



ارائه شده توسط:

سایت ترجمه فا

مرجع جدیدترین مقالات ترجمه شده

از نشریات معتبر

بهم آمیختگی فولرن های (هر مولکول تشکیل شده از کربن به شکل هاله کروی، بیضوی،

لوله ای و دیگر اشکال) B_nN_n : مسیر جدیدی برای تولید نانولوله های نیتريد بور با قطر

کوچک

چکیده

با استفاده از محاسبات نظریه وظیفه ای چگالی، ما پیش بینی نمودیم که نانولوله های تک جداره نیم کره ای- پوششدار نیتريد بورون (BN) با قطر کوچک را می توان از طریق بهم آمیختگی نانوخوشه های پایدار تولید نمود. به خصوص، خوشه های B_nN_n ($n = 12, 24$) نمایشگر ثبات بالا و منجر به نانولوله های BN (3, 3) و (4, 4)، به ترتیب، در نظر گرفته می شوند. نانولوله های BN تشکیل شده با طول محدود دارای خواص نیمه هادی با شکاف های باند گسترده هستند که برای کاربردهای دستگاه های-نانو جذاب است.

کلید واژه ها: فولرن های B_nN_n ، بهم آمیختگی، نانولوله های BN، محاسبات چگالی تئوری کاربردی

1. مقدمه

پس از تحقق تجربی موفق آن [1]، نانولوله های کربنی (CNTs) علاقه فوق العاده ای را به خواص فوق العاده ساختارهای نانو لوله ای تحریک نمودند [2]. به تازگی، نانولوله های نیتريد بور (BNNTs)، که ساختاری شبیه به نانولوله ها دارند، توجه فزاینده ای [3-8] را به خود جلب کرده اند. BNNTs از لحاظ نظری [9] در سال 1994 پیش بینی شدند و با موفقیت در سال 1995 [10] به تولید رسیدند. صرف نظر از اینکه نانولوله های تک جداره یا چند جداره باشند، در مقایسه با CNT های فلزی یا نیمه هادی، BNNTs همه نیمه هادی های شکاف باند گسترده پایدار مستقل از ماریپچی و قطر آن هستند [8]. علاوه بر این، BNNTs دارای ثبات بالای شیمیایی، خواص مکانیکی عالی، و هدایت حرارتی بالا هستند [5]. بنابراین، انتظار می رود BNNTs نانومواد امیدوار کننده در زمینه های گوناگون بالقوه مانند دستگاه های-نانو، کائوچو و مواد مرکب عملکردی و بسترهای الکتريکی عایق باشد [5,11].

امروزه ، پژوهش در مورد نانو لوله های کربنی محبوب شده است چرا که بسیاری از آزمایشگاه ها قادر به تولید نمونه های خود برای تحقیقات مختلف هستند. با این حال، پیشرفت تحقیقات BNNT هنوز هم در دسترس بودن نمونه BNNT برای تحقیقات گسترده از خواص و کاربرد آنها را محدود نموده است. تکنیک های شناخته شده برای رشد BNNT، به عنوان مثال، تخلیه قوس [10] ، تبخیر لیزر [12] ، روش جایگزینی BN از قالب های [13] CNT ، رسوب شیمیایی بخار ([14] CVD) ، و فرز توپی با درجه حرارت بالا [15] شامل هر دو ابزار خاص، درجه حرارت رشد بالا C) ، و / یا شیمی خطرناک می شوند. اخیرا ، با وجود سنتز در دمای پایین BNNTs ، مانند رسوب پالس-لیزر پیشرفته پلاسما ([16] PE- PLD) ، تولید نمونه های BNNT با کیفیت بالا هنوز هم دشوار است. علاوه بر این، رشد BNNTs بسیار خالص تک دیواره، هنوز یک چالش باقی مانده است، به ویژه برای BNNTs قطر کوچک [7] . تا به امروز، تعدادی از آثار نظری، وجود BNNTs با قطر کوچک را پیش بینی کرده است (به عنوان مثال ، کد عکس را ببینید. [9]) و احتمالا دارای خواص نیمه هادی با شکاف باند مستقیم یا غیر مستقیم است. با این حال، گزارش های تجربی در ساخت این نوع از BNNT وجود دارد؛ فقط زیگزاگ (6 ، 0) BNNT با قطر کوچک از 5 Å گزارش شده است [17] . این، مانع درک جدیدی از خواص BNNTs و ارتقاء تحقیقات در این زمینه شده است.

