

١٤٢٧



## دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

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

عنوان :

مطالعه تئوری جذب منوکسید کربن بر روی نانوتیوب های بور نیتريد  
(۸,۰) و (۱۰,۰) به روش تئوری تابع چگالی

۱۳۸۹/۱۰/۵

استاد راهنما:

دکتر احسان زاهدی

استاد مشاور:

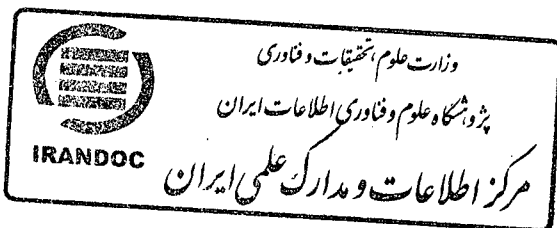
دکتر سید فرامرز طیاری

نگارش:

فاطمه قربانی

زمستان ۱۳۸۸

ب



۱۴۹۶۳۱



## دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه ، گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد « M.Sc. »

گرایش : شیمی فیزیک

عنوان :

مطالعه تئوری جذب منوکسید کربن بر روی نانوتیوب های بورنیتريد (۸،۰) و (۱۰،۰)

به روش تئوری تابع چگالی

نگارش :

فاطمه قربانی

زمستان ۸۸

۱۳۸۹/۱۰/۵

۱. دکتر احسان زاهدی

۲. دکتر سید فرامرز طیاری

۳. دکتر بهزاد پنهانکندی

۴. دکتر عبدالحکیم پنیق

هیأت داوران :

## سپاسگزاری:

سپاس بیکران خدای را سزااست  
که رحمانیتش بیکران و مهربانی اش بی حصر است

اکنون که به لطف ایزد منان موفق به اتمام این مقطع از تحصیل گشته ام لازم است از کسانی که در این مسیر مرا راهنمایی نمودند تشکر و قدردانی نمایم.

ابتدا از راهنمایی های استاد ارجمندم جناب آقای دکتر احسان زاهدی کمال تشکر و قدردانی را دارم.

از استاد گرامی جناب آقای دکتر سید فرامرزطیاری که زحمت مشاوره این پروژه را عهده دار بودند کمال سپاس و امتنان دارم.

از اساتید گرامی جناب آقایان دکتر بهزاد چهکندی و جناب آقای دکتر عبدالحکیم پنق که زحمت داوری این پروژه را کشیدند سپاسگزارم.

در پایان از سایر اساتید محترم گروه شیمی که در طول دوران تحصیل افتخار شاگردیشان را داشتم و از زحمات پدر و مادر عزیزم و تمامی کسانی که مرا به نحوی یاری رساندند نهایت تشکر و قدردانی را بجا آورده و از حضرت حق تعالی سلامت و توفیق روزافزون آنها را مسئلت می نمایم.

تقدیم به:

شمع فروزان زندگی، پدر بزرگوارم  
سرچشمه جوشان مهر، مادر فداکارم

آنانکه تلاش و همت را با محبتی بی دریغ بر گستره ای از عشق و ایمان ره توشه ام  
ساختند و آموختند فرزانه زیستن را.

و تقدیم به:

همسر مهربانم بخاطر عشق، حمایت و همراهی در زندگی.

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	چکیده.....
	فصل اول: مقدمه، تاریخچه و مطالعات پیشین پیرامون جذب برروی نانولوله ها.....
۲	۱-۱. نانو.....
۳	۲-۱. نانوتکنولوژی.....
۳	۱-۲-۱. تاریخچه ای از ظهور نانوتکنولوژی.....
۴	۲-۲-۱. تقسیم بندی های فنی و صنعتی نانوتکنولوژی.....
۵	۳-۲-۱. کاربردهای نانوتکنولوژی.....
۹	۴-۲-۱. تأثیرات امنیتی نانوتکنولوژی ( فرصت و تهدید).....
۹	۵-۲-۱. معایب و مضرات نانوتکنولوژی.....
۱۰	۳-۱. آلوتروپ های کربنی.....
۱۱	۴-۱. نانولوله های کربنی.....
۱۲	۱-۴-۱. ویژگی نانولوله های کربنی.....
۱۶	۲-۴-۱. انواع نانولوله های کربنی.....
۱۹	۵-۱. بورنیتريد.....
۱۹	۱-۵-۱. مشخصات بورنیتريد.....
۲۰	۲-۵-۱. نانولوله های بور نیتريد.....
۲۱	۳-۵-۱. خواص نانو لوله های بور نیتريد.....
۲۲	۴-۵-۱. خواص نانو لوله های بور نیتريد در مقایسه با نانو لوله های کربنی.....
۲۲	۵-۵-۱. روشهای تولید نانولوله های بور نیتريد.....
۲۳	۶-۵-۱. شیمی نانولوله های بورنیتريد و خالص سازی آنها.....
۲۳	۷-۵-۱. کاربردهای نانولوله های بور نیتريد.....
۲۴	۶-۱. مطالعات پیشین پیرامون جذب برروی نانولوله ها.....
	<b>فصل دوم: روش های محاسبات کوانتومی</b>
۲۸	۱-۲. مقدمه.....
۲۹	۲-۲. روش های مدل سازی کامپیوتری.....

