و روی پیوند C_2-C_2 بعد (چپ) از بهینه‌سازی.....
۴۲.....	شکل ۳-۱۰- نمایش SO_2 روی اتم کربن C_5 متای دیگر B قبل (راست) و روی اتم C_5 بعد (چپ) از بهینه‌سازی.....
۴۲.....	شکل ۳-۱۱- نمایش SO_2 روی اتم کربن C_6 پارای B قبل (راست) و روی همان اتم بعد (چپ) از بهینه‌سازی.....
۵۳.....	شکل ۳-۱۲- طیف IR سیستم‌های SO_2 + نانولوله.....
۶۱.....	شکل ۳-۱۳- نمایش فرم‌های رزونانسی مولکول سولفور دی‌اکسید.....
۶۱.....	شکل ۳-۱۴- نمایش چگالی الکترونی مولکول سولفور دی‌اکسید.....
۶۲.....	شکل ۳-۱۵- نمایش سه‌بعدی چگالی الکترونی نانولوله‌ی خالص.....
۶۲.....	شکل ۳-۱۶- نمایش سه‌بعدی چگالی الکترونی نانولوله‌ی آلائیده‌شده با نیتروژن.....

- شکل ۳-۱۷- نمایش سه بعدی چگالی الکترونی نانولوله‌ی آلاییده شده با بور..... ۶۳
- شکل ۳-۱۸- نمایش دوبعدی چگالی الکترونی نانولوله‌ی خالص..... ۶۳
- شکل ۳-۱۹- نمایش سه بعدی چگالی الکترونی نانولوله‌ی آلاییده شده با نیتروژن..... ۶۴
- شکل ۳-۲۰- نمایش سه بعدی چگالی الکترونی نانولوله‌ی آلاییده شده با بور..... ۶۴

صفحه	فهرست جداول
۳۵	جدول ۳-۱-۱- پارامترهای ساختاری محاسبه شده مولکول SO_2 با تابعی RHF/B ³ LYP و اتم‌های O و S با تابعی UHF/B ³ LYP محاسبه‌ای.....
۳۶	جدول ۳-۱-۲- پارامترهای ساختاری محاسبه شده مولکول SO_2 با تابعی RHF/BLYP و اتم‌های O و S با تابعی UHF/BLYP محاسبه‌ای.....
۳۷	جدول ۳-۱-۳- پارامترهای ساختاری محاسبه شده مولکول SO_2 با تابعی RHF/SVWN و اتم‌های O و S با تابعی UHF/SVWN محاسبه‌ای.....
۴۰	جدول ۳-۳-۱- پارامترهای ساختاری تجربی و محاسبه شده مولکول SO_2 SWCNT+ SO_2 خالص با تابعی RHF/B ³ LYP و سری پایه‌ی ترکیبی $(6-311+G(3df))$ و $6-31G$ ای نانولوله.....
۴۱	جدول ۳-۳-۲- پارامترهای ساختاری تجربی و محاسبه شده مولکول SO_2 SWCNT+ SO_2 آلاییده‌شده با یک N با تابعی B ³ LYP/ROHF و سری پایه‌ی ترکیبی $(6-311+G(3df))$ و $6-31G$ ای نانولوله.....
۴۳	جدول ۳-۳-۳- پارامترهای ساختاری تجربی و محاسبه شده مولکول SO_2 SWCNT+ SO_2 آلاییده‌شده با یک B با تابعی B ³ LYP/ROHF و سری پایه‌ی ترکیبی $(6-311+G(3df))$ و $6-31G$ ای نانولوله.....
۴۴	جدول ۳-۴-۱- انرژی مولکول SO_2 SWCNT+ SO_2 خالص.....
۴۴	جدول ۳-۴-۲- انرژی مولکول SO_2 SWCNT+ SO_2 آلاییده‌شده با یک نیتروژن.....
۴۵	جدول ۳-۴-۳- انرژی مولکول SO_2 SWCNT+ SO_2 آلاییده‌شده با یک بور.....
۴۶	جدول ۳-۵-۱- انرژی‌های اتصال سیستم SO_2 SWCNT+ SO_2 خالص (بر حسب میلی الکترون ولت).....
۴۶	جدول ۳-۵-۲- انرژی‌های اتصال سیستم SO_2 SWCNT+ SO_2 آلاییده‌شده با یک N (بر حسب میلی الکترون ولت).....
۴۷	جدول ۳-۵-۳- انرژی‌های اتصال سیستم SO_2 SWCNT+ SO_2 آلاییده‌شده با یک B (بر حسب میلی الکترون ولت).....
۴۸	جدول ۳-۶-۱- فاصله‌ی تعادلی گوگرد- نانولوله (d) بعد از بهینه‌سازی سیستم SO_2 SWCNT+ SO_2 خالص (بر حسب آنگسترم).....
۴۸	جدول ۳-۶-۲- فاصله‌ی تعادلی گوگرد- نانولوله (d) بعد از بهینه‌سازی سیستم SO_2 SWCNT+ SO_2 آلاییده‌شده با یک N (بر حسب آنگسترم).....
۴۹	جدول ۳-۶-۳- فاصله‌ی تعادلی گوگرد- نانولوله (d) بعد از بهینه‌سازی سیستم SO_2 SWCNT+ SO_2 آلاییده‌شده با یک B (بر حسب آنگسترم).....
۵۰	جدول ۳-۷-۱- زاویه‌ی تعادلی گوگرد- نانولوله (d) بعد از بهینه‌سازی سیستم SO_2 SWCNT+ SO_2 خالص (بر حسب درجه).....
۵۰	جدول ۳-۷-۲- زاویه‌ی تعادلی گوگرد- نانولوله (d) بعد از بهینه‌سازی سیستم SO_2 SWCNT+ SO_2 آلاییده‌شده با یک N (بر حسب درجه).....
۵۰	جدول ۳-۷-۳- فاصله‌ی تعادلی گوگرد- نانولوله (d) بعد از بهینه‌سازی سیستم SO_2 SWCNT+ SO_2 آلاییده‌شده با یک B (بر حسب درجه).....

