

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه تربیت مدرس

نانوساختارهای کربنی

ساختار و خاصیت‌های الکترونی

تصنیف:

دکتر رویا مجیدی

عضو هیأت علمی دانشگاه تربیت مدرس شهید رجائی

سرشناسه	: مجیدی، رویا، ۱۳۵۹ -
عنوان و نام پدیدآور	: نانوساختارهای کربنی : ساختار و خاصیت‌های الکترونی/تصنیف رویا مجیدی ؛ ویراستار ادبی عاطفه نجیبی.
مشخصات نشر	: تهران: دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، ۱۴۰۱.
مشخصات ظاهری	: ۱۸۵ص.
شابک	: ۹۷۸-۶۲۲-۶۵۸۹-۳۹-۰
وضعیت فهرست نویسی	: فیپا
یادداشت	: کتابنامه: ص. ۱۶۱ - ۱۸۴.
یادداشت	: نمایه.
موضوع	: مواد نانوساختار Nanostructured materials ترکیب‌های کربن Carbon compounds
شناسه افزوده	: دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی
شناسه افزوده	: Shahid Rajaei Teacher Training University
رده بندی کنگره	: ۹/۴۱۸TA
رده بندی دیویی	: ۵/۶۲۰
شماره کتابشناسی ملی	: ۸۹۸۱۰۳۹
اطلاعات رکورد کتابشناسی	: فیپا



دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی

عنوان	: نانوساختارهای کربنی ساختار و خاصیت‌های الکترونی
تصنیف	: دکتر رویا مجیدی، عضو هیأت علمی دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی
ویراستار علمی	: دکتر حمید افتخاری
ویراستار ادبی	: عاطفه نجیبی
نوبت چاپ	: اول - پاییز ۱۴۰۱
انتشارات	: دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی
لیتوگرافی، چاپ	: چاپ و صحافی حامی
طراح جلد	: دکتر رومینا مجیدی
ناظر چاپ	: محمد معتمدی‌نژاد
کارشناس چاپ و صفحه‌آرا	: نیره فیروزی
کارشناس انتشارات	: طاهره کیا
شمارگان	: ۱۰۰ جلد
قیمت	: ۱۰۰ ۰۰۰ تومان
شابک	: ۹۷۸-۶۲۲-۶۵۸۹-۳۹-۰ ISBN: 978-622-6589-39-0

کلیه حقوق این اثر برای مؤلفان و مترجمان و دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی محفوظ است.
نشانی: تهران، لویزان، کد پستی ۱۵۸۱۱-۱۶۷۸۸، صندوق پستی ۱۶۳ - ۱۶۷۸۵، تلفن: (۲۶۳۲) ۹ - ۲۲۹۷۰۰۶۰،
۲۲۹۷۰۰۷۰، تلفکس: ۲۲۹۷۰۰۴۲، پست الکترونیکی: publish@sru.ac.ir، وب سایت: http://publish.sru.ac.ir

فهرست

ج	پیش‌گفتار
	فصل ۱: کربن و دگرشکل‌های آن
۱	۱-۱ کربن
۶	۲-۱ الماس
۸	۳-۱ گرافیت
۹	۴-۱ فولرن
۱۳	۵-۱ نانولوله‌های کربنی
۱۵	۶-۱ نانومخروط‌های کربنی
۱۷	۷-۱ کارباین
۱۸	۸-۱ کربن مایع
۱۹	۹-۱ کربن بی‌شکل
۲۰	۱۰-۱ کربن شبه الماس
	فصل ۲: گرافن
۲۱	۱-۲ مقدمه
۲۱	۲-۲ گرافن
۳۵	۳-۲ گرافن دولایه
۳۸	۴-۲ گرافن با نقص‌های ساختاری
	فصل ۳: صفحه‌های دوبعدی کربنی
۴۷	۱-۳ مقدمه
۴۷	۲-۳ گرافن متخلخل
۵۰	۳-۳ بی‌فنیل کربن
۵۳	۴-۳ گرافاین و گرافداین
۵۶	۱-۴-۳ گرافاین‌های α ، β و γ
۶۱	۵-۳ گرافاین α_2
۷۰	۶-۳ گرافاین $T_{4,4,4}$
۷۳	۷-۳ گرافن دوقلو

۷۵	۸-۳ گرافن T
۷۹	۹-۳ گرافین R
۸۳	۱۰-۳ گرافن T دوقلو
۸۷	۱۱-۳ گرافن S
۹۱	۱۲-۳ گرافن متخلخل C_2X (X=N, P, As)

