



پژوهشگاه مواد و انرژی



وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه بین المللی امام خمینی (ره)
دانشکده علوم پایه

بررسی خواص اپتیکی نانو لوله های کربنی چند دیواره (MWNTs) ساخته شده به روش CVD

پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک حالت جامد

استاد راهنما:

دکتر اصغر کاظم زاده

استاد مشاور:

دکتر محمدرضا بذرافکن

دانشجو:

الهه رستگار

مهر ۸۹

چکیده

در سال ۱۹۹۱ دانشمندی به نام سومیو ایجیما به طور کاملاً اتفاقی، ساختار دیگری از کربن را کشف و تولید کرد که خواص منحصر به فردی دارد. وی در ابتدا این ساختار را نوعی فولرن تصور نمود که در یک جهت کشیده شده است. اما بعدها متوجه شد که این ساختار، خواص متفاوتی از فولرن ها دارد و به همین دلیل آن را، نانولوله ی کربنی نامید. چنانچه نانولوله کربنی فقط شامل یک لوله از گرافیت باشد، نانولوله تک دیواره و اگر شامل تعدادی از لوله های متحد المركز باشد نانولوله چند دیواره نامیده می شود. در این تحقیق به ساخت و بررسی برخی از خواص نوری نانو لوله های کربنی چند دیواره (MWNTs) پرداخته ایم. در مرحله ساخت از روش CVD (Chemical Vapor Deposition) یا همان رسوب گذاری بخار شیمیایی - حرارتی، برای تولید نانولوله های کربنی استفاده شده است. برای تولید MWNTs دو مرحله، ساخت کاتالیست و فرآیند سنتز انجام گرفته است. کاتالیست از پایه ذرات آلومینا و سیلیکات و مولیبدن تهیه شده و در فرآیند سنتز، گاز متان همراه با گاز آرگون خالص در شرایط بهینه در فشار اتمسفر و شارش ۴ لیتر بر دقیقه، در حالی که دمای کوره در این مرحله تا ۹۸۰ درجه سانتی گراد به مدت ۲۰ دقیقه از روی کاتالیست عبور داده می شود. در ادامه برای خالص سازی و حذف مواد باقی مانده از کاتالیست در نمونه تولید شده از روش اسید شوئی و گرمادهی در چند مرحله استفاده کرده ایم و به خلوص مطلوبی رسیده ایم که در متن به آن اشاره شده است. در تعیین خواص فیزیکی از دستگاه های طیف سنجی چون SEM، XRD و طیف عبوری استفاده کرده ایم و در بررسی خواص اپتیکی از اندازه گیری های رامان، لومینسانس، و طیف جذب UV-VISIBLE که در آن به تعیین ضریب جذب مولی پرداخته ایم. در طیف جذبی UV-VISIBLE به بررسی تاثیر غلظت سوسپانسیون بر میزان جذب نوری و ضریب خاموشی و مکان قله های موجود در طیف پرداخته ایم.

کلمات کلیدی: نانو لوله های کربنی چند دیواره، کاتالیست، CVD، خواص اپتیکی، لومینسانس، طیف

جذب UV-visible

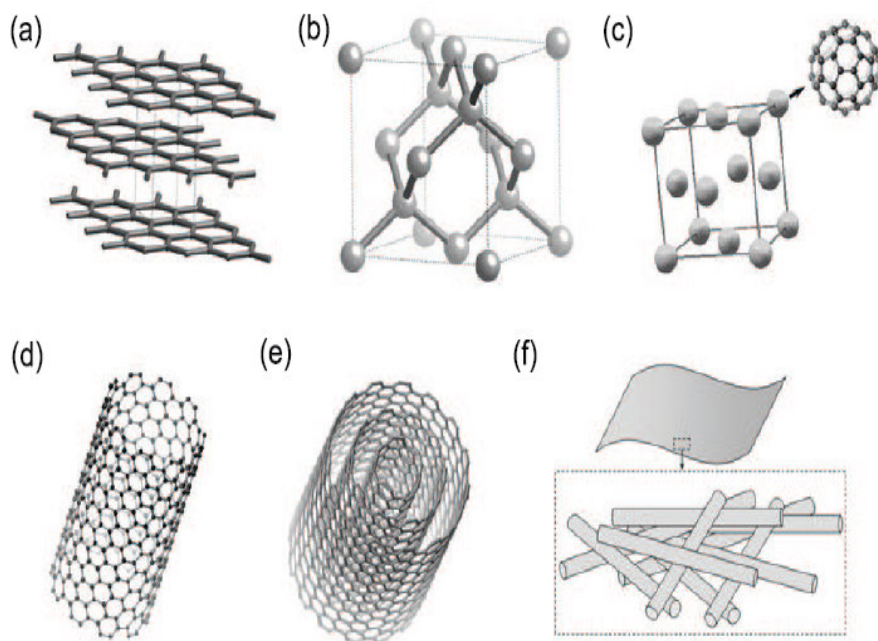
فصل اول

شناخت و معرفی انواع نانولوله های کربنی

۱-۱- مقدمه

کربن یکی از عناصر مهم موجود در طبیعت است که در شکل های بسیار متفاوتی دیده می شود. این عنصر شگفت انگیز کاربردهای بسیار متنوعی در زندگی بشر پیدا کرده است. به عنوان مثال فولاد که یکی از مهمترین آلیاژهای مهندسی است، از انحلال حدود ۲٪ کربن در آهن به دست می آید و با تغییر درصد کربن (به میزان تنها چند صدم درصد) می توان انواع فولاد را به دست آورد. شیمی آلی نیز علمی است که به بررسی ترکیبات حاوی کربن و هیدروژن می پردازد و مهندسی پلیمر هم بر اساس عنصر کربن پایه گذاری شده است.