- ۵۱.....(بر حسب درجه).....
- جدول ۳-۸-۱- مقادیر LUMO-HOMO سیستم SWCNT+SO₂ خالص (بر حسب الکترون ولت).....۵۲
- جدول ۳-۸-۲- مقادیر LUMO-HOMO سیستم SWCNT+SO₂ آلائیده شده با یک N (بر حسب الکترون ولت).....۵۲
- جدول ۳-۸-۳- مقادیر LUMO-HOMO سیستم SWCNT+SO₂ آلائیده شده با یک B (بر حسب الکترون ولت).....۵۳
- جدول ۳-۹-۱- مقادیر بار گوگرد و اکسیژن و محاسبه انتقالات بار مولکول SWCNT+SO₂ خالص با تابعی RHF/B³LYP و سری پایه‌ی ترکیبی (3df)G+311-6 SO₂ و 31G-6 رای نانولوله (بر حسب واحد اتمی).....۵۴
- جدول ۳-۹-۲- مقادیر بار گوگرد و اکسیژن و محاسبه انتقالات بار مولکول SWCNT+SO₂ آلائیده شده با یک N با تابعی B³LYP/ROHF و سری پایه‌ی ترکیبی (3df)G+311-6 SO₂ و 31G-6 ای نانولوله (بر حسب واحد اتمی).....۵۵
- جدول ۳-۹-۳- مقادیر بار گوگرد و اکسیژن و محاسبه انتقالات بار مولکول SWCNT+SO₂ آلائیده شده با یک B با تابعی B³LYP/ROHF و سری پایه‌ی ترکیبی (3df)G+311-6 SO₂ و 31G-6 ای نانولوله (بر حسب واحد اتمی).....۵۵
- جدول ۳-۱۰-۱- گشتاورهای دوقطبی مولکول SWCNT+SO₂ خالص (بر حسب واحد دبی).....۵۶
- جدول ۳-۱۰-۲- گشتاورهای دوقطبی مولکول SWCNT+SO₂ آلائیده شده با یک N (بر حسب واحد دبی).....۵۷
- جدول ۳-۱۰-۳- گشتاورهای دوقطبی مولکول SWCNT+SO₂ آلائیده شده با یک B (بر حسب واحد دبی).....۵۷
- جدول ۳-۱۱-۱- فرکانس ارتعاشات مولکول SWCNT+SO₂ خالص.....۵۸
- جدول ۳-۱۱-۲- فرکانس ارتعاشات مولکول SWCNT+SO₂ آلائیده شده با یک نیتروژن.....۵۹
- جدول ۳-۱۱-۳- فرکانس ارتعاشات مولکول SWCNT+SO₂ آلائیده شده با یک بور.....۵۹

