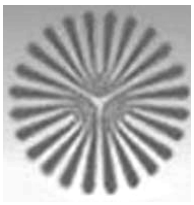


دانشگاه پیام نور

دانشکده علوم پایه

پایان نامه

برای دریافت مدرک کارشناسی ارشد

رشته فیزیک

عنوان پایان نامه :

بررسی کوپل شدگی اکسایتون – فوتون درنانولوله های کربنی با استفاده از تابع گرین

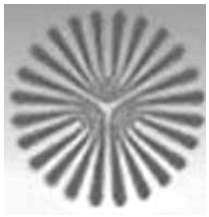
دانشجو : پریسا مرادی

استاد راهنما : دکتر حمداله صالحی

استاد مشاور : دکتر علیرضا رازقی زاده

فروردین ۱۳۹۱

بسم الله الرحمن الرحیم



دانشگاه پیام نور

دانشکده علوم پایه

پایان نامه

برای دریافت مدرک کارشناسی ارشد

رشته فیزیک

گرایش حالت جامد

عنوان پایان نامه :

بررسی کوپل شدگی اکسایتون – فوتون درنانولوله های کربنی با استفاده از تابع گرین

دانشجو : پریسا مرادی

استاد راهنما : دکتر حمداله صالحی

استاد مشاور : دکتر علیرضا رازقی زاده

فروردین ۱۳۹۱

صورتجلسه دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

جلسه دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد خانم/ آقای : پریسا مرادی .....

دانشجوی رشته فیزیک (حالت جامد) به شماره دانشجویی: ۸۸۰۰۳۸۲۵(۲۹۰۱) .....

تحت عنوان: بررسی کوپل شدگی اکسایتون- فوتون در نانوسیم های کربنی با استفاده از تابع گرین .....

.....

با حضور هیات داوران در روز یکشنبه ..... مورخ ۱۳۹۰/۱/۲۷ ساعت ۸ .....

در محل تحصیلات تکمیلی دانشگاه پیام نور استان خوزستان مرکز اهواز برگزار شد و هیات

داوران پس از بررسی، پایان نامه مذکور را شایسته نمره به عدد ۱۹ به

حروف نوزده تام ..... با درجه عالی ..... تشخیص داد.

ردیف	نام و نام خانوادگی	هیات داوران	مرتبه دانشگاهی	امضاء
۱	حمداله صدیقی	استاد راهنما	دانشیار	
۳	علیرضا رازقی نژاد	استاد مشاور	استادیار	
۴	سید اسدالله زرین تقوی	استاد داور	استادیار	
۵	مهدی کدخدایی طرازی	نماینده تحصیلات تکمیلی	استادیار	

تقدیم به آنکه آمدنش را چشم در راهیم

مهدیا منتظرانت همه در تب و تابند

همه ی اهل جهان جمله گرفتار شبند

چو ببینی غم و ظلمت برود از عالم

شاد گردد دل آنان که گرفتار شبند....

با سپاس از سه وجود مقدس؛

آنان که ناتوان شدند تا ما به توانایی برسیم

موهایشان سپید شد، تا ما روسفید شویم و

عاشقانه سوختند تا گرما بخش وجود ما و روشنگر راهمان باشند...

