بسم الله الرحمن الرحيم

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان‌نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک

گرایش حالت جامد نظری

عنوان پایان نامه:

اثر تزریق ناخالصی مغناطیسی و نقص بر خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله‌های نیترید بور (BN) تک دیواره و دو دیواره

استاد راهنما:

دکتر علی فتحعلیان

نگارش:

لیلا شریفی

مهر ماه ۹۱

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات
و نوآوری‌های ناشی از تحقیق موضوع این پایان‌نامه
متعلق به دانشگاه رازی است.

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان‌نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک

گرایش حالت جامد نظری توسط لیلا شریفی

تحت عنوان

اثر تزریق ناخالصی مغناطیسی و نقص بر خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله‌های نیترید بور (BN) تک دیواره و دو دیواره

در تاریخ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه به تصویب نهایی رسید.

۱- استاد راهنمای پایان‌نامه	**دکتر علی فتحعلیان**	**با مرتبه علمی استادیار**	**امضاء**
۲- استاد داور داخلی پایان‌نامه	**دکتر حامد رضانیا**	**با مرتبه علمی استادیار**	**امضاء**
۳- استاد داور داخلی پایان‌نامه	**دکتر سیدحمزه موسوی**	**با مرتبه علمی استادیار**	**امضاء**

چکیده

در این پایان‌نامه با استفاده از روش تابع چگالی و نرم‌افزار Wien2k به بررسی اثر تزریق ناخالصی و نقص بر خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله‌های تک دیواره و دودیواره نیترید بور پرداخته شده است.

نانولوله‌هایی که در این پروژه مورد بررسی قرار گرفته‌اند، از نوع زیگزاگ هستند. چون این نانولوله‌ها همه نیمه‌رسانا هستند، سپس با تغییر قطر نانولوله تک دیواره تغییرات گاف انرژی را بررسی کرده‌ایم. همچنین هنگامی که نانولوله دو دیواره است افزایش فاصله بین دیواره داخلی و خارجی روی گاف انرژی اثر می‌گذارد، که این اثر در قطرهای بالاتر تغییر می‌کند. این تغییرات را با استفاده از منحنی چگالی حالت و ساختار باند نشان داده‌ایم.

به دلیل اینکه در نانولوله‌هایی که به وجود می‌آیند به طور طبیعی، نقص وجود دارد. یک بار دیگر خواص الکترونی نانولوله‌ها را با وجود نقص مورد بررسی قرار دادیم. نقص که در این ساختار ایجاد شده از نوع نقص هندسی، جفت ۷–۵ است. در ادامه نقص را یک‌بار در لایه بیرونی نانولوله دو دیواره و بار دیگر در لایه داخلی قرار داده و از نظر پایداری، ساختار را بررسی کرده‌ایم. سپس با وجود یک ناخالصی Fe به جای اتم نیتروژن خواص مغناطیسی ساختار را بررسی کرده و ممنتوم مغناطیسی آن را محاسبه کرده‌ایم.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول: تاریخچه پیدایش نانو لوله‌های کربنی

