بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَٰنِ الرَّحِيمِ

دانشکده علوم گروه فیزیک

پایان‌نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته فیزیک گرایش حالت جامد

عنوان پایان‌نامه:

مطالعه نظری رشد نانولوله‌های کربنی دودیواره در روش رشد رسوب شیمیایی فاز بخار به کمک حرارت(CVD).

دانشجو: **حمید شاهیوندی**

استاد راهنما: **دکتر مجید واعظزاده**

استاد مشاور: **محمدرضا سعیدی**

تیرماه ۱۳۹۰

تقدیم به:

تقدیم به مهر مادرم، بزرگواری پدرم، مهربانی برادرانم

تقدیم با احترام به اساتید بزرگوارم "استاد مجید واعظ زاده" و "دکتر محمدرضا سعیدی" که برای من نمونه های مهربانی، سخاوت و بخشندگی بوده اند.

تقدیم به همه کسانی که به من آموخته اند و در جمع آوری این پایان نامه مرا یاری رسانده اند.

تشکر و قدردانی

صدها فرشته بوسه بر آن دست می زند

کز کار خلق یک گره بسته وا کند

خداوند را سپاس می گویم که به من فرصت داد تا عمر خود را در راه تحصیل علم و دانش سپری کنم و همواره استادانی دلسوز و فرزانه بر سر راهم قرار داده، تا در این راه دراز و بی پایان علم جویی، راهنمای راهم باشند. با تشکر از راهنماهای دلسوز و فرزانه، مشوقان راه علم اساتید ارجمند جناب آقای دکتر واعظ زاده و جناب آقای دکتر سعیدی.

بدین وسیله مراتب قدردانی خود را از پدر و مادر و همچنین دوستان و عزیزانی که مرا در این مسیر یاری نموده اند، دارم.

چکیده

نانولوله کربنی دو دیواره (DWCNTها) ، ساختاری است متشکل از دو نانولوله تک دیواره که یکی از آنها بصورت هم مرکز درون نانولوله دیگر قرار گرفته است و بین آنها اندرکنش ضعیف واندروالس برقرار می‌باشد. نانولوله‌های کربنی دو دیواره لوله‌هایی به قطر چندین نانومتر و ضخامتی به اندازه دو برابر قطر اتم کربن می‌باشند، که دارای پتانسیل بالایی برای استفاده در علوم و صنایع مختلف از جمله در حمل و نقل، الکترونیک، پنل‌های خورشیدی، سنسورها و غیره می‌باشند.

یکی از روش‌های بسیار مناسب برای تولید کنترل شده نانولوله‌های کربنی دو دیواره، روش رشد رسوب شیمیایی فاز بخاربه کمک حرارت (CVD) می‌باشد. از نتایج تجربی می‌توان به عوامل مؤثر بر رشد نانولوله‌های دو دیواره در روش CVD دست یافت. ولی تا به حال مدلی مناسب برای مکانیسم رشد این دسته از نانولوله‌ها ارائه نشد است، بطوری که با استفاده از آن بتوان سیستم رشد را بیشتر تحت کنترل گرفت و شرایط بهینه رشد را راحت-تر فراهم نمود. این پروژه به بررسی نظری رشد نانولوله‌های کربنی دو دیواره(DWCNT) در روش رشد رسوب شیمیایی فاز بخار به کمک حرارت(CVD) می‌پردازد.

در کارهای پیشین با استفاده از مدل گلوله-فنر، مدلی مناسب برای رشد نانولوله‌های تک دیواره ارائه شده است. در اینجا نیز از مدل گلوله-فنر استفاده می‌شود، اما برای بدست آوردن معادلات رشد دیواره‌های داخلی و خارجی DWCNT برحسب زمان، بایستی اندرکنش هر یک از دیواره ها با زیرلایه و همچنین اندرکنش متقابل دیواره ها روی یکدیگر، و تأثیر آنها بر رشد دیواره‌ها محاسبه شود. در اینجا از پتانسیل لنارد-جونز برای محاسبه اندرکنش لایه-زیرلایه و لایه-لایه استفاده شده است. همچنین در این کار تأثیر عواملی مانند دمای کوره رشد، قطر دیواره‌ها، کایرالیتی و ... روی رشد نانولوله دودیواره بررسی شده است و نتایج رشد بدست آمده را با نمودارهای تجربی موجود مقایسه کرده‌ایم. در این پروژه نتایج مربوط به طول دو دیواره را با هم مقایسه کرده‌ایم

