**چکیده**

نانو لوله های کربنی مهم ترین ترکیب نانو فناوری هستند و از مهم ترین کاربرد آن ها در علم قطعات نانویی الکترونیک است. بنابراین بررسی و پژوهش در مورد خواص مختلف آن ها از اهمیت ویژه ای برخودار است. در این تحقیق با بهره گیری از روش هارتری فوک(HF) و روش تابعی چگالی(DFT) الکترون بر هم کنش مولکول نیتروژن با سطح خارجی نانو لوله های کربنی مدل زیگزاگ (۰، ۵ ) و مدل آرمچیر (۴و۴) با طول و قطر معین و بهینه، بررسی و تحلیل شده است. با استفاده از برنامه ی نرم افزاری گوسین به محاسبه ی انرزی جذب سطحی گازنیتروژن بر روی سطح خارجی نانو لوله ما را برآن داشت که به بررسی ساختار الکترونی مولکول نیتروژن و کربن که در پیوند سطحی در سطح نانو لوله هستند بپردازیم. این پژوهش جالب و مفید به نظر می رسد. نتیجه ی محاسبه ها نشان می دهدکه بر هم کنش مولکول نیتروژن با سطح نانو لوله، ساختارهای جذبی متنوعی را می دهد. به دلیل اندازه ی کوچک، استحکام و سختی بالا، چگالی کم و خواص الکتریکی عالی نانو لوله های کربنی و تغییر مقاومت الکتریکی نانو لوله های نیمه رسانا در پی جذب مولکول نیتروژن گازی و همچنین استفاده از نانو لوله های تک دیواره برای ذخیره سازی یون های آلکانی به عنوان منابع قدرت و همچنین کاربرد آن ها در پیل های سوختی و به عنوان مدارهایی در مقیاس نانو متر و ترکیباتی برای تجهیزات حسگر بی نظیرهستند به طوری که بهترین کاربرد این نانو لوله ها به علت سازگاری زیستی و استحکام بالا در زیست پزشکی و دارو سازی نیز می باشد. همچنین از تاثیر جذب گاز نیتروژن بر روی خواص الکتریکی نانو لوله های نیمه رسانا که تاثیر چندانی بر روی خواص الکتریکی نانو لوله های رسانا ندارد. ما توانستیم به بررسی بهینه سازی اولیه ی نانو لوله ها، بررسی پیکر بندی جذب کربن متصل شده به نیتروژن و مطالعه ی تعیین انرژی جذب مولکول نیتروژن بر روی نانو لوله ی تک دیواره ی مدل زیگزاگ (۰و۵) و آرمچیر (۴و۴) بپردازیم.

*کلید واژه ها*: HF، DFT، نانو لوله ی کربنی، جذب مولکول نیتروژن گازی، انرژی جذب