از سوی دیگر، نانو لوله های کربنی کوچک با قطر [7] [18] ، [5] [19] ، و [4] [20] Å [21] با C_{60} ، C_{36} ، and C_{20} مرتبط هستند. انتظار می رود این سازگاری برای BNNTs نیز معتبر باشد. فولرن های BN به لحاظ نظری پیش بینی شده اند [22-26] ، و فولرن های B_nN_n با $n = 12-60$ با موفقیت ساخته شده اند [27-31] . این فولرن های B_nN_n می توانند در دیگر نانومواد BN [32-34] مونتاز شوند.

در این نامه، نتایج اولیه امیدوار کننده ما برای نشان دادن امکان تولید BNNTs با قطر کوچک با درهم آمیختگی فولرن های کوچک B در دمای اتاق. ارائه شده است در کار فعلی، فولرن های $B_{12}N_{12}$ و $B_{24}N_{24}$ به عنوان نمونه انتخاب می شوند.

2. روش های محاسباتی

همه محاسبات با استفاده از تئوری چگالی تابعی چرخش قطبی (DFT) پیاده سازی شده در گرم DMOL (شرکت، Accelrys) [35,36] انجام شده است. تقریب شیب تعمیم یافته فرموله شده توسط Perdew, Burke, and Ernzerhof (PBE) [37] برای توصیف تابع انرژی مرتبط با مبادله به کار گرفته می شود. تمام پرداخت های هسته ای تمام-الکترون و مجموعه دوتایی مبنای عددی همراه با توابع D-قطبی (به عنوان مثال، مجموعه DNP) انتخاب می شوند. روش های میدانی خود سازگار با معیار همگرایی از 10-6 a.u روی چگالی انرژی و الکترون انجام می شوند. این هندسه ها به طور کامل و بدون هر گونه محدودیت تقارن بهینه می شوند. ما از یک معیار همگرایی 10-3 a.u در مورد شیب و جابه جایی و 10-5 a.u در مورد کل انرژی در بهینه سازی هندسی استفاده می کنیم. چنین تحمل انرژی و حداکثر نیرو، برای اطمینان از استقرار ساختارهای تعادل واقعی به اندازه کافی کوچک می باشد. تجزیه و تحلیل ارتعاشی حالت عادی برای این اعمال می شود که تضمین کند هندسه های بهینه سازی شده، مینیمم واقعی محلی هستند. نتایج حاصل از محاسبات تجزیه و تحلیل ارتعاشی برای محاسبه خواص ترمودینامیکی مهم از قبیل آنتالپی (H)، آنتروپی (S) و انرژی آزاد (G) در درجه حرارت محدود استفاده می شود.

3. نتایج و بحث

ما این بررسی را با تایید خواص ساختاری و الکترونیکی از فولرن های B_nN_n ($n = 12, 24$) آغاز می کنیم. اشکال (A1) و 2 (A1)، تنظیمات بهینه سازی شده از تعادل $B_{12}N_{12}$ و $B_{24}N_{24}$ را نشان می دهد. فولرن $B_{12}N_{12}$ در ساختار قفس کروی با تقارن بالا (Th) شامل شش حلقه جدا شده چهار عضوی (MRS4) و هشت حلقه شش عضوی (MRS6) بسیار با ثبات هستند. فولرن های $B_{12}N_{12}$ به عنوان کوچکترین خوشه حجم اطاعت کننده از قانون MRS4 جدا شده در نظر گرفته می شوند (مشابه با قانون پنج ضلعی جدا برای buckminsterfullerene) که به عنوان یک معیار برای ثبات آن به کار گرفته می شود. شکاف انرژی بین بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده (انسان) و کمترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده (LUMO) برای فولرن