و پیش بینی مدل را برای اختلاف طول آنها، ارائه کرده‌ایم. در آخر پیش‌بینی مدل برای تغییرات فرکانس نوسانی دیواره‌ها برحسب طول دیواره‌ها را ارائه کرده‌ایم.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

مقدمه ۱

فصل اول **۴**

نانولوله‌های کربنی ۴

مقدمه..... ۵

۱-۱. آلوتروپ‌های اتم کربن..... ۶

۱-۱-۱. الماس ۷

۱-۱-۲. گرافیت ۸

۱-۱-۳. فولرن ۸

۱-۱-۴. گرافن ۹

۱-۲. ساختار مولکولی نانولوله‌های کربنی ۹

۱-۲-۱. مکانیسم تشکیل پیوند ۹

۱-۲-۲. طبقه‌بندی نانولوله‌های کربنی ۱۱

۱-۲-۲-۱. نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره ۱۲

۱-۲-۲-۲. نانولوله‌های کربنی چند دیواره ۱۳

۱-۳. نامگذاری نانولوله‌های کربنی ۱۴

۱-۴. روش‌های تولید نانولوله‌های کربنی ۱۷
۱-۴-۱. روش قوس الکتریکی ۱۸
۱-۴-۲. روش سایش لیزری ۱۹
۱-۴-۳. رسوب‌دهی شیمیایی فاز بخار به کمک حرارت (CVD) ۲۰
۱-۵. کاربردهای الکترونیکی و مکانیکی نانولوله‌های کربنی ۲۱
۱-۵-۱. کاربرد نانولوله‌های کربنی در نانوترانزیستورها ۲۱
۱-۵-۲. استفاده از نانولوله‌های کربنی به عنوان تقویت کننده در کامپوزیت‌ها ۲۳
۱-۶. کاربردهای زیستی نانولوله‌های کربنی ۲۵
۱-۶-۱. حسگرهای زیستی نانولوله‌ای ۲۵
۱-۶-۲. حمل و نقل مولکولی با استفاده از نانولوله‌های کربنی ۲۷

فصل دوم **۳۰**

مقدمه ۳۱
۲-۱. اثرنگاری نانولوله‌های کربنی دودیواره ۳۳
۲-۱-۱. میکروسکوپ الکترونی عبوری با وضوح بالا (HRTEM) ۳۳
۲-۱-۲. مدل دم‌زنی شعاعی (RBM) ۳۳
۲-۱-۳. اثرنگاری نانولوله‌های کربنی دودیواره ۳۴
۲-۲. تهیه نانولوله‌های کربنی دودیواره ۳۵
۲-۲-۱. رشد **DWCNT** از روش رسوب‌دهی شیمیایی فاز بخار ۳۶
۲-۳. ویژگی‌ها و کاربردهای **DWCNT**ها ۴۲

۲-۳-۱. ویژگی‌های الکترونیکی و نوری ۴۳
۲-۳-۲. انتقال ۴۳
۲-۳-۳. اثرات دما، فشار و ناخالصی ۴۵
۲-۴. پایداری حرارتی و شیمیایی، خواص مکانیکی ۴۶
۲-۴-۱. پایداری حرارتی ۴۷
۲-۴-۲. ساختار متخلخل و پایداری اکسایشی **DWCNT**های بسته‌ای ۴۸
۲-۴-۳. خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی دودیواره ۵۱
۲-۵. خلاصه و چشم‌انداز ۵۲
۲-۵-۱. چشم‌انداز ۵۴