پدرانمان، مادرانمان، استادانمان

چکیده

مهم‌ترین وپرکاربردترین نانولوله‌های کربنی، نانولوله‌های کربنی تک جداره می باشند، که نسبت طول به قطر این نانولوله‌ها در حدود ۱۰۰۰ است. بنابراین می توان آنها را به صورت ساختارهای تک بعدی در نظر گرفت. این مواد دارای خواص منحصر به فردی بوده و بدین جهت کاربرد گسترده‌ای در تمامی ابعاد زندگی بشری پیدا کرده اند. در این پروژه سعی داریم هامیلتونی کل سیستم اکسایتون – فوتون کوپل شده روی سطح نانولوله را مورد مطالعه قراردهیم. آن‌گاه با استفاده از فرمول‌بندی مسأله، به رابطه‌ای خواهیم رسید که بیانگر هامیلتونی برهم کنشی است که توصیف کننده‌ی سیستم کوپل شده‌ی اکسایتون – فوتون روی سطح نانو برحسب تانسورگرین، میدان و رسانندگی محوری سطح می باشد. با توجه به اینکه پلاسمون صوتی، بر انگیخته‌ی تشدیدی بین دو نوع حامل بار مختلف است، کوچک بودن شعاع نانولوله‌های تک دیواره موجب می شود تا فاصله‌ی ترازهای انرژی عرضی تک ذره بیشتر شود . هر چه فاصله‌ی ترازهای انرژی عرضی تک بعدی که در برانگیختگی‌های تشدیدی شرکت می کنند کمتر باشد، بسامد پلاسمون صوتی بیشتر خواهد شد. بنابراین نانولوله‌های کربنی تک جداره به عنوان یک دستگاه تک بعدی، نماینده‌ی خوبی برای مشاهده‌ی پلاسمون‌های صوتی نامیرا می باشند. در این پروژه به دنبال راه حلی در زمینه‌ی برقرار سازی ارتباط بین پلاسمون صوتی وابررسانایی می باشیم. بنابراین بعد از پیش‌بینی پلاسمون سطحی در چند نمونه از نانولوله‌های کربنی، با استفاده از رابطه‌ی مک میلان می توان دمای گذار را برای آن نانولوله‌ها به دست آورد.

واژگان کلیدی : نانولوله‌های کربنی،کوپل شدگی، پلاسمون سطحی، ابررسانایی

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
مقدمه ----------	۱
فصل اول: فرآیند نانو	
۱-۱ مقدمه ----------	۴
۱- ۲ معرفی فرآیند نانو ----------	۴
۱-۳ کربن و ساختارهای مختلف آن ----------	۵
۱-۳-۱ : الماس ----------	۶
۱-۳-۲ : گرافیت ----------	۶
۱-۳-۳ : فلورین ها ----------	۷
۱-۳-۴ : نانو لوله‌های کربنی ----------	۸
۱- ۴ انواع نانولوله‌های کربنی ----------	۹
۱-۴-۱ : نانولوله‌های کربنی تک دیواره ----------	۹
۱-۴-۲ : نانولوله‌های کربنی چند دیواره ----------	۱۳
۱-۴-۳ : نانولوله‌های حلقه ای یا چنبره ای ----------	۱۴
۱-۴-۴ : ساختارهای غیر ایده آل ----------	۱۴
۱-۵ ساخت نانولوله‌های کربنی ----------	۱۵
۱-۶ برخی کاربردهای نانولوله‌های کربنی ----------	۱۵
۱-۶-۱ : کاربردهای الکترو مکانیکی ----------	۱۵
۱-۶-۲ : هدایت حرارتی در نانولوله‌های تک دیواره ----------	۱۶
۱-۶-۳ : سلول‌های خورشیدی ----------	۱۷
۱-۶-۴ : کاهش اصطکاک ----------	۱۷
۱-۶-۵ : حسگرها ----------	۱۸

فصل دوم : بررسی کوپل‌شدگی

۲-۱مقدمه ---------- ۲۱

۲-۲ کوپل‌شدگی نانولوله‌های کربنی با استفاده از تابع گرین ---------- ۲۲

فصل سوم : ابررسانایی

۳-۱ مقدمه ---------- ۳۲

۳-۲ تحلیل کلاسیک پلاسمون سطحی ---------- ۳۳

۳-۳ ابررسانایی در نانولوله‌های کربنی ---------- ۳۹

۳-۴ فرمول‌بندی مسأله ---------- ۴۳

۳-۵ بررسی ابررسانایی ---------- ۴۸

نتیجه گیری ---------- ۵۰

پیشنهادات ---------- ۵۱

واژه نامه ---------- ۵۲

منابع ---------- ۵۴

انتشارات ---------- ۵۷

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل ۱- ۱نمایش اربیتال‌های sp^3 الماس ---------- ۶

شکل ۱-۲ نمایش اربیتال‌های sp^2 گرافیت ---------- ۷

شکل ۱-۳ ساختار سه بعدی فلورین c_{60} ----------- ۸

شکل ۱-۴ نمایش بردارهای $(\vec{a}_1، \vec{a}_2)$ وکایرال و جفت شاخص $(m، n)$ ------ ۱۰

