

صلاة الأضحية



دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه ی کارشناسی ارشد فیزیک گرایش اتمی - مولکولی

**حالت‌های تک الکترونی و جذب اپتیکی بین نواری در نانولوله‌های کربنی تک
دیواره‌ای**

استاد راهنما:

دکتر فردین خیراندیش

پژوهشگر:

امین اسفندیارپور

دی ماه ۱۳۸۸

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات
و نوآوری های ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه
متعلق به دانشگاه اصفهان است.



دانشگاه اصفهان
دانشکده علوم
گروه فیزیک

پایان نامه ی کارشناسی ارشد فیزیک گرایش اتمی-مولکولی آقای
امین اسفندیارپور تحت عنوان

**حالت‌های تک الکترونی و جذب اپتیکی بین نواری در نانولوله‌های کربنی تک
دیواره‌ای**

در تاریخ ۸۸/۱۰/۳۰ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه به تصویب نهایی رسید.

- ۱- استاد راهنمای پایان نامه دکتر فردین خیر اندیش با مرتبه ی علمی دانشیار امضا
- ۲- استاد داور داخل گروه دکتر غلامرضا راشدی با مرتبه ی علمی استادیار امضا
- ۳- استاد داور خارج از گروه دکتر حسن سبزیان با مرتبه ی علمی دانشیار امضا

امضای مدیر گروه

چکیده

فیزیک نانولوله های کربنی، پس از کشف آن توسط ایئجیما که نانولوله های دو - دیواره را در سال ۱۹۹۱ و نانولوله های تک - دیواره را دو سال بعد کشف کرد، به سرعت وارد زمینه های تحقیقاتی شد. پس از آن تحقیقات متعدد نظری و تجربی در زمینه های گوناگونی مثل مکانیک ، اپتیک ، الکترونیک و ... روی آن انجام شده و پیشرفتهای قابل توجهی در این زمینه در دهه ی اخیر بدست آمده است. مبحث خواص اپتیکی نانولوله ها مورد توجه ما در این پایان نامه است .

در فصل اول، نانولوله های کربنی و ساختار هندسی آن را معرفی می کنیم. از آنجا که تقارن نانولوله ها در درک مفاهیم عمیق خواص فیزیکی آنها کمک می کند. در فصل دوم، تقارن کامل نانولوله های تک دیواره - و دو دیواره را بدست می آوریم. ضمن اینکه با توجه به گروه تقارنی نانولوله های تک دیواره ، جایگاه اتمها را توسط این اعداد تقارنی بدست می آوریم. در فصل سوم، فعالیت اپتیکی همراه با محورهای اپتیکی بررسی می شود. این نتایج می تواند برای برپایی آزمایشات روی نانو ابزارهای اپتیکی بسیار مفید باشد. مسئله ی شناسایی نانو لوله ها بوسیله طیفهای اپتیکی ، در مقیاس وسیعی از کاربردها دارای اهمیت است، لذا ما در فصل آخر، طیف جذبی اپتیکی برای گذار مستقیم بین نواری در نانو لوله های کربنی را با استفاده از روش پتانسیل صفر - برد بدست می آوریم و نتایج بدست آمده را با طیف جذبی که توسط دیگر روش ها بدست آمده مقایسه می کنیم.

واژگان کلیدی: نانو لوله های کربنی، گروه تقارنی نانو لوله ها ، فعالیت اپتیکی ، پتانسیل صفر - برد ، طیف جذبی

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

فصل اول: معرفی نانو لوله های کربنی

۱-۱	مقدمه	۱
۲-۱	نانولوله های کربنی	۲
۳-۱	ساختار نانو لوله های کربنی	۴
۱-۳-۱	نانولوله های تک دیواره	۵
۲-۳-۱	نانو لوله های چند دیواره	۹
۴-۱	خواص الکترونی نانو لوله ها	۱۰

فصل دوم: گروه تقارنی نانو لوله های تک دیواره و چند دیواره

۱-۲	مقدمه	۱۲
۲-۲	تقارن نانو لوله ها	۱۳
۳-۲	گروه های تقارنی نانو لوله های تک دیواره	۱۴
۴-۲	گروه های تقارنی نانو لوله های دو دیواره و چند دیواره	۲۰
۵-۲	نتیجه گیری	۲۴

فصل سوم: بررسی فعالیت اپتیکی نانو لوله های تک-دیواره و دو-دیواره بر اساس تقارن

۱-۳	مقدمه	۲۵
۲-۳	تانسورهای دی الکتریک ϵ و فعالیت اپتیکی A و اصل نیومن	۲۶
۳-۳	فعالیت اپتیکی در نانولوله های تک دیواره	۲۹
۴-۳	فعالیت اپتیکی در نانولوله های دو - دیواره	۳۰
۵-۳	نتیجه گیری	۳۷