استفاده از نانوفناوری به تولید محصولات هوشمند در سطح مولکولی و همچنین خلق موادی صدها بار سبک تر و مستحکم تر منجر می شود. نانوتکنولوژی دانش ساخت مواد، وسایل و سیستم های فضایی است که بر پایه کنترل مواد در مقیاس های نانو متری بنا نهاده شده است و سبب بروز پدیده جدیدی گشته که به مواد خواص فیزیکی، شیمیایی، الکترونیکی و بیولوژیکی جدیدی می بخشد. نانو تیوب های کربنی نیز یکی از اجزای کلیدی در نانوتکنولوژی هستند. بعضی از شکل های خاص کربن در شکل ۱-۱ نمایش داده شده است.



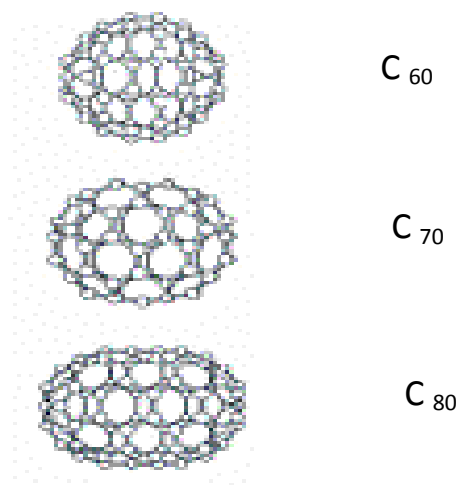
شکل ۱-۱ ساختارهای متفاوت کربنی

(a) گرافیت، (b) الماس، (c) فولرن، (d) نانوتیوب تک دیواره، (e) نانوتیوب چند دیواره و (f) فیلم کربن نانوتیوب

۲-۱- تاریخچه کشف نانو لوله های کربنی

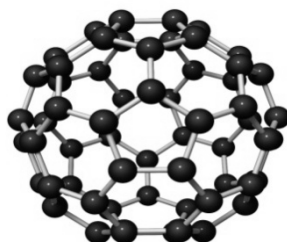
شروع این مبحث به زمانهای بسیار قبل بر می گردد. قبل از اینکه به بیان تاریخچه کشف نانو لوله های کربنی بپردازیم در ابتدا به چگونگی کشف فولرنها و باکی بالها می پردازیم. در سال ۱۹۸۵ یکسری آزمایش غیر منتظره منجر به کشف یک مولکول جدید ساخته شده از کربن خالص شد. باکی بالها^۱ در حقیقت شش اتم کربن آرایش یافته در شکلی شبیه به توپ بودند. در آن زمان به نظر می رسید که این کشف هیچ چیز جز یک نوع آلوتروپ جدید کربن نیست و جهان شیمی هنوز کلمه مناسبی برای نامگذاری این مولکول جدید نیافته بود. در حقیقت آنچه که کشف شده بود تنها یک مولکول جدید کربنی نبود بلکه یک گروه نامحدود از مولکولهای جدید یعنی فولرن ها بود. هر فولرن^۲ (C₆₀، C₇₀، C₈₀ و ...) یک ویژگی اصلی دارد و آن تشکیل شدن از یک قفس کربن خالص است. هر اتم با سه اتم دیگر پیوند برقرار کرده است که مشابه گرافیت است. بر خلاف گرافیت هر فولرن ۱۲ فرم ۵ وجهی با تعدادی فرم ۶ وجهی دارد. به عنوان مثال باکی بال C₆₀، ۲۰ فرم ۶ وجهی دارد [۱].

^۱buckyball
^۲fluren



شکل ۱-۲- تصویری از ساختار سه نوع فولرن

برخی از فولرنها مثل C_{60} فرم نیم کره ای دارند و بقیه آنها مانند C_{70} فرم درازی شبیه توپ راگبی دارند



شکل ۱-۳- فولرن (فولرن کاملاً ساختار کره ای دارد)

تاریخ نانو تیوب های کربن گرافیتی به گذشته ای دور در سال ۱۹۵۲ برمی گردد. در آن سال رادشکوویچ^۱ و لوکیانویچ تصاویر^۲ واضحی از لوله های ۵۰ نانومتری کربنی را در مجله ی روسی "شیمی فیزیکی" به چاپ رساندند. این امکان وجود دارد که نانو تیوب های کربنی حتی قبل از آن سال هم ساخته شده باشند ولی تا زمان اختراع (TEM) امکان مشاهده مستقیم این ساختار ها فراهم نبوده است.

