دانشکده علوم گروه فیزیک

رساله دکترا

رشته فیزیک حالت جامد

عنوان

مدل سازی نظری و بهینه سازی عوامل موثر در رشد نانولوله های کربنی به روش رسوب بخار شیمیایی

استاد راهنما: دکتر مجید واعظ زاده

دانشجو: محمدرضا سعیدی

مهر ۱۳۹۱

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَٰنِ الرَّحِيمِ

تقدیم به روح پاک و بزرگ پدرم، همان بزرگواری که یادم داد تا روی پای خود بایستم و تنها بر خدا توکل کنم.

تقدیم به مادر عزیزتر از جانم، همان مهربانی که هرگز دست از حمایت من برنداشت تا بتوانم همچون کوه سر بر آسمان بسایم.

تقدیم به پدربزرگ مهربانم، همان مومن واقعی که عشق به علی (ع) را از بدو تولد در گوش جانم طنین انداز کرد.

و

تقدیم به همسر نازنینم، همان محبوبی که گرمابخش زندگیم شد.

بسمه تعالی

تاسیس ۱۳۰۷ دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی	**تأییدیه هیأت داوران**	شماره: تاریخ:

هیأت داوران پس از مطالعه پایان‌نامه و شرکت در جلسه دفاع از رساله دکترا تهیه شده تحت عنوان :

مدل سازی نظری و بهینه سازی عوامل موثر در رشد نانو لوله های کربنی به روش رسوب بخار شیمیایی

توسط آقای **محمد رضا سعیدی** صحت و کفایت تحقیق انجام شده را برای اخذ درجه دکترا رشته **فیزیک** گرایش **حالت جامد** در تاریخ **۱۳۹۱/۷/ ۲۳** مورد تأیید قرار می‌هند.

۱- استاد راهنمای اول	**جناب آقـای دکتر مجید واعظ زاده**	امضاء
۲- ممتحن داخلی	**جناب آقـای دکترمحمود جعفری**	امضاء
۲- ممتحن داخلی	**جناب آقـای دکـتر رضا افضلی**	امضاء
۳- ممتحن خارجی	**جناب آقـای دکتر حسین مهربان**	امضاء
۴- ممتحن خارجی	**جناب آقای دکتر سید ادریس فیض آبادی**	امضاء
۵- نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه	**جناب آقای دکتر علی ذاکری**	امضاء

بسمه تعالی

تاسیس ۱۳۰۷ دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی	**اظهارنامه دانشجو**	**شماره:** **تاریخ:**

اینجانب **محمد رضا سعیدی** دانشجوی دکترا رشته **فیزیک** گرایش **حالت جامد**

دانشکده علوم دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی گواهی می‌نمایم که تحقیقات ارائه شده در رساله با عنوان

مدل سازی نظری و بهینه سازی عوامل موثر در رشد نانو لوله های کربنی به روش رسوب بخار شیمیایی

با راهنمایی استاد محترم جناب آقای **مجید واعظ زاده** توسط شخص اینجانب انجام شده و صحت واصالت مطالب نگارش شده در این رساله مورد تأیید می‌باشد، و در مورد استفاده از کار دیگر محققان به مرجع مورد استفاده اشاره شده است. بعلاوه گواهی می‌نمایم که مطالب مندرج در رساله تا کنون برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی توسط اینجانب یا فرد دیگری در هیچ جا ارائه نشده است و در تدوین متن رساله چارچوب (فرمت) مصوب دانشگاه را بطور کامل رعایت کرده‌ام.

امضاء دانشجو:

تاریخ: ۹۱/۷/۲۳

بسمه تعالی

تاسیس ۱۳۰۷ دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی	**حق طبع و نشر و مالکیت نتایج**	شماره: تاریخ:

۱- حق چاپ و تکثیر این پایان‌نامه متعلق به نویسنده آن می‌باشد. هرگونه کپی برداری بصورت کل پایان‌نامه یا بخشی از آن تنها با موافقت نویسنده یا کتابخانه دانشکده علوم دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی مجاز می‌باشد.