فصل سوم **۵۶**

مقدمه ۵۷
۳-۱. مکانیسم کلی رشد ۵۸
۳-۲. رشد نانولوله تک‌دیواره و چنددیواره ۶۳
۳-۳. رشد نانولوله‌های کربنی روی پایه‌ها و مسائل پشروی آن ۷۱
۳-۴. پیکربندی و ملاحظات مربوط به رسوب شیمیایی فاز بخار به کمک حرارت (CVD) ۷۵
۳-۴-۱. کوره افقی ۷۵
۳-۴-۲. کوره عمودی ۸۰
۳-۵. رشد نانولوله‌ی همتراز و مستقیم ۸۱
۳-۶. رسوب‌دهی شیمیایی فاز بخار به کمک پلاسما ۸۵

فصل چهارم **۸۸**

مقدمه ۸۹

۴-۱. مکانیسم رشد نانولوله‌های کربنی روی کاتالیزور ۹۰

۴-۱-۱. رشد نانولوله‌های کربنی با قطرهای مختلف ۹۴

۴-۱-۲. رشد نانولوله‌های کربنی در دماهای مختلف و بدست آوردن دمای بهینه رشد ۹۵

۴-۱-۳. رشد نانولوله‌های کربنی با کاتالیزورهای متفاوت ۹۶

۴-۲. مکانیسم رشد نانولوله‌های کربنی دودیواره در روش CVD ۹۸

۴-۲-۱. اندرکنش بین دو دیواره نانولوله کربنی دودیواره ۹۸

۴-۲-۲. معادلات رشد دیواره‌های داخلی و بیرونی بر حسب زمان ۱۰۳

۴-۲-۳. مقایسه رشد نانولوله‌های دودیواره با قطرهای متفاوت ۱۰۸

۴-۲-۴. تغییرات فرکانس نوسان دیواره‌های بیرونی وداخلی برحسب طول دیواره‌ها ۱۱۰

۴-۳. نتیجه‌گیری ۱۱۱

مراجع **۱۱۳**

فهرست اشکال

شکل ۱-۱. انواع مختلف آلوتروپ‌های کربن اعم از الماس، فلورن، نانولوله، گرافیت و کربن آمورف.....۶

شکل۱-۲.(الف). اوربیتال‌های چهارگانه sp^3 اتم کربن در ساختار الماس (ب). شبکه الماس.....۷

شکل۱-۳. (الف).ساختار پیوندشش ضلعی پایه برای یک لایه گرافیت: هسته‌های کربن به شکل دایره‌های توپر، پیوندهای پای خارج از صفحه به شکل دمبل و پیوندهای سیگما به صورت خط پیوسته، نشان داده شده‌اند.(ب).ساختار لایه گرافن.....۱۰

شکل ۱-۴. نحوه پیچش صفحه گرافن و تولید نانولوله تک دیواره.....۱۱

شکل۱-۵.طبقه بندی نانولوله‌هی کربنی: (الف). نانولوله کربنی تک دیواره. (ب). نانولوله کربنی چند دیواره.....۱۲

شکل۱-۶.نمونه‌ای از تصاویر میکروسکوپ الکترونی عبوری از نانولوله‌ها.....۱۳

شکل ۱-۷. صفحهٔ گرافن که از شش ضلعی‌های کربنی ساخته شده است. بردارهای $\vec{a}_1$ و $\vec{a}_2$ ، بردارهای سلول واحد شبکهٔ مستقیم ساختار گرافن هستند. بردارهای C و T بردارهای شبکهٔ مستقیم نانولوله را نشان می‌دهند. با توجه به شکل محور نانولوله در جهت بردار T قرار دارد. اگر صفحهٔ گرافن را در جهت بردار C لوله کنیم، ساختار نانولوله بدست می‌آید.....۱۵

شکل۱-۸. نامگذاری نانو لوله های کربنی بر اساس زاویه پیچش.....۱۷

شکل۱-۹. شماتیکی از سیستم تولید نانولوله کربنی با استفاده از روش تخلیه قوس الکتریکی.....۱۸