قبل از اولین تولید مصنوعی و یافتن فلورین های کوچکتر C_{60} و C_{70} این باور وجود داشت که این مولکول های کروی بزرگ عموماً ناپایدار هستند. اما، محاسبات چند دانشمند روسی نشان داد که

^۱-Radushkevich

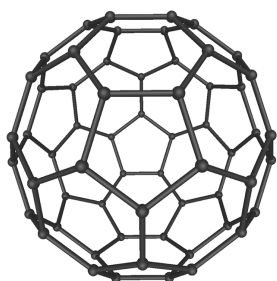
^۲-Lukyanovich

مولکول C_{60} در حالت گازی پایدار بوده و شکاف باند بزرگی دارد. مشابه اغلب کشف های بزرگ علمی دیگر، فلورین ها نیز به طور تصادفی کشف شدند. در سال ۱۹۸۵ کرتو و اسمالی با نتایج عجیبی در طیف جرمی کربن تبخیر یافته روبرو شدند. در پی این حادثه فلورین ها کشف شدند و پایداری آن ها در حالت گازی اثبات شد. اولین مشاهدات فلورین ها در طیف نگاری جرمی غیر منتظره بود.

در سال ۱۹۹۱ نانو تیوب های کربنی توسط ایجیما وهمکارانش کشف شدند. کشف نانو تیوب های کربنی توسط ایجیما در ماده حل نشدنی لوله های گرافیتی سوخته شده در دوده حاصله از تخلیه قوس الکتریکی دو میله کربنی، سرچشمه تحقیقات امروزی در مورد نانو تیوب های کربنی است. این یک کشف اتفاقی دیگر در ارتباط با فلورین ها بود، هر چند برای تولید فلورین، روش تخلیه قوس الکتریکی به خوبی شناخته شده بود. از آن پس محققین زیادی در سرتاسر جهان به مطالعه و بررسی این نانو تیوب ها مشغولند. یک منظر از ساختار نانو تیوب های کربنی، ساختار یک بعدی و درون تهی آن ها است. ساختار یک بعدی آن ها بسیار مورد توجه فیزیک دانان است، زیرا امکان آزمایشات در فیزیک کوانتوم یک بعدی را برای آن ها فراهم می سازد. ساختار درون تهی آن ها هم بسیار مورد توجه شیمی دانان است، زیرا امکان دربرگیری مولکول ها، واکنش در فضای محصور و رهاسازی کنترل شده ی مولکول ها برای مصارفی همچون رساندن دارو به بدن را ایجاد می کند [۲۳].

۱-۳- ساختار نانولوله های کربنی

کربن، به چهار صورت مختلف در طبیعت یافت می شود که همه این چهار فرم جامد هستند و در ساختار آنها اتم های کربن به صورت کاملاً منظم در کنار یکدیگر قرار گرفته اند. این ساختارها عبارتند از:



۱- گرافیت

۲- الماس

۳- نانولوله ها

۴- باکی بال‌ها^۱ (مانند C₆₀ در شکل مقابل)

گرافیت یکی از مهم‌ترین ساختارهای کربن در طبیعت است و از قرارگرفتن شش اتم کربن در کنار یکدیگر به وجود آمده است. این اتم‌های کربن به گونه‌ای با یکدیگر ترکیب شده‌اند که یک شش ضلعی منتظم را پدید می‌آورند و از مجموع آنها، صفحه‌ای به دست می‌آید که به عنوان یک «لایه گرافیت» در نظر گرفته می‌شود. اتم‌های کربن با پیوندهای کووالانسی که پیوندی قوی و محکم است به یکدیگر متصل شده‌اند. لازم به ذکر است که اتم‌های کربن به کار رفته در یک لایه گرافیت نمی‌توانند با کربنی خارج از این لایه پیوند کووالانسی بدهند. بنابراین یک لایه گرافیت از طریق پیوندهای واندروالس که پیوندهایی ضعیف هستند به لایه زیرین متصل می‌شود. این مساله باعث می‌شود که صفحه‌های گرافیت به راحتی روی یکدیگر بلغزند. به همین دلیل از این ترکیب در «روغن کاری» و «روان کاری» استفاده می‌شود. علت نرمی سطوحی که با مداد روی آنها نوشته شده است نیز همین نکته می‌باشد.

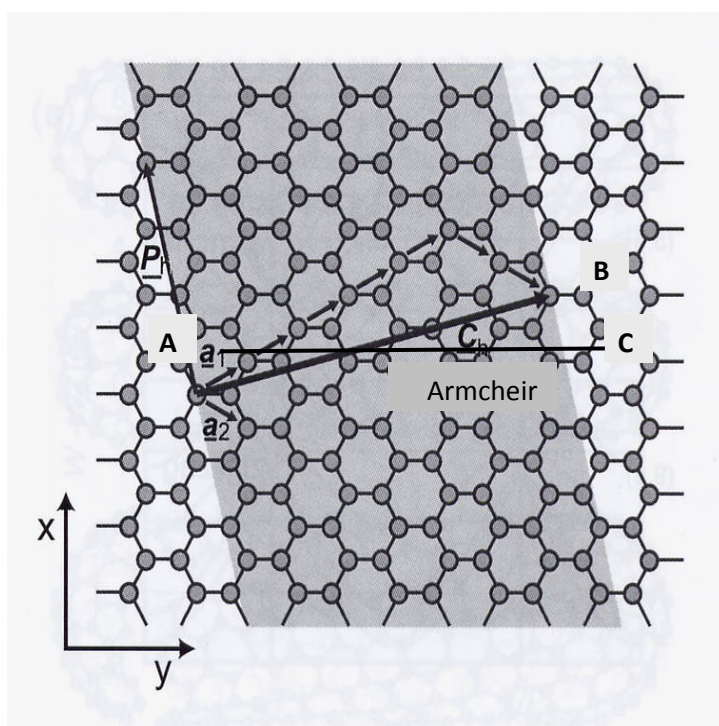
آغاز مطالعات روی این مولکول‌ها بیشتر به خاطر خواص الکتریکی ویژه آنها بوده است. این خواص، نانولوله‌های کربنی را به کاندیدهای مناسبی جهت تولید محصولات الکترونیکی در مقیاس میکرو نظیر دیود، ترانزیستور، سیم نانو و نمایشگر و ... مبدل ساخت. در عین حال این ماده خواص مکانیکی جالب توجهی نیز از خود بروز می‌دهد که از آن جمله می‌توان به استحکام کششی و انعطاف پذیری خوب اشاره کرد.