۱-۱- مقدمه ۲

۱-۲- نانو لوله‌های کربنی ۳

۱-۲-۱- انواع لوله‌های کربنی و ساختار هندسی آنها ۴

۱-۲-۲- روش‌های تولید نانو لوله‌های کربنی ۶

۱-۲-۲-۱- روش تخلیه قوس ۶

۱-۲-۲-۲- روش تابش لیزر ۶

۱-۲-۲-۳- روش رسوب بخار شیمیایی (CVD) ۷

۱-۲-۳- ویژگی‌های نانو لوله‌های کربنی ۷

۱-۲-۴- کاربردهای نانو لوله‌های کربنی ۹

فصل دوم: نظریه تابعی چگالی

۲-۱- مقدمه ۱۱

۲-۲- روش‌های کوانتومی حل دستگاه بس ذره‌ای ۱۱

۲-۳- تقریب بورن- اپنهایمر ۱۲

۲-۴- چگالی الکترونی ۱۳

۲-۴-۱- نظریه توماس- فرمی ۱۴

۲-۵ - نظریه تابع چگالی ۱۶

۲-۵-۱- قضایای هوهنبرگ- کوهن ۱۷

۲-۶- معادلات کوهن- شم ۱۹

۲-۶-۱- روش‌های حل انرژی تبادل ـ همبستگی $E_{xc}[n]$ ۲۲

۲-۶-۱-۱ - تقریب چگالی موضعی (LDA) ۲۲

۲-۶-۱-۲ - تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) ۲۳

۲-۶-۱-۳ - تقریب LDA+C ۲۳

۲-۶-۱-۴- تقریب LDA+U ۲۴

۲-۷- روش‌های حل معادلات کوهن- شم ۲۴

۲-۷-۱- روش امواج تخت بهبود یافته APW ۲۵

۲-۷-۲- روش امواج تخت بهبود یافته خطی LAPW ۲۷

۲-۷-۳- روش امواج تخت بهبود یافته خطی با اوربیتال‌های موضعی (LAPW+lo) ۲۸

۲-۷-۴- روش امواج تخت بهبود یافته با اربیتال موضعی (APW+lo) ۲۸

۳-۷-۵- روش امواج تخت بهبود یافته خطی در مدل پتانسیل کامل (FP- LAPW) ۲۹

فصل سوم: مقدمه‌ای بر نانو لوله‌های نیترید بور

۳-۱- مقدمه ۳۰

۳-۱- مقدمه ۳۱
۳-۲- روش‌های سنتز ۳۳
۳-۳- ویژگی‌های نانو لوله‌های نیترید بور ۳۶
۳-۴- نقص در نانو لوله‌ها ۳۸
۳-۵- اهمیت و کاربرد نانو لوله‌های نیتریدبور ۳۹
۳-۶- مروری بر کارهای انجام شده روی نانو لوله‌های نیترید بور ۴۱
فصل چهارم: اثر تزریق ناخالصی و نقص بر روی خواص الکترونی و مغناطیسی در نانو لوله‌های نیترید بور تک دیواره و دو دیواره
۴-۱- مقدمه ۴۴
۴-۲- رهیافت پایان‌نامه ۴۴
۴-۲-۱- روش محاسباتی ۴۵
۴-۲-۲- بررسی خواص الکترونی نانو لوله‌های تک دیواره نیتریدبور (n,۰) ۴۵
۴-۲-۳- بررسی خواص الکترونی نانو لوله‌های نیتریدبور دو دیواره (n_2 ,۰) @ (n_1 ,۰) ۴۸
۴-۲-۴- اثر نقص جفت پنج‌ضلعی- هفت‌ضلعی (۷-۵) در خواص الکترونی نانولوله‌های نیترید بور تک دیواره و دو دیواره ۵۰
۴-۲-۴-۱- نانو لوله‌های نیتریدبور (۶,۰) با وجود نقص جفت ۷-۵ ..... ۵۰
۴-۲-۴-۲- نانو لوله‌ی نیتریدبور (۱۲,۰) با وجود نقص ۷-۵ ..... ۵۳
۴-۲-۵- بررسی اثر نقص ۷-۵ در نانولوله‌های دو دیواره ۵۵
۴-۲-۵-۱- نقص در دیواره داخلی (۰, ۱۲)@(۰, ۶) ۵۵
۴-۲-۵-۲- نقص در دیواره خارجی نانولوله (۰, ۱۲)@(۰, ۶) ۵۶
۴-۲-۵-۳- مقایسه نانو لوله‌های همراه با نقص در دیواره داخلی و خارجی ۵۷
۴-۲-۶- اثر تزریق ناخالصی Fe بر نانولوله‌های نیترید بور همراه با نقص ۷-۵ ..... ۵۸
نتیجه‌گیری ۶۰
منابع ۶۲