۱- مقدمه

تاریخچه‌ی نانو تکنولوژی

پروفسور ریچارد فاینمن^۱ برنده جایزه نوبل فیزیک پتانسیل، در سال ۱۹۵۹ در مؤسسه تکنولوژی کالیفرنیا ایده‌هایی بنیادی در زمینه کوچک سازی نوشتجات، مدارها و ماشینها ایراد کرد: "آنچه من می‌خواهم به شما بگویم، مسئله دستکاری و کنترل اشیاء در مقیاس کوچک است. تردیدی وجود ندارد که در نوک یک سوزن آنقدر جا هست که بتوان تمام دایره‌المعارف بریتانیکا را جا داد." بدین ترتیب شاخه جدیدی از دانش پا به عرصه ظهور گذاشت. فاینمن اصرار داشت که دانشمندان ساخت وسائلی را که برای کار در مقیاس اتمی لازم است، شروع کنند. این موضوع مسکوت ماند، تا اینکه اریک درکسلر^۲ (دانشجوی تحصیلات تکمیلی MIT) ندای فاینمن را شنید و یک قالب کاری برای مطالعه "وسائلی که توانایی حرکت دادن اشیاء مولکولی و مکان آنها را با دقت اتمی دارند" ایجاد کرد، که در سپتامبر ۱۹۸۱ در مقاله‌ای با نام "پروتئین راهی برای تولید انبوه مولکولی ایجاد می‌کند" آن را ارائه داد. درکسلر آن را با کتابی بنام "موتورهای خلقت" دنبال کرد و توسعه مفهوم نانو تکنولوژی را همانند یک کوشش علمی ادامه داد. اولین نشانه‌های ثبت شده از این مفهوم نانو تکنولوژی، تغییر مکان دادن اشیا مولکولی در سال ۱۹۸۹ بود، موقعی که دانشمندی در مرکز تحقیقات IBM، اتمهای منفرد گزنون را روی صفحه نیکل حرکت داد، تا نام IBM را روی سطح نیکل نقش کند. هدف فاینمن از این کار ایجاد انگیزه در موسسات آموزشی و تحقیقاتی بود تا توجه آنها را به دنیای میکروها و نانوها جلب کند.

در واقع تحقیقات در مقیاس نانو به بهره گیری همزمان از دانش ابزارها و تکنیکها و نیز اطلاعات درباره

^۱- R. Feynman

^۲- E. Drexler

فیزیک واکنشهای مولکولی و اتمی تبدیل شده است. امروزه دانشمندان علم مواد، مهندسان مکانیک و الکترونیک و محققان علوم پزشکی به دنبال تشکیل تیمهای تحقیقاتی متشکل از زیست شناسان، فیزیکدانان و شیمی دانان هستند [۱].

۱-۱- شاخه‌های نانو تکنولوژی

الف) نانو تکنولوژی خشک

این شاخه از علم نانو به مطالعه ساختارهای نانویی می‌پردازد. به دست آوردن ساختارهای نو و روش‌های مطالعه این ساختارها و بررسی خواص گوناگون آنها از جمله خواص الکتریکی، مکانیکی، اپتیکی، الکترواپتیکی و ... در این حوزه از علم نانو بررسی می‌شود. لذا طراحی و ساخت دستگاه‌هایی دقیق‌تر از آنچه امروزه از آنها استفاده می‌کنیم یا گامی در جهت توسعه این میکروسکوپ‌های الکترونی، شاخه مهمی از نانو تکنولوژی خشک به حساب می‌آید.