شناخت ساختمان یک نانولوله از طریق تعیین بردار کایرال R که به ترتیب زیر تعریف شده است، امکان پذیر است:

$$\vec{C}_h = n \vec{a}_1 + m \vec{a}_2 \quad (1.1)$$

بردار کایرال جهت طول ورقه کربنی به صورت لوله‌ای جمع شده را نشان می‌دهد. برای تعیین این بردار به ترتیب زیر عمل می‌شود:

¹ Bucky ball



شکل ۱-۴- روش تعیین بردار کایرال و زاویه کایرال (مشخصه های ساختمانی نانو لوله ها)

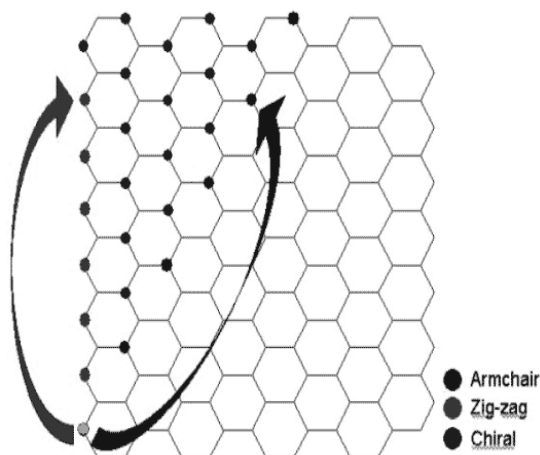
مطابق شکل ۱-۴ یک نانو لوله باز شده را در نظر بگیرید، فرض کنید دو خط x و y در امتداد محور نانو لوله قرار دارند. نقطه ای را روی خط y در نظر بگیرید که روی یکی از کربنهای نانو لوله منطبق است. این نقطه را A بنامید. حال از نقطه A خطی را به سمت محور x رسم کنید که تمام شش وجهی های کربنی مسیر را به دو قسمت مساوی تقسیم کند. محل تلاقی این خط و محور x را نقطه C بنامید. این خط به خط صندلی دسته دار^۱ موسوم است. حال خط AB را به گونه ای رسم نمایید که نقطه B روی نزدیکترین کربن موجود روی محور x نسبت به نقطه C قرار بگیرد، که با بردار C_n نشان داده شده است، بردار کایرال نام دارد. زاویه تشکیل شده بین بردار کایرال و خط صندلی دسته دار به زاویه کایرال موسوم است [۴].

یک لایه گرافیت را در نظر بگیرید، اتمهایی را که در یک ردیف قرار گرفته اند با (n, m) که نشان دهنده مختصات یک نقطه در صفحه است مکان یابی می کنیم. به طوری که مختصات n ، مربوط به ستون اتمها و مختصات m مربوط به ردیف اتمها باشد.

همان طور که می دانیم برای تهیه یک لوله از یک صفحه، کافی است یک نقطه از صفحه را روی نقطه دیگر قرار دهیم. یک نانولوله مانند صفحه گرافیتی است که به شکل لوله درآمده باشد. بسته به اینکه

^۱ Armchair

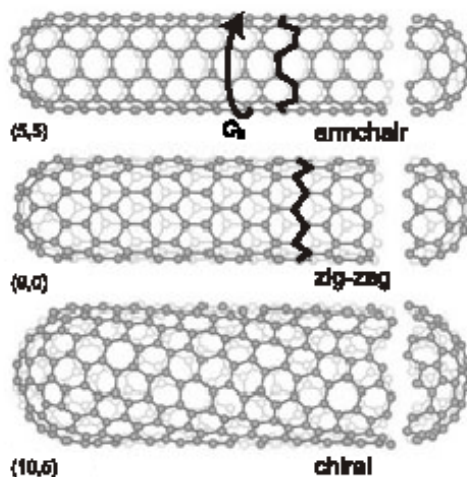
چگونه دو سر صفحه گرافیتی به یکدیگر متصل شده باشند ، انواع مختلفی از نانولوله ها را خواهیم داشت.