شکل ۱- ۵ نانولوله‌های زیگزاگ، آرمچیر، کایرال ---------- ۱۱

شکل ۱-۶ یاخته واحد یک نانولوله---------- ۱۲

شکل ۱-۷ نانولوله‌ی کربنی چند دیواره ی هم مرکز---------- ۱۴

شکل ۱-۸ ساختارهای غیر ایده آل T شکل و Yشکل ---------- ۱۵

شکل ۲-۱ شکل هندسی یک نانولوله ---------- ۲۳

شکل ۳-۱ نمایش رفتار پلاسمون سطحی---------- ۳۳

شکل ۳-۲ نمودارتغییرات بسامد برحسب عدد موج برای فلز با مدل درود ----- ۳۷

مقدمه

ریچارد فاینمن[1] متخصص کوانتوم نظری و دارنده‌ی جایزه‌ی نوبل، درسخنرانی معروف خود در سال ۱۹۵۹با عنوان " آن پایین فضای بسیاری هست "[2] به بررسی بعد رشد نیافته‌ی علم مواد پرداخت. وی در آن زمان اظهار داشت : " اصول فیزیک تا آن جایی که من توانایی فهمش را دارم مخالفتی با ساختن اتم به اتم چیزها ندارد." او فرض را بر این قرار داد که اگر دانشمندان فرا گرفته‌اند که چگونه ترانزیستورها ودیگرسازه‌ها را با مقیاس‌های کوچک بسازند، پس ما خواهیم توانست که آنها را کوچک و کوچک‌تر کنیم. فاینمن تأکید کرد که اتم‌ها و مولکول‌ها می‌توانند به عنوان واحدهای ساختمانی به کار روند [۱- اخوان ،۱۳۸۰:۵].

نانو تکنولوژی به عنوان یک فن‌آوری کاربردی در دهه‌های اخیر مورد توجه قرار گرفته است. فن‌آوری نانو از همگرایی علوم فیزیک، شیمی و زیست شناسی به وجود آمده است. این فن‌آوری توانایی کار در سطح اتم و ایجاد ساختارهایی که نظم مولکولی کاملاً جدیدی دارند را فراهم می‌آورد. ماده‌ی اصلاح شده در مقیاس نانو، خصوصیات جدید و مفیدی داراست که قبلاً در آن مشاهده نمی‌شد. برای احساس اندازه‌ی نانو قطر موی سر انسان را که یک دهم میلیمتر است را در نظر بگیرید، یک نانومتر صدهزار برابر کوچک‌تر از آن است (10^{-9}). نانو تکنولوژی عبارت است از توانمندی تولید مواد، ابزارها و سیستم‌های جدید در اندازه‌های مولکولی و اتمی و در دست گرفتن کنترل این ساخته‌ها و استفاده از ویژگی‌هایی که در این ابعاد ظاهر می شود. با استفاده از همین تعریف ساده مشخص می‌شود که نانو تکنولوژی کاربردهای متعددی را در زمینه‌های مواد غذایی دارویی، تشخیص پزشکی، بیوتکنولوژی، الکترونیک و کامپیوتر در ارتباطات حمل و نقل،انرژی ایمنی، بهداشت و محیط زیست، مواد، هوافضا وامنیت ملی می توان برشمرد. به وضوح مشاهده می‌شود که بشر با یک انقلاب دیگری در تکنولوژی روبروست. انقلابی که بسیار وسیع‌تر و گسترده‌تر از دو انقلاب دیگر(کشاورزی و صنعتی) است[۶]. از میان انبوهی از مواد نانومتری که هر کدام توان بالایی به منظور استفاده در سیستم های میکرو- نانو دارند، نانولوله‌های کربنی ازاهمیت و