5.055 ولت، $B_{12}N_{12}$ است، که نشانه ای از خواص نیمه هادی آن می باشد. فولرن های $B_{24}N_{24}$ با تقارن

S_8 ، که شامل دو حلقه هشت عضوی (MRS_8)، هشت MRS_4 جدا شده و شانزده MRS_6 هستند، یافت می

شود مطلوب ترین ساختار قفس از نظر انرژی هستند. دو MRS_8 جدا شده در انتهای قفس واقع شده اند. علاوه بر

این، مقدار شکاف HOMO-LUMO برای فولرن های $B_{24}N_{24}$ ، 4.723 ولت است. نتایج محاسبه شده در

توافق کامل با مطالعات قبلی نظری و تجربی در فولرن های [31-22] B_nN_n ($n = 12, 24$) قرار دارند.

پس از آن، رفتار رشد اولیه در مورد بهم آمیختگی فولرن های B_nN_n ($n = 12, 24$) در نظر گرفته شد.

اشکال 1 و 2 نشان دهنده تحولات ساختار هندسی بهینه شده از ($M = 1-5$) B به هم آمیختگی های

$(B_{12}N_{12})_m$ و $(B_{24}N_{24})_m$ ($m = 1-5$) هستند. در مطالعه حاضر، همه فعل و انفعالات دایمر

ممکن بررسی می شوند. بهم آمیختگی دو قفس $B_{12}N_{12}$ که از نظر انرژی مناسب است، منجر به محصولات

ساختاری پایدار می شود [شکل 1 (A 2), 2D]. با این حال، MR 6 با بهم آمیختگی دو قفس $B_{12}N_{12}$ روبرو

می شود، بهینه سازی کامل آنها منجر به یک خوشه $B_{24}N_{24}$ می شود (ایزومر 2a) که از نظر انرژی در میان بهم

آمیختگی ها، مطلوب ترین حالت است. پایدار ترین ایزومر 2a از دایمرهای $B_{12}N_{12}$ ، از نظر انرژی با توجه به

دیگر ایزومرهای دایمریک حداقل، 7.150 ولت پایین تر است. این نشان می دهد که این سیستم ممکن است به یک

حداقل بزرگ در سطح انرژی پتانسیل منجر شود در مدتی که MR 6 با بهم آمیختگی مواجه می شود Matxain و

همکاران [32] همچنین گزارش دادند که بهم آمیختگی وجه MR 6 برای قفس های $B_{12}N_{12}$ منجر به یک

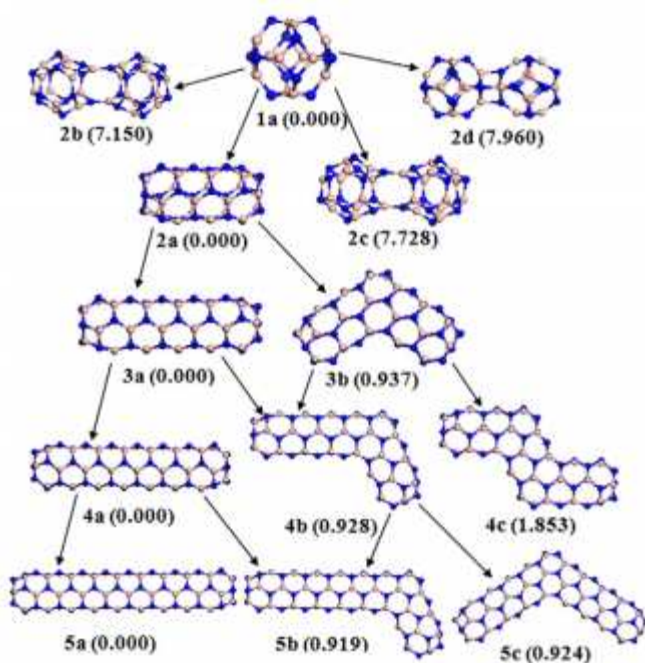
خوشه چگال می شود. با توجه به تفاوت های بزرگ در انرژی بین بهم آمیختگی وجه MR 6 و دیگران، ما تنها بهم