شکل ۱-۵- جهت لایه گرافیتی در انواع نانو لوله ها

براساس جهت بردار کایرال سه نوع نانولوله کربنی وجود دارد :

۱. نوع زیگزاگ^۱
۲. نوع دسته صندلی
۳. نوع نامتقارن^۲

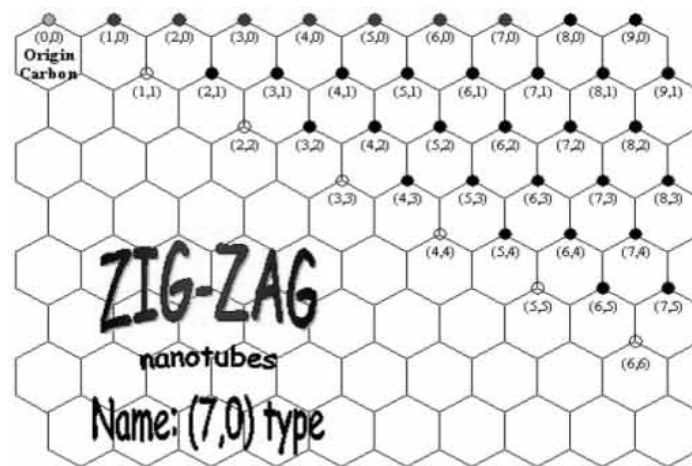


شکل ۱-۶- انواع مدل‌های نانو لوله های کربنی

¹ Zig-Zag
² Chiral

۱-۳-۱- نانو لوله های زیگزاگی شکل

برای ساختن نوع زیگزاگ نانولوله، مطابق شکل (۱-۷) اتم‌ها را در راستای افقی (ستون به ستون) شمرده $\{(1,0), (2,0), \dots\}$ ، اتم انتهایی $(5,0)$ را با خم کردن صفحه، بر روی اتم ابتدایی $(0,0)$ انطباق می‌دهیم. برای اطمینان از درستی روش ساخت باید دقت کنیم که در آخر کار، در راستای افقی یک خط شکسته زیگزاگ به دور نانولوله ببینیم.



شکل ۱-۷- تصویری از جهت گیری نانولوله زیگزاگی شکل نوع $(7,0)$

در نانو لوله های زیگزاگی شکل زاویه کایرال 30° درجه است یعنی بردار کایرال با خط دسته صندلی زاویه 30° درجه تشکیل می‌دهد. اگر بردار a_1 در امتداد خط زیگزاگ یعنی با زاویه 30° درجه رسم شود، بردار a_2 تصویر بردار a_1 نسبت به خط صندلی دسته داراست. جمع بردارهای a_1 و a_2 بردار کایرال است که بدین ترتیب n و m ضرایب این دو بردار تعیین می‌گردند. نانولوله های زیگزاگی شکل به فرم کلی $(n,0)$ هستند و طول واحدهای کربنی در جهت محور لوله کوتاه (0.43 نانومتر) است.

۱-۳-۲- نانو لوله های دسته صندلی شکل

در صورتی که اتم ابتدایی و اتمی که در وضعیت ۴۵ درجه نسبت به آن قرار دارد، روی هم قرار بگیرند، نانولوله نوع صندلی به دست می آید. در این حالت می توانیم بین این دو اتم یک خط مستقیم رسم کنیم که معادله آن $m = n$ است. یعنی شماره ستون و ردیف هر یک از آنها با یکدیگر برابر است. در این حالت با یک بار گردش به دور نانولوله تعدادی صندلی پشت سر هم خواهیم دید.

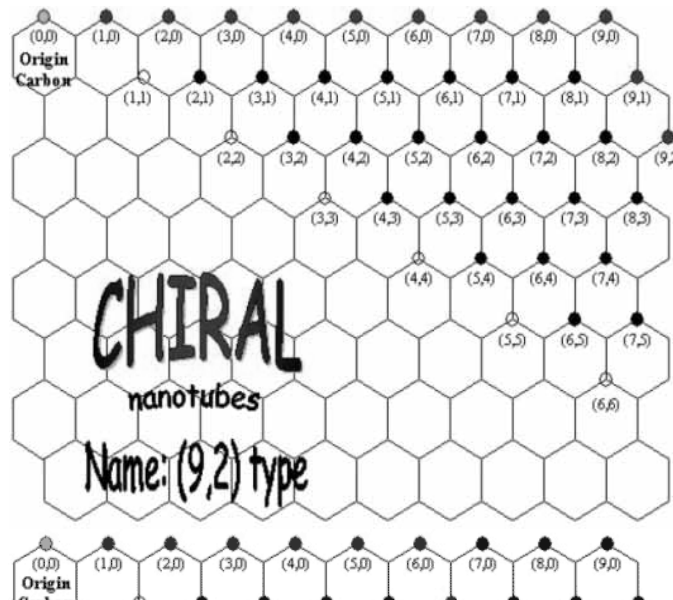


شکل ۱-۸- تصویری از نانو لوله دسته صندلی شکل نوع (۶و۶)

در نانو لوله دسته صندلی شکل (۱-۸) ، بردار کایرال بر خط دسته صندلی منطبق است یعنی زاویه کایرال صفر درجه است. نانو لوله های مدل دسته صندلی را به فرم کلی (n,n) نشان می دهند. طول سلول واحد در این نوع نانو لوله ها حدود ۰/۲۵ نانومتر است.

۱-۳-۳- نانو لوله های نامتقارن

در این حالت نیز مشابه روش صندلی عمل می‌کنیم، با این تفاوت که در مختصات اتم انتهایی، $m \neq n$ خواهد بود. اگر یک بار افقی به دور نانولوله بچرخیم مجموعه‌ای از صندلی‌ها را می‌بینیم که نسبت به افق، به صورت مایل قرار گرفته‌اند.