---

[1] Richard Feyman
[2] There is plenty of room at the bootom

جایگاه ویژه‌ای برخوردارند. نانولوله‌های کربنی برای اولین بار در سال ۱۹۹۱ میلادی توسط سامیو ایجیما[۱] به روش قوس الکتریکی تولید شدند[۷]. نانولوله‌های کربنی استوانه‌های توخالی از تک ورقه‌های کربنی هستند که قطرشان در حد نانومتر و طول‌شان به اندازه‌ی میکرومتر و گاهی تا حد سانتی متر است. در واقع نانولوله‌های کربنی در آزمایش ایجیما برای تولید فلورین‌ها به روش قوس الکتریکی به عنوان محصول جانبی تولید شده بودند. او نانولوله‌های کربنی چند دیواره را که به صورت لوله‌های هم محور با قطر نانومتری بودند، مشاهده نمود. در این روش با اعمال اختلاف پتانسیل بین دو الکترود گرافیتی (الکترود مثبت آند و الکترود منفی کاتد) در یک محفظه، گاز بی‌اثر قوس الکتریکی ایجاد شده و در این حین آند خورده می شود و محصولات روی کاتد انباشته می‌شوند. دو سال بعد نانولوله‌های کربنی تک جداره به همان روش قوس الکتریکی و با آلایش آند به کاتالیت فلزی تولید شدند. خواص جالب توجه نانولوله‌های کربنی سبب شده است که در سال‌های اخیر مورد توجه فراوان پژوهش‌گران قرار بگیرند . مهم‌ترین و پرکاربردترین نانولوله‌های کربنی، نانولوله‌های کربنی تک جداره می باشند که به دلیل خواص منحصر به فردشان کاربرد گسترده‌ای در تمامی ابعاد زندگی بشری پیدا کرده اند[۴- میری،۱۷:۱۳۸۵]. در این پروژه ابتدا به معرفی فن‌آوری نانو اشاره می‌شود. بعد به معرفی اتم کربن و ساختارهای آن، نانولوله‌های کربنی وانواع آن، روش تولید و کاربردهایشان می‌پردازیم. آن‌گاه در فصل دوم موضوع کوپل شدگی نانولوله‌های کربنی را با استفاده از تابع گرین مورد بررسی قرار می‌دهیم. سپس در فصل سوم به بررسی پلاسمون سطحی که یکی از پیامدهای کوپل شدگی است می‌پردازیم. در این خصوص به نتایجی در مورد دمای گذار بعضی از نانولوله‌های کربنی می‌رسیم و با دیگر داده‌های موجود مقایسه می‌کنیم.

[۱] Samio Igima

فصل اول

فرآیند نانو

۱– ۱ مقدمه

فرآیند نانو فن‌آوری از دهه‌ی ۱۹۵۰ و۱۹۶۰ آغاز شده است. در آن دوره بیشتر مهندسان به فکر ساختن تجهیزات بزرگ، بمب‌های اتمی، تسخیر فضا و ..... بودند. این در حالی بود که پژوهش‌گران صنعت الکترونیک تحقیقات گسترده ی خود را در زمینه‌ی کوچک‌تر نمودن چیزها شروع کردند. با افزایش تقاضا برای کاربردهای محاسباتی سنگین و رایانه‌های پیشرفته، ترانزیستورها و مدارات مجتمع ،کوچک و کوچک‌تر شدند تا جایی که در سال ۱۹۸۰ دانشمندان حد و حدودی برای این تحولات به وجود آمده، پیش بینی کردند و شرایط برای روش‌های جدید و کاملاً متفاوت با گذشته آغاز شد. در این راستا به جز مهندسان الکترونیک، مهندسان و دانشمندان سایر علوم دیگر نیز فعالیت‌های خود را روی اتم‌ها و مولکول‌ها متمرکز کردند [۴– میری،۲:۱۳۸۵].

۱– ۲ معرفی فرآیند نانو

بعد از شکافت اتم، فیزیک‌دانها تلاش می کردند تا از ذرات تشکیل دهنده‌ی اتم و نیروهای نگه‌دارنده‌ی آن‌ها مطلع شوند. در آن دوره شیمی‌دانها نیز بر روی ترکیب اتم‌ها و ساختن مولکول‌های جدید فعالیت می کردند. زیست شناسان نیز کشفیاتی به اثبات رساندند که بیان می نمود، اطلاعات ژنتیکی بعضی از سلول‌های بدن روی مولکول‌های پیچیده‌ای به نام DNA ذخیره شده است. در دهه‌ی ۱۹۸۰ افق‌های کاملاً تازه‌ای در تحقیقات مهندسی گشوده شد. به طور کل ریشه‌های فن‌آوری نانو در سه خط فکری فیزیک اتمی، شیمی و الکترونیک به وجود آمده است [۴– میری،۲:۱۳۸۵]. نتیجه‌ی تمام مطالعات و تحقیقات به دست آمده، فن‌آوری نانو یا نانو تکنولوژی نام گذاری شد. این نام توسط فیزیک دانی به نام اریک درکلسر[۱] گسترش پیدا کرد.