ب) نانو تکنولوژی مرطوب

این شاخه به مطالعه سیستمهای زنده‌ای می‌پردازد که اساسا در محیطهای آبی وجود دارند. در این شاخه ساختمان مواد ژنتیکی، غشاها و سایر ترکیبات سلولی در مقیاس نانومتر مورد مطالعه قرار می‌گیرد.

ج) نانو تکنولوژی محاسبه‌ای

در بسیاری از مواقع ابزار آزمایشگاهی موجود برای انجام برخی از آزمایشها در مقیاس نانومتر مناسب نیستند و یا آنکه انجام این آزمایشها بسیار گران تمام می‌شود. در این حالت از رایانه‌ها برای شبیه سازی فرآیندها و واکنشهای اتمها و مولکولها استفاده می‌شود. شناختی که بوسیله محاسبه بدست می‌آید، باعث می‌شود که زمان پیشرفت نانو تکنولوژی خشک به چند دهه کاهش یابد و البته تأثیر مهمی در نانو تکنولوژی مرطوب نیز خواهد داشت.

با توجه به هزینه‌های تولید یک ساختار در مقیاس نانو لازم است که برای داشتن بالاترین بهره، ابتدا پیش‌بینی‌هایی در مورد برآورد و هزینه‌های تولید ماده جدید، ویژگی‌ها و کاربردهای آن داشته باشیم. لذا تولید نرم‌افزارهای کامپیوتری و نوشتن برنامه‌هایی که این امکان را برای ما فراهم کنند نیز جزء این شاخه از علم نانو به حساب می‌آید. به دست آوردن ویژگی‌ها و خصوصیات یک ماده با روش‌های تئوری و محاسباتی، علاوه بر چشم‌انداز بسیار خوبی که از آینده، پیش روی ما قرار می‌دهد، به ما کمک می‌کند

روش‌های بهتری برای تولید تجربی مواد جدید در ابعاد کوچک و در مقیاس وسیع، داشته باشیم. این حوزه از علم نانو در مدت زمان کمی که از آغاز این علم می‌گذرد، کمک زیادی به پیشرفت این علم کرده است. لذا نانوتکنولوژی راهی است به سوی همگرایی علوم و در واقع راهی است برای اینکه ما را به آن نقطه مبدأ پیدایش هستی و استفاده بهتر از هستی برساند [۲].

۱-۱-۱- نانوذرات

نانوذره طبق تعریف عبارت است از یک ذره‌ی میکروسکوپی که حداقل یکی از ابعاد آن به اندازه ۱۰۰ نانومتر یا کمتر از آن باشد. امروزه، یکی از مهیج‌ترین و جالب‌ترین زمینه‌های تحقیقاتی، پژوهش در زمینه نانوذرات است چرا که دارای بالاترین کارآئی در تمام جنبه‌های مختلف زندگی بشری از جمله بیوپزشکی، نوری و الکترونیکی و غیره است.

۱-۱-۲- نانو ساختارها

آلوتروپ‌های کربن چهار شکل گوناگون دارند که نانو ساختارها اخیراً شناخته شده‌اند. از سال ۱۹۸۵ که آلوتروپ سوم کربن - فولرن کشف شد، تاکنون تلاش برای ساخت ساختارهای دیگری از کربن و شناسایی خواص آنها ادامه دارد. این تلاش پس از فولرن، منجر به کشف نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره^۱ و چنددیواره^۲ شد. مطالعات روی هندسه این ساختارها و خواص الکتریکی و مکانیکی‌شان ادامه دارد. در اینجا به توضیح نانو ساختار عمده کربن، نانولوله کربنی می‌پردازیم.

