چکیده

موضوع : مطالعه اثر طلا بر خواص ساختاری نانولوله های کربنی وتوانایی آن در جذب کربن مونوکسید. خواص ویژه ومنحصر به فردنانولوله ها از جمله مدول یانگ بالا واستحکام کششی خوب از یک طرف وطبیعت کربنی بودن آنها (بخاطر اینکه کربن ماده ای کم وزن، بسیار پایدار وساده جهت انجام فرایند ها که نسبت به فلزات برای تولید، ارزانتر می باشد) باعث شده که در دهه گذشته شاهد تحقیقات مهمی در کارایی وپر باری روشهای رشد نانولوله ها باشد. تحقیقات نشان داد که با توجه به جهت لوله شدن صفحه گرافیتی، آن ها می توانند دارای رفتار فلزی یا نیمه هادی با گاف انرژی های مختلف باشند. به جایگزین کردن ناخالصی ها به جای اتم های تشکیل دهنده ی دیواره نانولوله، ناخالصی زدن یا داپ کردن می گویند که به منظور اصلاح خواص نانولوله به کار می رود. با عمل داپ کردن در نانولوله می توان شکاف باند انرژی را کاهش ومنجر به افزایش میزان رسانایی نانولوله ها شد. از آنجا که نانولوله ها تحمل دمای بالا، مقاومت در برابر اکسید شدن و استحکام دارند، با افزایش رسانایی به این روش می توان از آنها در کار های الکترونیکی به خوبی استفاده کرد.در این پروژه ابتدا نانولوله کربنی تک دیواره (٦،٠) توسط نرم افزارهای HyperChem، Nanotube modeler رسم شد و سپس با GaussView 5.0، ساختار مورد نظر را مشاهده نمودیم و فایل ورودی Gaussian 09 را از طریق آن ساختیم. توسط نرم افزار گوسین به روش تئوری تابعی دانسیته، تابع هیبریدی DFT(B3LYP) و سری پایه LANL2DZ ،ساختار ترکیب مورد نظر به وجود آمده در دمای ۲۹۸Kو فشار ۱atm بهینه کرده و در نهایت بر روی ترکیبات بهینه سازی شده مطالعات فرکانس و NBO انجام شد. در این مطالعات کمیت هایی نظیر انرژی یونیزاسیون، الکترون خواهی، پتانسیل شیمیایی الکترونی، سختی، نرمی، شکاف HOMO-LUMO، آنتالپی و انرژی آزاد گیبس محاسبه شد..

نتایج حاصله نشان داد که داپ کردن طلا در نانو لوله از یک موقعیت با داشتن آنتالپی و آنتروپی مساعد و انرژی آزاد گیبس منفی امکان پذیر می باشد با توجه به افزایش انرژی یونیزاسیون در نانو لوله داپ شده نسبت به نانو لوله خالص پایداری در آن افزایش یافته است .جذب فیزیکی در دو موقعیت نانولوله داپ شده برسی شد که در هر دو حالت جذب صورت گرفته است پس می توان از این ماده به عنوان سنسور کربن مونوکسید استفاده کرد.