اریک درکسلر در گفته های خود بیان نمود که فن‌آوری نانو برای اولین بار در سال ۱۹۵۹ در یکی از سخنرانی‌های ریچارد فایمن پیش بینی شده بود. فایمن در یکی از سخنرانی‌های عمومی‌اش با عنوان "در آن پایین فضای زیادی وجود دارد " پیش بینی کرد که روزی خواهد آمد که تمام محتویات کتابخانه‌های بزرگ دنیا را بتوان درون چیزی به اندازه‌ی یک ذره‌ی غبار ذخیره نمود. وی نظریه‌ی

[۱] K.Eric Drexler

ساخت ماشین‌ها و ادوات مکانیکی از اتم‌های منفرد را مطرح نمود. چنین ماشین‌هایی مولکول‌هایی مصنوعی بودند که اتم به اتم ساخته می شدند. ممکن بود ایجاد مولکول ساخته شده حتی از نانومتر هم بیشتر نباشد. همین نظریه‌ی دست کاری اتم‌ها بود که پایه و اساس نانو فن‌آوری را ایجاد نمود. اما در آن زمان افراد بسیار معدودی از کاربرد چنین فعالیت‌هایی آگاه بودند. در حقیقت این اریک درکسلر بود که افکار عمومی را با نگرش فایمن و مفاهیم اولیه‌ی نانو فن‌آوری آشنا نمود. فن‌آوری نانوابعاد گسترده‌ای را شامل می شود که یکی از مهم‌ترین اجزای این فن‌آوری نانولوله‌های کربنی[۱] هستند. قبل از آشنایی بیشتر با فن‌آوری نانولوله‌های کربنی بهتر است با اتم کربن و ساختارهای مختلف آن آشنا شویم [۴- میری،۱۳۸۵:۲].

۱-۳ کربن و ساختارهای مختلف آن

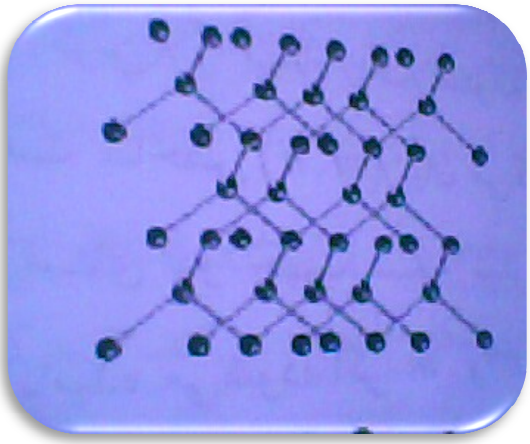
کربن ششمین عنصر از جدول تناوبی است و از واژه‌ی لاتین کربو[۲] به معنای زغال چوب گرفته شده است و دارای ساختارهای مختلفی همچون گرافیت الماس نانولوله کربنی و فلورین‌ها یا باکی بالها [۳]، نانو پیازها [۴] [۸] ، کربن شبه الماس[۵] [۹،۱۰]و .... است. در اینجا تنها چهار ساختار اصلی آن یعنی گرافیت ، الماس ، فلورین[۶] و نانولوله توضیح داده خواهد شد. برای درک بهتر ویژگی‌ها و ساختارهای مختلف کربن ابتدا باید پیوندها و ویژگی‌های اتم کربن را مورد بررسی قرارداد. یک اتم کربن شش الکترون با دو اربیتال 1s دارد و چهار الکترون باقی مانده می توانند اربیتال‌های هیبریدی sp ،sp^2 ،sp^3 را اشغال کنند که هر یک به ترتیب جواب گوی پیوندهای ساختاری الماس ،گرافیت نانولوله‌ها یا فلورین‌ها خواهند بود.