شکل۱-۱۰. شماتیکی از سیستم رشد نانولوله کربنی به روش سایش لیزری.....۱۹

شکل۱-۱۱. شماتیکی از سیستم رشد نانولوله کربنی به روش CVD.....۲۰

شکل ۱-۱۲. پایانه های سورس و درین در ترانزیستورهایی که با نانولوله‌های کربنی ساخته می‌شوند.....۲۳

شکل۱-۱۳. شماتیکی از نانوکامپوزیت نانولوله‌ای..... ۲۴

شکل۱-۱۴. نمونه‌ای از حسگرهای زیستی نانولوله‌ای..... ۲۷

شکل۱-۱۵. روش‌های مختلف استفاده از نانولوله کربنی برای حمل و نقل مولکولی. (الف): عبور مولکول‌ها از درون نانولوله و جاگذاری مولکول‌ها درون آنها، (ب): اتصال مولکول‌ها به سطح نانولوله..... ۲۸

شکل۲-۱. پیپود فولرنی برای تولید DWCNT..... ۳۲

شکل۲-۲. (الف) TEM با وضوح بالا از DWCNTهای رشد یافته از پیپودهای فولرن [۲۹] و (ب) پاسخ رامان مربوط به DWCNTها پس از تبدیل(تغییر شکل) پیپودهای C_{60} در دمای $^{\circ}C$ ۱۲۵۰..... ۳۵

شکل۲-۳. توزیع قطر DWCNTهای با خلوص بالا بر اساس مشاهدات میکروسکوپ الکترونی عبوری با کیفیت بالا..... ۳۹

شکل۲-۴. (الف) طیف رامان فرکانس پایین و (ب) فرکانس بالا به ترتیب برای DWCNTهای خام و خالص سازی شده که توسط لیزر ۵۳۲nm تحریک شده است. (ج) شماتیک مدل انباشته از DWCNTهای دسته‌ای از الگوی پراش اشعهX مربوط به DWCNTها..... ۴۰

شکل۲-۵. (الف) تصاویری از باکی‌پیپر مشتق شده از DWCNT (ضخامت تقریباً ۳۰ میکرون می‌باشد). (ب) تصاویر میکروسکوپ الکترونی عبوری با وضوح پایین و (ج) میکروسکوپ الکترونی انتشار میدان که یک ساختار بسته‌ای را نمایش می‌دهند. (د) تصویر TEM با وضوح بالا از سطح مقطع DWCNTهای بسته‌ای (مدلی شماتیک با دو دیواره متحدالمرکز که به صورت منظم در یک آرایه شش وجهی دسته‌بندی شده‌اند). (ر) باکی‌پیپرهای DWCNT بسیار انعطاف‌پذیر و از نظر مکانیکی محکم و (ز) نیمه شفاف می‌باشند..... ۴۱

شکل۲-۶.(الف) جذب سطحی هم‌دما برای باکی‌پیپرهای بدست آمده از SWCNT و DWCNT (قسمت اضافه شده در گوشه سمت راست، نمودار مقایسه‌ای جذب برای هر دو نمونه تحت $P/P_0 = 0.1$ را نشان می‌دهد). (ب) توزیع میکروتخلخل‌های (میکروروزنه) مربوط به باکی‌پیپرهای بدست آمده از SWCNT و DWCNT با استفاده از روش DFT. خط کم رنگ

DWCNTها و خط تیره SWCNTها را نشان می‌دهد. توجه داشته باشید که میکروتخلخل‌های زیر ۰/۸نانومتر، مربوط به تخلخل‌های درون شبکه‌ای، در DWCNTهای دسته‌ای مشاهده شده‌اند.....۴۹

شکل۳-۱. 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 [۱۱۳] کربن در سرتاسر سطح کاتالیزور فلزی منتشر می‌شود و یک ساختار لوله‌ای شکل را روی محیط کاتالیزور تشکیل می‌دهد.....۶۰