ضمناً متن این صفحه نیز باید در نسخه تکثیر شده وجود داشته باشد.

۲- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی می‌باشد و بدون اجازه کتبی دانشگاه به شخص ثالث قابل واگذاری نیست.

همچنین استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مراجع مجاز نمی‌باشد.

*** توجه:**

این فرم می‌بایست پس از تکمیل، در نسخ تکثیر شده قرار داده شود.

حمد و سپاس مخصوص پروردگارم است که منت بر من نهاده و نعمت داشتن استاد والامقامی همچون

آقای دکتر مجید واعظ زاده

را به من عطا کرده است. استاد بزرگواری که نه تنها در تحصیلات تکمیلی، راهنمای دلسوز من بوده است، بلکه همچون یک پدر، درست زندگی کردن و رشد کردن را با تمام وجود به من آموخته است. به رسم شاگردی، بوسه بر دستان پر مهر آن نعمت الهی زده و تا ابد خود را مدیون آن بزرگوار می دانم.

همچنین از خانواده پر مهرم تشکر می کنم که همواره مرا تحمل کرده اند و برای موفقیتم از صمیم قلب دعا کرده اند.

چکیده

در این رساله، یک نظریه جدید برای توصیف مکانیسم رشد و معلوم کردن نحوه تاثیر متغیرهای پارامتری مانند دما و کاتالیست و همچنین عوامل خارجی مانند میدانهای الکتریکی و مغناطیسی، روی رشد نانولوله های کربنی به روش رسوب بخار شیمیایی ارائه می شود. اساس نظریه ارائه شده بر پایه نوسانات طولی فونونی نانولوله کربنی روی کاتالیست در مدل رشد از پایه و نوسانات طولی فونونی خوشه های کاتالیست فلزی روی نانولوله کربنی در مدل رشد از سر می باشد. بر پایه نظریه ارائه شده، تاثیر میدانهای الکتریکی و مغناطیسی در رشد نانولوله های کربنی جهت بهینه سازی رشد، مورد بررسی قرار می گیرد و نشان داده می شود که با اعمال میدان الکتریکی DC در رشد از پایه و میدان مغناطیسی AC در رشد از سر، طول نانولوله کربنی هنگام رشد افزایش می یابد. در انتها، با استفاده از تئوری ارائه شده و با در نظر گرفتن اندرکنش دیواره ها، مدلی نظری برای توصیف مکانیسم رشد نانولوله های کربنی دو دیواره به روش رسوب بخار شیمیایی ارائه می شود. نتایج بدست آمده از این نظریه، توسط نتایج تجربی و شبیه سازی های محققان دیگر مورد تایید می باشد.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
مقدمه	۱
فصل اول: توضیح موضوع و اهمیت ان	۳
۱-۱ انواع نانولوله های کربنی	۵
۱-۲ خواص نانولوله های کربنی	۷
۱-۲-۱ واکنش پذیری شیمیایی	۸
۱-۲-۲ استحکام و مقاومت	۸
۱-۲-۳ خواص الکتریکی	۹
۱-۲-۴ خواص مغناطیسی	۱۰
۱-۲-۵ خاصیت نشر میدانی	۱۱
۱-۳ کاربردهای بالقوه نانولوله های کربنی	۱۱
۱-۳-۱ صنعت فوتوولتائیک	۱۱
۱-۳-۲ ذخیره سازی انرژی	۱۳
۱-۳-۳ گسیلنده های میدان	۱۴
۱-۳-۴ نانو ماشینها	۱۶
۱-۳-۵ تقویت کننده در کامپوزیتها	۱۸