---

[۱] Carbon Nanotube (CNT)
[۲] Carbo
[۳] Bucky bal
[۴] Nano onion
[۵] Dimond Like Carbon
[۶] Fullerene

۱-۳-۱ الماس[۱]

در الماس چهار الکترون ظرفیت از هر اتم کربن اربیتال sp^3 را اشغال می کنند و چهار پیوند کووالانسی مشابه را با چهار کربن دیگر در چهار جهت تترا هدرالی[۲] برقرار می کنند، مطابق شکل (۱-۱). این ساختار سه بعدی به هم قفل شده باعث شده است که الماس به یکی از سخت ترین مواد شناخته شده در طبیعت تبدیل گردد . از آن جایی که الکترون‌های الماس پیوندهایی تشکیل می دهند ،این ماده از نظر الکتریکی عایق است. الکترون‌های الماس در پیوند بین اتم های کربن به طور محکم نگه داشته می شوند. این الکترون‌ها، امواج الکترومغناطیسی ناحیه‌ی فرابنفش را جذب می کنند. اما ناحیه ی مرئی و فروسرخ را نمی توانند جذب نمایند، در نتیجه الماس خالص هنگام مشاهده با چشم کاملاً شفاف به نظر می رسد، همچنین الماس رسانندگی گرمایی فوق العاده بالایی نیز دارد[۱۲].



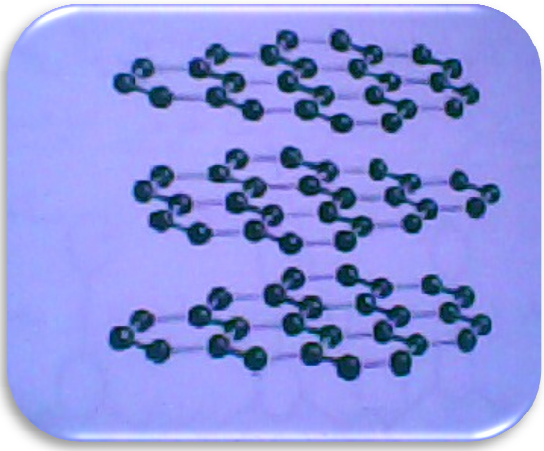
شکل ۱-۱: نمایش اربیتال‌های sp^3 الماس[۳- رحمانی،۱۳۸۷:۴۲]

۱-۳-۲ گرافیت

در گرافیت سه الکترون ظرفیت اتم کربن اربیتال های هیبریدی sp^2 را برای تشکیل سه پیوند σ در صفحه و یک اربیتال (پیوند π) خارج از صفحه اشغال می کنند. این یک شبکه مسطح شش گوشی را ایجاد می کند، شکل (۱-۲). استحکام گرافیت در صفحه بیشتر از الماس است . به علاوه اربیتال

[۱] Dimond
[۲] Tetra hedral

خارج از صفحه π یا الکترون های پخش شده روی صفحات گرافیت ، خواص گرمایی و الکتریکی این ماده را بیشتر می کند. برهم‌کنش بین الکترون‌های نامستحکم π و نور باعث می شود که گرافیت به رنگ سیاه دیده شود.[۳-رحمانی ،۱۳۸۷:۴۰].



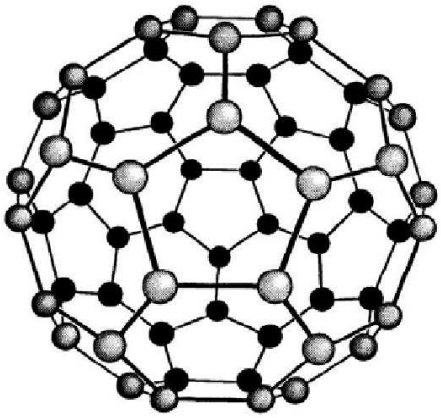
شکل ۱-۲ : نمایش اربیتال‌های sp^2 گرافیت **[۳-رحمانی ،۱۳۸۷:۴۰]**

۱-۳-۳ فلورین‌ها

در فلورین‌ها (C_{60}، C_{70}،...) نیز اربیتال‌های هیبریدی دارای پیوندهای sp^2 هستند. فقط گاهی انحنای زیاد باعث آمیخته شدن با حالت هیبریداسیون sp^3 می شود ساختار به هم پیوسته‌ی مولکول فلورین باعث ایجاد ویژگی‌های جالب الکتریکی، مکانیکی، اپتیکی می شود، مطابق شکل (۱-۳). به همین دلیل فلورین‌ها را می توان به طور وسیعی در زمینه‌های الکترونیکی، مغناطیسی، اپتیکی شیمیایی و پزشکی به کار برد. به نظر می رسد اولین رشته های در مقیاس نانو در سال ۱۹۷۰ میلادی توسط ایندو[۱] از دانشگاه اولئان فرانسه تهیه شده است. این رشته‌ها هفت نانومتر قطر داشتند و با روش رشد توسط بخار تهیه می‌شدند. در سال ۱۹۸۵ کروتو[۲] و اسمالی[۳] با نتایج عجیبی در طیف جرمی کربن تبخیر یافته مواجه شدند. بعد از این حوادث فلورین‌ها کشف شدند. فلورین‌ها خوشه‌ی

