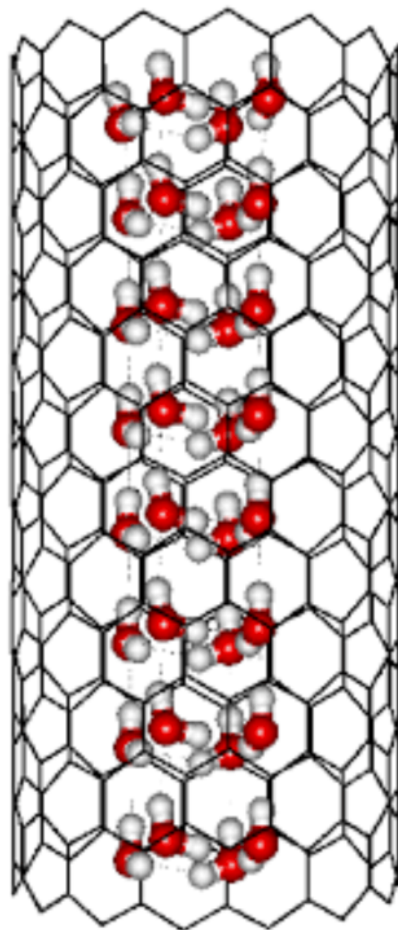


نانو لوله های کربنی

Carbon Nano Tube



نویسنده : دکتر افشین رشید

درباره نویسنده

نویسنده : افشین رشید

سطح علمی نویسنده : دکترای نانو _ میکرو الکترونیک

تارنما : www.electronic-tarfand.blog.ir

پست الکترونیک : afshinrashid342@gmail.com

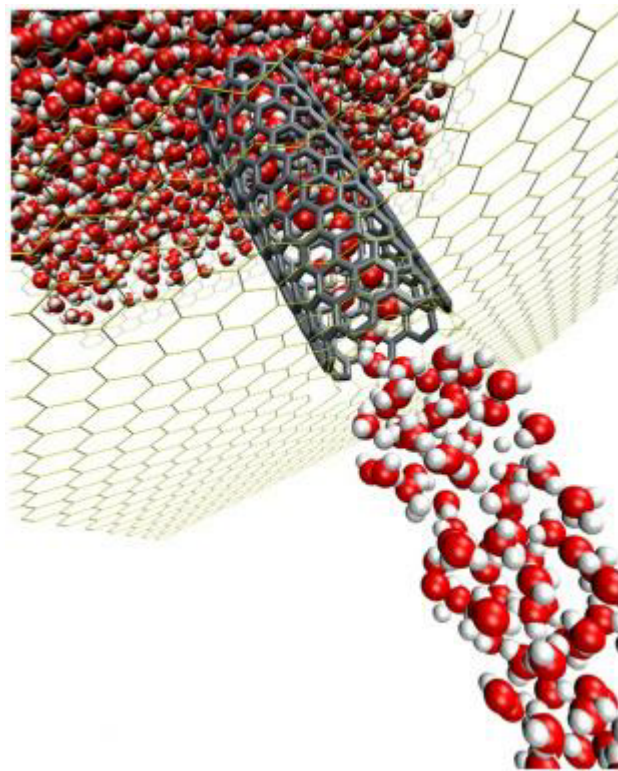
به نام خدا

پیشگفتار از نویسنده کتاب :

در ستایش علم الکترونیک همین بس که کاربردی ترین علوم در جوامع میباشد . و از یاد نبریم نانو_میکرو الکترونیک برترین گرایش علوم الکترونیک و کلید دستیابی به یک فناوری برتر در نیمه ی سده پیش رو میباشد. شاید باور کردنی نباشد اما تغییر در حجم و بازطراحی مدار های الکترونیکی و مخابراتی بر پایه علوم نانو الکترونیک میتواند تا چند برابر کارایی و قدرت این عناصر الکترونیکی افزایش دهد . و دست با تر در صنایع دریایی ؛ نظامی ؛ پزشکی ؛ الکترونیکی ؛ مخابراتی_ارتباطی ؛ به ارمغان آورد .

(دکتر افشین رشید)