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل ۱-۱- صفحات گرافیت که به نانو لوله تبدیل شده است ۴
شکل ۱-۲- (a) نانو لوله کربنی تک دیواره. (b) نانو لوله کربنی چند دیواره ۴
شکل ۱-۳- گرافن ۵
شکل ۱-۴- طرحواره دستگاه تولید نانو لوله‌های کربنی به روش بخار شیمیایی ۷
شکل ۲-۱- نمایش تقسیم فضای داخلی بلور توسط کره‌های مافین- تین ۲۵
شکل ۳-۱- (a) لایه‌های نیترید بور، (b) نمای بالایی نیترید بور، (c) منحنی چگالی حالت کل و ساختار نواری نیترید بور ۳۲
شکل ۳-۲- (a) نانو لوله تک دیواره نیترید بور (۰, ۶)، (b) نانولوله دو دیواره نیترید بور(۰، ۱۴) @)(۰, ۶)، (c) سطح مقطع نانو لوله تک دیواره نیترید بور (۰, ۶)، (d) سطح مقطع نانو لوله دو دیواره نیترید بور (۰, ۱۴) @)(۰, ۶) ۳۳
شکل ۴-۱- منحنی چگالی حالات کل برحسب انرژی برای نانو لوله‌های زیگزاگ با قطرهای مختلف ۴۵
شکل ۴-۲- ساختار باند برای نانولوله‌های (۶,۰) ، (۰, ۱۲)، (۰, ۱۴) و (۰, ۱۸) ۴۷
شکل ۴-۳- منحنی‌های چگالی حالات کل برای نانو لوله‌های دو دیواره، نانو لوله (۱۲,۰)@ (۰, ۶)، نانو لوله (۰, ۱۴)@ (۰, ۶)، نانو لوله (۱۸,۰) @ (۰, ۶) ۴۸
شکل ۴-۴- نقص در نانو لوله نیترید بور (۰, ۶) ۵۰
شکل ۴-۵- چگالی حالت کل نانو لوله (۰, ۶) با نقص ۷-۵ و نانو لوله (۰, ۶) بدون نقص ۵۱
شکل ۴- ۶- منحنی چگالی حالت موضعی نانولوله (۰, ۶) همراه با نقص ۵۲
شکل ۴-۷- ساختار نواری (a) نانو لوله (۰, ۶)، (b) نانو لوله (۰, ۶) همراه با نقص ۵۲
شکل ۴-۸- منحنی چگالی حالت کل برای نانولوله (۰, ۱۲) همراه با نقص و نانولوله (۰, ۱۲) بدون نقص ۵۳
شکل ۴-۹- منحنی چگالی حالت اوربیتال p برای اتم N و B ۵۳
شکل ۴-۱۰- (a) ساختار نواری نانولوله (۰, ۱۲) همراه بدون نقص (b) ساختار نواری نانولوله (۰, ۱۲) با نقص ۵۴
شکل ۴-۱۱- منحنی چگالی حالت کل نانولوله (۰, ۶) همراه با نقص و نانو لوله (۰, ۱۲) همراه با نقص ۵۴
شکل ۴-۱۲- نقص ۷-۵ در لایه بیرونی نانو لوله (۰, ۱۲)@ (۰, ۶) ۵۵
شکل ۴-۱۳- منحنی چگالی حالت کل برای نانولوله همراه با نقص(۰, ۱۲)@(۰, ۶) و نانولوله همراه با نقص (۰، ۶) ۵۶
شکل ۴-۱۴- منحنی چگالی حالت کل نانولوله (۰, ۱۲)@(۰, ۶) همراه با نقص خارجی و نانولوله (۰، ۱۲) همراه با نقص ۵۷
شکل ۴-۱۵- منحنی چگالی حالت کل (a) نانو لوله دو دیواره (۰, ۱۲)@(۰, ۶) با نقص داخلی، (b) نانو لوله دو دیواره، (۰, ۱۲)@(۰, ۶) با نقص خارجی ۵۷
شکل ۴-۱۶- نانو لوله BN (۰, ۶) @ Fe ۵۸
شکل ۴-۱۷- منحنی چگالی حالت نانو لوله BN (۰, ۶) @ Fe ۵۹

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

جدول ۴-۱- مقادیر انرژی کل و انرژی فرمی برای قطرهای مختلف نانو لوله زیگزاگ تک دیواره..... ۴۶
جدول ۴-۲- مقادیر انرژی کل و انرژی فرمی برای قطرهای مختلف نانو لوله‌های دو دیواره..... ۴۹
جدول ۴-۳- مقایسه طول پیوند اتم‌ها قبل و بعد از واهلش کردن ساختار..... ۵۱
جدول۴-۴- انرژی تشکیل نانولوله دو دیواره همراه با نقص۷-۵ همراه با نقص در دیواره خارجی و داخلی... ۵۸

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

نمودار ۴-۱- گاف انرژی برحسب افزایش فاصله بین دو دیواره ۴۹

فصل اول

تاریخچه پیدایش نانو لوله‌های کربنی

۱-۱- مقدمه

قرن بیست و یکم، قرن فناوری نانو مهمترین دوران صنعت به شمار می‌رود. قرن نانو، قرن سلامتی، صرفه جویی و آرامش نامیده می‌شود. نانو نه یک ماده است نه یک جسم، بلکه فقط یک مقیاس است. نانو یک میلیاردم هر کمیت است.

در مقیاس نانو خواص فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی تک تک اتم ها، مولکول‌ها با خواص توده ماده متفاوت است. نانو ذرات در چنین مقیاس و مشخصه‌های منحصر به فردی موجب پیدایش دستاوردهای نوینی در علوم پزشکی و مهندسی می‌شوند. به طور خلاصه نانو تکنولوژی به معنی انجام مهندسی مواد در ابعاد اتمی - مولکولی و ساخت موادی با خواص کاملاً متفاوت در ابعاد نانو است.

فناوری نانو حدود نیم قرن پیش در دهه‌های آخر قرن بیستم همراه با توسعه فناوری‌های نوین تصویربرداری، دستکاری و شبیه سازی ماده در مقیاس اتمی پدید آمده است . نانو در گذشته فیزیکی اتمی نامیده می‌شد و پس از کاربردی شدن آن، نانو نامیده شد. به همین دلیل نانو یک علم جدید نیست، اما کاربردی شدن آن زندگی انسان را دگرگون ساخت.