۱-۳-۶ نانو حسگرها ۱۹

۱-۳-۷ نانو جستجوگرها ۲۰

۱-۳-۸ کاربردهای زیستی ۲۱

۱-۴ روشهای رشد نانولوله ها ۲۲

فصل دوم: ادبیات تحقیق و پژوهشهای مرتبط ۲۹

۲-۱ اعمال میدان الکتریکی هنگام رشد نانولوله های کربنی ۳۰

۲-۱-۱ تاثیر میدان الکتریکی DC بر هم ترازی نانولوله های کربنی ۳۰

۲-۱-۲ تاثیر میدان الکتریکی متناوب (AC) بر هم ترازی نانولوله های کربنی ۳۴

۲-۱-۳ تاثیر نوع میدان بر روی هم ترازی نانولوله‌های کربنی تک دیواره ۳۵

۲-۱-۴ تاثیر طول نانولوله‌های کربنی بر هم‌ترازی آنها در میدان الکتریکی ۳۶

۲-۲ اعمال میدان مغناطیسی هنگام رشد نانولوله های کربنی ۳۸

۲-۲-۱ تاثیر میدان مغناطیسی در هم‌راستایی نانولوله‌ها ۳۸

۲-۲-۲ شکل‌گیری ساختارهای مختلف از نانولوله‌ها در حضور میدان مغناطیسی ۴۳

۲-۲-۳ تاثیر میدان مغناطیسی بر طول نانولوله‌ها در روش تخلیه قوس الکتریکی ۴۶

۲-۳ مکانیسم های مختلف رشد نانولوله های کربنی در روش رسوب بخار شیمیایی ۵۲

فصل سوم: مدل سازی نظری و بهینه سازی عوامل موثر در رشد نانولوله های کربنی به روش رسوب بخار شیمیایی ۶۱

۳-۱ مکانیسم رشد از پایه نانولوله های کربنی به روش رسوب بخار شیمیایی ۶۲

۳-۱-۱ رشد نانولوله‌های کربنی با قطرهای مختلف ۶۵

۳-۱-۲ دمای بهینه رشد ۶۶

۳-۱-۳ تاثیر کاتالیست بر روی رشد CNT ۶۸

۳-۲ مکانیسم رشد از سر نانولوله های کربنی در رسوب بخار شیمیایی ۶۹

۳-۲-۱ رشد CNT با قطرهای مختلف ۷۱

۳-۲-۲ وابستگی رشد به دما ۷۲

۳-۲-۳ وابستگی رشد به کاتالیست ۷۴

۳-۳ بررسی نرخ رشد نانولوله های کربنی در رسوب بخار شیمیایی ۷۵

۳-۳-۱ نرخ رشد نانولوله کربنی با قطرهای مختلف ۷۵

۳-۳-۲ وابستگی نرخ رشد نانولوله به دما ۷۷

۳-۴ افزایش ترم جاذب در پتانسیل لنارد-جونز تحت میدان الکتریکی DC ۷۸

۳-۵ تاثیر میدان الکتریکی DC بر رشد از پایه نانولوله های کربنی در رسوب بخار شیمیایی ۸۲

۳-۵-۱ رشد نانولوله کربنی تحت میدان های الکتریکی DC مختلف ۸۳

۳-۵-۲ وابستگی رشد CNT به کاتالیست های مختلف در حضور میدان الکتریکی DC ۸۵

۳-۶ تاثیر میدان مغناطیسی AC روی طول نانولوله های کربنی هنگام رشد به روش رسوب بخار شیمیایی ۸۶