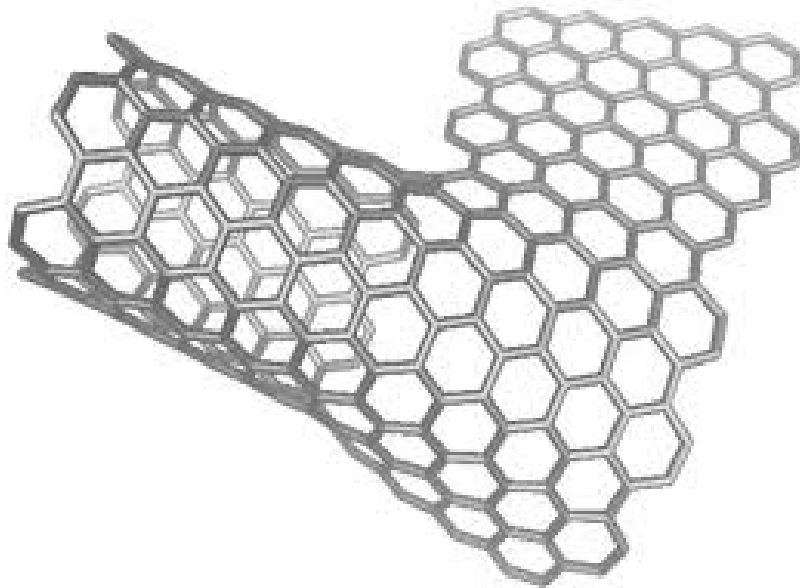
آشنایی با صفات انتقال یا هدایت الکترونیکی نانو لوله های (تک و چند جداره) CNT و CNTs (بر پایه دکترای نانو - میکرو الکترونیک)



در حالت انتقال و هدایت الکترونیکی مولکول های مختلف روی سطح نانو لوله های CNTs ، از نظر طول SWCNT ها و سختی آنها ، شرایط مشابهی دارند. بسیاری از خصوصیات و کاربرد های نانو لوله های کربنی وجود دارد که از نسبت ابعاد CNTs ، مقاومت مکانیکی ، هدایت الکتریکی و حرارتی استفاده کامل می کنند. هدایت الکترونیکی میتواند روی برخی از خواص ذاتی این نانو لوله ها تأثیر گذار باشد. عملیات حرارتی روی نانولوله ها، موجب کاهش تعداد نقص های ساختاری نانو لوله ها میشود، نقص هایی که در اثر عملیات خالصسازی یا ذرات کاتالیست به وجود میآید. بعد از

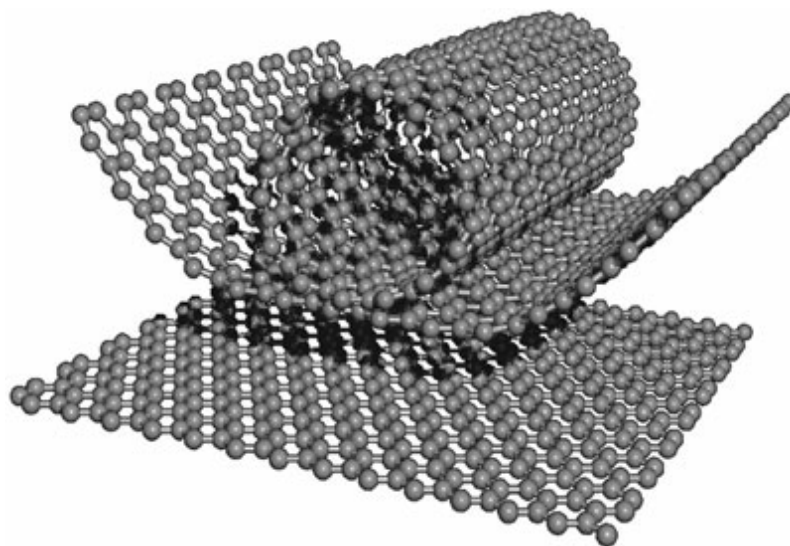
عملیات حرارتی، طیف الکترونیکی نانو لوله های کربنی تکجداره CNT حساسیت خود را نسبت به هدایت الکترونیکی از دست داده در حالی که نسبت به تکامل الکترونیکی ذرات نانو لوله های کربنی در حالت انتقال یا هدایت الکتریکی حساس است. بنابراین، برخی خواص ذاتی برای نانو لوله های خالص یا آنهای-ی که اندکی حرارت دیده اند تحت واکنش ذرات الکترومغناطیسی و افزایش رسانایی در حالت رسانایی و هدایت الکترونیکی بالقوه قرار میگیرند. در علم نانو الکترونیک از روش قوس الکتریکی برای تولید نانو لوله های کربنی استفاده کرد. در این روش از یک منبع تقریباً کم ولتاژ برای ایجاد جرقه بین دو الکتروود استفاده می شود. کاتالیست فلزات واسطه به منظور تسریع تولید نانو لوله های کربنی به آند گرافیتی اضافه میگردد. معمولاً برای بهبود خواص الکتریکی در برخی مواد همچون (الکترودهای شیشه ای کربن) GCE، الکتروود خمیری کربن، الکتروود های گرافیتی و یا الکتروود های گرافن میتوان نانوتیوب ها را به توده ی آنها اضافه کرد. به طور کلی، مشاهده شده است که اضافه کردن نانو ذرات، به داخل ساختار الکتروود ها منجر به بهبود خواص الکتروشیمیایی، حساسیت با تر و محدودیت های تشخیصی کمتر میگردد. به ع و ه، در روشهای تشخیص نانو الکترو شیمیایی، استفاده از نانو ساختارها به طور کلی باعث بهبود انتقال بار در سطح الکتروود میشود.