علوم و فناوری نانو به دلیل اندازه و مقیاسی که در آن معتبرند، می‌توانند با بسیاری از خواص مکانیک کوانتومی در تعامل باشند. فهم بسیاری از فرایندها در این مجموعه بدون داشتن این دانش غیرممکن می‌باشد.

فناوری نانو را می‌توان نگرش عمیق در پژوهش و تحولات دانست که هدف آن کنترل رفتار و ساختار بنیادی مواد در حد اتم‌ها و مولکول‌ها می‌باشد. همچنین بهره برداری از خواص نو ظهور این گونه ساختار و نحوه ی ساخت و استفاده از آن‌ها از اهداف اصلی این فناوری می‌باشد.

۱) روش ساخت ساختارها در فناوری نانو

از اهداف مهم فناوری نانو و شاید مهمترین آنها، به وجود آوردن ساختارهایی از مواد است که در آنها آرایش مولکول‌ها از پیش طراحی شده باشد. روش‌های مرسوم تولید، مثل روش ذوب فلزات و سرد کردن آنها در قالب، چنین امکانی را فراهم نمی کنند. در صنعت از دو روش برای ساخت استفاده می‌شود. تا چند سال پیش، راه دستکاری و جا به جا کردن تک مولکول‌ها و ساختارهای نانوی یک طرفه بود. یعنی برای

ساختن چیزها در مقیاس کوچک، می‌بایست یک قطعه بزرگتر را با تراشیدن و خرد کردن یا حل کردن بخش‌های اضافی با اسید و... آن قدر کوچک می‌کردیم تا به قطعه ی نهایی برسیم. به عبارت دیگر، روش تولید ساختارهای کوچک از نوع بالابه پایین بود.

در چند سال اخیر فنونی ابداع شده‌اند که اجازه می‌دهند مولکول‌ها یا ذرات را جا به جا و آنها را به هم متصل کنیم. مثل جا به جا کردن ذرات نانویی با میکرسکوپ نیروی اتمی (AFM)، به فنون ساختن نانو لوله‌های کربنی به این روش، ساختن از پایین به بالا می‌گویند.

۲) نانو مواد و دسته بندی آن

فناوری نانو به سه سطح قابل تقسیم است؛ مواد، ابزارها و سیستم‌ها

موادی که در سطح نانو در این فناوری به کار می‌رود، را نانو مواد می‌گویند. ماده ی نانو ساختار، به هر ماده‌ای که حداقل یکی از ابعاد آن مقیاس نانومتری (زیر ۱۰۰ نانومتر) باشد اطلاق می‌شود.

مواد در مقیاس نانو، رفتار کاملاً متفاوت، نامنظم و کنترل نشده‌ای از خود بروز می‌دهند. با کوچک شدن ذرات خواص نیز تغییر خواهد کرد. مثلاً فلزات، سخت تر و سرامیک نرم‌تر می‌شوند.

نانو مواد به دسته‌های زیر قابل تقسیم می‌باشد:

۱- نانو خوشه‌ها ۲- نانو پوشش‌ها ۳- نانو لایه‌ها ۴- نانو سیم‌ها ۵- نانو لوله‌ها ۶- نانو حفره‌ها ۷- نانو ذرات

در ادامه به معرفی نانو لوله‌ها می‌پردازیم.

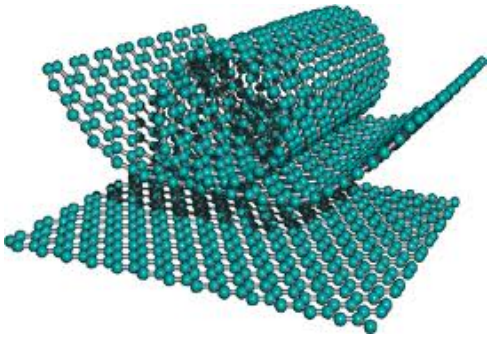
۱-۲- نانو لوله‌های کربنی[1]

تا سال ۱۹۸۰، سه آلوتروپ کربن (کربن غیر بلوری) به نام‌های الماس، گرافیت[2] و کربن بی‌شکل شناخته شده بودند اما امروزه می‌دانیم که خانواده کاملی از سایر اشکال کربن نیز وجود دارند.

در سال ۱۹۹۱ دانشمندی به نام سومیو ایجیما[3] به طور کاملاً اتفاقی، ساختار دیگری از کربن را کشف و تولید کرد که خواص منحصر به فردی داشت [۱]. وی در ابتدا این ساختار را نوعی فولرن[4] تصور نمود که در یک جهت کشیده شده است. اما بعدها متوجه شد که این ساختار، خواص متفاوتی از فولرن‌ها دارد. به همین دلیل آن را نانو لوله ی کربنی نامید.