فصل چهارم: حالت های تک الکترونی و جذب اپتیکی بین نواری در نانولوله های کربنی تک-

دیواره

۱-۴	مقدمه	۳۸
۲-۴	ساختار ماریپیچی نانو لوله های کربنی	۳۹
۳-۴	تقریب پتانسیل صفر - برد	۴۱
۴-۴	طیف و توابع موج نوارهای الکترون ها	۴۳

۴-۵ جذب اپتیکی ایجاد شده توسط گذار مستقیم بین نواری در نانو لوله های منزوی.....	۴۸
۴-۵-۱ قطبش موازی.....	۴۹
۴-۵-۲ قطبش دایروی راستگرد.....	۵۲
۴-۵-۳ قطبش دایروی چپگرد.....	۵۴
۴-۶ یک مثال.....	۵۵
۴-۷ بحث و مقایسه با جذب بوسیله ی یک صفحه ی گرافیت.....	۵۹
۴-۸ نتیجه گیری.....	۶۴
پیوست.....	۶۵
منابع و مأخذ.....	۷۵

فهرست شکل ها

عنوان	صفحه
شکل ۱-۱ مولکول C_6	۲
شکل ۲-۱ صفحه ی گرافن	۴
شکل ۳-۱ (الف) نانولوله های تک دیواره: (ب) نانولوله ی چند دیواره	۴
شکل ۴-۱ ساختار نانولوله های تک دیواره	۶
شکل ۵-۱ (الف) نانولوله ی یکدست (ب) نانولوله ی زیگزاگ (پ) نانولوله ی صندلی	۷
شکل ۶-۱ نانو لوله های (الف) صندلی (ب) زیگزاگ (پ) یک دست با کلاهک های فولرن	۸
شکل ۷-۱ تصویر یک دسته نانولوله که به روش تبخیر لیزری تولید شده	۹
شکل ۸-۱ تصویر یک نانولوله ی چند دیواره با بزرگنمایی بسیار بالا	۱۰
شکل ۱-۲ ناوردایی نانو لوله ی تک دیواره تحت گروه تقارنی C_n	۱۶
شکل ۲-۲ موقعیت صفحات آینه ای و محورهای افقی مرتبه ی دوم برای نانولوله های لوله نشده: (الف) صندلی (ب) زیگزاگ (پ) یکدست	۱۸
شکل ۳-۲ موقعیت صفحات آینه ای و محورهای افقی مرتبه ی دوم برای نانولوله های لوله شده ی: (الف) صندلی (ب) زیگزاگ (پ) یکدست	۱۸
شکل ۴-۲ جایگاه اتم های نانولوله ی تک دیواره با توجه به اعداد تقارنی	۱۹
شکل ۱-۳ محورهای اپتیکی OA ممکن برای ضریب شکست های متفاوت	۲۷
شکل ۲-۳ محور های اپتیکی و زوایای چرخش صفحه ی قطبش برای نانولوله های گوناگون (جهت فلش ها بیانگر جهت فرود نور در راستای محورهای اپتیکی و α و β زوایای چرخش صفحه ی قطبش را بیان می کند)	۳۰
شکل ۱-۴ پتانسیل مرکزی $U(r)$	۴۲
شکل ۲-۴ آرایش ناحیه ای از نانو لوله ی (۱۴ و ۱۵) در مختصات حلقوی ماریچی، که آرایش ناحیه ای توسعه یافته نام دارد	۴۶
شکل ۳-۴ نوار و طیف جذبی برای یک نانو لوله ی (۱۴ و ۱۵): (الف) قطبش موازی (ب) قطبش دایروی راستگرد	۵۶
شکل ۴-۴ وابستگی ضریب جذب برای نانو لوله منزوی (۱۴ و ۱۵) به انرژی های متفاوت از به نور فردی (الف) هم قطبش (ب) با قطبش عرضی	۵۸

- شکل ۴-۵ ساختار نواری برای یک صفحه ی گرافیت نامتناهی..... ۶۰
- شکل ۴-۶ مقادیر مجاز بردار موج برای نانولوله ی (۱۵،۱۴)..... ۶۱
- شکل ۴-۷ مقادیر مجاز بردار موج برای نانولوله ی (۴،۲)..... ۶۱
- شکل ۴-۸ طیف جذبی یک صفحه ی گرافیت برای گذار بین نواری مستقیم الکترون های π با استفاده از تقریب پتانسیل صفر - برد ۶۴

فهرست جدول ها

صفحه

عنوان

- جدول ۱-۲ گروه تقارنی نانو لوله های چند دیواره ی زیگزاگ و صندلی برای لوله های نوسانی (لوله هایی که با همه ی مولفه هایش زیگزاگ است یا اینکه همه ی مولفه هایش صندلی باشد)..... ۲۳
- جدول ۱-۴ مقایسه ی مقادیر تجربی به دست آمده در [۱۷] با روش پتانسیل صفر- برد ۴۷