خواص الکتریکی نانو لوله های (CNT) و هدایت الکتریکی نانو لوله



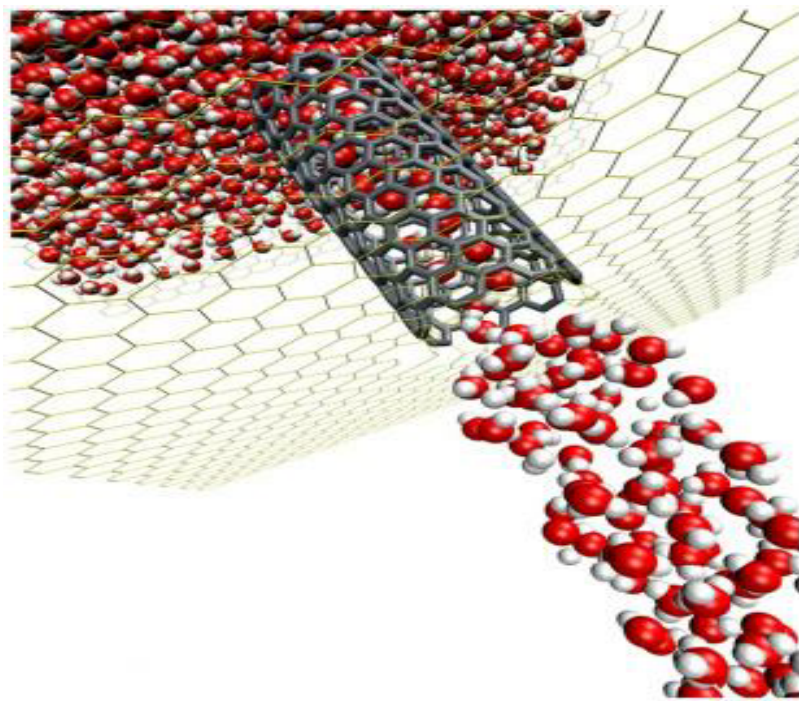
نانو لوله های کربنی تک جداره یا CNT میتوانند رسانا یا نیمه رسانای بسیار مناسبی باشند. این هدایت الکتریکی با بستگی به هندسه دقیق اتمهای کربن دارد. از نانو لوله های کربنی تک جداره یا CNT به عنوان یک پدیده تک بعدی نام برده میشود. علت رویکرد به این نانو لوله های تک جداره (CNT) و عملکرد برای جایگزین کردن آن ها در صنعت، بر اساس خصوصیات عالی مکانیکی و رسانایی الکتریکی آن ها مانند فلزات میباشد. البته تولید نانو لوله های تک جداره دارای هزینه با یی است و تولید به همراه پایدار کردن

خصوصیات آن ها در حین فراوری پلیمر نانو لوله مشکل میباشد. هر چند نانو لوله هایی که با استفاده از تکنیکی که شامل حرکاتی افقی و عمودی میباشد تولید شده اند، اضافه بر این که ثابت نگه داشته میشوند از لحاظ ساختاری قابل کنترل میباشند.



یکی از معایب نانو لوله های چند جداره نسبت به تک جداره این است که استحکام دهی آن ها کمتر میباشند. اما از آنجا که در حال حاضر کاربردهای نانو لوله های تک یه CNT در تقویت ادوات خطوط انتقال جریان الکتریکی باعث بهبود خواص گرمایی و الکتریکی میشود تا بهبود خواص مکانیکی و کاربرد نانولوله های کربنی چند جداره یا CNTs بسیار زیاد میباشد. ازطرفی تکنیک های موجود نیز برای تولید نانو لوله های تک جداره به اندازه کافی بازدهی ندارد و خلوص کم را نیز به همراه نمی آورد. تخلیص این مواد بسیار زحمت آور است و در نهایت ممکن است به ساختار

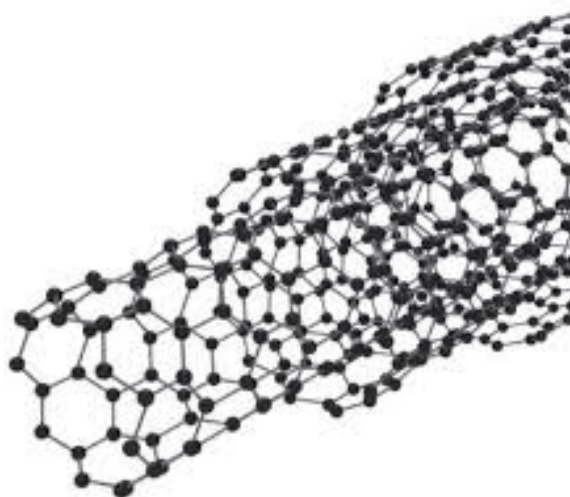
هدایت پذیر الکترونیکی نانو لوله های کربنی تک جداره CNT صدمه وارد کند.