شکل ۱-۹- تصویری از نانو لوله کایرال (نامتقارن) نوع (۲ و ۹)

برای ساختن مدلی از هر کدام از انواع نانولوله‌ها فقط کافی است مطابق شکل (۱-۹) کاغذ را خم کرده و نقطه ی انتهایی را بر نقطه ی ابتدایی منطبق نمایید. آرایش یافتگی جهت واحدهای شش وجهی نسبت به محور نانولوله تعیین کننده خواص الکتریکی نانو لوله است. بدین معنی که تمام نانو لوله های مدل دسته صندلی دارای رفتار فلزی و نانولوله های زیگزاگی در یک سوم موارد دارای رفتار فلزی می باشند که این یک سوم مربوط به مواقعی است که رابطه زیر صادق باشد :

$$m - n = 3q \quad (۲.۱)$$

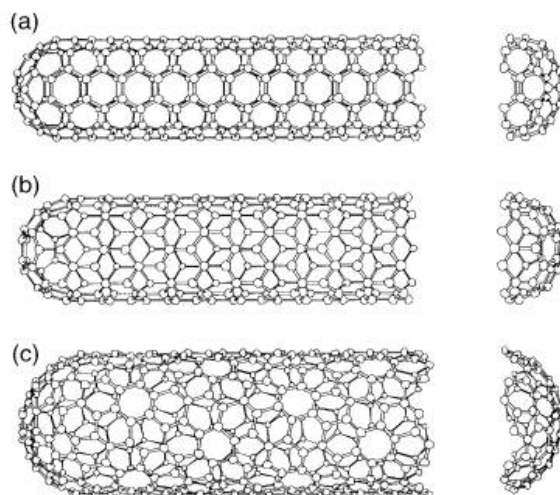
که q یک عدد صحیح است و در سایر موارد نانو لوله ها خاصیت نیمه رسانایی از خود نشان می دهند. یعنی اگر اختلاف $m - n$ مضربی از عدد ۳ نباشد، نانو لوله خاصیت نیمه رسانایی از خود نشان می دهد. در مجموع همچنین این امکان وجود دارد که نانو لوله های با فرم های کایرال متفاوت را به هم متصل کرده و به این ترتیب فرم های مختلفی از اجزاء مولکولی در ابعاد نانو به دست می آید.

۴-۱- انواع نانو تیوب های کربنی

۴-۱-۱- نانو تیوب های کربنی تک جداره *SWNTs*

یک نانو تیوب تک دیواره از دو قسمت بدنه و درپوش با خواص متفاوت فیزیکی و شیمیایی تشکیل شده است. ساختار درپوش نشات گرفته، و مشابه یک فلورین کوچکتر همچون C_{60} می باشد. اتم های کربنی که به شکل پنج و شش ضلعی در کنار یکدیگر قرار گرفته اند، ساختار درپوش را می سازند. ترکیب یک پنج ضلعی و پنج شش ضلعی در اطراف آن، قوس لازم برای شکل گیری یک درپوش بسته ی گنبدی شکل را ایجاد می کند. قانون دوم، قانون پنج ضلعی مجزا می باشد که می گوید فاصله ی بین پنج ضلعی ها روی پوسته ی فلورین جهت کاهش تنش سطحی و حصول یک قوس موضعی حتی المقدور نرم، به حداکثر ممکن می رسد تا ساختار پایدار تری را نتیجه دهد. کوچکترین ساختار پایداری که بدین نحو می تواند شکل گیرد، مولکول C_{60} و بعد از آن مولکول C_{70} می باشد و به همین ترتیب فلورین های بزرگتر. خاصیت مشترک دیگر بین تمام فلورین ها این است که تمام آن ها از تعداد اتم های کربن تشکیل شده اند که تعداد آن ها زوج است. زیرا اضافه کردن یک شش ضلعی به یک ساختار موجود به معنای اضافه کردن دو اتم کربن می باشد. قسمت دیگر تشکیل دهنده ی ساختار یک *SWNT*، بدنه ی استوانه ای شکل آن می باشد که از یک صفحه ی گرافیتی با اندازه معلوم که در جهت مشخصی پیچیده شده است به دست می آید. از آنجایی که حاصل باید، یک تقارن استوانه ای باشد، برای به دست آوردن یک استوانه ی بسته فقط می توان صفحات را در جهات خاصی پیچاند.

بیشتر *SWNTs* قطری نزدیک به 1 nm دارند و طول آن‌ها چندین هزار برابر بزرگتر از قطر آن‌ها است. *SWNTs* با طول چند سانتی متر هم ساخته شده‌اند. ساختار یک *SWNT* را می‌توان در ذهن چنان مجسم کرد که از لوله کردن یک صفحه‌ی گرافین (یک صفحه‌ی تک لایه به ضخامت یک اتم از گرافیت) و ایجاد یک استوانه‌ی بدون درز، درست شده باشد.