فصل ۴: نانولوله‌های کربنی یا ساختار گرافنی

۹۵	۱-۴ مقدمه
۹۵	۲-۴ نانولوله‌های کربنی
۹۶	۳-۴ ساختار نانولوله‌های کربنی تک‌جداره
۱۰۲	۴-۴ منطقه بریلوئن نانولوله‌های کربنی
۱۰۴	۵-۴ تقریب چین خوردگی منطقه
۱۰۶	۱-۵-۴ رابطه‌های پراکندگی انرژی
۱۰۸	۲-۵-۴ چگالی حالت‌های الکترونی
۱۱۲	۶-۴ اثر انحنای دیواره نانولوله‌ها
۱۱۵	۷-۴ هیبرید شدن مجدد حالت‌های σ و π

فصل ۵: نانولوله‌های کربنی با ساختار غیرگرافنی

۱۱۹	۱-۵ مقدمه
۱۱۹	۲-۵ نانولوله‌های گرافینی
۱۲۷	۳-۵ نانولوله‌های گرافین α_2
۱۳۳	۴-۵ نانولوله‌های گرافن T
۱۴۰	۵-۵ نانولوله‌های گرافن S
۱۴۵	۶-۵ نانولوله‌های گرافن متخلخل نیتروژنه
۱۵۱	۷-۵ فولرن‌های تناوبی
۱۵۵	پیوست
۱۶۱	مرجع‌ها
۱۷۳	واژه‌نامه (انگلیسی به فارسی)
۱۷۷	واژه‌نامه (فارسی به انگلیسی)
۱۸۱	نمایه

پیش‌گفتار

به نام خالق زیبایی‌ها

بی‌شک زیبایی‌های آشکار و پنهان بسیاری در جهان هستی وجود دارند که با تأمل و تفکر در آن‌ها می‌توان پی به وجود خالق آن‌ها برد. نظم در نظام آفرینش، یکی از این زیبایی‌های حیرت‌انگیز است. ظاهر زیبا و منظم بلورها همواره توجه بشر را به خود جلب کرده است. ارتباط بین زیبایی بیرونی بلورها و ساختار داخلی آن‌ها، سال‌ها ذهن بسیاری از دانشمندان را به خود مشغول نموده بود. در اوایل قرن بیستم، با کشف اشعه ایکس دسترسی به دنیای درونی ماده امکان‌پذیر شد. کشف‌های علمی در ارتباط با ساختار داخلی بلورها، نظم در طبیعت را آشکارتر نمود.

علم نانو که موضوع اصلی آن ماده و رفتار آن در ابعاد حدود ۱ تا ۱۰۰ نانومتر است، در سال‌های اخیر توجه بسیاری را به خود معطوف کرده است. در ابعاد نانو، ماده‌ها رفتار متفاوتی نشان می‌دهند، لذا مطالعه ساختار و خاصیت‌های نانوساختارها از اهمیت خاصی برخوردار است. در فناوری نانو، ترکیب‌های کربنی از جایگاه ویژه‌ای برخوردار هستند. نانوساختارهایی همچون فولرن، گرافن و نانولوله‌های کربنی از مهم‌ترین نانوساختارهای کربنی محسوب می‌شوند. اگرچه تمامی این نانوساختارها از اتم کربن تشکیل شده‌اند، تفاوت در نحوه چیدمان و پیوند بین اتم‌ها باعث خواص متفاوت در این نانومواد شده است.

در این کتاب به بررسی ساختار اتمی و خاصیت الکترونی نانوساختارهای کربنی (صفحه‌های دوبعدی و نانولوله‌های یک‌بعدی) پرداخته می‌شود. فصل ۱ با اتم کربن آغاز می‌گردد و سپس به دگرشکل‌های آن اشاره می‌شود. در فصل ۲، گرافن به‌عنوان معروف‌ترین صفحه دوبعدی کربنی، مفصل‌تر بررسی می‌شود. توسعه گرافن دری به سوی کشف ماده‌های دوبعدی جدیدتر باز نموده است. به برخی از این صفحه‌های دوبعدی کربنی مانند گرافدین‌ها، گرافاین، گرافن دوقلو و غیره در فصل ۳ اشاره می‌شود. نانولوله‌های کربنی یکی از جالب‌ترین نانوساختارهای یک‌بعدی کربنی هستند. در فصل‌های ۴ و ۵، نانولوله‌های کربنی حاصل از لوله نمودن صفحه گرافن یا دیگر صفحه‌های کربنی، بررسی می‌شوند. این صفحه‌ها و نانولوله‌های کربنی با ساختار اتمی و رفتار الکترونی متنوع می‌توانند کاندیداهای مناسبی برای استفاده در قطعه‌های الکترونیکی یا حسگرهای گازی باشند.