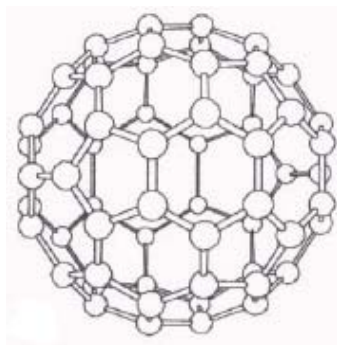
فصل اول

معرفی نانو لوله های کربنی

۱- ۱ مقدمه

مواد تشکیل یافته از کربن (خوشه ها و مولکول ها) از جهات بسیاری مورد توجه هستند. تمایز مهم اتم کربن با عناصر دیگر تعدد آرایش های ممکن برای حالت های الکترونی آن است. آرایش های مختلف برای حالت های الکترونی اتم کربن به عنوان هیبرید - اوربیتال های اتمی شناخته می شود که به پیوند اتم کربن با همسایه های نزدیک اش مربوط است. سه نوع هیبریدشدگی مختلف در اتم کربن رخ می دهد که از ترکیب اوربیتال $2s$ با یک، دو و یا سه اوربیتال $2p$ حاصل می شوند و به ترتیب هیبریدشدگی sp ، sp^2 و sp^3 نامیده می شوند. در حالی که سایر عناصر گروه چهارم از قبیل Si و Ge فقط هیبریدشدگی sp^3 از خود نشان می دهند، کربن دارای چندین شکل بلوری بسیار پایدار با خصوصیات بسیار متفاوت است. الماس از اتم های کربن که به واسطه ی پیوندهای sp^3 در چهار وجهی ها آرایش یافته اند ساخته شده است و عایق، شفاف و یکی از سخت ترین مواد عالم محسوب می شود. در مقابل، گرافیت به صورت صفحات روی هم چیده شده از اتم های کربن است که به واسطه ی پیوندهای sp^2 در شبکه ای شش ضلعی مرتب شده اند و بسیار نرم، شبه فلز، تیره ی برآق و دارای یکی از بالاترین نقاط ذوب است.

تا این اواخر، فقط این دو نوع ساختار کریستالی که تماماً از کربن هستند برای ما شناخته شده بودند. تا اینکه در سال ۱۹۸۵، ریچارد سمالی^۱ و همکارانش موفق به کشف مولکول C_{60} شدند (شکل ۱-۱). مولکول C_{60} ساختار یگانه ای دارد واقعاً یک قفس بسته از ۶۰ اتم کربن است. به جز C_{60} مولکول هایی پایدار دیگری نیز به شکل قفس های بسته وجود دارد که آن ها را به نام فولرن^۲ می شناسیم. یک نمونه از این مواد فولرن C_{70} است.



شکل ۱-۱: مولکول C_{60}

به دنبال کشف فولرن ها، در یک بازه ی زمانی بسیار کوتاه چند شکل جدید از کربن شناخته شدند که در بین آن ها کشف نانولوله های کربنی توسط اییجیما^۳ حائز اهمیت فراوانی است [۱]. نانولوله ها به خاطر خواص الکتریکی و مکانیکی یگانه ای که دارند مورد توجه بسیاری هستند و امروزه فعالیت های تحقیقاتی فراوانی برای بررسی خواص فیزیکی آن ها صورت می گیرد. آن ها هم می توانند مانند یک فلز جریان الکتریکی را از خود عبور دهند و هم می توانند مانند یک نیمه رسانا عمل کنند. نانولوله ها از استحکام بالایی برخوردار هستند و مدول یانگ بسیار بالایی دارند. علاوه بر این، نانولوله ها به سبب ساختار ویژه ای که دارند سامانه های آرمانی برای مطالعه ی فیزیک در ابعاد پایین به شمار می روند و می توان آن ها را به عنوان اولین نمونه ی واقعی سامانه های کوانتومی یک بعدی در نظر گرفت.