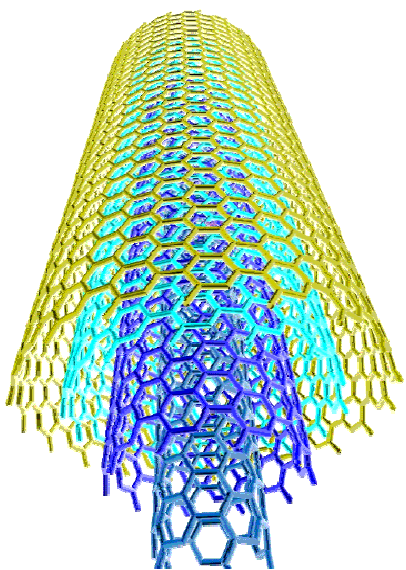


شکل ۱-۱-۱۰- شکل‌های متفاوتی از نانو تیوب‌های کربنی با بردارهای کایرال مختلف

SWNTs نوع بسیار مهمی از نانو تیوب‌های کربنی هستند، زیرا آن‌ها دارای خواص الکتریکی بسیار جالبی هستند که خاص آن‌ها است و نانو تیوب‌های چند دیواره آن خواص را ارائه نمی‌دهند. نانو تیوب‌های تک دیواره به احتمال بسیار قوی بهترین انتخاب برای بیشتر مینیاتوری کردن الکترونیک، پس از دوره بسیار پیشرفته میکرو الکترونیک امروزی به شمار می‌آیند. اساسی‌ترین بلوک پایه‌ی این سیستم‌ها اتصال الکتریکی است، و *SWNTs* می‌تواند یک هادی عالی باشد. یک کاربرد مفید و مهم *SWNTs* در ایجاد اولین ترانزیستور مولکولی اثر میدانی است. ساخت اولین گیت منطقی مولکولی با ترانزیستور‌های در سال ۲۰۰۱ محقق گشته است. ساخت *SWNTs* هنوز بسیار گران تمام می‌شود و توسعه‌ی روش‌های ساخت *SWNTs* ارزان برای آینده‌ی نانو فناوری کربن، امری حیاتی به شمار می‌آید. اگر نتوان به روش‌های ارزان‌تر ساخت دست یافت، به کارگیری این فناوری در مقیاس اقتصادی مقرون به صرفه نمی‌باشد.

۱-۴-۲- نانو تیوب های کربنی چند جداره (MWNTs)

نانو تیوب های کربنی چند جداره از چند استوانه ی کربنی هم محور تو در تو ایجاد می شوند. نانو تیوب های چند دیواره (MWNTs) را می توان به صورت دسته ای از نانو تیوب های هم مرکز با قطر های متفاوت در نظر گرفت. طول و قطر این ساختار ها در مقایسه با نانو تیوب های تک دیواره بسیار متفاوت بوده که در نتیجه، خواص آن ها نیز بسیار متفاوت می باشد.



شکل ۱- ۱۱ تصویری از یک نانو تیوب چند دیواره

۱-۴-۳- فولرایت

فولرایت شکل بسیار فشرده ی نانو تیوب است. نانو تیوب های تک جداره پلاریزه شده (*P-SWNT*) یک دسته از فولرایت ها هستند که سختی آن ها در حد الماس است.

۱-۴-۴- تروس یا حلقه ای

نانو تروس یک نانو تیوب کربنی است که به شکل یک حلقه خم شده است. نانوتروس ها خواص منحصر به فرد بسیاری دارند. مثلا مقدار مغناطیس آن ها ۱۰۰۰ برابر بیشتر از آنچه برای برخی مواد دیگر انتظار می رفت است، و بسیاری خواص دیگر همچون پایداری حرارتی و غیره که با شعاع حلقه و قطر لوله تغییر می کند.

۱-۴-۵- ساختار های غیر ایده آل

پس از ساختار های ایده آل بدون نقص، ما به بررسی نواقص مطلوب یا نامطلوب می پردازیم. در صورت جایگزینی یک شش ضلعی با یک پنج ضلعی یا هفت ضلعی تغییر شکل هایی نظیر خمیدگی یا انشعاب در نانو تیوب ها رخ می دهد. تغییر شکل ها می توانند به طرف داخل یا خارج بوده که باعث تغییرات خواص آن ها مخصوصا تغییرات شدید خواص الکتریکی آن ها می شود. نوع دیگری از نواقص توسط ناخالصی هایی هستند که حین عمل رشد یا بعد از آن وارد کار می شوند؛ از جمله ترکیباتی که می توانند وارد ساختار شوند ذرات کاتالیست می باشند.

وجود برخی نواقص می تواند منجر به ساختار های متفاوت و جدیدی همچون اتصالات T و Y شکل و یا پیوند های $SWNTs$ گردد. تحت شرایط خاص، می توان این نواقص را به گونه ی کنترل شده ای ایجاد کرد. این نواقص منجر به ساختار های جدیدی می شود که از خواص متفاوت و جالب تری در مقایسه با حالت اولی شان برخوردارند. مطالعه ی نواقص، خود به تحقیقات و آزمایش های گسترده ای نیاز دارد.

۱-۵- خواص نانو لوله های کربن

نانولوله ها که از ساختمان کندوی عسل گرافیت پیروی می کنند، الیاف مقاومی محسوب می شوند. در نانو لوله های کربنی مشابه گرافیت اتم های کربن دارای هیبریداسیون sp^2 هستند. این هیبریداسیون قوی تر از باندهای ایجاد شده در اثر هیبریداسیون sp^3 عمل می کنند که همین عامل به آنها استحکام فوق العاده ای می بخشد. در شارهای بالا نانو لوله ها می توانند با هم یکی شوند و برخی هیبریدهای sp^2 را به sp^3 تبدیل نمود و مقاومت بیشتری را کسب نمایند. جدول زیر برخی ویژگیهای ساختاری و فیزیکی نانو لوله های کربنی را نشان می دهد و این ویژگی ها را با سایر مواد مقایسه می کند:

جدول ۱-۱- خلاصه ای از خواص نانو لوله های کربنی

ویژگی	نانو لوله ها	قابل مقایسه با
اندازه قطر	SWCNT: 0.6 – 1.8 nm (عموما 1.4 nm) MWCNT: 20 – 50 nm	پرتوهای الکترونی با پهنای ۵۰ نانومتر
ظرفیت حمل جریان	حدود ۱ بیلیون آمپر در سانتی متر مربع	سیمهای مسی با ۱ میلیون آمپر در سانتی متر
تابش میدانی	می تواند فسفر را در ۳-۱ ولت فعال کند اگر فاصله (الکترودها ۱ میکرون باشد .)	مولیبدن با میدان ۱۰۰-۵۰ ولت / میکرومتر که عمر محدودی نیز دارد .
هدایت حرارتی	بیش از ۶۰۰۰ وات/متر×کلوین در دمای اتاق	نزدیک به هدایت الماس خالص که ۳۳۲۰ وات / متر×کلوین است .
پایداری حرارتی	تا دمای ۲۸۰۰ درجه سانتی گراد در خلاء و ۷۵۰ درجه در هوا پایداری دارند .	سیمهای فلزی در ریز مدارها در دمای ۶۰۰-۱۰۰۰ درجه ذوب می شوند .

همچنین جدول زیر خواص الیاف کربنی را با نانو لوله های کربنی مقایسه می کند :

جدول ۱-۲- مقایسه خواص نانو لوله های کربنی و الیاف کربن

ویژگی	الیاف کربنی	نانو لوله های کربنی
قطر	میکرومتر	نانومتر
استحکام	کم	زیاد
سختی	کم	زیاد
دانسیته	زیاد	کم
هدایت الکتریکی	کم	زیاد

۱-۵-۱- واکنش پذیری شیمیایی

به دلیل وجود انحنا و قوسی شکل بودن سطح نانو تیوب های کربنی از واکنش پذیری بهتری در مقایسه با یک صفحه ی گرافینی برخوردارند [۱۴]. واکنش پذیری نانو تیوب های کربنی مستقیماً به بهم ریختن توازن اوربیتال p آن ها که در اثر انحنای سطحی ایجاد می شود بستگی دارد. بنابراین می بایستی بین جداره و درپوش یک نانو تیوب تمایز قائل شد. به همین دلیل نانو تیوب های با قطر کمتر، از واکنش پذیری بیشتری برخوردارند. تعدیل شیمیایی پیوند های کووالانسی در جداره و یا درپوش نیز امکان پذیر می باشد. به عنوان مثال ، قابلیت حل پذیری نانو تیوب های کربنی در حلال های مختلف را می توان به این ترتیب کنترل کرد.

۱-۵-۲- خواص مکانیکی

نانولوله ها دارای پیوندهای محکمی در بین اتم هایشان می باشند و به همین علت در برابر نیروهای کششی مقاومت و استحکام زیادی از خود نشان می دهند. به عنوان مثال نیروی لازم برای شکستن یک نانولوله ی کربنی چند برابر نیرویی است که برای شکستن یک قطعه فولاد با ضخامتی معادل یک نانو لوله احتیاج داریم. اما جالب است که بدانیم پیوندهای بین اتمی در نانولوله ها علاوه بر ایجاد استحکام بالا، شکل پذیری آسان و حتی پیچش را در آنها می سازد. در حالی که فولاد تنها در برابر نیروهای کششی دارای مقاومت است و برای پیچش انعطاف پذیری لازم را ندارد. در بررسی

کاربرد نانولوله‌ها و به کار گیری خواص آنها ، می توانیم به استفاده از این ترکیبات به عنوان «رشته»^۱ در مواد مرکب ، اشاره کنیم؛ به چنین موادی ، کامپوزیت می‌گویند. ملموس‌ترین مثال کامپوزیت «کاه‌گل» است. کاه‌گل مخلوطی از «کاه» و «گل» است که در آن، کاه به عنوان رشته‌هایی که استحکام و انعطاف‌پذیری بهتری نسبت به گل دارد ، پراکنده شده است تا مانع از ترک خوردن آن شود. گل را اصطلاحاً «زمینه»^۲ می‌نامیم . نانولوله‌ها نیز چون استحکام و شکل‌پذیری خوبی دارند، در مواد مرکب با زمینه‌های فلزی، پلیمری و سرامیکی استفاده می‌شوند. اما مهم‌ترین فاکتوری که باعث برگزیدن نانولوله به عنوان رشته در مواد مرکب (کامپوزیت) شده است، وزن کم آن است، در حالی که استحکام آن بالاست. از مهم‌ترین موارد استفاده چنین مواد مرکبی می‌توان به موارد زیر اشاره کرد: بدنه هواپیما و هلیکوپتر، زه راکت‌های تنیس و... . جدول زیر برخی خواص مکانیکی نانو لوله های کربنی را با آلومینیوم، فولاد ، تیتانیوم و الیاف گرافیتی مقایسه می‌کند.

جدول ۱-۳- مقایسه خواص مکانیکی نانو لوله های کربنی را با آلومینیوم ، فولاد ، تیتانیوم و الیاف گرافیتی

ماده	مدول الاستیک (GPa)	ازدیاد طول (%)	استحکام در نقطه تسلیم (GPa)	چگالی (g/cm ³)
SWCNT	1210 ⁺	4	65.0	1.4
MWCNT	1260 ⁺	1.5	2.7	1.8
الیاف گرافیت	152	1.2	2.1	1.6
تیتانیوم	103	15	0.9	4.5
آلومینیوم	69	16	0.5	2.7
فولاد	207	9	0.8	7.8

¹ Fibre

² Matrix