[۱] Marinobw Endo
[۲] H.W Kroto
[۳] R.E Smalley

بزرگی از اتم‌های کربن در قالب یک قفس بسته اند که از ویژگی‌های خاصی همانند پایداری در حالت گازی، برخوردار هستند[۱۲]. تلاش برای کشف فلورین‌های دیگر ادامه داشت تا اینکه در سال ۱۹۹۱ نانولوله‌های کربنی توسط ایجیما و همکارانش در آزمایشگاه ENC تسوکو کشف شدند. این کشف در ماده‌ی حل نشدنی لوله‌های گرافیتی سوخته شده در دوده‌ی حاصل از تخلیه‌ی قوس الکتریکی دو میله‌ی کربنی مشاهده شد که منشأ فن‌آوری کنونی نانو درباره‌ی نانولوله‌های کربنی شد. امروزه نام ایجیما در صدر محققان این رشته باقی مانده است. در همین زمان و به طور مستقل در مسکو نیز دانشمندان موفق به کشف ریزلوله‌هایی شده بودند که البته نسبت طول به قطر آن کمتر از یافته‌ی ایجیما بود. روس‌ها نام این ماده را بارلنس[۱] گذاردند. آن چه ایجیما موفق به مشاهده‌ی آن بود نانولوله‌ی چند لایه بود. وی بعد از دو سال نانولوله‌ی تک دیواره را نیز کشف نمود[۱۲].



شکل ۱-۳ : ساختار سه بعدی فلورین $c_{۶۰}$ [۵- ماساکا[۲]،۲۰۰۶:۲۵۲]

۱-۳-۴ نانولوله‌های کربنی

نانولوله‌های کربنی (CNT) نوعی آلوتروپ کربن به شکل‌های مختلف از کربن با یک ساختار نانو استوانه‌ای می باشند. نانولوله ها با نسبت طول به قطر تا اندازه ی ۱ به ۱۳۲۰۰۰۰۰۰ به صورت بارز طولانی‌تر از هر ماده‌ی دیگر هستند. این مولکول‌ها که دارای خواص شگفت انگیزی همانند استحکام خارق العاده و خواص الکتریکی حرارتی غیر عادی می باشند، برای به کارگیری کاربردهای نانو

[۱] Barrelense
[۲] Masaka

فن‌آوری الکترونیک و اپتیک و..... مناسب هستند. نام آن‌ها از ساختار طولانی و تو خالی‌شان با دیواره‌هایی که به وسیله‌ی صفحات کربن با ضخامت یک کربن ساخته شده است نشأت می گیرد. این صفحات در زاویه‌های بخصوص و گسسته لوله می‌شوند. ترکیبی از زاویه‌ها و شعاع‌های مختلف تعیین کننده‌ی خصوصیات نانولوله‌های کربنی هستند. برای مثال اگر پوسته ی نانولوله ، فلزی یا نیم رسانا باشد، نانولوله‌ها به عنوان نانولوله‌های تک دیواره (SWNT)[۱] و نانولوله‌های چند دیواره (MUNT)[۲] طبقه بندی می شوند. شیمی کوانتوم کاربردی با هیبریداسیون اربیتال به بهترین وجه پیوندهای شیمیایی را در نانولوله‌ها توصیف می کند. همه‌ی نانولوله‌های کربنی از پیوند sp^2 مشابه گرافیت تشکیل شده‌اند که از پیوند sp^3 الماس قوی‌تر است وموجب استحکام منحصر به فرد این مولکول‌ها شده است [۳-رحمانی،۱۳۸۷:۳۵].