آمیختگی وجه MR 6 را در زیر در هنگامی که قفس ها گرد هم آورده می شوند، در نظر می گیریم. شکل 1 (A 3) و

(B 3) دو ساختار با پایین ترین انرژی را از تریمرهای $B_{12}N_{12}$ نشان می دهد. مایه اصل لوله ای، پایدار ترین

ساختار است. ساختار دوم با مایه اصلی لوله ای خم شده، فقط 0.937 ولت در انرژی، بالاتر است. برای تعیین بیشتر

ویژگی های هندسی بهم آمیختگی های $(B_{12}N_{12})_m$ ، هندسه های $(B_{12}N_{12})_4$ تحت آزمون قرار گرفت. با گرد هم آوردن چهار قفس $B_{12}N_{12}$ با هم، مایه اصلی لوله ای هنوز هم از نظر انرژی به مایه اصلی خم شده ترجیح داده می شود. زمانی که تعداد منومرهای $B_{12}N_{12}$ افزایش می یابد، این ویژگی لوله ای ادامه می یابد همانطور که در شکل 1 نشان داده شده است. با توجه به پایین ترین انرژی از فرآیند بهم آمیختگی، می توانیم این روند بهم آمیختگی را به شکل یک صندلی دسته دار (3, 3) نانولوله BN با کلاه های نیم کروی درک نماییم. نانولوله صندلی دسته دار (3, 3)، BN دارای قطر کوچک حدود 4.14 \AA است.



شکل 1

بهم آمیختگی فولرن $B_{24}N_{24}$ مشابه بهم آمیختگی $B_{12}N_{12}$ است، همانطور که در شکل 2 نشان داده شده است. بهم آمیختگی وجه $MR8$ ، از نظر انرژی، از بهم آمیختگی های دیگر مطلوب تر است. برای دیمرها، ساختار لوله ای، شکلی با پایین ترین انرژی است که حداقل 13.008 ولت در انرژی پایین تر از بهم آمیختگی های دیگر است. ساختار لوله ای به دلیل تفاوت های بزرگ در انرژی در میان ایزومرها تداوم می یابد. نانولوله صندلی دسته دار (4, 4) BN های با قطر کوچک از 5.47 \AA را می توان با بهم آمیختگی وجه $MR 8$ از قفس های $B_{24}N_{24}$ تشکیل داد. تعداد قفس های $B_{24}N_{24}$ به طور آشکارا طول لوله را تعیین می کند.

System	E_b (eV)	ΔG (eV)	E_g (eV)
$B_{12}N_{12}$	12.687		5.055
$(B_{12}N_{12})_2$	13.100	-9.004	4.656
$(B_{12}N_{12})_3$	13.238	-8.992	4.529
$(B_{12}N_{12})_4$	13.307	-8.915	4.463
$(B_{12}N_{12})_5$	13.348	-9.042	4.421
(3, 3) BNNT	13.451		4.44
$B_{24}N_{24}$	13.169		4.723
$(B_{24}N_{24})_2$	13.463	-9.453	4.512
$(B_{24}N_{24})_3$	13.564	-16.936	4.390
$(B_{24}N_{24})_4$	13.614	-13.357	4.330
(4, 4) BNNT	13.756		4.40

^a The free energy difference for the coalescence channel " $(B_nN_n)_{m-1} + B_nN_n \rightarrow (B_nN_n)_m$ " at room temperature is defined by $\Delta G(T) = \Sigma \Delta G_{\text{product}}(T) - \Sigma \Delta G_{\text{reactant}}(T)$.

جدول 1: انرژی اتصال در هر $BN (E_b)$ ، تفاوت انرژی آزاد $(\Delta G)^a$ ، شکاف انرژی (E_g) برای پایدارترین

ساختارها از بهم آمیختگی های B_nN_n و BNNT های متناظر.