شکل۳-۲. 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.....۶۲

شکل۳-۳. شکل‌های مختلف رشته‌های کربنی رشد یافته در شرایط رشد مختلف. (الف)-نانولوله‌ی کربنی با دیواره‌های گرافن موازی با محور لوله،که هیچ نقصی درآن مشاهده نمی‌شود، این ساختارها در دماهای رشد بالا تشکیل می‌شوند. (ب)- نانولوله‌های "مجعد" و "فنری" که در فرآیندهای CVD با دمای رشد پایین شکل می‌گیرند. (ج)- ساختار بامبو شکل که بدلیل هندسه سطح ذرات کاتالیزور و رسوب‌گذاری ورقه‌های کربن به واسطه توده ذرات کاتالیزور، به وجود می‌آید.....۶۶

شکل۳-۴. (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.....۷۲

شکل۳-۵. دو مدل رشد (الف)رشد از سر، (ب)رشد از پایه، که از تفاوت بین اندرکنش‌های فلز کاتالیزور- زیرلایه ناشی می-شوند.....۷۳

شکل۳-۶. انواع مختلف کوره‌های رشد نانولوله در روش CVD. (الف)- کوره افقی معمول‌ترین پیکربندی برای تولید نانولوله‌های کربنی. (ب)- کوره عمودی برای تولید حجمی بکار می‌رود. (ج)- راکتور بستر سیال. (د)- سیستم CVD پلاسمایی.....۷۷

شکل۳-۷. آنتالپی آزاد تشکیل نمونه‌های کربنی، محاسبه شده از[۱۶۲، ۱۶۳].....۷۸

شکل۳-۸. روش‌های رشد نانولوله‌های همتراز. (الف)-نانولوله‌های بسته‌بندی شده متراکم که تقریبا بصورت همتراز و عمودی رشد می‌کنند. این ساختار از روش کاتالیزور شناور بدست آمده است که در آن محلول فروسن-تولئون به درون کوره‌ای با دمای

$^{\circ}C$ ۷۵۰ تزریق شده است. (ب)- از روزنه‌های قالب آلومینیومی متخلخل نانولوله‌های کاملاً مستقیم، با قطر و طول یکسان رشد می‌کنند. (ج)- در این روش از میدان الکتریکی $V/\mu m$ ۰/۵ برای هدایت نانولوله‌های کربنی تک دیواره استفاده می‌شود تا نانولوله‌ها بصورت افقی بین الکترودها رشد کنند. (د)- نانولوله‌های مستقیم، همتراز و عمودی رشد یافته از روش CVD پلاسمایی..... ۸۳

شکل۴-۱. مدل جرم- فنر برای CNT و کاتالیزور آن..... ۹۱

شکل۴-۲. رشد نانولوله با قطرهای مختلف در دمای ۹۷۳ درجه کلوین..... ۹۵

شکل۴-۳. وابستگی رشد به دما برای دو قطر متفاوت..... ۹۶

شکل۴-۴. نمودار تغییرات انرژی نوسان برحسب انرژی واندروالس(انرژی واندروالس نماینده کاتالیزور می‌باشد)..... ۹۷

شکل۴-۵. وابستگی انرژی پیوند وان‌دروالس به رشد نانولوله در دماهای مختلف..... ۹۸

شکل۴-۶. (الف)-حالت اولیه موقعیت نسبی هر زوج کربن-کربن. (ب)- حالت ثانویه موقعیت نسبی هر زوج کربن-کربن..... ۱۰۱

شکل۴-۷. 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 با هم با میله نشان داده شده است..... ۱۰۲

شکل۴-۷. (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 $^{\circ}K$ ۹۹۸ که در این دما دارای بیشترین درصد نانولوله دو دیواره می-باشیم[۲۰۱]..... ۱۰۷

شکل۴-۸. نمودار رشد دیواره بیرونی برحسب زمان برای قطرها و کایرالیتی‌های متفاوت..... ۱۰۸

شکل۴-۹. نمودار رشد دیواره بیرونی برحسب زمان برای قطرها و کایرالیتی‌های متفاوت..... ۱۰۹

شکل۴-۹. نمودار تغییرات فرکانس نوسانی دیواره‌های داخلی و بیرونی بر حسب طول دیواره‌ها..... ۱۱۱

مقدمه

نانولوله‌ها در حوزه‌ی نانو فناوری که از تکنولوژی‌های جدید بشر است قرار می‌گیرند و با توجه به کاربردهای گسترده‌ی این ساختارها در علوم مختلف مانند: فیزیک، شیمی، 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، ویژگی-های 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.