۱-۲-۱-۱- نانولوله کربنی

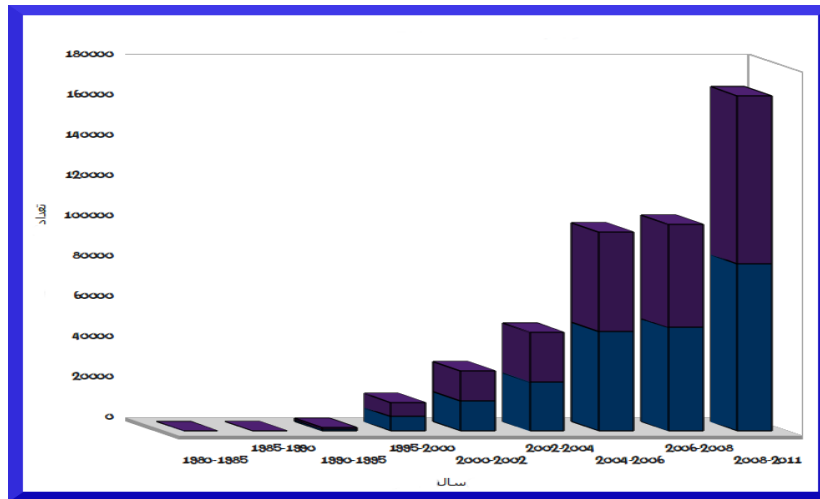
در سال ۱۹۹۱ سومیو ایجیما^۳ هنگامی که مشغول مطالعه روی ساختارهای کربنی بود، به ساختار جدیدی از کربن برخورد کرد [۳]. این ساختار به صورت استوانه‌هایی چندلایه از اتم کربن مشاهده شد که ابعاد این لوله‌ها در حد نانومتر بود. این ساختار، به دلیل بعد نانومتری و شکل لوله‌مانند آن، نانولوله کربنی نامیده شد. نانولوله‌های کربن جدیدترین آلوتروپی کربن است که کشف شده است. نمودار زیر تعداد انتشاراتی را که عبارت نانولوله در عنوان یا چکیده‌ی مقالات ظاهر شده است، نشان می‌دهد. با مشاهده‌ی

^۱- Single walled Carbon Nanotube

^۲- Multi walled Carbon Nanotube

^۳- [Sumio Iijima](#)

این نمودار، می‌توان به اهمیت موضوع پی برد که در سال‌های اخیر نیز، تعداد انتشارات به طور صعودی و ناگهانی افزایش یافته است.



شکل ۱-۱- افزایش انتشارات بر روی نانولوله‌ها در سال‌های اخیر

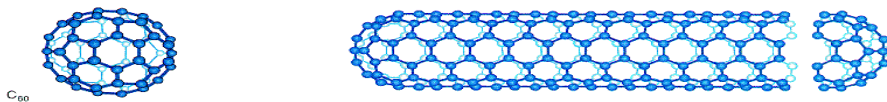
نانولوله‌های کربنی ساختاری شبیه به گرافیت دارند به این صورت که اگر یک صفحه گرافن را در نظر بگیریم و آن را لوله کنیم، یک نانولوله کربنی خواهیم داشت. انتهای یک لوله می‌تواند باز یا بسته باشد. بسته شدن دو انتهای نانولوله همانند فولرن با ایجاد پنج‌ضلعی‌هایی در ساختار اتفاق می‌افتد یعنی می‌توان نانولوله را به صورت یک فولرن که از دو انتها کشیده شده هم تصور کرد.

اگر هر صفحه گرافن لوله شود، یک نانولوله کربنی تک‌دیواره می‌دهد. یک صفحه گرافن، صفحه‌ای متشکل از اتم‌های کربن است که در یک ساختار لانه‌زنبوری کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند. هیبرید اتم‌های کربن sp^2 است، تک الکترون‌های اوربیتال پیوندی با هم پیوند یگانه دارند و تک الکترون باقیمانده به صورت پیوند دوگانه، بین واحدهای ساختاری شش‌ضلعی این شبکه می‌چرخد، همانند مولکول بنزن، و یک ابر الکترونی در بالا و پایین این صفحه ایجاد می‌کند.