انرژی محاسبه شده اتصال در هر $BN (E_b)$ از پایدارترین مونتاژ $B_nN_n (n = 12, 24)$ در جدول 1 نشان

داده شده است. E_b توسط $E_b = (nE_B + nE_N - E_{BN})/n$ تعریف می شود که در آن E_B and E_N انرژی

های کلی اتم B و N جدا شده هستند؛ E_{BN} کل انرژی سیستم B_nN_n متناظر است؛ و n تعداد اتم های B و N

درگیر است. برای هر مونتاژ $B_nN_n (n = 12, 24)$ ، E_b به طور هموار با افزایش اندازه مونتاژ m افزایش می

یابد که نشان می دهد که مونتاژهای $(B_{12}N_{12})_m$ و $(B_{24}N_{24})_m$ پایدارتر از مونتاژهای $(B_{12}N_{12})_{m-m'}$ و

$(B_{24}N_{24})_{m-m'}$ ($m > m'$) به ترتیب خواهند بود. بر اساس جدول 1، E_b برابر BNNT ها به طور مشخص تنها

کمی بزرگتر از این مقدار برای مونتاژ B_nN_n با اندازه محدود است. این می تواند تایید کند که BNNT های کلاه دار

نیم کروی با قطرهای کوچک می توانند توسط بهم آمیختگی فولرن های B_nN_n تشکیل شوند. برای درک پایداری

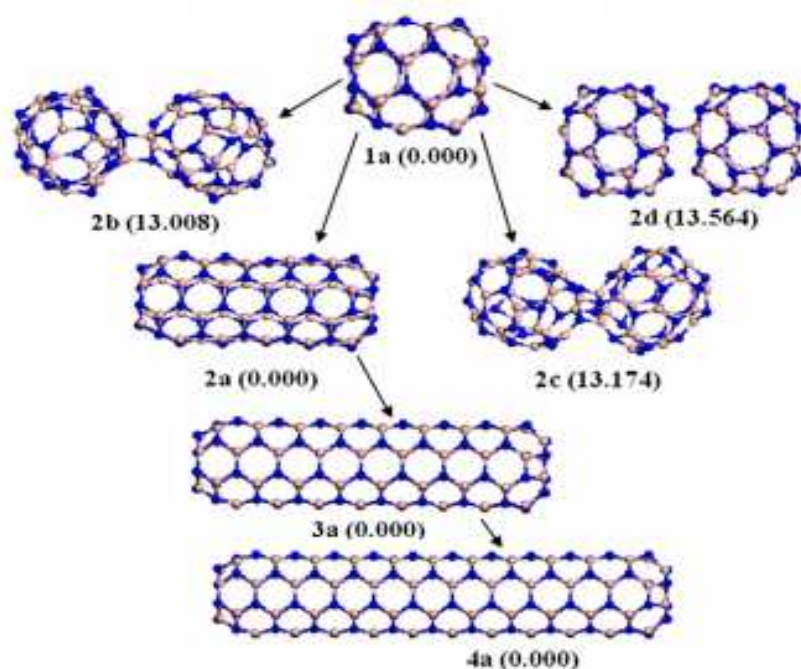
بهم آمیختگی های فولرن B_nN_n و عملی بودن بیشتر آن، تفاوت های انرژی آزاد از فرآیند بهم آمیختگی در دمای

اتاق محاسبه می شود. تفاوت های انرژی آزاد برای پایدارترین بهم آمیختگی های $(B_nN_n)_m$ همه منفی هستند که

نشان می دهد که این بهم آمیختگی ها از نظر انرژی مطلوب هستند و اینکه فرآیند بهم آمیختگی به طور خود به

خودی در دمای اتاق رخ می دهد.