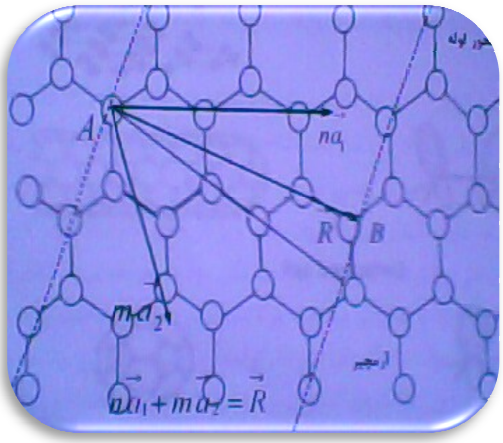
۱-۴ انواع نانولوله‌های کربنی

۱-۴-۱ نانولوله‌های کربنی تک دیواره (SWNT)

نانولوله‌های تک دیواره به صورت ورقه‌های بلند گرافیتی‌اند که به شکل استوانه پیچیده شده‌اند. نسبت طول به قطر این نوع نانولوله‌ها حدود۱۰۰۰ است. نانولوله‌ی تک دیواره از دو قسمت درپوش و بدنه که دارای خواص فیزیکی و شیمیایی متفاوتی هستند، تشکیل شده است. ساختار درپوش مشابه یک فلورین C_{60} است که از کنار هم قرار گرفتن اتم‌های کربنی به صورت پنج ضلعی و شش ضلعی ایجاد می گردد. بر اساس قضیه‌ی اویلر برای به دست آوردن ساختاری قفسی شکل بسته از پنج ضلعی‌ها، به دوازده تا پنج ضلعی نیاز است. ترکیب یک پنج ضلعی و شش ضلعی در اطراف آن قوس لازم برای شکل گیری یک درپوش بسته‌ی گنبدی شکل را ایجاد می کند که فاصله‌ی بین پنج ضلعی‌ها روی پوسته‌ی فلورین به منظور کاهش تنش سطحی و حصول یک قوس موضعی نرم ، به بیشترین مقدار ممکن می رسد تا ساختار پایدارتری را به وجود آورد. کوچک‌ترین ساختار پایداری که به این روش می تواند شکل بگیرد مولکول C_{60} و بعد از آن مولکول C_{70} و .... به همین تربیت فلورین‌های بزرگتر ایجاد می شوند. قسمت دیگر ساختار یک نانولوله‌ی کربنی تک دیواره، بدنه‌ی

[۱] Single Wall Nanotubes
[۲] Multi Wall Nanotubes

استوانه‌ای شکل آن است که از صفحه‌ای گرافیتی با اندازه‌ای معلوم که در جهتی مشخص پیچیده شده است، به دست می آید. از آنجا که باید محصول ایجاد شده تقارنی استوانه‌ای شکل داشته باشد، باید برای به دست آوردن استوانه‌ای بسته، صفحات را در جهت هایی خاص پیچید. لذا دو اتم از گرافیت انتخاب می شوند، یک اتم به عنوان مبدأ در نظر گرفته می‌شوند. برداری که از اتم مبدأ به جهت اتم دیگر اشاره می کند، بردارکایرال[1] است، که به صورت $C_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$ تعریف می شود. طول بردار کایرال برابر محیط نانولوله است. به طوری که محور نانولوله عمود بر بردار کایرال می باشد. شکل زیر بردار کایرال را نشان می دهد [۳-رحمانی،۱۳۸۷:۴۲].



شکل ۱- ۴ : نمایش بردارهای $(\vec{a}_1, \vec{a}_2)$ وکایرال و جفت شاخص(m, n) [۳ -رحمانی ،۱۳۸۷:۴۰]

نانولوله‌های با بردارهای کایرال متفاوت دارای خواص منحصربه فردی نظیر هدایت الکتریکی ، استحکام مکانیکی وخواص نوری متفاوتی می باشند. معمولاً نانولوله‌های تک دیواره قطری حدود یک نانومتر و طولی چند هزار برابر قطر خود دارند. البته تا کنون نانولوله‌های تک دیواره با طول چند سانتی‌متر نیز ساخته شده است. تمام ساختارهای ایجاد شده برای نانولوله‌های تک دیواره از بردارهای کایرال در محدوده ی $m \leq n$ قرار دارند. ساختار یک SWCNT یک صفحه‌ی گرافیتی تک لایه به ضخامت یک اتم کربن است که به صورت استوانه‌ای تو خالی لوله شده است. طرز لوله شدن

[1] Chiral Vector