۳-۶-۱ رشد CNT تحت تاثیر میدان های مغناطیسی مختلف ۸۸

۳-۶-۲ وابستگی دمای بهینه رشد به میدان مغناطیسی ۹۰

۳-۶-۳ وابستگی رشد CNT به کاتالیست‌های مختلف در حضور میدان مغناطیسی AC ۹۱

۳-۷ مکانیسم رشد نانولوله‌های کربنی دو دیواره (DWCNT) در روش رسوب بخار شیمیایی ۹۳

۳-۷-۱ اندرکنش بین دو دیواره نانولوله کربنی دودیواره ۹۴

۳-۷-۲ معادلات رشد دیواره‌های داخلی و بیرونی برحسب زمان ۹۸

۳-۷-۳ مقایسه رشد نانولوله‌های دو دیواره با قطرهای متفاوت ۱۰۴

۳-۸ نتیجه گیری و پیشنهادات ۱۰۶

لیست مقالات ارائه شده ۱۰۸

مراجع ۱۰۹

فهرست اشکال و نمودارها

عنوان	صفحه
شکل ۱-۱: طبقه بندی نانولوله‌های کربنی: (الف). نانولوله کربنی تک دیواره. (ب). نانولوله کربنی چند دیواره.	۵
شکل ۱-۲: نمونه‌ای از تصاویر میکروسکوپ الکترونی عبوری از نانولوله‌ها.	۷
شکل ۱-۳: تاثیر کایرالیتی نانولوله کربنی روی خواص الکتریکی آن.	۱۰
شکل ۱-۴: طرحواره ای از کاشت نانولوله های کربنی در لایه ذاتی یک سلول خورشیدی pin.	۱۲
شکل ۱-۵: خاصیت مویینگی نانولوله کربنی.	۱۳
شکل ۱-۶: پایانه های سورس و درین در ترانزیستورهایی که با نانولوله‌های کربنی ساخته می‌شوند.	۱۶
شکل ۱-۷: نسل آتی چرخدنده های نانویی با استفاده از نانولوله های کربنی.	۱۷
شکل ۱-۸: استفاده از حرکت چرخشی و محوری نانولوله های چند دیواره در ساخت نانوماشینها.	۱۷
شکل ۱-۹: طرحواره ای از نانوکامپوزیت نانولوله‌ای.	۱۹
شکل ۱-۱۰: نمونه‌ای از حسگرهای زیستی نانولوله‌ای.	۲۰
شکل ۱-۱۱: استفاده از یک نانولوله چنددیواره به عنوان نوک میکروسکوپ نیروی اتمی.	۲۱
شکل ۱-۱۲: کوره افقی معمول‌ترین پیکربندی برای تولید نانولوله‌های کربنی در روش CVD.	۲۶
شکل ۱-۱۳: آنتالپی آزاد تشکیل نمونه‌های کربنی.	۲۶

شکل ۲-۱: تصویر SEM از نانولوله‌های تک‌دیواره رشد یافته در میدان‌های مختلف. فاصله بین دو الکترود μm ۴۰ است. ۳۱

شکل ۲-۲: (a) یک نانولوله‌ی تک دیواره در میدان الکتریکی (b) ارتعاشات SWCNT در میدان الکتریکی. ۳۲

شکل ۲-۳: انحرافات القاء شده در یک CNT با کایرالیته (۰و۸) توسط میدان الکتروستاتیک با شدت‌های مختلف. زاویه اعمال میدان 45° و طول نانولوله nm ۶/۵۴ می باشد. ۳۴

شکل ۲-۴: نمودار جریان-ولتاژ برای CNTهای هم‌تراز شده. ولتاژ AC اعمال شده $3V$ و بسامد $6.5kHz$ می باشد. ۳۶

شکل ۲-۵: (a) SWCNT عمودی با طول بلند بر روی جزیره‌های Al_2O_3 با ولتاژ $50V$ و میدان $2\times10^{6}V/m$ (b) رشد SWCNT بر روی جزیره‌هایی با اندازه‌های متفاوت. ۳۷

شکل ۲-۶: ریز ساختاری از پودرهای CNT. ۳۹

شکل ۲-۷: طرحواره ای از قرار گرفتن نمونه در مولد میدان مغناطیسی. ۴۰

شکل ۲-۸: ریز ساختاری از نانولوله های کربنی a) در غیاب میدان b) در حضور میدان [۷۸]. ۴۰

شکل ۲-۹: تصاویر SEM از نانولوله‌های کربنی واقع در میدان مغناطیسی a) ۸۰ Koe b) صفر [۷۹]. ۴۱

شکل ۲-۱۰: نمودار توزیع تجربی (دایره،مثلث ومربع) و تئوری (منحنی) جهت‌یابی نانولوله‌های کربنی در میدان مغناطیسی. محور افقی زاویه بین CNT و میدان را نشان می‌دهد. شدت میدان: a) ۰، b) ۵، c) ۱۰، d) ۱۶، e) ۲۰، f) ۳۰، g) ۴۰، h) ۶۰ و i) ۸۰ Koe. ۴۲