شکاف های HOMO - LUMO برای پایدار ترین ساختارها برای به دست آوردن درک بیشتری از خصوصیات ساختار فولرن های به هم آمیخته محاسبه می شود. نتایج در جدول 1 ذکر شده است. شکاف HOMO - LUMO حساس به اندازه مونتاژ می باشند. دامنه شکاف 5.055-4.330 ولت تغییر می کند که نشان می دهد که مونتاژها با اندازه محدود BnNn با ساختارهای لوله ای با پوشش گرد دارای خواص نیمه هادی هستند. از نقطه نظر توسعه نانو ساختارها بر اساس BN-، رفتار نیمه هادی مورد بحث از نانولوله های BN محدود برای کاربردهای دستگاه های-نانو بسیار جالب است.



شکل 2

4. نتیجه گیری ها

به طور خلاصه، با استفاده از چگالی محاسبات نظریه تابعی، ما شواهد نظری را از شکل گیری نانولوله های BN نیم کره - پوشش دار تک جداره با قطر کوچک از طریق بهم آمیختگی فولرن های B_nN_n ($n = 12, 24$) گزارش نمودیم. فرآیند بهم آمیختگی یک مسیر با انرژی کارآمد برای تشکیل نانولوله های BN کوچک با کلاه نیم کره در دمای اتاق است. بهم آمیختگی فولرن های $B_{12}N_{12}$ ، نانولوله های صندلی دسته دار (3, 3) BN

با قطر کوچک حدود 4.14 \AA را تولید می کند. بهم آمیختگی فولرن های $B_{24}N_{24}$ منجر به یک نانولوله صندلی دسته دارد (4, 4) BN با قطر 5.47 \AA می شود. نانولوله های BN با اندازه محدود دارای خواص نیمه هادی هستند که نشان از سودمندی آن در کاربردهای دستگاه های-نانو دارد. با امیدواری، نتایج ما، آزمایشات برای تولید این BNNTs تک جداره نیم کره-پوشش دار با قطر کوچک را تحریک خواهد نمود.

تقدیرات

این کار توسط برنامه تحقیقاتی عمومی ملی چین (973) تحت مجوز شماره CB6313042010، بنیاد علوم طبیعی ملی چین (شماره 11074214)، و وزارت علوم و فناوری چین مورد حمایت قرار گرفت.