۲۹	..... طبقه بندی روش های محاسبات شیمی کوانتومی
۲۹	..... روش های نیمه تجربی ۱-۳-۲
۳۱	..... روش های آغازین (ab initio) ۲-۳-۲
۳۱	..... روش هارتری - فاک (HF) ۱-۲-۳-۲
۳۲	..... روش ماتریس دانسیته (DFT) ۲-۲-۳-۲
۳۳	..... Moller-Plesset تنوی اختلال ۳-۲-۳-۲
۳۳	..... روش های فوق هارتری - فاک ( همبستگی الکترون ) ۴-۲-۳-۲
۳۴	..... روش های همبستگی وردشی ۱-۴-۲-۳-۲
۳۵	..... روش های همبستگی اختلال ۲-۴-۲-۳-۲
۳۶	..... روش همبستگی تابع دانسیته ۳-۴-۲-۳-۲
۳۶	..... سری های پایه ۳-۳-۲
۳۷	..... توابع نوع اسلیتر ۱-۳-۳-۲
۳۷	..... توابع نوع گوسین ۲-۳-۳-۲
۳۸	..... سری پایه حداقل ۳-۳-۳-۲
۳۹	..... سری پایه ظرفیتی شکافته ۴-۳-۳-۲
۳۹	..... توابع پایه نفوذی ۵-۳-۳-۲
۴۰	..... توابع پایه پلاریزه ۶-۳-۳-۲
۴۱	..... معرفی چند محاسبه ab initio ۴-۳-۲
۴۱	..... محاسبات تک نقطه ای ۱-۴-۳-۲
۴۲	..... محاسبات بهینه سازی هندسی ۲-۴-۳-۲
۴۲	..... محاسبات فرکانس ۳-۴-۳-۲
۴۳	..... شرح مراحل یک اجرای ab initio ۵-۳-۲
۴۳	..... خواندن ورودی و محاسبه یک هندسی ۱-۵-۳-۲
۴۴	..... تعیین سری پایه ۲-۵-۳-۲
۴۴	..... محاسبه انرژی دافعه هسته ۳-۵-۳-۲
۴۴	..... محاسبه انتگرال ها ۴-۵-۳-۲
۴۴	..... تعیین پیکربندی الکترونی ۵-۵-۳-۲
۴۵	..... تولید حدس اولیه ۶-۵-۳-۲

۴۵	..... اجرای تکرار میدان خودسازگار SCF (انرژی الکترونی)
۴۵	..... محاسبه انرژی کل ۸-۵-۳-۲
۴۶	..... مراحل بعدی ۹-۵-۳-۲
۴۶	..... ab initio شیمی کوانتومی
۴۶	..... ab initio کاربرد های روش
۴۷	..... محدودیت ها ، نقاط قوت و اعتبار شیمی کوانتومی ab initio
۴۷	..... NMR ۴-۲
۴۷	..... NMR چیست ؟ ۱-۴-۲
۴۹	..... NMR تاریخچه ۲-۴-۲
۴۹	..... اسپین هسته ای ۳-۴-۲
۵۰	..... مکانیک کوانتومی NMR ۴-۴-۲
۵۳	..... ماتریس دانسیته ۵-۴-۲
۵۳	..... برهم کنش ها در رزونانس مغناطیسی هسته ای ۶-۴-۲
۵۵	..... محاسبات آغازین پارامترهای NMR ۷-۴-۲
۵۶	..... محاسبه تانسورهای رزونانس مغناطیسی هسته ای ۸-۴-۲
۵۷	..... NQR ۵-۲
۵۷	..... اثرات چهار قطبی ۱-۵-۲
۵۹	..... هامیلتونی چهار قطبی ۲-۵-۲
<b>فصل سوم: روش کار ، محاسبات</b>	
۶۲	..... بحث مقدماتی ۱-۳
۶۲	..... ۱-۳ بخش اول
۶۲	..... ۱-۱-۳ ترسیم و تعیین شکل هندسی نانولوله بور نیتريد (8,0) و (10,0)
۶۴	..... ۲-۱-۳ بهینه سازی ساختار نانولوله بور نیتريد خالص (8,0) و (10,0)
۶۸	..... ۳-۱-۳ جذب کربن منوکسید (CO) بر روی نانولوله بور نیتريد (8,0) و (10,0)
۷۲	..... ۴-۱-۳ بهینه سازی ساختار نانولوله بور نیتريد CO-attached (8,0) و (10,0)
۷۵	..... ۵-۱-۳ مطالعه تانسورهای پوشیدگی شیمیایی هسته های $^1H$ , $^{11}B$ , $^{15}N$
۸۳	..... ۶-۱-۳ مطالعه رزونانس چهار قطبی هسته ای هسته های $^2H$ , $^{11}B$ , $^{14}N$