نانو لوله های کربنی CNT بر حسب شکل هندسی شان و نانو لوله های کربنی تک یه بر حسب نحوه رول شدن صفحات گرافیتی سازنده شان به صورت رسانا یا نیمه رسانا در میآیند. به عبارت دیگر از آنجا که نانولوله ها در سطح مولکولی همچون یک باریکه سیمی در هم تنیده به نظر میرسند اتم های کربن در قالب شش وجهی به یکدیگر متصل میشوند و این الگوهای شش وجهی دیواره های استوانه‌های را تشکیل میدهند که اندازه آن تنها چند نانومتر میباشد. زاویه پیچش نوعی نانو لوله، که به صورت زاویه بین محور الگوی شش وجهی آن و محور لوله تعریف میشود، رسانا یا نارسانا بودن را تعیین میکند. تغییر شعاع نیز امکان بستن طول باند

و عایق نمودن نانو لوله فلزی را فراهم میکند. پس میتوان گفت دو پارامتر اساسی که در این بین نقش اساسی بازی میکنند، یکی ساختار نانولوله و دیگری قطر و اندازه آن است. در هدایت الکتریکی از یک هادی به یک نیمه هادی و یا یک عایق قابل تغییر الکتریکی نانو لوله ها بسته به ساختار و زاویه کایرال مولکولی آنها میباشد. از آنجایی که نانو لوله های کربنی قادرند جریان الکتریسته را به وسیله انتقال بالستیک الکترون بدون اصطکاک از سطح خود عبور دهند- این جریان صد برابر بیشتر از جریانی است که از سیم مسی عبور میکند- لذا نانو لوله ها انتخاب ایده آلی برای بسیاری از کاربردهای میکرو الکترونیک میباشد.

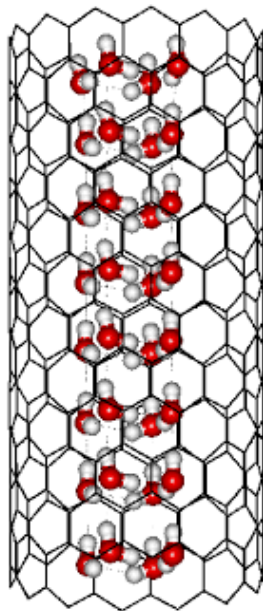
نانو لوله های کربنی CNTs و کاربرد های مختلف آن



استفاده از تکنولوژی های نانو در خطوط انتقال برق ضمن افزایش قابلیت اطمینان شبکه از تلفات انرژی تا حد قابل توجهی کاسته و انجام انتقال برق را آسانتر میکند. یکی از فناوری های پر کاربرد در صنعت برق نانو لوله های کربنی CNTs می باشد که استوانه ای توخالی با جنس دیواره اتم های کربن است. سیم های نانو لوله کربنی تاثیر مهمی در افزایش رسانایی الکتریکی و استحکام مکانیکی دارند. رسانایی کابل های نانو لوله کربنی را می توان با دوپ کردن با عنصر ید به با تر از فلزاتی همچون مس و آلومینیم رسانید. و در حالی که وزن آنها خیلی کمتر و در حدود یک ششم سیم های فلزی می باشد. استحکام کششی خارجی ترین جداره یک

نانو لوله کربنی CNTs (چند دیواره) صد برابر بیشتر از آلومینیم است. کربن یکی از عناصر شگفت انگیز طبیعت است که به چهار صورت در طبیعت یافت می شود. که هر چهار شکل جامد بوده و شامل گرافیت الماس نانو لوله و باکی بال می باشد. اندازه و شکل فیزیکی نانو مواد و چگونگی پیوند بین اتمی آنها تاثیر بسیاری بر خواص مواد می گذارد؛ مهم ترین خاصیت فیزیکی نانو لوله ها، «هدایت الکتریکی» آنهاست. هدایت الکتریکی نانو لوله ها بسته به زاویه و نوع پیوندها، از دس تهای به دس ته دیگر کاملاً متفاوت است؛ هر اتم در جایگاه خود در حال ارتعاش است، وقتی که یک الکترون (یا بار الکتریکی) وارد مجموعه ای از اتم ها میشود، ارتعاش آنها بیشتر شده و در اثر برخورد با یکدیگر بار الکتریکی وارد شده را انتقال میدهند. هرچه نظم اتم ها بیشتر باشد، هدایت الکتریکی آن دس ته از نانو لوله ها بیشتر خواهد بود. تقسیم بندی بر اساس نظم اتمی کربن در نانو لوله و در نتیجه رسانایی آنها انجام شده است؛ برای مثال نانولوله نوع صندلی 1000 بار از مس رساناتر است، در حالی که نوع زیگزاگ و انواع نامتقارن نیمه رسانا هستند. خاصیت نیمه رسانایی نانو لوله ها ساختار آنها تغییر می کند. بسیاری از کاربردهای نانو لوله کربنی تاکنون بر کاربردهای مقیاس کوچک متمرکز بوده است.