۱-۲ نانولوله های کربنی

نانولوله ها با گرافیت که یکی از قدیمی ترین شکل های شناخته شده ی کربن است رابطه ی بسیار نزدیکی دارند. برای شناختن نانولوله ها لازم است چند نکته را در مورد گرافیت بدانیم. گرافیت از صفحاتی

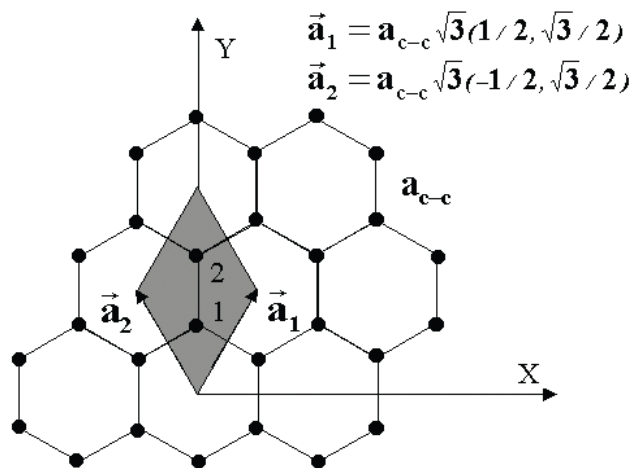
1. Richard Smalley
2. Buckminster fullerene
3. Iijima

تشکیل شده است که گرافن^۱ نامیده می شوند. گرافن یک شبکه ی لانه زنبوری است که در هر رأس آن یک اتم کربن قرار دارد. هر کدام از اتم های گرافن با سه اتم کربن مجاور خود پیوند کووالانسی با هیبرید sp^2 تشکیل می دهد.

بنابراین، هر اتم کربن یک الکترون غیر پیوندی دارد که اوربیتال $2p_z$ را اشغال می کند. همپوشانی اوربیتال های $2p_z$ اتم های کربن مجاور باعث تشکیل پیوندهایی می شود، که شیمی دان ها آن ها را به نام پیوندهای π می شناسند. اوربیتال های این پیوندها بر صفحه ی گرافن عمود بوده و گستردگی فضایی آن در امتداد صفحه ی گرافن کم است به طوری که در اغلب محاسبات می توان از همپوشانی این اوربیتال ها صرف نظر کرد. در شکل (۱-۲) شبکه ی گرافن و سلول واحد آن که شامل دو اتم کربن است نشان داده شده است. در این شکل بردارهای \vec{a}_1 و \vec{a}_2 بردارهای پایه ی شبکه هستند که در اینجا $a_0 = 2.46 \text{ \AA}$ و $|a_1| = |a_2| = \sqrt{3}a_c = a_0$ و مساحت سلول واحد $s_g = \frac{\sqrt{3}}{2}a_0$ می باشد (محاسبات در پیوست آمده است). که در این مساحت دو اتم با موقعیتهای $\frac{a_1+a_2}{3}$ و $2\frac{a_1+a_2}{3}$ وجود دارد (شکل ۱-۲).

صفحات گرافن به صورت مجزا در طبیعت پیدا نمی شوند بلکه صفحات روی هم چیده می شوند و گرافیت را تشکیل می دهند. این صفحات توسط نیروهای ضعیف واندروالسی بهم پیوند می خورند و می توانند روی همدیگر لغزیده و به آسانی از هم جدا شوند. نانولوله ها اساساً از یک یا چند صفحه ی گرافن که به شکل استوانه در آمده اند تشکیل می شوند. نانولوله هایی که تنها دارای یک لایه هستند، نانولوله های تک دیواره SWNTs^۲ و نانولوله هایی که شامل دو یا چند لایه هستند، نانولوله های چند دیواره MWNTs^۳ نامیده میشوند در شکل (۱-۳) نانولوله های تک دیواره و چند دیواره که به ترتیب توسط میکروسکوپ تونل زنی روبشی STM^۴ و میکروسکوپ الکترونی - عبوری با وضوح بالا HRTEM^۵ تصویربرداری شده اند نشان داده شده است.

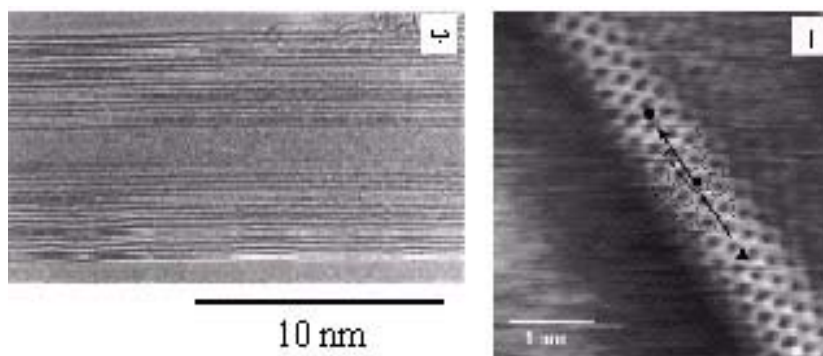
-
1. Graphene
 2. Single wall carbon nanotube
 3. Multi-wall carbon nanotube
 4. Scanning tunneling microscope
 5. High resolution transmission electron microscope



شکل ۱-۲: صفحه ی گرافن

۳-۱ ساختار نانو لوله های کربنی

ساختار نانو لوله های کربنی توسط میکروسکوپ الکترونی عبوری با وضوح بالا HRTEM، میکروسکوپ تونل زن روبشی STM و میکروسکوپ نیروی اتمی AFM^۱ به دقت بررسی شده است. این بررسی ها به طور مستقیم تایید کرده اند که نانو لوله های کربنی استوانه های یکپارچه ای از صفحات گرافن هستند که در هر دو انتها توسط نیمکره ها یا کلاهک هایی شبیه فولرن ها مسدود شده اند. همچنین قطر نانولوله های کربنی از مرتبه ی نانومتر و حداکثر طول آنها از مرتبه ی میکرومتر گزارش شده است. در ادامه مطلب به بررسی ساختار نانولوله ها می پردازیم .