۱۰۶	..... بخش دوم بروکسول
۱۰۶	..... ۱-۲-۳. ترسیم و تعیین شکل هندسی نانولوله بروکسول (8,0) و (10,0)
۱۰۶	..... ۲-۲-۳. بهینه سازی ساختار نانولوله بروکسول خالص (8,0) و (10,0)
۱۰۷	..... ۳-۲-۳. جذب کربن منوکسید (CO) بر روی نانولوله بروکسول (8,0) و (10,0)
۱۰۹	..... ۴-۲-۳. بهینه سازی ساختار نانولوله بروکسول CO- attached (8,0) و (10,0)
۱۱۲	..... ۵-۲-۳. مطالعه تانسورهای پوشیدگی شیمیایی هسته های $^1H, ^{11}B, ^{15}N$
۱۱۹	..... ۶-۲-۳. مطالعه رزونانس چهار قطبی هسته ای هسته های $^2H, ^{11}B, ^{14}N$
۱۳۹	..... ۷-۲-۳. نتیجه گیری نهایی
۱۴۱	..... فهرست منابع فارسی
۱۴۲	..... فهرست منابع لاتین
۱۴۵	..... چکیده انگلیسی

## فهرست جداول

صفحه	عنوان
۱۹	جدول ۱-۱. مشخصات بورنیتريد .....
۴۸	جدول ۱-۲. مجموعه انتخابی از هسته های فعال در NMR و خواص آنها .....
۵۴	جدول ۲-۲. هاميلتوني ها و برهمکنش های اسپين هسته ای .....
۶۴	جدول ۱-۳. مقادير انرژی کل الکترونی ، گشتاور دوقطبی ، گاف انرژی با استفاده از روش <i>AM1</i> .....
	جدول ۲-۳. مقادير میانگین طول پیوند بین اتم های لایه های مختلف برای نانولوله بور نیتريد (8,0) و (10,0)
۶۵	با استفاده از روش <i>AM1</i> .....
	جدول ۳-۳: مقادير انرژی کل الکترونی ، گشتاور دوقطبی و گاف انرژی با روش <i>B3LYP</i> و با استفاده از سری پایه
۶۵	<i>STO-3G</i> .....
	جدول ۳-۴. مقادير طول پیوند بین اتم های لایه های مختلف برای نانولوله بور نیتريد (8,0) و (10,0) با روش
۶۶	<i>B3LYP</i> و با استفاده از سری پایه <i>STO-3G</i> .....
	جدول ۳-۵. مقادير انرژی کل الکترونی ، گشتاور دوقطبی و گاف انرژی با روش <i>B3LYP</i> و با استفاده از سری
۶۶	پایه <i>3-21G</i> .....
	جدول ۳-۶. مقادير میانگین طول پیوند بین اتم های لایه های مختلف برای نانولوله بور نیتريد (8,0) و (10,0)
۶۶	با روش <i>B3LYP</i> و با استفاده از سری پایه <i>3-21G</i> .....
	جدول ۳-۷. مقادير انرژی کل الکترونی ، گشتاور دوقطبی و گاف انرژی با روش <i>B3LYP</i> و با استفاده از سری
۶۷	پایه <i>6-31G</i> .....
	جدول ۳-۸. مقادير میانگین طول پیوند بین اتم های لایه های مختلف برای نانولوله بور نیتريد (8,0) و (10,0)
۶۷	با روش <i>B3LYP</i> و با استفاده از سری پایه <i>6-31G</i> .....
	جدول ۳-۹. مقادير انرژی الکترونی ، گشتاور دوقطبی و گاف انرژی به روش <i>B3LYP</i> و با استفاده از سری پایه
۶۷	<i>6-31G*</i> .....
	جدول ۳-۱۰. مقادير انرژی HOMO و LUMO با روش <i>B3LYP</i> و با استفاده از سری پایه <i>6-31G*</i> .....
	جدول ۳-۱۱. مقادير میانگین طول پیوند بین اتم های لایه های مختلف برای نانولوله بور نیتريد (8,0) و (10,0)
۶۸	با روش <i>B3LYP</i> و با استفاده از سری پایه <i>6-31G*</i> .....
	جدول ۳-۱۲. نتایج حاصل از جذب کربن منوکسید بر روی نانولوله (8,0) با روش <i>B3LYP</i> و با استفاده از سری پایه
۷۲	<i>6-31G*</i> .....