شکل ۲-۱۱: آهنربای یوغی شکل Ne-Fe-B برای اعمال میدان مغناطیسی. ۴۴

شکل ۲-۱۲: نانولوله‌های دسته‌ای قلابی شکل. ۴۵

شکل ۲-۱۳: نانولوله‌های دسته‌ای قوسی شکل. ۴۵

شکل ۲-۱۴: نانولوله‌های دسته‌ای نردبانی شکل. ۴۵

شکل ۲-۱۵: تصویر TEM از تغییر جهت رشد CNT، هنگامی که جهت نیروی مغناطیسی تغییر می‌کند. ۴۶

شکل ۲-۱۶: a) طرحواره ای از دستگاه آزمایش. تصویر قوس b) در حضور میدان مغناطیسی و c) در غیاب میدان. ۴۷

شکل ۲-۱۷: مقایسه طول SWCNT در حضور میدان مغناطیسی و بدون میدان در محفظه تخلیه قوس الکتریکی. شکل سمت چپ، تصویر SEM از اندازه‌گیری طول SWCNT را نشان می‌دهد. در شکل سمت راست، تصویر TEM از SWCNT منفرد و دسته‌ای نشان داده شده است. ۴۸

شکل ۲-۱۸: رشد SWCNT بر روی ذرات کاتالیست فلزی مذاب در پلاسما. ۵۰

شکل ۲-۱۹: وابستگی آهنگ رشد SWCNT به طول، بر اساس چگالی پلاسما. قطر SWCNT، ۲ نانومتر و قطر ذرات کاتالیست ۱۰ نانومتر است. در شکل کاهش شدید سرعت رشد با افزایش طول دیده می‌شود. ۵۱

شکل ۲-۲۰: مراحل رشد نانولوله‌های کربنی، شامل تجزیه کاتالیزوری منبع تغذیه کربن(هیدروکربن یا CO)، انتشار کربن، و رسوب به عنوان یک رشته. مطابق مدل بکر، کربن درون حجم کاتالیزور فلزی"M" منتشر می‌شود. مطابق مدل اوبرلین [۱۰۳] کربن در سرتاسر سطح کاتالیزور فلزی منتشر می‌شود و یک ساختار لوله‌ای شکل را روی محیط کاتالیزور تشکیل می‌دهد. ۵۴

شکل ۲-۲۱: مراحل رشد نانولوله کربنی در مکانیسم انتشار سطحی کربن روی کاتالیزور که شامل تجزیه کاتالیزوری منبع کربن، انتشار کربن روی سطح کاتالیزور و نهایتاً رشد نانولوله کربنی می‌باشد. ۵۶

شکل ۲-۲۲: (الف)- سطح هیدروفوبیک که در آن برهمکنش ضعیف بین سطح و نانو ذره کاتالیزور برقرار است. (ب)- سطح هیدروفیلیک که در آن برهمکنش قوی بین سطح و نانو ذره کاتالیزور برقرار است. ۵۸

شکل ۲-۲۳: دو مدل رشد (الف)رشد از سر، (ب)رشد از پایه، که از تفاوت بین اندرکنش‌های فلز کاتالیزور- زیرلایه ناشی می‌شوند. ۵۹

شکل ۳-۱: مدل جرم- فنر برای CNT و کاتالیست آن. ۶۳

شکل ۳-۲: رشد CNT با قطرهای مختلف در دمای ۷۰۰ درجه سانتیگراد. ۶۶

شکل ۳-۳: وابستگی رشد به دما برای قطرهای مختلف. ۶۷

شکل ۳-۴: تاثیر انرژی پیوند وان‌دروالس روی رشد CNT از پایه در دماهای مختلف. ۶۹

شکل ۳-۵: مدلی از برهم‌کنش CNT با خوشه ای از نانوذرات فلزی در انتهای آن و زیرلایه توسط سیستم جرم و فنر. ۷۰