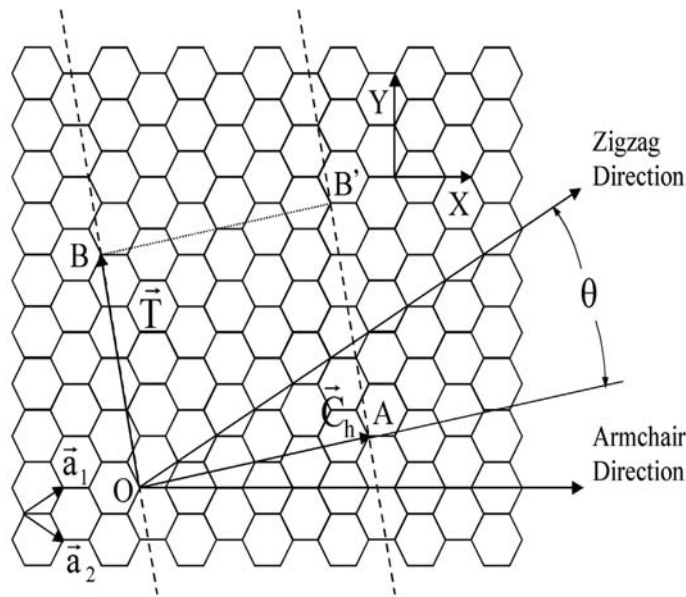
شکل ۱-۳: (الف) نانولوله های تک دیواره (ب) نانوله ی چند دیواره

1. Atomic force microscope

۱-۳-۱ نانولوله های تک دیواره

ساختار نانو لوله های تک دیواره را می توان توسط برداری به نام یکدست^۱ و یا توسط دو عدد صحیح n_1 و n_2 توصیف کرد. بردار یکدست $\vec{C}_h = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2$ که در شکل (۴-۱) نشان داده شده است، دو نقطه از شبکه ی دو بعدی گرافن را که از لحاظ بلور شناسی معادل هستند به هم متصل می کند. برای اینکه تصور بهتری از بردار یکدست به دست آوریم، فرض کنید یک نانو لوله ی تک دیواره را در امتداد موازی با محور آن برش داده و روی یک سطح مسطح پهن کنیم در شکل (۴-۱) خطوط خط چین لبه های نانولوله یا لبه های خط برش را نشان می دهند. حال یک نقطه (یک اتم کربن) را بر روی یکی از خطوط در نظر می گیریم (نقطه ی O). سپس از این نقطه خطی را در امتداد صندلی که در شکل (۴-۱) مشخص شده است، رسم می کنیم. این خط از هر شش ضلعی که عبور کند، آن را به دو نیمه ی مساوی تقسیم می کند. حال روی خط دیگر نزدیک ترین نقطه به محل تقاطع خط صندلی را می یابیم (نقطه ی A) و نقاط O , A را توسط بردار یکدست \vec{C}_h به هم متصل می کنیم بردار پایه ی \vec{a}_h در امتدادی قرار دارد که به آن امتداد زیگزاگ گفته می شود و بردار پایه ی \vec{a}_v تصویر آن نسبت به امتداد صندلی است. زاویه ی بین بردار یکدست و امتداد زیگزاگ را زاویه ی یکدست یا زاویه پیچش می نامند که در شکل (۴-۱) با θ مشخص شده است. این زاویه معیاری از پیچش حلقه های شش ضلعی کربن حول محور استوانه است.

نانو لوله ها را به صورت مناسب می توان بر حسب سلول واحد یک بعدی شان توصیف کرد. این سلول توسط بردار یکدست و بردار انتقال شبکه ی یک بعدی نانولوله مشخص می شود در شکل (۴-۱) مستطیل تشکیل شده از بردارهای \vec{C}_h و \vec{T} سلول واحد یک بعدی نانو لوله است. بردار \vec{T} بردار انتقال شبکه ی یک بعدی نانو لوله است و نانو لوله از تکرار سلول واحد یک بعدی اش در امتداد \vec{T} حاصل می شود.