۱-۲- ساختار نانولوله‌های کربنی

نانولوله‌های کربنی دارای نسبت طول به قطر بسیار بزرگ هستند لذا می‌توان آنها را بعنوان یک لوله‌ی تک بعدی در نظر گرفت. هر نانولوله‌ی کربنی شامل دو بخش جدا از هم با خواص فیزیکی و شیمیایی متفاوت است. اولی، دیواره‌ی لوله است و دومی، سر فنجان مانند آن. انتهای لوله یعنی سر فنجان مانند

نظیر مشتقی از فلورن ۶۰ است و اتمهای کربن در سر انتهای در ساختار هگزاگونال و پنتاگونال قرار گرفته‌اند.

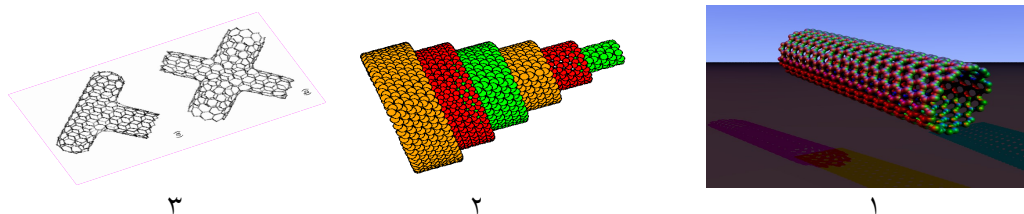


شکل ۱-۲- نمایش دو قسمت متفاوت با خواص متفاوت

۱-۳- اشکال مختلف یک نانولوله

تامنی^۱ و همکارانش بیان داشتند که نانوساختارهای کربنی خالص و به ویژه نانولوله خواص الکترونیکی و مکانیکی جالبی دارند که وابسته به قطر و کایرالیته‌ی آنها می‌باشد [۵, ۶].

فعالیت شیمیایی بالای یک نانولوله‌ی کربنی در قیاس با یک ورق گرافیت نتیجه‌ی مستقیم انحنا‌ی سطحی موجود در نانولوله‌های کربنی است و این امر از اوربیتال غیراشتراکی و نافرمانی P ناشی می‌شود که در اثر انحنا این خصلت را پیدا کرده است. روی این اصل بین فعالیت کربن‌های سطح دیواره و انتهای اختلاف رفتار وجود دارد. در واقع در قیاس با گرافیت یک نوع اصلاح شیمیایی در خواص اوربیتال فوق حاصل می‌شود که باعث گردیده نانولوله‌های کربنی از فعالیت شیمیایی بالائی برخوردار باشند. بعنوان مثال حالیت این ترکیبات در حلال‌های مختلف نشان از خواص متفاوت شیمیایی آن در قیاس با گرافیت است. لازم به یاد آوری است فعالیت شیمیایی کامل این ترکیبات زمانی قابل مطالعه است که بتوان آنها را کامل خالص نمود و از حالت خام در آورد. اشکال مختلف یک نانولوله شامل نانولوله‌های تک دیواره، چند دیواره و معیوب می‌باشد.

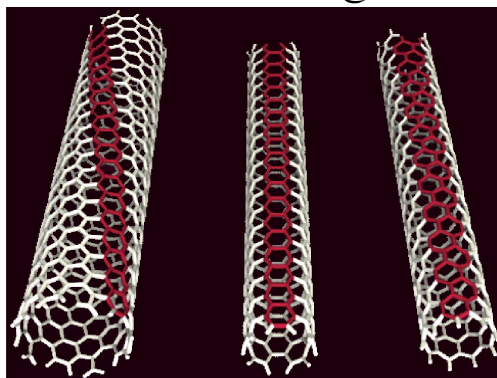


شکل ۱-۳- نمایش شماتیک نانولوله‌ی تک دیواره (SWNT) ۱ و چند دیواره (MWNT) ۲ و معیوب ۳

۱-۳-۱- نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره

نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره فقط از کربن و یک ساختار ساده (ورقه‌ای از شش ضلعی‌های منظم) تشکیل شده‌اند. بر اساس نوع رول کردن صفحه‌ی گرافیتی که به کایرالیته‌ی آنها معروف است می‌توانند به سه صورت وجود داشته باشند:

الف- شکل زیگزاگ ب- شکل آرمچیر ج- شکل کایرال



شکل ۱-۴- نمایش سه بعدی انواع نانولوله‌های کربنی تک دیواره

۱-۳-۲- نانولوله‌های کربنی چنددیواره

این نوع نانولوله شامل نانولوله‌های تک دیواره می‌باشد که به صورت هم مرکز در درون هم قرار گرفته‌اند. فاصله‌ی بین دو دیواره در این نوع نانولوله‌ها در اندازه‌ی فاصله‌ی بین صفحات لایه‌های کربنی در گرافیت است.

