# شبیه سازی رشد نانولوله های کربنی در روش CVD با استفاده از دینامیک مولکولی

**نرجس گرجی زاده[1]، کیوان اسفرجانی**

**دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده فیزیک**

[1]gorjizadeh@mehr.sharif.edu

**چکیده**

رشد نانولوله های کربنی با استفاده از روش دینامیک مولکولی شبیه سازی شده است. روش CVD در تولید نانولوله های کربنی از اهمیت خاصی برخوردار است. در این روش، فلز کاتالیست نقش مهمی در رشد دارد، لذا این شبیه سازی در حضور یک کره نیکل به عنوان کاتالیست انجام شده است و با فرستادن اتمهای کربن به سمت این کره، امکان رشد نانولوله کربنی مورد بررسی قرار گرفته است. برهمکنش اتم های کربن با کره نیکل با استفاده از روشهای مبتنی بر اصول اولیه محاسبه شده است و کنترل دمای سیستم توسط ترموستات لانژون صورت گرفته است. برای تعیین مسیر حرکت اتم ها نیز از الگوریم ورله سرعتی استفاده گردید. نتایج شبیه سازی نشان می دهد که با اعمال نیرویی برای عبور از سد پتانسیل می توان به حالت نانولوله رشدیافته دست یافت.

**واژه های کلیدی: نانولوله کربنی؛ شبیه سازی؛ دینامیک مولکولی؛ رشد؛ CVD**

## مقدمه

کشف نانولوله های کربنی در سال ۱۹۹۱ توسط ایجیما (Iijima) [۱]، زمینه تحقیقات تئوری و تجربی بسیاری را در رابطه با ساخت و بررسی خواص این مواد فراهم ساخته است. نانولوله های کربنی به دلیل خواص الکتریکی و مکانیکی منحصر به فردشان، انتظار می رود نقش بسزایی در طراحی و ساخت ادوات نانومتری از جمله در ساخت مدارهای مجتمع و نانومواد داشته باشند [۲]. از این رو، جهت دست یافتن به کاربردهای آنها افزایش راندمان تولید آنها ضروری است. لذا شبیه سازی های کامپیوتری می توانند در کسب دانش بیشتر نسبت به ساز و کار رشد این مواد کمک کنند.

تولید نانولوله های کربنی به طور عمده به سه روش زیر صورت می گیرد: ۱) تبخیر لیزری، که عبارت است از تابش یک پرتو لیزر به یک صفحه گرافیت و تبخیر اتمهای کربن و سپس تشکیل نانولوله های کربنی در فاز گازی [۳] ، ۲) تخلیه قوسی، که عبارت است از تبخیر اتمهای کربن در اثر تخلیه قوس الکتریکی بین دو الکترود از جنس گرافیت وتشکیل نانولوله های کربنی بر روی کاتد [۴] ، ۳) CVD [۵]، که عبارت است از تجزیه حرارتی یک گاز هیدروکربن در حضور یک فلز کاتالیست با ساختار نانومتری و سپس رسوب اتمهای