میتوان از خاصیت نانو لوله های CNTs به عنوان خطوط انتقال برق و انتقال جریان اشاره کرد. میتوان با استفاده از محلول کاتالیزور و مراحل مناسب نانو ادواتی به طول چند صد متر تولید

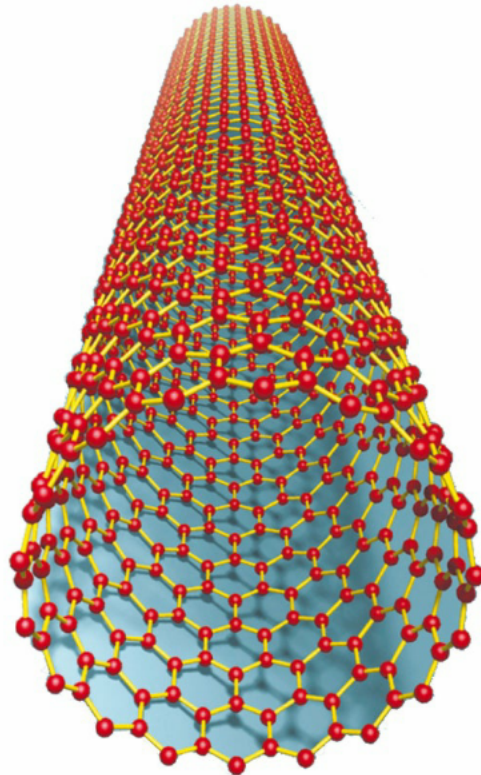


رسانایی الکتریکی کابل‌های نانو لوله ای میتواند در حد رسانایی سیم های فلزی باشد، در حالیکه وزن آنها بسیار کمتر است. با نانو لوله های کربنی دو جداره کابل انتقال برق ساخت و در ولتاژ استاندارد شبکه انتقال جریان را انجام داد. کابل های بسیار رسانای مبتنی بر نانو لوله های کربنی میتوانند کارایی همانند کابل های فلزی مرسوم داشته باشد و در همان حال وزن آنها حدود یک ششم باشد. این کابلها را میتوان در کاربرد های نظیر صنایع هواپیمایی و خودروسازی که در آنها وزن یک فاکتور مهم است، بطور گسترده استفاده کرد.



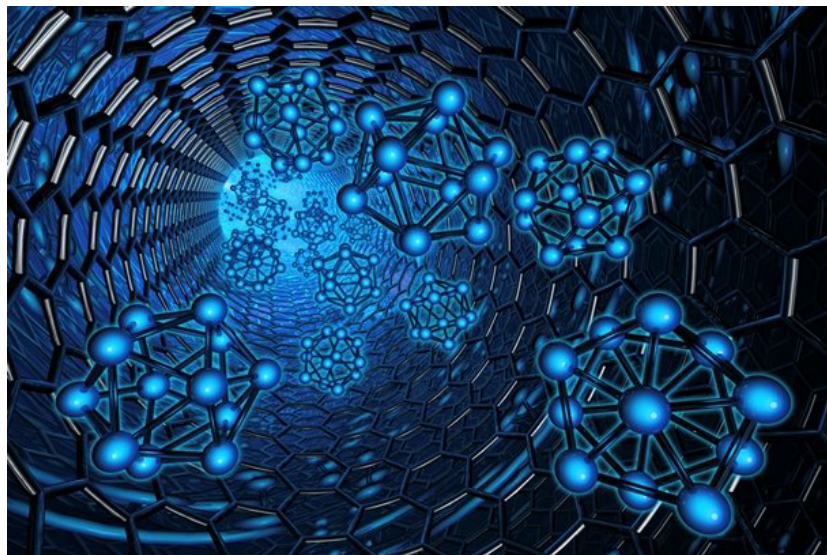
کابلهای ساخته شده بوسیله نانو لوله های CNTs خالص بافته شده اند و میتوان آنها را بدون از دست دادن رسانایی شان بهم گره زد. برای افزایش رسانایی و پایداری این کابل ها، نانو لوله ها را با عنصر ید میتوان دوپ کرد. نسبت ضریب رسانایی به وزن که ضریب رسانایی مناسب نامیده میشود، برای این نانو لوله در مقایسه با فلزاتی مانند مس و نقره با تر است. و کار انتقال جریان در شبکه را آسان تر و میزان کاهش جریان در انتقال کمتر میباشد.