- جدول ۳-۱۳. مقادیر میانگین طول پیوند بین اتم های لایه های مختلف پس از جذب کربن منوکسید بر روی نانولوله بورنیتريد (8,0) با روش *B3LYP* و با استفاده از سری پایه  $6-31G^*$  ..... ۷۲
- جدول ۳-۱۴. نتایج حاصل از جذب کربن منوکسید بر روی نانولوله بورنیتريد (10,0) با روش *B3LYP* و با استفاده از سری پایه  $6-31G^*$  ..... ۷۳
- جدول ۳-۱۵. مقادیر میانگین طول پیوند بین اتم های لایه های مختلف پس از جذب کربن منوکسید بر روی نانولوله بور نیتريد (10,0) با روش *B3LYP* و با استفاده از سری پایه  $6-31G^*$  ..... ۷۴
- جدول ۳-۱۶. مقادیر پارامترهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی و آنیزوتروپی NMR،  $^1H$ ،  $^{11}B$ ،  $^{15}N$  برای نانولوله (10,0) با روش *B3LYP* و سری پایه  $6-311G^{**}$  ..... ۷۶
- جدول ۳-۱۷. مقادیر پارامترهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی و آنیزوتروپی NMR،  $^1H$ ،  $^{11}B$ ،  $^{15}N$  برای نانولوله (10,0) با روش *B3LYP* و سری پایه  $6-311G^{**}$  ..... ۷۹
- جدول ۳-۱۸. مقادیر ویژه تانسور شیب میدان الکتریکی و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته های مختلف نانولوله بورنیتريد خالص (8,0) قبل از جذب با روش *B3LYP* و سری پایه  $6-311G^{**}$  ..... ۸۳
- جدول ۳-۱۹. مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته های  $^1H$ ،  $^{11}B$ ،  $^{14}N$  نانولوله بور نیتريد (8,0) بعد از جذب نوع A ..... ۸۶
- جدول ۳-۲۰. مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی (a.u) و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته های  $^1H$ ،  $^{11}B$ ،  $^{14}N$  نانولوله بورنیتريد (8,0) بعد از جذب نوع B ..... ۸۸
- جدول ۳-۲۱. مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی (a.u) و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته های  $^1H$ ،  $^{11}B$ ،  $^{14}N$  نانولوله بورنیتريد (8,0) بعد از جذب نوع C ..... ۹۰
- جدول ۳-۲۲. مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی (a.u) و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته های  $^1H$ ،  $^{11}B$ ،  $^{14}N$  نانولوله بورنیتريد (10,0) قبل از جذب ..... ۹۲
- جدول ۳-۲۳. مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی (a.u) و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته های  $^1H$ ،  $^{11}B$ ،  $^{14}N$  نانولوله بورنیتريد (10,0) بعد از جذب نوع A ..... ۹۵
- جدول ۳-۲۴. مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی (a.u) و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته های  $^1H$ ،  $^{11}B$ ،  $^{14}N$  نانولوله بورنیتريد (10,0) بعد از جذب نوع B ..... ۹۸
- جدول ۳-۲۵. مقادیر تانسورهای شیب میدان الکتریکی (a.u) و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته های  $^1H$ ،  $^{11}B$ ،  $^{14}N$  نانولوله بورنیتريد بعد از جذب نوع C ..... ۱۰۱