شکل ۳-۶: رشد CNT با قطرهای مختلف در دمای ^{o}C ۹۰۰. ۷۲

شکل ۳-۷: نمودار رشد از سر CNT در دماهای مختلف. ۷۳

شکل ۳-۸: طول CNT تابعی از جرم خوشه برای نیکل، آهن و طلا بعنوان کاتالیست در دمای ۹۰۰ درجه سلسیوس. ۷۴

شکل ۳-۹: نرخ رشد نانولوله کربنی تابعی از زمان واکنش و قطر نانولوله. ۷۶

شکل ۳-۱۰: وابستگی نرخ رشد نانولوله ها با قطرهای مختلف به دما. ۷۷

شکل۳-۱۱: افزایش پتانسیل لنارد- جونز تابعی از فاصله بین دو اتم، R ، و میدان الکتریکی اعمال شده بین دو اتم آهن و کربن. ۸۲

شکل۳-۱۲: نمودار رشد نانولوله های کربنی بر حسب زمان برای میدان های الکتریکی DC مختلف. ۸۴

شکل ۳-۱۳: وابستگی رشد CNT به میدان الکتریکی DC برای کاتالیست های مختلف. ۸۵

شکل ۳-۱۴: رشد CNT تحت تاثیر میدان‌های مغناطیسی مختلف AC در دمای ^{o}C ۹۰۰. ۸۹

شکل ۳-۱۵: تغییرات دمای بهینه رشد به صورت تابعی از دامنه میدان مغناطیسی AC. ۹۱

شکل ۳-۱۶: نمودار تغییرات طول بیشینه CNT تابعی از تعداد اتم‌های خوشه در حضور و در غیاب میدان مغناطیسی، برای دو کاتالیست مختلف آهن و نیکل. ۹۲

شکل ۳-۱۷: (الف)-حالت اولیه موقعیت نسبی هر زوج کربن-کربن و (ب)- حالت ثانویه موقعیت نسبی هر زوج کربن-کربن در نانولوله کربنی دو دیواره. ۹۶

شکل ۳-۱۸: شماتیکی از رشد نانولوله دودیواره که در آن اتم‌های کربن با گلوله، اندرکنش دیواره‌ها با کاتالیزور و اندرکنش بین دو دیواره با فنر و همچنین پیوند اتم‌های کربن در هر دیواره با میله نشان داده شده است. ۹۸

شکل ۳-۱۹: (الف). نمودار تغییرات طول دیواره‌های بیرونی و داخلی نانولوله کربنی دودیواره برحسب زمان که از مدل نتیجه شده‌اند. (ب). نتایج تجربی مربوط به رشد نانولوله در دمای ۹۹۸K که در این دما دارای بیشترین درصد نانولوله دو دیواره می‌باشیم [۱۵۱]. ۱۰۳

شکل ۳-۲۰: نمودار رشد دیواره بیرونی برحسب زمان برای قطرها و کایرالیتی‌های متفاوت. ۱۰۵

شکل ۳-۲۱: نمودار رشد دیواره داخلی برحسب زمان برای قطرها و کایرالیتی‌های متفاوت. ۱۰۶

مقدمه

نانولوله‌ها در حوزه‌ی نانو فناوری که از فناوریهای جدید بشر است قرار می‌گیرند و با توجه به کاربردهای گسترده‌ی این ساختارها در علوم مختلف مانند: فیزیک، شیمی، مواد، مکانیک، برق، علوم زیستی، بهداشت و پزشکی و نیز صنایع از قبیل: خودروسازی، کشتی سازی، هواپیما سازی و هوافضا، کشاورزی، و صنایع برق، الکترونیک و کامپیوتر، در سال های اخیر مورد توجه و سرمایه گذاری زیادی قرار گرفته اند.