مکانیسم رشد نانو لوله ها CCVD در تولید نانو ترانزیستور



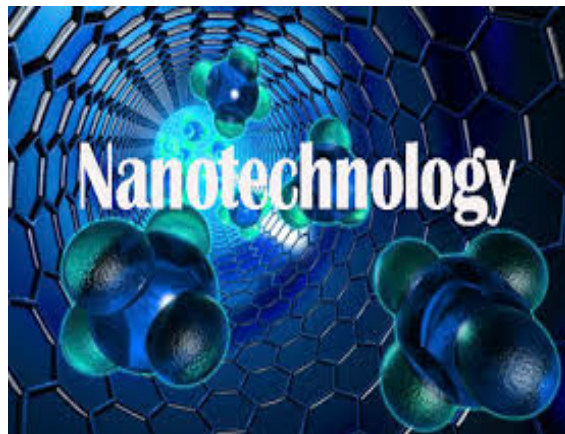
در علوم نانو و نانو الکترونیک ساختار محاسبات مواد، چقرمگی شکست یا تافنس شکست خاصیتی است که مقاومتی را که اجسام دارای شکاف در برابر شکست نشان میدهند توصیف میکند. این پارامتر برای همه کاربردهای طراحی جامدات، مهم است و با K_{Ic} نشان داده میشود. چقرمگی شکست یک روش محاسباتی برای شکست ترد است در زمانی که در ماده ترک وجود داشته باشد. اگر چقرمگی شکست یک ماده کم باشد، آن ماده به صورت ترد می

شکند و هرچه چقرمگی شکست با تر روداحتمال شکست نرم افزایش می یابد. دما مهمترین اخت ف بین روش های مبتنی بر منبع گازی و جامد است. در CCVD معمول از دمای کم استفاده شده و نانولوله ها در دمای زیر 0111 درجه رشد می کنند. بیش از یک مکانیسم می تواند بسته به نوع پیش مواد گازی، کاتالیست مورد استفاده و پارامترهای عملیاتی در رشد نانولوله کربنی دخیل باشد. مکانیسم انحلال-نفوذ-رسوب از رایجترین آنهاست که بیشتر در روش های دما پایین حاکم است. در این مکانیسم، نانو ذرات کاتالیستی از آلیاژهای فلزی یا فلزات واسطه (مانند نیکل، آهن و کبالت) به صورت کروی و یا شناور بر سطح زیر یه در نظر گرفته می شوند. بخار هیدروکربنی (مانند C_2H_4 ، C_2H_2 ، CH_4 ، CO و C_2H_6) وقتی با ذرات داغ کاتالیست تماس برقرار می کند به کربن و هیدروژن تجزیه شده و کربن در فلز بستر نفوذ می کند.



وقتی اتم کربن در کاتالیزور به مقدار فوق اشباع رسید، رسوب و

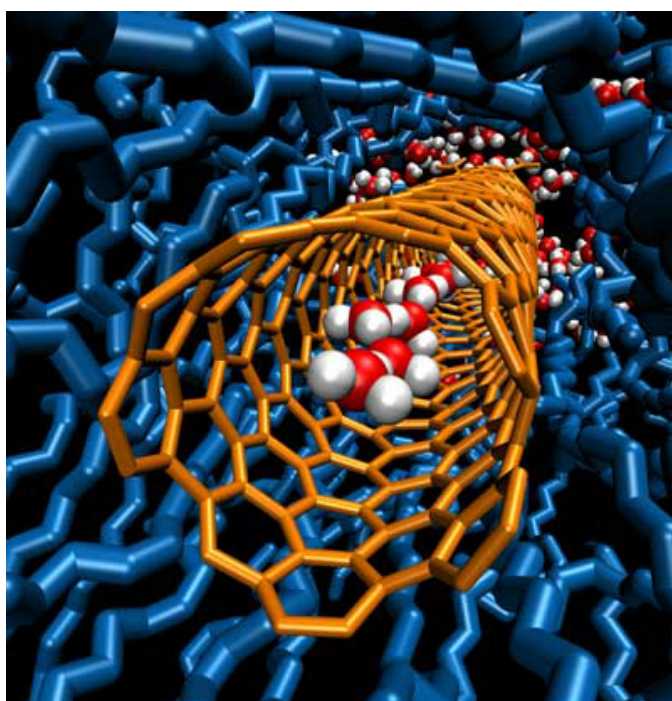
رشد نانولوله های کربنی آغاز می شود. اگر تعامل کاتالیزور با بستر ضعیف باشد (فلز با بستر دارای زاویه تماس حاد باشد)، نانولوله در پایین کاتالیزور (tipgrowth) و اگر تعامل کاتالیزور با بستر قوی باشد فلز با بستر دارای زاویه تماس باز باشد. نانولوله در با ی کاتالیزور رشد می کند (growth base) در حالت اول امکان تولید نانولوله با یک سر باز وجود دارد. شکل فیزیکی کربن رسوب کرده نانولوله کربنی تک دیواره، چنددیواره، آمورف و الیه گرافیتی پوشش دهنده نانوذرات کاتالیست (به عوامل زیادی مانند اندازه ذرات کاتالیستی، نرخ رسوب بستگی دارد. وقتی نرخ رسوب برابر و یا کمتر از نرخ نفوذ کربن است، الیه گرافیتی اطراف نانوذرات کاتالیستی تشکیل می شود. وقتی نرخ رسوب بیشتر از نرخ نفوذ کربن است، نانولوله کربنی شکل می گیرد. اندازه نانوذرات کاتالیستی نقش مهمی را در رشد نانولوله ها ایفا می کند عموماً نانوذرات کاتالیستی با اندازه کوچک (کمتر از 01 نانومتر) برای هسته زایی و رشد نانولوله کربنی فعال هستند.