جدول ۳-۲۶. مقادیر انرژی کل الکترونی، گشتاور دو قطبی و گاف انرژی با روش <i>B3LYP</i> و با استفاده از سری پایه	
..... 3-21G	۱۰۷
جدول ۳-۲۷. مقادیر انرژی کل الکترونی، گشتاور دو قطبی و گاف انرژی با روش <i>B3LYP</i> و با استفاده از سری پایه	
..... 6-31G	۱۰۷
جدول ۳-۲۸. نتایج حاصل از جذب کربن منوکسید بر روی نانولوله بروکسول (8,0) با روش <i>B3LYP</i> و با استفاده	
از سری پایه 6-31G	۱۰۹
جدول ۳-۲۹. نتایج حاصل از جذب کربن منوکسید بر روی نانولوله بروکسول (10,0) با روش <i>B3LYP</i> و با استفاده	
از سری پایه 6-31G	۱۱۰
جدول ۳-۳۰. مقادیر طول پیوند در نانولوله بروکسول (8,0) قبل و بعد از جذب نوع B,A در موضع جذب	۱۱۱
جدول ۳-۳۱. مقادیر طول پیوند در نانولوله بروکسول (10,0) قبل و بعد از جذب نوع B,A در موضع جذب	۱۱۲
جدول ۳-۳۲. مقادیر پارامترهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی و آنیزوتروپی $^{17}O, ^1H, ^{11}B, ^{15}N$ NMR برای نانولوله	
بروکسول (8,0)	۱۱۲
جدول ۳-۳۳. مقادیر پارامترهای پوشیدگی ایزوتروپی و آنیزوتروپی $^{17}O, ^1H, ^{11}B, ^{15}N$ NMR برای نانولوله بروکسول	
(10,0)	۱۱۵
جدول ۳-۳۴. مقادیر ویژه تانسورهای شیب میدان الکتریکی (a.u) و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz)	
هسته های $^{17}O, ^2H, ^{11}B, ^{14}N$ نانولوله بروکسول خالص (8,0) قبل از جذب با روش <i>B3LYP</i> و سری پایه	
6-311G**	۱۲۰
جدول ۳-۳۵. مقادیر ویژه تانسورهای شیب میدان الکتریکی (a.u) و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz)	
هسته های $^{17}O, ^2H, ^{11}B, ^{14}N$ نانولوله بروکسول (8,0) بعد از جذب نوع A با روش <i>B3LYP</i> و سری پایه	
6-311G**	۱۲۲
جدول ۳-۳۶. مقادیر ویژه تانسورهای شیب میدان الکتریکی (a.u) و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz)	
هسته های $^{17}O, ^2H, ^{11}B, ^{14}N$ نانولوله بروکسول (8,0) بعد از جذب نوع B با روش <i>B3LYP</i> و سری پایه	
6-311G**	۱۲۴
جدول ۳-۳۷. مقادیر ویژه تانسورهای شیب میدان الکتریکی (a.u) و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz)	
هسته های $^{17}O, ^2H, ^{11}B, ^{14}N$ نانولوله بروکسول خالص (10,0) قبل از جذب با روش <i>B3LYP</i> و سری پایه	
6-311G**	۱۲۶
جدول ۳-۳۸. مقادیر ویژه تانسور شیب میدان الکتریکی (a.u) و ثابت جفت شدن چهار قطبی هسته ای (MHz) هسته	

های  $^{17}O, ^2H, ^{11}B, ^{14}N$  نانولوله بروکسول (10,0) بعد از جذب نوع B با روش *B3LYP* و سری پایه

۱۲۹ ..... 6-311G\*\*

جدول ۳-۳۹. ثابت های جفت شدن چهارقطبی هسته ای (MHz) نانولوله بروکسول (8,0) با روش *B3LYP* و سری

پایه 6-311G\*\* ..... ۱۳۲

جدول ۳-۴۰. ثابت های جفت شدن چهارقطبی هسته ای (MHz) نانولوله بروکسول (8,0) با روش *B3LYP* و سری

پایه 6-311G\*\* ..... ۱۳۵

## فهرست نمودارها

صفحه	عنوان
۷۱	نمودار ۳-۱۰. تغییرات $\Delta E$ بر حسب $\Gamma$ برای نانولوله بور نیتريد (10,0) در جذب نوع A .....
۷۱	نمودار ۳-۱۱. تغییرات $\Delta E$ بر حسب $\Gamma$ برای نانولوله بور نیتريد (10,0) در جذب نوع B .....