References

- [1] S. Iijima, Nature 354 (1991) 56.
- [2] R. Saito, G. Dresselhaus, M. Dresselhaus, Physical Properties of Carbon Nanotubes, Imperial College Press, London, 1998.
- [3] D. Golberg, Y. Bando, C.C. Tang, C.Y. Zhi, Adv. Mater. 19 (2007) 2413.
- [4] R. Arenal, X. Blasé, A. Loiseau, Adv. Phys. 59 (2010) 101.
- [5] D. Golberg, Y. Bando, Y. Huang, T. Terao, M. Mitome, C. Tang, C. Zhi, ACS Nano 4 (2010) 2979.
- [6] J. Wang, C.H. Lee, Y.K. Yap, Nanoscale 2 (2010) 2028.
- [7] C. Zhi, Y. Bando, C. Tang, D. Golberg, Mater. Sci. Eng. R 70 (2010) 92.
- [8] P. Ayala, R. Arenal, A. Loiseau, A. Rubio, T. Pichler, Rev. Mod. Phys. 82 (2010) 1844.
- [9] A. Rubio, J.L. Corkill, M.L. Cohen, Phys. Rev. B 49 (1994) 5081.
- [10] N.G. Chopra, R.J. Luyken, K. Cherrey, V.H. Crespi, M.L. Cohen, S.G. Louie, A. Zettl, Science 269 (1995) 966.
- [11] M. Radosavljević, J. Appenzeller, V. Derycke, R. Martel, P. Avouris, A. Loiseau, J. Cochon, D. Pigache, Appl. Phys. Lett. 82 (2003) 4131.
- [12] R. Arenal, O. Stephan, J.L. Cochon, A. Loiseau, J. Am. Chem. Soc. 129 (2007) 16183.
- [13] W. Han, Y. Bando, K. Kurashima, T. Sato, Appl. Phys. Lett. 73 (1998) 3085.
- [14] M.J. Kim, S. Chatterjee, S.M. Kim, E.A. Stach, M.G. Bradley, M.J. Pender, L.G. Sneddon, B. Maruyama, Nano Lett. 8 (2008) 3298.
- [15] Y. Chen, L.T. Chadderton, J.F. Gerald, J.S. Williams, Appl. Phys. Lett. 74 (1999) 2960.
- [16] J. Wang, V.K. Kayastha, Y.K. Yap, Z. Fan, J.G. Lu, Z. Pan, L.N. Ivanov, A.A. Puzosky, D.B. Geohegan, Nano Lett. 5 (2005) 2528.
- [17] E. Bengu, L.D. Marks, Phys. Rev. Lett. 86 (2001) 2385.
- [18] P.M. Ajayan, S. Iijima, Nature 358 (1992) 23.
- [19] L.F. Sun, S.S. Xie, W. Liu, W.Y. Zhou, Z.Q. Liu, D.S. Tang, G. Wang, L.X. Qian, Nature 403 (2000) 384.
- [20] L.C. Qin, X.L. Zhao, K. Hirahara, Y. Miyamoto, Y. Ando, S. Iijima, Nature 408 (2000) 50.
- [21] N. Wang, Z.K. Tang, G.D. Li, J.S. Chen, Nature 408 (2000) 50.
- [22] R.J.C. Batista, M.S.C. Mazzoni, H. Chacham, Chem. Phys. Lett. 421 (2006) 246.
- [23] R.R. Zope, T. Baruah, M.R. Pederson, B.I. Dunlap, Chem. Phys. Lett. 393 (2004) 300.
- [24] L. Koponen, L. Tunturivuori, M.J. Puska, R.M. Nieminen, J. Chem. Phys. 126 (2007) 214306.
- [25] S.S. Alexandre, H. Chacham, R.W. Nunes, Phys. Rev. B 63 (2001) 045402.
- [26] S.A. Shevlin, Z.X. Guo, H.J.J. van Dam, P. Sherwood, C.R.A. Catlow, A.A. Sokol, S.M. Woodley, Phys. Chem. Chem. Phys. 10 (2008) 1944.
- [27] D. Golberg, Y. Bando, O. Stéphan, K. Kurashima, Appl. Phys. Lett. 73 (1998) 2441.
- [28] T. Oku, A. Nishiwaki, I. Narita, M. Gonda, Chem. Phys. Lett. 380 (2003) 620.
- [29] D. Golberg, A. Rode, Y. Bando, M. Mitome, E. Gamaly, B. Luther-Davies, Diam. Relat. Mater. 12 (2003) 1269.
- [30] T. Oku, I. Narita, A. Nishiwaki, Mater. Manuf. Process. 19 (2004) 1215.
- [31] T. Oku, A. Nishiwaki, I. Narita, Sci. Technol. Adv. Mater. 5 (2004) 635.
- [32] J.M. Matxain, L.A. Eriksson, J.M. Mercero, X. Lopez, M. Piris, J.M. Ugalde, J. Poater, E. Marito, M. Sola, J. Phys. Chem. C 111 (2007) 13354.
- [33] A.V. Pokropivny, Diam. Relat. Mater. 15 (2006) 1492.
- [34] S.S. Alexandre, R.W. Nunes, H. Chacham, Phys. Rev. B 66 (2002) 085406.
- [35] B. Delley, J. Chem. Phys. 92 (1990) 508.
- [36] B. Delley, J. Chem. Phys. 113 (2000) 7756.
- [37] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 3865.

برای خرید فرمت ورد این ترجمه، بدون واتر مارک، اینجا کلیک نمایید.



این مقاله، از سری مقالات ترجمه شده رایگان سایت ترجمه فا میباشد که با فرمت PDF در اختیار شما عزیزان قرار گرفته است. در صورت تمایل میتوانید با کلیک بر روی دکمه های زیر از سایر مقالات نیز استفاده نمایید:

لیست مقالات ترجمه شده ✓

لیست مقالات ترجمه شده رایگان ✓

لیست جدیدترین مقالات انگلیسی ISI ✓

سایت ترجمه فا ؛ مرجع جدیدترین مقالات ترجمه شده از نشریات معتبر خارجی