پروژه‌های حوزه نانولوله کربنی را می‌توان به دو دسته کلی تقسیم بندی کرد. دسته اول پروژه‌های مربوط به سنتز نانولوله‌ها می‌باشند که بطور کلی بدنبال مسیرهایی برای تولید بیشتر و با کیفت مناسب‌تر می‌باشند. دسته دوم پروژه‌هایی می‌باشند که به مطالعه ساختار و خواص ساختاری نانولوله‌ها می‌پردازند، این دسته از پروژه‌ها بدنبال دستیابی به ساختارهایی مناسب برای کاربردهای مختلف صنعتی، پزشکی و غیره می‌باشند.

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. در روش‌های قوس الکتریکی و تبخیر لیزری، نانولوله‌هایی با ساختار منظم‌تر و عیوب کمتری تشکیل می‌شوند ولی میزان تولید در این روش‌ها در حد آزمایشگاهی است و برای تولید انبوه بایستی از روش رسوب شیمیایی فاز بخار استفاده کرد که از لحاظ ساختاری نانولوله‌های تولید شده از این روش دارای عیوب بیشتری می‌باشند.

روش رسوب شیمیایی فاز بخار، یکی از روش‌های مهم تولید نانولوله 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.

نانولوله‌ها کربنی به دو دسته کلی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره(SWCNTs) و نانولوله‌ای کربنی چند دیواره تقسیم می‌شوند. نانولوله‌های کربنی دو دیواره (DWCNTs) ساده‌ترین شکل نانولوله‌های چند دیواره می‌باشند. در واقع نانولوله کربنی دو دیواره، ساختاری است متشکل از دو نانولوله تک دیواره که یکی از آنها بصورت هم مرکز درون نانولوله دیگر قرار گرفته است و بین آنها اندرکنش ضعیفی برقرار می‌باشد. نانولوله‌های کربنی دو دیواره لوله‌هایی به قطر چندین نانومتر و ضخامتی به اندازه دو برابر قطر اتم کربن می‌باشند، که دارای پتانسیل

بالایی برای استفاده در علوم و صنایع مختلف از جمله در حمل و نقل، الکترونیک، پنل‌های خورشیدی، سنسورها و غیره می‌باشند.

تا به حال مکانیسمی برای رشد این دسته از نانولوله‌ها ارائه نشد است. در این پروژه با توجه به اهمیت نانولوله-های کربنی دو دیواره، به مطالعه نظری رشد نانولوله‌های کربنی دو دیواره در روش رشد رسوب‌دهی شیمیایی فاز بخار به کمک حرارت می‌پردازیم.