## فهرست شکل ها

صفحه	عنوان
۲	شکل ۱-۱. اندازه تقریبی شی ها از $10^2 m$ تا $10^{-6} m$ .....
۱۰	شکل ۲-۱. آلوتروپهای کربن در طبیعت .....
۱۱	شکل ۳-۱. شکل گیری نانولوله ها از صفحات گرانیب .....
۱۶	شکل ۴-۱. انواع نانولوله های کربنی .....
۱۷	شکل ۵-۱. نانولوله های نامگذاری شده .....
۱۸	شکل ۶-۱. انواع نانولوله های کربنی .....
۲۱	شکل ۷-۱. مدل مولکولی ساختار بورنیتريد هگزاگونال .....
۶۳	شکل ۱-۳. ساختار هندسی نانولوله بور نیتريد خالص (8,0) .....
۶۳	شکل ۲-۳. ساختار هندسی نانولوله بور نیتريد خالص (10,0) .....
۶۳	شکل ۳-۳. بسته شدن انتهای نانولوله (8,0) با استفاده از اتم هیدروژن .....
۶۴	شکل ۴-۳. بسته شدن نانولوله (10,0) با استفاده از اتم هیدروژن .....
۶۸	شکل ۵-۳. مولکول CO .....
۶۹	شکل ۶-۳. جذب نوع A .....
۶۹	شکل ۷-۳. جذب نوع B .....
۷۰	شکل ۸-۳. جذب نوع C .....
۷۰	شکل ۹-۳. جذب نوع C .....
۱۰۶	شکل ۱۲-۳. ساختار هندسی نانولوله بروکسول خالص (8,0) .....
۱۰۶	شکل ۱۳-۳. ساختار هندسی نانولوله بروکسول خالص (10,0) .....
۱۰۸	شکل ۱۴-۳. جذب نوع A در نانولوله بروکسول (8,0) .....
۱۰۸	شکل ۱۵-۳. جذب نوع B در نانولوله بروکسول (8,0) .....
۱۰۹	شکل ۱۶-۳. جذب نوع B در نانولوله بروکسول (10,0) .....

## چکیده:

در این تحقیق، هدف اصلی بررسی تأثیر جذب کربن منوکسید بر روی تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی (CSI) و تانسورهای پوشیدگی شیمیایی آنیزوتروپی (CSA) هسته‌های مختلف، ثابت‌های جفت‌شدن چهارقطبی هسته‌ای، گشتاور دوقطبی، گاف انرژی و طول پیوند در نانولوله‌های بور نیتريد (۸,۰) و (۱۰,۰) خالص و نانولوله‌های بروکسول (۸,۰) و (۱۰,۰) خالص و هر دو با اتصال CO می‌باشد. در ابتدا برای تمامی ساختارها به کمک نرم افزار گوسین ۰۳ در سطح محاسباتی B3LYP/6-31G\* برای نانولوله‌های بورنیتريد (۸,۰) و (۱۰,۰) و در سطح محاسباتی B3LYP/6-31G برای نانولوله‌های بروکسول (۸,۰) و (۱۰,۰) بهینه‌سازی انجام پذیرفت. در گام بعد، انرژی‌های جذب، طول پیوند، گشتاور دوقطبی، HLG (HOMO-LUMO Gap)، تانسورهای پوشیدگی ایزوتروپی و آنیزوتروپی و پارامترهای NQR هسته‌های مختلف در طی جذب کربن منوکسید در سه جهت متفاوت برای نانولوله‌های بور نیتريد (۸,۰) و (۱۰,۰) و دو جهت متفاوت برای نانولوله‌های بروکسول (۸,۰) و (۱۰,۰) مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهد که جذب کربن منوکسید در هر سه نوع جذب (A, B و C) در نانولوله‌های بور نیتريد (۸,۰) و (۱۰,۰) از نوع جذب فیزیکی بوده و انرژی‌های جذب 0.89687 kJ/mol تا 3.30077 kJ/mol می‌باشد. همچنین تغییرات تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی و تانسورهای پوشیدگی شیمیایی آنیزوتروپی هسته‌های مختلف و پارامترهای NQR جزئی بوده که این نتیجه به علت جذب ضعیف CO بر روی نانولوله‌های بور نیتريد بدست آمده است. نتایج در مورد جذب CO بر روی نانولوله‌های بروکسول (۸,۰) و (۱۰,۰) در دو موضع جذب (نوع A و B) نشان می‌دهند که این جذب از نوع شیمیایی قوی و گرمازا می‌باشد بطوریکه انرژی جذب نوع A و B در نانولوله بروکسول (۸,۰) به ترتیب 247.06372 kJ/mol و 352.65660 kJ/mol و انرژی جذب نوع A یا B در نانولوله بروکسول (۱۰,۰) 390.881 kJ/mol می‌باشد. همچنین محاسبات NMR و NQR تاکید می‌کنند که تغییرات تانسورهای پوشیدگی ایزوتروپی و آنیزوتروپی و پارامترهای NQR در موضع جذب شدیدتر می‌باشند