1 - Carbon Nano Tube
2 - Graphite
3 - Sumio Iijima
4 - Follerene

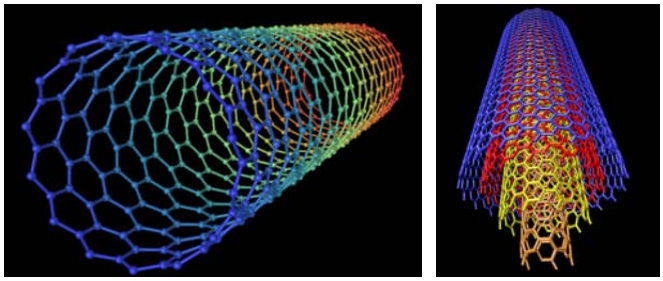
در یک نانو لوله‌ی کربنی، اتم‌های کربن در ساختاری استوانه‌ای آرایش یافته اند. یعنی یک لوله ی توخالی که جنس دیواره‌اش از اتم‌های کربن است. آرایش اتم‌های کربن در دیواره‌ی این ساختار استوانه‌ای، دقیقاً مشابه آرایش کربن در صفحات گرافیت است. در گرافیت، شش ضلعی‌های منظم کربنی در کنار یکدیگر صفحات گرافیت را می‌سازند. این صفحات کربنی بر روی یکدیگر انباشته می‌شوند و هر لایه از طریق پیوندهای ضعیف واندروالس به لایه زیرین متصل می‌شود. هنگامی که صفحات گرافیت در هم پیچیده می‌شوند، نانو لوله‌های کربنی را تشکیل می‌دهند. در واقع، نانو لوله ی کربنی، یک لایه گرافیت (گرافن)[1] است که به شکل لوله در آمده باشد.



شکل ۱-۱- صفحات گرافیت که به نانو لوله تبدیل شده است

۱-۲-۱- انواع لوله‌های کربنی و ساختار هندسی آنها

نانو لوله‌های کربنی از نظر شکل ظاهری، ساختار و گرافیت به دو دسته نانو لوله‌های کربنی تک لایه (SWCNT)[2] و چند لایه (MWCNT)[3] تقسیم می‌شوند. در آزمایش‌ها می‌توان این نکته را دریافت که نانو لوله‌های کربنی از طناب‌های لوله‌ای زیادی تشکیل شده‌اند.



(a) (b)

شکل ۱-۲- (a) نانو لوله کربنی تک دیواره. (b) نانو لوله کربنی چند دیواره

1 - Gera phene
2 - Single Wall carbon Nano Tube
3 - Multi Wall carbon Nano Tube

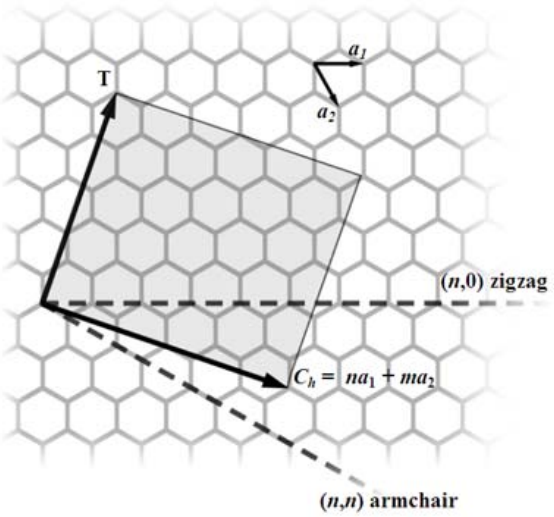
یک نانو لوله کربنی تک دیواره به طور مشخص توسط بردار جهت (کایرال) با دو اندیس (n,m) معادل آن تعریف می‌شود.

یک نانو لوله کربن (n,m) بردار کایرال[1] $C = na_1 + ma_2$ را دارد. در این رابطه a_1, a_2 دو بردار واحد مربوط به یک سلول واحد در شبکه ی گرافن شش‌وجهی می‌باشند.

با اینکه خواص مکانیکی نانو لوله‌های کربنی بستگی کمی به بردار جهت آن (n,m) دارد، ولی خواص الکتریکی آن بسیار وابسته به این بردار است. قطر d و زاویه کایرال θ مربوط به بردار جهت نانو لوله‌ی کربنی تک لایه که توسط پیوند C=C با طول پیوند a و اندیس(n,m) نشان داده شده، به صورت زیر قابل محاسبه هستند. [۳]

$$d = \frac{a}{\pi}\sqrt{n^2 + m^2 + nm} \qquad tg\theta = \frac{\sqrt{3}m}{2n + m}$$

لوله‌های که در آن‌ها $\theta = 0$ و اندیس‌های بردار کایرال آن (n,۰) باشد نانو لوله زیگزاگ[2] و لوله که در آن (n,n) و زاویه θ=۳۰° باشد، نانو لوله دسته صندلی[3] می‌نامند.