این کتاب می‌تواند علاوه بر دانشجویان رشته‌هایی مانند فیزیک، شیمی، مواد و نانو، برای علاقمندان به بحث نانوساختارها نیز جذاب باشد. زیرا سعی شده است که بحث‌ها به گونه‌ای بیان شوند که برای درک آن‌ها حداقل آشنایی با مفهومی‌های بنیادی بلورشناسی و فیزیک نیاز باشد. از بیان رابطه‌های ریاضی و جزئیات مربوط به شبیه‌سازی‌ها تا حد امکان اجتناب شده است. برای ایجاد ساختار اتمی صفحه گرافن، نانولوله‌ها و نانومخروط‌های گرافنی می‌توان از نرم‌افزارهای tubegen یا nanotube modeler استفاده نمود. همچنین، ساختار اتمی فولرن‌های مختلف در سایت <https://nanotube.msu.edu/fullerene> در دسترس است. ساختارها با نرم‌افزار gaussview قابل مشاهده هستند. برای مقایسه ساده‌تر، ساختارهای نوار الکترونی و چگالی حالت‌های الکترونی بر مبنای نظریه تابعی چگالی و با استفاده از نرم‌افزار openMX محاسبه شده‌اند. اطلاعات کامل مربوط به این نرم‌افزار در سایت www.openmx-square.org در دسترس است. کمیت‌های مربوط به خاصیت‌های مکانیکی صفحه‌های دوبعدی با استفاده از نرم‌افزار siesta محاسبه شده‌اند. جزئیات مربوط به محاسبه‌ها در مقاله‌ها موجود هستند.

در پایان از دانشجویان و اساتید گرانقدر خواهشمندم با بیان نظرها و پیشنهادهای ارزشمند خود، بنده را جهت بهبود کتاب در آینده یاری نمایند.

رویا مجیدی

پاییز ۱۴۰۱

royamajidi@gmail.com
r.majidi@sru.ac.ir

فصل ۱

کربن و دگرشکل‌های آن

۱-۱- کربن

هر نسلی به یک عنصر خاص در جدول تناوبی علاقمند است. در قرون وسطی، طلا و نقره به‌لحاظ اقتصادی توجه بسیاری را به خود معطوف نمودند. سپس گوگرد به‌دلیل استفاده فراوان از آن در باروت، به عنصر مورد علاقه تبدیل شد. دوران هسته‌ای اهمیت اورانیوم را آشکار کرد. فناوری اطلاعات، سیلیکون را به یک ستاره تبدیل نمود. اکنون نیز در بحث فناوری پاک، تمرکز بر لیتیم است [۱]. با این‌حال، قرن بیست و یکم را می‌توان به‌عنوان عصر کربن در نظر گرفت. کربن به شکل CO_2 هوا را آلوده می‌کند. در حالی‌که خالص‌ترین شکل آن می‌تواند محیط را پاک نماید که خبر خوبی برای نسل‌های آینده است. این ویژگی، کربن را به یکی از پرکاربردترین عناصر در تاریخ بشریت تبدیل نموده است [۲].

کربن چهارمین عنصر فراوان در جهان و پانزدهمین عنصر فراوان در پوسته زمین است. در تمام موجودات زنده از جمله انسان، حیوان و گیاهان، کربن وجود دارد. در بدن انسان از نظر جرم، کربن دومین عنصر فراوان بعد از اکسیژن است [۳]. مواد زیستی مانند پروتئین‌ها، اسیدهای آمینه، لیپیدها و اسید نوکلئیک‌ها نیز دارای پایه کربنی هستند [۴].

کربن به شکل پانزده ایزوتوپ مختلف یافت می‌شود. ^{12}C ، ^{13}C و ^{14}C پایدارترین ایزوتوپ‌های کربن محسوب می‌شوند. ایزوتوپ ^{14}C یک ماده رادیواکتیو با نیمه عمر ۵۷۳۰ سال است که از آن در تاریخ‌گذاری رادیوکربن استفاده می‌گردد. ۹۹ درصد کربن در دسترس، ایزوتوپ ^{12}C است که واحد جرم اتمی براساس جرم این ایزوتوپ تعریف شده است. واحد جرم اتمی برابر با یک دوازدهم جرم ^{12}C در نظر گرفته شده است. در مقایسه با ^{12}C ، ^{13}C فراوانی بسیار کمتری دارد و یک هسته فعال در طیف‌سنجی تشدید مغناطیسی هسته محسوب می‌گردد [۵].