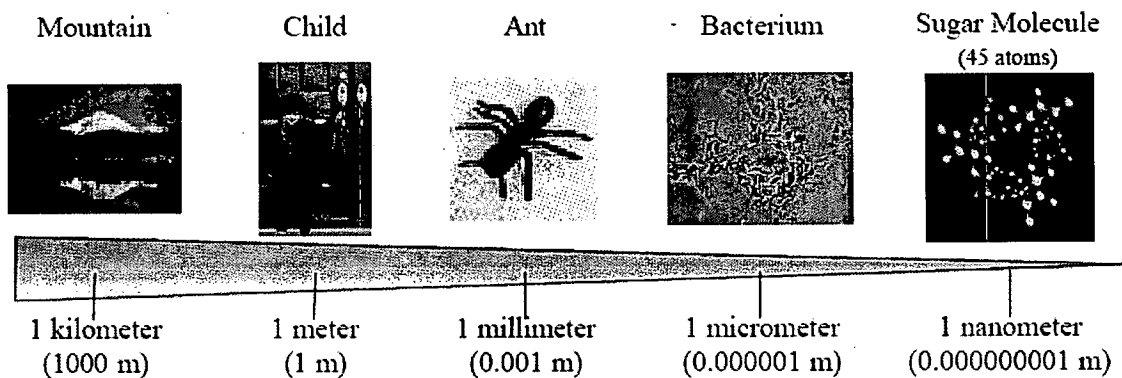


# فصل اول

مقدمه و تاریخچه

## ۱-۱- نانو مقدمه و تاریخچه

واحدهای مختلفی برای بیان اندازه و مقیاس وجود دارد. هر واحد به نسبت بزرگی یا کوچکی می‌تواند یکی از پسوندهای کیلو، مگا، پیکو و یا میلی، میکرو و غیره را به خود اختصاص دهد یک نانومتر یک میلیاردم متر ( $10^{-9}$  m) است. شکل (۱-۱). پیشوند نانودر اصل یک کلمه یونانی به معنی کوتوله و کوتاه قد<sup>۱</sup> است. این مقیاس را با ذکر مثال‌های عینی، بهتر می‌توان حس کرد. یک تار موی انسان به طور طبیعی قطری حدود ۵۰۰۰۰ نانومتر دارد. یک سلول باکتری، قطری معادل چند صد نانومتر دارد. کوچکترین اشیای قابل دید توسط چشم غیر مسلح اندازه‌های حدود ۱۰۰۰۰ نانومتر دارد. این مقیاس از آن جهت مهم است که طبیعت، سیستم‌ها را در مقیاس اتمی و نانو تحت کنترل دارد. از این رو می‌توان با حرکت به سمت ابعاد میکرو و سپس به سمت نانو به خواص بنیادی و ساختارهای اساسی مواد رسید.



شکل (۱-۱). اندازه تقریبی شیء‌ها از  $10^2$  m به  $10^{-9}$  m

<sup>۱</sup> -Dwarf

## ۱-۲- نانو تکنولوژی

در حالیکه تعاریف زیادی برای فناوری نانو وجود دارد<sup>۱</sup> NNI تعریفی را برای فناوری نانو ارائه می دهد که در برگیرنده هر سه تعریف ذیل باشد:

۱- توسعه فناوری و تحقیقات در سطوح اتمی، مولکولی و یا ماکرومولکولی در مقیاس اندازه ای ۱ تا ۱۰۰ نانومتر.

۲- خلق و استفاده از ساختارها و ابزار و سیستمهایی که به خاطر اندازه کوچک یا حد میانه آنها، خواص و عملکرد نوینی دارند .

۳- توانایی کنترل یا دستکاری در سطوح اتمی

نانو تکنولوژی تولید کارآمد مواد و دستگاهها و سیستمها با کنترل ماده در مقیاس طولی نانو، و بهره برداری از خواص و پدیده های نوظهوری است که در مقیاس نانو توسعه یافته اند.