شکل ۱-۳- گرافن

همه نانو لوله‌های کربنی از نظر خواص الکتریکی به دو دسته فلزی و نیم‌رسانا تقسیم‌بندی می‌شوند. نانولوله‌های دسته صندلی فلز هستند و در نانو لوله‌های زیگزاگ کربنی می‌توان گفت اگر (n-m) مضربی از ۳ باشد فلز و در غیر این صورت، نیمه رسانا می‌باشند [۴].

1 - Chairal
2 - Zigzag Nano Tube
3 - Armchair Nano Tube

تولید نانو لوله‌های تک جداره دارای هزینه‌ی بالایی است و تولید به همراه پایدار کردن خصوصیات آنها در زمین فراوری پلیمر نانو لوله مشکل می‌باشد. برعکس، در دسترس بودن و تجاری بودن نانو لوله‌های کربنی چند جداره باعث شده که پیشرفت‌های زیادی در این زمینه داشته باشد. یکی از معایب نانولوله‌های چندجداره نسبت به تک جداره این است که استحکام‌دهی آنها کمتر می‌باشد. زیرا پیوندهای صفحات داخلی ضعیف می‌باشند. اما از آنجا که در حال حاضر کاربردهای نانولوله‌ها در تقویت پلیمر باعث بهبود خواص الکتریکی و گرمایی می‌شود تا بهبود خواص مکانیکی، کاربرد نانولوله‌های کربنی چندجداره بسیار زیاد می‌باشد. از طرفی تکنیک‌های موجود نیز برای تولید نانولوله‌های تک‌جداره به اندازه کافی بازدهی ندارد و خواص لازم را نیز به همراه نمی‌آورد. تلخیص این مواد بسیار زحمت‌آور است و در نهایت ممکن است بر ساختار نانو لوله نیز صدمه بزند.

۱-۲-۲- روش‌های تولید نانو لوله‌های کربنی

بعد از آن که در سال ۱۹۹۱ ایجمیا اولین نانو لوله را در کربن دوده‌ای حاصل از تخلیه قوس الکتریکی مشاهده کرد، محققان روش‌های زیادی برای تولید نانو لوله‌های کربنی ارائه داده‌اند ولی هنوز سنتز آنها در دمای اتاق به صورت مشکل لاینحلی باقی مانده است. دانشمندان تاکنون این مواد را در محدوده دمایی ۲۰۰ تا ۷۰۰ درجه سانتی‌گراد با بازده کمتر از ۷۰ درصد و حتی پس از چندین بار خالص‌سازی با درجه خلوص حداکثر ۹۵-۷۰ درصد تولید کرده‌اند [۵].

در اینجا چند روش عمده در سنتز نانو لوله‌ها را مورد بحث اجمالی قرار می‌دهیم.

۱-۲-۲-۱- روش تخلیه قوس[1]

در این روش اتم‌های کربن به وسیله عبور جریان بالا از دو قطب آندوکاتد در داخل پلاسماهای گاز هلیم داغ شده، بخار می‌شوند [۶].

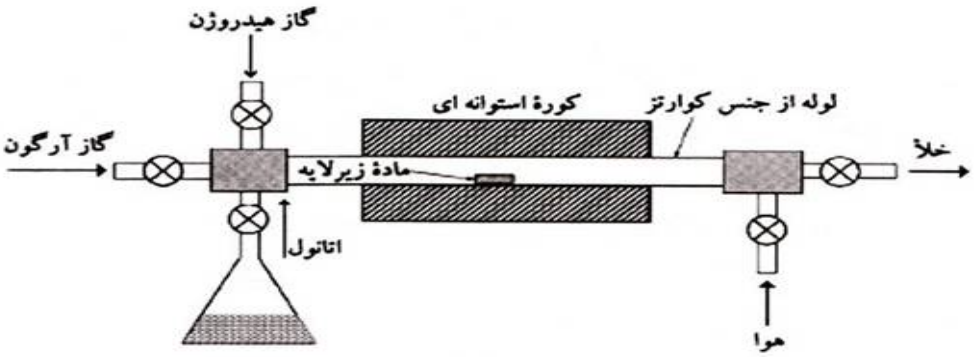
۱-۲-۲-۲- روش تابش لیزر[2]

در این روش پالس‌های قوی شده اشعه لیزر به طرف یک هدف کربنی (شامل ۵ درصد اتمی نیکل و کبالت) پرتاب می‌شوند تا آن را تبخیر کرده و سبب جدا شدن خوشه‌های کربنی از آن گردد [۷].