شکل ۱-۴: ساختار نانولوله های تک دیواره

به این دلیل نانولوله ها را به عنوان سیستم های یک بعدی می شناسیم. بردار \vec{T} بر \vec{C}_h عمود بوده و توسط اولین نقطه ای که روی خط برش قرار می گیرد (نقطه ی B) مشخص می شود. بردار \vec{T} به صورت زیر مشخص می شود:

$$\vec{T} = -\frac{2n_2 + n_1}{n\mathfrak{R}} \vec{a}_1 + \frac{2n_1 + n_2}{n\mathfrak{R}} \vec{a}_2 \quad (1-1)$$

$$|\vec{T}| = \sqrt{3}a_0(n_1^2 + n_1n_2 + n_2^2)^{\frac{1}{2}} / n\mathfrak{R}$$

به طوریکه، n ب. م. n_1 و n_2 است. اگر $\frac{n_1 - n_2}{3n}$ عدد صحیحی باشد، $\mathfrak{R} = 3$ است و در غیر اینصورت $\mathfrak{R} = 1$ خواهد بود. (اثبات رابطه ی (۱-۱) در پیوست آمده است).

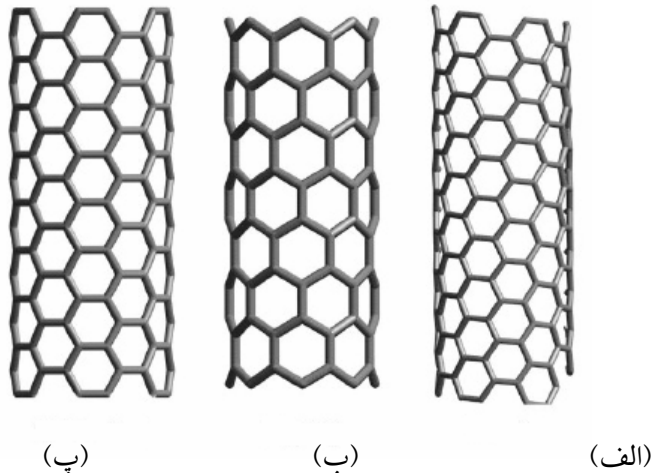
سلول واحد در واقع یک قطعه ی استوانه ای با ارتفاع $|\vec{T}|$ و مساحت $|\vec{T}||\vec{C}_h|$ می باشد که در واقع حاوی

$$\frac{s_t}{s_g} = 2(n_1^2 + n_1n_2 + n_2^2)^{\frac{1}{2}} / n\mathfrak{R} \quad (2-1)$$

سلول واحد گرافنی است و تعداد اتم های کربن موجود در آن دو برابر این مقدار خواهد بود.

نانو لوله ها بر حسب اینکه زاویه ی یکدست آنها چه مقداری داشته باشد، به سه دسته ی اصلی تقسیم می شوند. اگر بردار \vec{C}_h در امتداد صندلی ($\theta = 30^\circ$) قرار گیرد، نانولوله را نانولوله ی صندلی و در صورتی که بردار \vec{C}_h در امتداد زیگزاگ ($\theta = 0^\circ$) قرار گیرد، نانو لوله را زیگزاگ می نامند. این نوع نانولوله ها یک صفحه ی تقارن آینه ای (به موازات محور استوانه و شامل آن) دارند و از این رو آنها را نانولوله های بدون پیچش نیز می نامند. به ازای سایر جهت گیری های بردار \vec{C}_h که متناظر با مقادیر $0^\circ < \theta < 30^\circ$ است نانولوله های یکدست را خواهیم داشت. واضح است که نانولوله های یکدست صفحه ی تقارن آینه ای ندارند.

در نمایش (n_1, n_2) برای بردار $\vec{C}_h = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2$ بردارهای $(n_1, 0)$ و $(0, n_2)$ متناظر با نانولوله ی زیگزاگ و بردار (n_1, n_1) متناظر با نانولوله ی صندلی است. در شکل (۵-۱) یک نمونه از نانولوله های صندلی، زیگزاگ و یکدست نشان داده شده است.



شکل ۵-۱: (الف) نانولوله ی یکدست (ب) نانولوله ی زیگزاگ (پ) نانولوله ی صندلی

خصوصیات مختلف نانولوله های کربنی را می توان بر حسب اعداد n_1 و n_2 یا بر حسب زاویه ی یکدست و قطر آنها بیان کرد. قطر نانولوله بر حسب n_1 و n_2 از رابطه ی زیر به دست می آید:

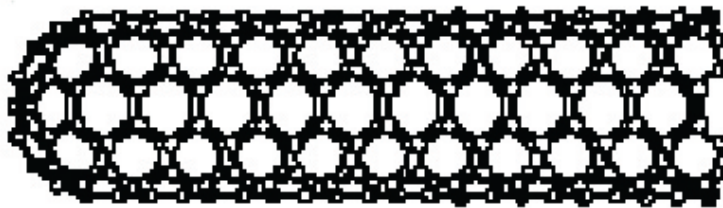
$$d_t = L/\pi = \sqrt{3}a_{c-c} (n_1^2 + n_1n_2 + n_2^2)^{\frac{1}{2}} / \pi \quad (۳-۱)$$