۱-۴- مقایسه‌ی نانولوله‌های تک‌دیواره و چنددیواره

از آغاز کار روی تک دیواره‌ها از آنها به عنوان یک پدیده‌ی تک‌بعدی نام برده می‌شد تا اینکه این نظریه مرحله به مرحله پیشرفت کرد. علت علاقه به نانولوله‌های تک‌جداره و تلاش برای جایگزین کردن آنها در صنعت، بر اساس محاسبات نظری و کارهای آزمایشگاهی، خصوصیات عالی مکانیکی و رسانایی الکتریکی آنها مثل فلزات می‌باشد. البته تولید نانولوله‌های تک‌دیواره دارای هزینه‌ی بالایی است و تولید به همراه پایدار کردن خصوصیات آنها در حین فرآوری پلیمر- نانولوله مشکل می‌باشد. هر چند

نانولوله‌هایی که با استفاده از تکنیک خاصی که شامل حرکاتی افقی و عمودی شبیه نقاشی سنتی ژاپن می‌باشد تولید شده‌اند، از لحاظ نوری نیز یک‌دست و همگن و از لحاظ ساختاری قابل کنترل می‌باشند. برعکس در دسترس بودن و تجاری بودن نانولوله‌های کربنی چنددیواره باعث شده که پیشرفت‌های بیشتری در این زمینه داشته باشیم تا حدی که محصولاتی در آستانه‌ی تجاری شدن تولید شده است. به عنوان مثال از نانولوله‌های کربنی چنددیواره (جایگزین Carbon black) در پودرهای رنگ استفاده شده است. یکی از معایب نانولوله‌های کربنی چنددیواره نسبت به تک‌دیواره این است که استحکام‌دهی آن‌ها کمتر می‌باشد. زیرا پیوندهای صفحات داخلی ضعیف می‌باشند. اما از آنجا که در حال حاضر کاربردهای نانولوله‌ها در تقویت پلیمرها باعث بهبود خواص گرمایی و الکتریکی می‌شود تا بهبود خواص مکانیکی، کاربرد نانولوله‌های کربنی چنددیواره بسیار زیاد می‌باشد. از طرفی تکنیک‌های موجود نیز برای تولید نانولوله‌های تک‌دیواره به اندازه‌ی کافی بازدهی ندارد و خلوص لازم را نیز به همراه نمی‌آورد. تخلیص این مواد بسیار زحمت‌آور است و در نهایت ممکن است به ساختار نانولوله نیز صدمه بزند.

۱-۵- سمیت نانولوله‌های کربنی

تعیین سمیت نانولوله‌های کربنی، یکی از پرفشارترین سؤالات در نانوتکنولوژی بوده است. متأسفانه چنین تحقیقی اخیراً شروع شده است و داده‌ها ناقص بوده و مورد نقد و بررسی هستند. نتایج اولیه در ارزیابی سمیت این مواد ناهمگن به مشکلاتی برخورد کرده است. با پارامترهایی مثل ساختار، توزیع سایز، ناحیه‌ی سطحی، شیمی سطح، بار سطحی و حالت انباشتگی، تأثیر روی واکنش‌پذیری نانولوله‌های کربنی بررسی شده است [۶]. مطالعه‌ای نشان می‌دهد که CNTها می‌توانند وارد سلول‌های انسانی شده و مرگ سلول‌ها را باعث شوند. در CNTهای فیبر سوزنی شکل، مشابه به فیبرهای آزبست هراس زیادی وجود دارد که استفاده‌ی گسترده از نانولوله‌های کربنی ممکن است به سرطان منجر شود [۱۰-۷].