### ۱-۲-۱- تاریخچه ای از ظهور نانو تکنولوژی

ریچارد فاینمن<sup>۲</sup>، متخصص کوانتوم نظری و دارنده جایزه نوبل، در سخنرانی معروف خود در سال ۱۹۵۹ میلادی با عنوان «آن پایین فضای بسیاری هست» به بررسی بعد رشد نیافته مواد پرداخت. وی در آن زمان اظهار کرد: «اصول فیزیک، تا آن جایی که من توانایی فهمیدن آن را دارم، بر خلاف امکان ساختن اتم به اتم چیزها حرفی نمی زنند.» او فرض را بر این قرار داد که اگر دانشمندان فرا گرفته اند چگونه ترانزیستورها و دیگر سازه ها را با مقیاس های کوچک بسازند، پس ما خواهیم توانست که آنها را کوچک و کوچک تر کنیم. در واقع آنها به مرزهای حقیقی خود در لبه های نامعلوم کوانتوم نزدیک خواهند بود. به نحوی که اتم را در مقابل دیگری به گونه ای قرار دهیم که بتوانیم کوچکترین محصول مصنوعی و ساختگی ممکن را ایجاد کنیم.

با استفاده از این فرم های بسیار کوچک چه وسایلی را که نمی توانیم ایجاد کنیم، ایجاد کنیم. فاینمن در ذهن خود یک «دکتر مولکولی» تصور کرد که صدها بار از یک سلول منحصر به فرد کوچکتر است و می تواند به بدن انسان تزریق شود و درون بدن برای انجام کاری یا مطالعه و تأیید سلامتی سلول ها و یا انجام اعمال ترمیمی و به طور کلی برای نگه داری بدن در سلامت کامل به سیر پردازد. می توان گفت در آن سال ها کلمه «بزرگ» از اهمیت ویژه ای

<sup>۱</sup> -National Nanotechnology Initiative

2.Richard Feynman

برخوردار بود (مثل علوم بزرگ، پروژه های مهندسی بزرگ و غیره، حتی کامپیوترها در دهه ۱۹۵۰ تمام طبقات ساختمان را اشغال می کردند). ولی از وقتی فاینمن نظر و منطقه خود را بازگو کرد، جهان روندی به سوی کوچکتر شدن در پیش گرفت. پس از آن، ماروین مینسکی<sup>۱</sup> تفکرات بسیار باروری داشت، که می توانست به اندیشه های فاینمن قوت ببخشد. مینسکی پدر علم هوش مصنوعی است و در دهه ۱۹۶۰-۱۹۷۰ جهان را در تفکراتی که مربوط به آینده می شد، رهبری کرد. در اواسط دهه هفتاد میلادی، اریک در کسلر<sup>۲</sup> که یک دانشجوی فارغ التحصیل بود، مینسکی را به عنوان استاد راهنما جهت تکمیل پایان نامه خود انتخاب کرد. او نیز این مسؤلیت را بر عهده گرفت. در کسلر سخت به وسایل بسیار کوچک فاینمن علاقه مند شده بود و قصد داشت تا در مورد توانایی های آنان به کاوش بپردازد. مینسکی نیز با وی موافقت کرد. در کسلر در اوایل دهه هشتاد، درجه استادی خود را در رشته علوم کامپیوتر دریافت کرد و گروهی از دانشجویان را به صورت انجمنی به دور خود جمع نمود. او افکار جوان ترها را با یک سری ایده ها که خود «نانوتکنولوژی» نامگذاری کرد، مشغول است. در کسلر اولین مقاله علمی خود را در مورد نانوتکنولوژی مولکولی در سال ۱۹۸۱ ارائه داد. در کسلر اولین درجه دکتری در نانوتکنولوژی را در سال ۱۹۹۱ دریافت کرد.

### ۱-۲-۲- تقسیم بندی های فنی و صنعتی نانو تکنولوژی

نانو تکنولوژی را هم از نظر شاخه های علمی و فنی آن وهم از نظر کاربردهای صنعتی می توان دسته بندی نمود. برخی از شاخه های علمی و فنی آن عبارتند از:

۱. نانو پودر
۲. نانو سرامیک
۳. نانو الکترونیک
۴. نانو پزشکی
۵. نانو زیست فناوری

تاثیر اساسی نانوتکنولوژی در رشد و پیشرفت بسیاری از صنایع و فناوری ها ماهیت فرا رشته ای علوم و فناوری نانو به عنوان توانمندی تولید مواد، ابزارها و سیستم های جدید با دقت اتم و مولکول، موجب تعریف کاربردهای بسیار

<sup>۱</sup> -Marvin Minsky

<sup>۲</sup> - Eric Drexler