1 - Dischage Arc
2 - Ablation Laser

۱-۲-۳- روش رسوب بخار شیمیایی (CVD)[1]

این روش شامل حرارت دادن مواد و کاتالیزوری تا درجه حرارت‌های بالا در یک کوره لوله‌ای شکل و عبور یک گاز هیدروکربنی در سراسر لوله برای یک مدت زمان معین می‌باشد [۱۰-۸].



شکل ۱-٤- طرحواره دستگاه تولید نانو لوله‌های کربنی به روش بخار شیمیایی

دو روش تخلیه قوس و تابش لیزری برای زمان طولانی، روش‌های تقریباً کاملی برای تولید نانو لوله‌هایی تک جداره بودند اما از آنجا که هر دو روش مبتنی بر بخار اتم‌های کربن درون محفظه کوچک هستند، اولاً میزان تولید نانو لوله پایین می‌باشد. ثانیاً، نانو لوله‌هایی که به صورت تبخیری تهیه می‌شوند به صورت در هم پیچیده هستند. در این صورت برای خالص و تمیز کردن آن‌ها با مشکل مواجه اند. روش رسوب بخار نیز با چالش‌هایی مواجه است. چرا که برای تولید نانو لوله‌هایی کربنی چند جداره چگالی بالایی از عیوب در ساختارشان به وجود می‌آید. این عیوب به خاطر دمای پایین رشد می‌باشد که مقدار انرژی لازم برای بازپخت نانولوله و تکمیل ساختارش را فراهم نمی‌کند. همچنین این روش منجر به مواردی شامل هر نوع نانو لوله هادی و نیمه هادی می‌شود. رشد نانو لوله‌ها دلخواه بوده و قطر آن‌ها بزرگ است در حالی که نانو لوله‌های با قطر کمتر در کلید زنی مناسب ترند. با این وجود تمرکز محققان بر روی روش رسوب‌دهی بخار است. زیرا تولید انبوه در حد کیلوگرم را میسر می‌سازد و می‌توان کنترل قابل قبولی بر مکانیزم رشد داشت [۱۰- ۸].

۱-۲-۳- ویژگی‌های نانو لوله‌های کربنی

خواص ویژه و منحصر به فرد از جمله مدول یانگ بالا و استحکام کششی خوب و طبیعت کربنی نانو لوله‌ها (به خاطر اینکه کربن ماده‌ای است کم وزن و بسیار پایدار و ساده جهت انجام فرایندها که نسبت به فلزات برای تولید ارزان می‌باشد). این نانو لوله‌ها مورد توجه بسیار قرار داده است.

1 - Chemical Vepor Deposition

یکی از خصوصیات برجسته نانو لوله‌های کربنی استحکام کششی بالای آنها است که نزدیک ۱۰۰ گیگاپاسکال یعنی بیش از ۱۰۰ برابر استحکام فولاد است در حالی که وزنش یک ششم وزن فولاد است. با این حال این مقیاس غلط‌انداز است، چرا که فولاد از تجمع بلورها مواد افزودنی حاصل می‌شود ولی نانو لوله‌ها مثل هم خانواده ی خود گرافیت به یک دیگر نچسبیده تنها بر اثر نیروهای ضعیف و اندروالس جذب یک دیگر می‌شوند. نانو لوله‌های کربنی دارای خواص الکتریکی بالایی می‌باشند. آنها بسته به کایرالیته می‌توانند رسانا یا نیمه رسانا باشند.

نانو لوله‌های کربنی سیم‌های ملکولی بزرگی هستند که الکترون می‌تواند آزادانه در آن حرکت کند، این قطعات می‌توانند در کنار مدارات الکتریکی خیلی سریعتر و با توان کمتر از مدارات کنونی کار کنند. هدایت گرمایی نانو لوله‌های کربنی در جهت لوله‌ها و نه عمود بر آنها باعث شده است که این ترکیبات قابلیت بالقوه‌ای در گودال‌های حرارتی در زمینه‌ی نانو الکترونیک از خود نشان دهند.

یکی دیگر از ویژگی‌های نانو لوله‌ها نشر میدانی است. قطعات نشر میدانی ساختارهایی هستند که تحت تأثیر میدان الکتریکی از خود الکترون منتشر می‌کنند. نانو لوله‌ها قادرند تحت تأثیر میدان‌های الکتریکی جریان‌های بالایی را انتشار دهند و از لحاظ کاتالیزری، فعال می‌باشند. همچنین فعالیت موییننگی بالایی دارند و می‌توانند گازها مایعات را در خود جای دهند. رفتار میکروسکوپی یک نانو لوله که پاره است همانند یک کفشدوزک به نظر می‌رسد. شکاف موجود در بافت نانو لوله ناشی از تنشهای حرارتی وارد شده به آن بوده و در حین فرایند گذر از ساختار پنج وجهی به هفت وجهی کربن در طول لوله دوخته می‌شود. نانو لوله‌ها می‌توانند نور مادون قرمز را جذب و دفع کنند. همچنین تزریق هم زمان الکترون از یک سر و تزریق حفره‌ای از سر دیگر لوله موجب می‌شود نور با طول موج ۱/۵ میکرومتر از نانو لوله منتشر شود. همچنین دارای چگالی سطحی بسیار بالایی می‌باشند که باعث استحکام بالای نانو لوله می‌شود می‌توان گفت این فعالیت در اثر ریز بودن قابل توجه آنها پدیدار می‌شود.