اگر اندازه ذرات در حد یک نانومتر باشد، نانولوله تک دیواره شکل می گیرد. نانوذرات کاتالیستی با اندازه 01 تا 51 نانومتر منجر به

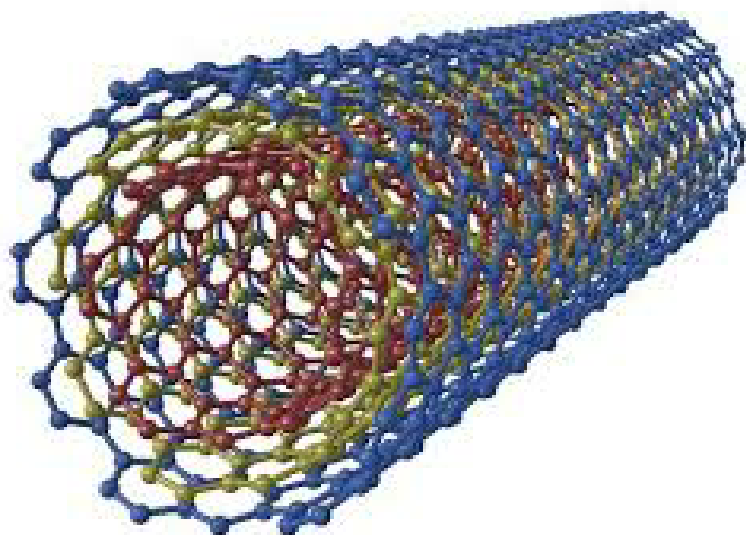
رشد نانولوله چند دیواره می شوند. همچنین نانوذرات کاتالیستی با اندازه بزرگتر از 51 نانومتر با ورقه های آمورف گرافیتی پوشش داده می شوند. و ساخت چیپ ها و نانو ترانزیستور ها نمایی از تاثیر ساختار کریستالی کاتالیست را بر شکل و ساختار نانورشته کربنی می باشد. تعریف های مختلفی از تغییر در ساختار مواد برای تولید چیپ ها و المان های الکترونیکی علم نانو (nanoscience) ارائه شده است. علم نانو الکترونیک مطالعه پدیده ها و دستکاری مواد در مقیاسهایی در ابعاد اتمی، مولکولی و ماکرومولکولی است که منجر به تغییر شدید خواص مواد (نسبت به مواد در ابعاد بزرگ) میشود.

(تغییر ساختار و تکامل و تغییر زاویه کایرالی تک یه و چند لایه)
CNTs و نانولوله های کربنی چند جدار و تک جداره



جداره های نانو لوله ها می توانند مانند یک فلز رفتار کنند و از نظر الکتریکی زاویه دار انجام شوند. تغییر ساختار و ساختمان در آنها میتواند نمایش خصوصیات نیمه هادی. یا غیر هدایت کننده باشد به عنوان مثال ، تغییر جزئی در قسمت مارپیچ می تواند لوله را از یک فلز به یک نیمه هادی با شکاف بزرگ تبدیل کند. نانولوله های کربنی، استوانه های توخالی متشکل از اتمهای کربن به صورت ساختار شش وجهی هستند. دو ساختار رایج زیگزاگ و