در این رابطه L طول بردار \vec{C}_h و a_{c-c} طول پیوند کربن-کربن (در حدود 1.42 \AA) است. قطر متوسط نانو لوله های تک دیواره در حدود 1.4 nm و طول آنها بالغ بر ده ها میکرومتر است. همچنین زاویه ی یکدست را می توان بر حسب n_1 و n_2 از رابطه ی زیر به دست آورد:

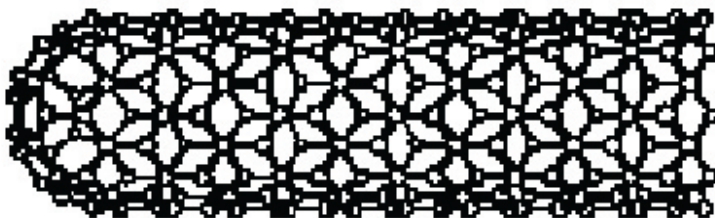
$$\theta = \tan^{-1}[\sqrt{3}n_1 / (2n_1 + n_2)] \quad (۴-۱)$$

توجه داشته باشید که در هندسه SWCNT که در بالا ذکر شد فرض شده است که عمل خم کردن صفحه ی گرافیتی برای تبدیل شدن به نانولوله اثری روی پیوند $C-C$ نمی گذارد و طول این پیوند در نانولوله برابر است با طول پیوند در صفحه ی گرافیتی، اما طول این پیوند وقتی که آنرا در راستای محور نانولوله اندازه گیری می کنیم فرق می کند و هنگامی که آنرا در راستای بردار \vec{C}_h اندازه می گیریم کوچکتر خواهد بود. نانولوله های کربنی در انتهای خود دارای کلاهک می باشند اگر که مولکول C_6 را به دو نیم تقسیم کنیم و به قسمت استوانه ای نانولوله اضافه کنیم به این مقصود می رسیم. اگر مولکول C_6 عمود بر محور پنج گانه به دو نیم شود، کلاهک صندلی بوجود می آید (شکل ۶-۱ الف) و اگر عمود بر محور سه گانه به دو نیم شود کلاهک زیگزاگ بوجود می آید. کلاهک یکدست نیز در شکل ۶-۱ پ نشان داده شده است. کلاهک نانولوله هایی با قطر بزرگتر می تواند توسط فولرن های بزرگتر مانند مولکولهای C_7 و C_8 تولید شوند.

(الف)



(ب)

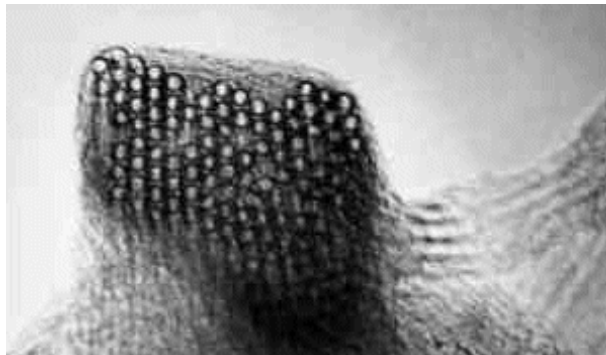


(پ)



شکل ۶-۱: نانولوله های (الف) صندلی (ب) زیگزاگ (پ) یکدست با کلاهک فولرن

بیشتر مواقع نانو لوله های تک دیواره در کنار یکدیگر جمع می شوند و یک دسته نانولوله را تشکیل می دهند تصویر بردارهای انجام شده توسط میکروسکوپ TEM و اندازه گیری های پراش اشعه X نشان می دهند که دسته نانولوله ها آرایه ای از نانولوله های تک دیواره هستند که در یک شبکه ی مثلثی دو بعدی در امتداد یک راستای معین چیده شده اند. این شبکه ی مثلثی ثابت شبکه ای در حدود 1.7 \AA دارد. تعداد نانولوله های تک دیواره در یک دسته نانولوله به چند صد عدد می رسد و توزیع قطر نانولوله ها تقریباً یکنواخت است [۳]. در شکل (۷-۱) یک دسته نانولوله نشان داده شده که تحت تاثیر وزن خود خمیده شده است. مجموعه ای از دسته نانولوله های به هم پیچیده یک رشته نانولوله نامیده میشود.