در نانو لوله‌ها هر سه اتم کربن قابلیت ذخیره‌سازی یک یون لیتیم را دارند در حالی که اتم کربن توانایی ذخیره سازی یک یون لیتیم را دارد. همچنین توانایی ذخیره انرژی در نانو لوله‌ها چند برابر الکترودهای گرافیتی است. نانو لوله‌ها در دمای زیر ۱۵ درجه کلوین ابررسانا می‌شوند و شعاع این نانو لوله‌های ابررسانا ۰/۴ نانومتر است.

۱-۲-٤- کاربردهای نانو لوله‌های کربنی

۱) به عنوان تقویت کننده در کامپوزیت ها

نانو لوله‌ها یکی از محکم ترین مواد به شمار می‌روند. این موضوع، کاربرد لوله‌های کربنی را به عنوان ماده ی پر کننده در تولید نانو کامپوزیت‌ها به خوبی روشن می‌سازد. کامپوزیت‌های با پایه نانو لوله‌ای کربنی دارای نسبت استحکام به وزن بالا هستند و مصارف گسترده‌ای را در صنعت خواهند داشت.

۲) استفاده در نمایشگرهای تشعشع میدانی

یکی از مشکلات دستگاه‌های نشر میدانی امروزی، عدم پایداری میدان‌های تولیدی در بازده‌های زمانی طولانی است. این مشکل را می‌توان با استفاده از نانو لوله کربنی حل نمود. برای مثال، مزایای استفاده از نمایشگرهای تولید شده با نانو لوله ی کربنی نسبت به نمایشگرهای کریستال مایع، سرعت واکنش بالاتر نسبت به محرک‌های الکتریکی، مصرف انرژی کمتر، درخشندگی مناسب تر مغناطیسی پایین در هنگام روشن کردن دستگاه و دمای کاری بالاتر است.

۳) استفاده از نانو لوله‌های تک دیواره در صنعت الکترونیک

نانو لوله‌ها به میزان قابل توجهی سخت و قوی بوده و هادی جریان الکتریسیته و گرمای می‌باشند. این خواص سبب استفاده از این مواد در صنعت الکترونیک شده است.

نانو لوله‌های کربنی سیستم‌های مولکولی بزرگی هستند که الکترون می‌تواند آزادانه در آن حرکت کند و رفتار آنها پیچیده است. در این راستا رفتار نانو لوله‌های چند دیواره بسیار پیچیده از تک دیواره است. زیرا لایه‌های کناری روی یکدیگر اثر می‌گذارند. مدل سازی چنین اثراتی از موضوعات تحقیقاتی در حال حاضر می‌باشد. محققان امیدوارند که ابعاد سیم‌ها یا قطعات را از طریق جایگزینی با نانو لوله به حدود نانومتر یا کمتر برسانند. این قطعات در کنار مدارات الکترونیکی می‌توانند خیلی سریع‌تر و با توان کمتر از مدارات کنونی کار کنند. لامپ‌های تولید شده با نانو لوله‌های کربنی هزینه تولید کمتری دارند. به علاوه عمر طولانی‌تر و ثبات رنگ بیشتر نسبت به لامپ‌های معمولی، از مزایای دیگر این لامپ‌هاست.

از دیگر کاربردهای نانو لوله‌های کربنی در ذخیره کننده و پیل سوختی است. نانو لوله ها، ساختارهای کربنی توخالی هستند، بنابراین امکان قراردادن مواد خارجی در داخل آنها وجود دارد. به طور مثال، با قرار دادن فلزات درون نانو لوله‌ها می‌توان خواص الکتریکی این مواد را بهبود بخشید.

تحقیقات نشان داده است که نانو لوله‌های باز، مثل یک نی توخالی عمل می‌کنند. این نی‌ها مولکولی می‌توانند به وسیله عمل موئینگی و تحت شرایط خاص برخی عناصر را به درون خود بکشند.

کاربردهای دیگری نیز وجود دارد که باعث اهمیت زیاد نانو لوله‌ها و تحقیقات در این زمینه شده است.

فصل دوم

نظریه تابعی چگالی