فصل اول

نانولوله‌های کربن

مقدمه

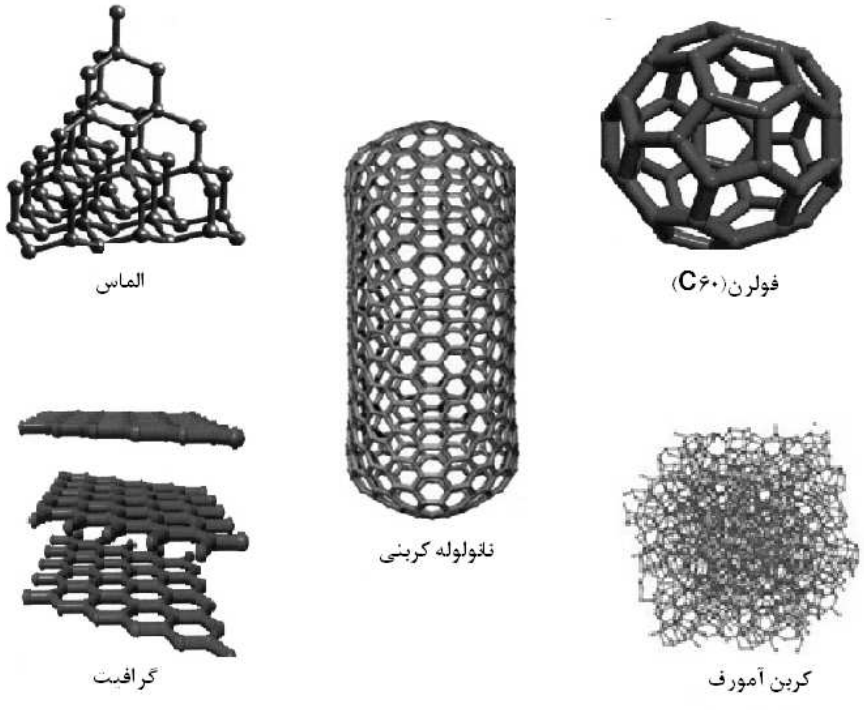
عصر حاضر را شاید بتوان عصر کربن نامید، زیرا این ماده کاربرد وسیعی در صنایع مختلف پیدا کرده است. در این بین، نانولوله‌های کربنی و فلورن‌ها توجه دانشمندان را بیشتر از دیگر شکل‌های کربن به خود جلب کرده‌اند. تا به حال تحقیقات وسیعی در زمینه شناسایی، ساخت و بکارگیری نانولوله‌های کربنی در صنایع مختلف انجام شده و پیشرفت‌های زیادی نیز در این رابطه صورت گرفته است. در سال ۱۹۹۱ نانولوله‌های کربنی، به طور اتفاقی توسط ایجیما[1] در ژاپن کشف شدند[۱]. نانولوله‌ی کربنی ساختاری استوانه‌ای توخالی در ابعاد نانومتر می‌باشد که از شش ضلعی‌های منظم کربنی تشکیل شده است. نانولوله‌های کربنیبه صورت ساختارهای یک یا چند دیواره رشد می‌کنند. این لوله‌ها به عنوان ساختارهای یک بعدی کربنی شناخته شده و دارای خواص نزدیکی به خواص فیبرهای گرافیتی ایده‌آل می‌باشند. دو سر این لوله‌ها معمولاً منتهی به یک نیم فلورن می-شود. بنابراین می‌توان مولکول‌های فلورن را به عنوان یک حالت حدی نانو لوله‌های کربنی در نظر گرفت که دو کلاهک آن مستقیم به هم وصل شده‌اند.

دلیل عمده توجه به ساختارهای نانولوله‌ی کربنی خواص ویژه و منحصر به فرد نانولوله‌های کربنی ازجمله مدول یانگ بالا،استحکام کششی خوب ، ظرفیت بالای گذردهی جریان، گاف انرژی بزرگ و پایداری مکانیکی از یک طرف و طبیعت کربنی نانولوله‌ها (کربنماده‌ای است کم وزن، بسیار پایدار و ساده که نسبت به فلزات برایتولید ارزان تر می‌باشد) می‌باشد.

[1] Iijima

۱-۱. آلوتروپ‌های اتم کربن

الماس و گرافیت دو ساختار اصلی کربن جامد می‌باشند که اصطلاحاً شکل‌های آلوتروپیک[1] خوانده می‌شوند و در دمای اتاق پایدار می‌باشند. انواع مختلف آلوتروپ‌های اتم کربن در شکل۱-۱ نشان داده شده است. علت متنوع بودن آلوتروپ‌های اتم کربن را می‌توان در متنوع بودن هیبریداسیون (آمیختن دو یا چند اوربیتال متفاوت و تولید همان تعداد اوربیتال یکسان را هیبریداسیون می‌نامند.) اتم کربن‌جستجو کرد.



شکل۱-۱. انواع مختلف آلوتروپ‌های اتم کربن اعم از الماس، فلورن، نانولوله، گرافیت و آمورف .

[1]Allotropic forms