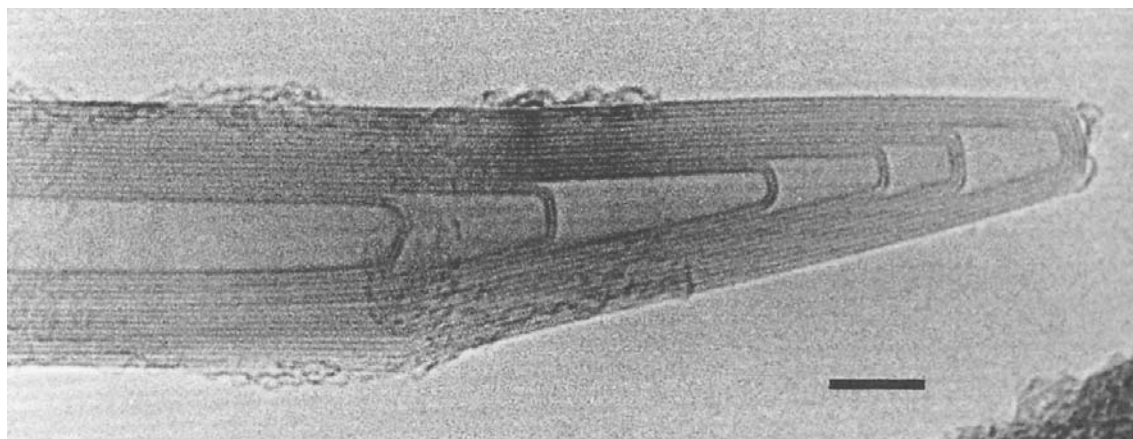
شکل ۷-۱: تصویر یک دسته نانولوله که به روش تبخیر لیزری تولید شده

۱-۳-۲ نانو لوله های چند دیواره

نانولوله های چند دیواره از چند (۳۰ - ۲) لایه ی استوانه ای تقریباً هم محور تشکیل می شوند. هر کدام از این لایه ها را می توان به عنوان یک نانولوله ی تک دیواره در نظر گرفت که دارای زاویه ی پیچش مربوط به خود است. بر خلاف گرافیت که می توان لایه های مجاور را دسته بندی کرد در نانولوله های چند دیواره لایه های مجاور معمولاً تناسبی با هم ندارند این بی نظمی در چیده شدن لایه ها سبب می شود که جفت شدگی الکترونی بین لایه ها نسبت به گرافیت کمتر باشد. فاصله ی بین لایه ها در نانولوله های چند دیواره nm ۳۴ ر ۰ است که نزدیک به فاصله ی بین لایه ها در گرافیت توربوستراتیک^۱ است. ساختار نوک لایه ها در نانولوله های چند دیواره بسیار نزدیک به ساختار فولرن های ایکوساهدرال^۲ است. در شکل (۸-۱) تصویر یک نانو لوله ی چند دیواره با بزرگنمایی بسیار بالا نشان داده شده است.

1. Turbostratic
2. Icosahedral

طول نانولوله های چند دیواره $1 \mu m$ و قطر آنها از ۱ الی ۳۰ نانومتر تغییر می کند بزرگ بودن قطر نانولوله های چند دیواره امکان مطالعه ی پدیده های کوانتومی نظیر اثر آهارانوف - بوهم را در میدان های قابل دسترس در آزمایشگاه فراهم می آورد. در حالی که مطالعه ی همین اثر در مورد نانولوله های تک دیواره نیازمند میدانی بالغ بر $T = 600$ است که عملاً دور از دسترس می باشد.



شکل ۱-۸: تصویر یک نانولوله ی چند دیواره با بزرگ نمایی بسیار بالا

۱-۴ خواص الکترونی نانولوله ها

نانولوله ی تک دیواره اساساً یک لایه ی دو بعدی از گرافیت (صفحه ی گرافن) است که به شکل استوانه در آمده است. بنابراین می توان انتظار داشت که خصوصیات نانولوله ای با قطر بسیار بزرگ شباهت زیادی به خصوصیات صفحه ی گرافن داشته باشد. در واقع نشان داده شده است که حتی برای نانولوله های با قطر کوچک نیز اثر انحنای نانولوله کوچک بوده و در نزدیکی تراز فرمی می توان از آن صرف نظر کرد. (همان طور که می دانیم خصوصیات مواد در دماهای پایین تنها به ترازهایی انرژی نزدیک به تراز فرمی بستگی دارد) [۲]. اجازه دهید اگر چه خلاصه، تغییراتی که در خواص الکترونی صفحات گرافنی، وقتی خمیده شده و به نانولوله تبدیل می شوند را بررسی کنیم. صفحه ی گرافن نامحدود، یک نیمه رسانا با گاف انرژی صفر یا یک شبه فلز است. حالت های الکترونی برای SWNT های نامتناهی در راستای محور نانولوله، پیوسته هستند اما در راستای محیط کوانیزه می شوند [۳].