در مقایسه با مطالعات سم‌شناسی قبلی با استفاده از SWCNTها، نتایج جدید نشان دادند که لوله‌های CN_x کمتر مضر هستند. برای مثال، با استفاده از دوزهای خیلی بالای نانولوله‌های (۵ mg/kg) CN_x هیچ تأثیر مهلکی روی موش‌ها مشاهده نشد که در تضاد با گزارش‌های قبلی با استفاده از MWCNT یا SWCNT های خالص [۱۱] تغییرات پاتولوژی نشان دادند که MWCNT های خالص شدیدتر از MWCNT های CN_x هستند. در هر دو تغییرات پاتولوژی در حد دوز و وابسته به زمان بودند [۱۲].

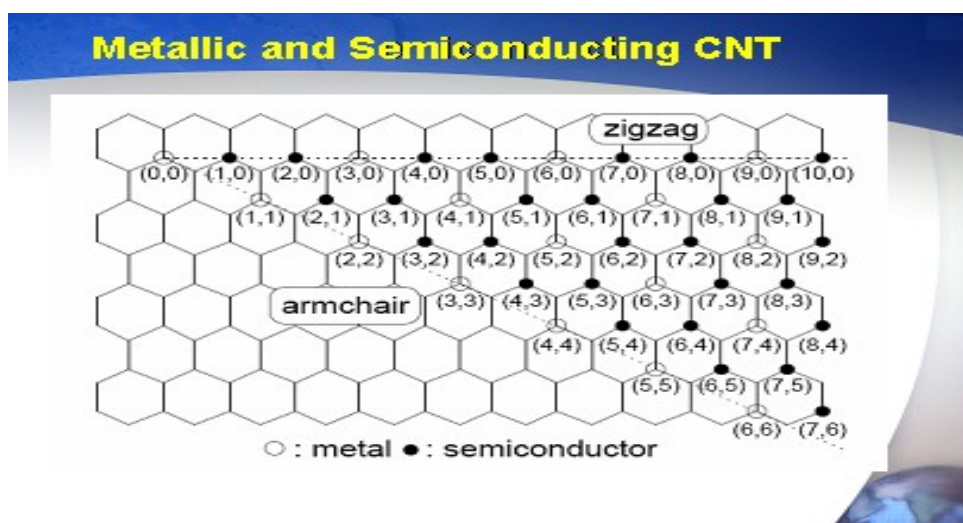
همچنین تأثیرات سم‌شناسی انواع دیگر نانولوله‌های آلاییده شده در حال مطالعه می‌باشد.

۱-۶- مزایای نانولوله‌های کربنی

۱. اندازه‌ی نانولوله‌های کربنی بسیار کوچک است (قطر کوچکتر از ϵnm).

این ترکیبات دارای قطر بسیار کوچک و طول بزرگ می‌باشند.

۲. نانولوله‌های کربنی برحسب نحوه‌ی تا شدن صفحات گرافیکی سازنده‌شان به صورت رسانا یا نیمه‌رسانا در می‌آیند. این مواد جدید با وجود وزن بسیار کمی که دارند، الکتریسیته را بهتر از مس هدایت می‌کنند. همچنین هدایت الکتریکی بالا بستگی به هندسه‌ی دقیق اتم‌های کربن دارد.



شکل ۱-۵- CNT های رسانا و نیمه رسانا

۳. نانولوله‌های کربنی دارای قدرت رسانایی گرمایی خیلی بالایی هستند. قبل از شناخت نانولوله‌های کربنی، الماس به خاطر ارتعاشات اتم‌های کربن در ساختار، بهترین رسانای گرما بود اما ارتعاشات فرکانس بالای پیوند کربن-کربن در نانولوله‌ها یک رسانایی گرمایی ذاتی در این ماده ایجاد کرده که مقدار آن حداقل دوبرابر الماس است.

۴. نانولوله‌های کربنی سطح جداره‌ی صاف و قدرت تفکیک بالایی در تشخیص گازها دارند.

۵. نانولوله‌های کربنی مدول یانگ^۱ بالایی دارند. ویژگی‌های مکانیکی این ساختارها به نوع ساختار، قطر و

^۱ - Young's Modulus