با کشف این ساختارها، فعالیت‌های تحقیقاتی گسترده‌ای در علوم مختلف به بحث و بررسی ویژگی‌های ساختاری نانوساختارهای کربنی و کاربردهای آن‌ها اختصاص یافته است. دلیل عمده توجه زیاد به این ساختارها، ویژگی‌های منحصر به فردی همچون اندازه کوچک، نسبت جرم به حجم پایین(چگالی کم)، سختی بالا،استحکام بالا (استحکام کششی خارجی ترین جداره‌ی یک نانولوله‌ی کربنی چند دیواره تقریبا ۱۰۰ برابر بیشتر از آلومینیوم است) و خواص عالی الکتریکی آن‌هاست. با توجه به این ویژگی‌ها پتانسیل بالایی برای استفاده از این ساختارها در علوم و صنایع مختلف پیش‌بینی می‌شود. به عنوان مثال این ساختارها به طور گسترده در تقویت مواد(کامپوزیت‌ها)، تولید صفحه نمایش مسطح با انتشار میدانی، استفاده در حسگرهای شیمیایی، دارورسانی و علم نانوالکترونیک کاربرد دارند.

تا به حال روش‌های مختلفی برای سنتز این نانوساختارها ارائه شده است که مهمترین و با اهمیت‌ترین آن‌ها، روش تخلیه قوس الکتریکی، روش تبخیر با لیزر و روش رسوب شیمیایی فاز بخار می‌باشند. روش رسوب شیمیایی فاز بخار، یکی از روش‌های مهم و پرکاربرد تولید نانولوله های کربنی می‌باشد که اساس کار ما در این پروژه نیز همین روش می‌باشد. در این روش با استفاده از یک کاتالیزور فلزی که درون کوره رشد قرار گرفته است و با عبور گاز تغذیه از درون کوره و اعمال دمای مناسب، نانولوله کربنی سنتز می‌شود. با توجه به مکان ذرات کاتالیزور نسبت به نانولوله در زمان رشد، رشد در این روش را می‌توان به دو دسته رشد از سر و رشد از

پایه تقسیم بندی کرد. در روش رشد از سر، ذره کاتالیزور روی نوک نانولوله قرار گرفته است ولی در روش رشد از پایه، نانو ذره کاتالیزور به زیرلایه متصل می‌باشد و نانولوله روی آن رشد می‌کند.

بررسی مکانیسم رشد نانولوله‌های کربنی یکی از بخش‌های مهم حوزه نانولوله کربنی می‌باشد. با بررسی مکانیسم رشد نانولوله‌ها می‌توان به تاثیر عوامل مختلف روی رشد نانولوله‌ها پی برد و همچنین می‌توان تاثیر این عوامل را برای بهینه کردن رشد در جهتی مناسب هدایت کرد و به ساختارهای مطلوب دست یافت. تا کنون مکانیسم های مختلفی برای توضیح چگونگی رشد نانولوله ها در رسوب بخار شیمیایی ارائه شده است، اما اگر چه مکانیسم های ذکر شده، نحوه تجزیه هیدروکربنها، آماده سازی کاتالیستها جهت رشد و عامل ایجاد رشد از سر و رشد از پایه را ارائه می دهند، اما هیچکدام مدلی برای رشد نانولوله ها روی کاتالیست و نحوه تاثیر پارامترهای موثر بر رشد را بیان نمی کنند. با توجه به کارهای تجربی و شبیه سازی، یک مطالعه جامع برای توصیف مکانیسم رشد و معلوم کردن نحوه تاثیر متغیرهای پارامتری مانند دما و کاتالیست و همچنین عوامل خارجی مانند میدانهای الکتریکی و مغناطیسی، روی رشد نانولوله های کربنی، موضوعی اجتناب ناپذیر است. تئوری قابل قبولی که تاثیر بسیاری از پارامترهای رشد را در نظر می گیرد و مدل مناسبی برای رشد نانولوله های کربنی در رسوب بخار شیمیایی ارائه می دهد، نظریه ای است که بر پایه نوسانات طولی فونونی نانولوله کربنی روی کاتالیست در مدل رشد از پایه و نوسانات طولی فونونی خوشه های کاتالیست فلزی روی نانولوله کربنی در مدل رشد از سر، در مجلات و کنفرانسهای معتبر بین المللی خارجی و داخلی ارائه شده است. در این رساله، اساس کار بر پایه همین مدل نظری مذکور خواهد بود که بطور بسیط بیان خواهد شد.

فصل اول

توضیح موضوع و اهمیت آن