

مطالعه اثر طلا بر خواص ساختاری نانولوله های کربنی و توانایی آن در جذب کربن مونوکسید

لیلا فتاحی *، 227،

1395-11-27

موضوع : مطالعه اثر طلا بر خواص ساختاری نانولوله های کربنی و توانایی آن در جذب کربن مونوکسید. خواص ویژه و منحصر به فرد نانولوله ها از جمله مدول یانگ بالا و استحکام کششی خوب از یک طرف و طبیعت کربنی بودن آنها (بخاطر اینکه کربن ماده ای کم وزن، بسیار پایدار و ساده جهت انجام فرایند ها که نسبت به فلزات برای تولید، ارزانتر می باشد) باعث شده که در دهه گذشته شاهد تحقیقات مهمی در کارایی و پیر 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 و منجر 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 (6,0) توسط نرم افزارهای HyperChem، modeler Nanotube رسم شد و سپس با 5.0 GaussView، ساختار مورد نظر را مشاهده نمودیم و فایل ورودی 09 Gaussian را از طریق آن ساختیم. توسط نرم افزار گوسین به روش تئوری تابعی دانسیته، تابع هیبریدی فشار 298 و K دمای در آمده وجود به نظر مورد ترکیب ساختار، LANL2DZ پایه سری و DFT(B3LYP) شد انجام NBO و فرکانس مطالعات شده سازی بهینه ترکیبات روی بر نهایت در و کرده بهینه atm1 در این مطالعات کمیت هایی نظیر انرژی یونیزاسیون، الکترون خواهی، پتانسیل شیمیایی الکترونی، سختی، نرمی، شکاف LUMO-HOMO، 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 بررسی شد که در هر دو حالت جذب صورت گرفته است پس می توان از این ماده به عنوان سنسور کربن مونوکسید استفاده کرد.

کلمات کلیدی : نانولوله کربنی، نانولوله داپ شده، طلا خواص مکانیکی، تئوری تابع چگالی