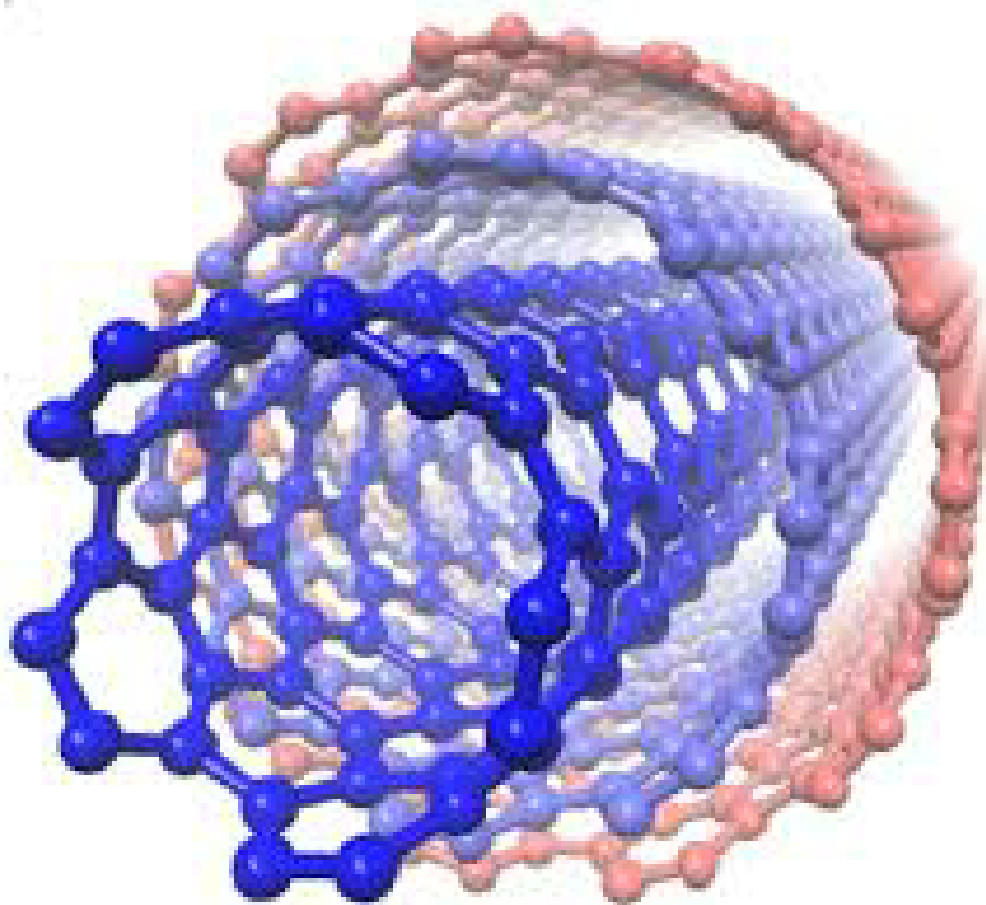
آرمچیر با شاخصه های هندسی و رفتاری متعدد به منظور ارزیابی تاثیر نوع ساختار بر تغییرات خواص مکانیکی که مهمترین آنها مدول استیسیته است مورد مطالعه قرار میگیرد. این دو ساختار پر کاربرد در پژوهش حاضر به روش اجزای محدود در نرم افزار تحلیلگر مارک مدلسازی شده اند و تاثیر تغییر آرایش ظاهری ساختار نانولوله کربنی بر مدول استیسیته آن مورد مطالعه قرار گرفته است. رفتار پیوندهای کووالانسی بین اتم های کربن نیز با فرض المان های خمشی دارای مدول استیسیته و ضریب پواسون معین و اعمال بار کششی خالص به سطح با یی آن انجام پذیرفته است تا مقدار مدول ساختار های مورد بررسی محاسبه گردد. بر اساس مطالعات انجام شده، ساختار آرمچیر در مقایسه با نمونه های زیگزاگ از مدول بیشتری برخوردار است.



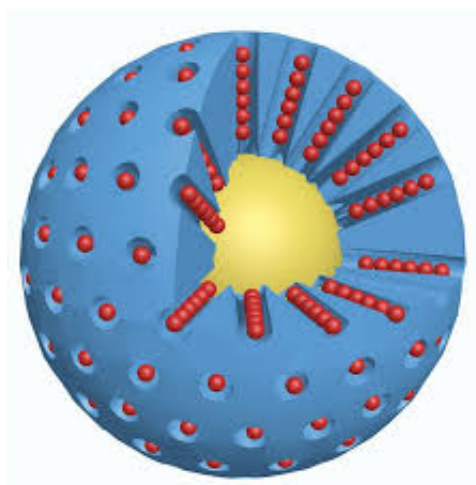
به طوری که نمونه های زیگزاگ همواره تمایل به افزایش مدول استیسیته خود و رسیدن به مقدار متناظر مربوط به ساختار ایده

آل آرمچیر دارند. جهت نورد تا (نورد و یا کایرال بردار) از یه های گرافن تغیی خواص الکتریکی نانو لوله ها را تعیین می کند. زاویه شبکه شش ضلعی اتمی کربن نانولوله را توصیف می Chirality کند. نانو لوله های صندلی - به اصطح به دلیل شکل صندلی مانند لبه های آنها - دارای شاخص های کایرال یکسان هستند و برای هدایت کامل آنها بسیار مورد نظر هستند. آنها برخ ف نانولوله های زیگزاگ نیستند ، که ممکن است نیمه هادی باشند. تبدیل یک برگه گرافن به میزان 30 درجه ، نانولوله ای را که از صندلی به صندلی بزرگ یا زیگزاگ یا برعکس تغییر می دهد ، تغییر می دهد همیشه حداقل به همان سطح هدایت MWCNT در حالی که همیشه به وکتور SWCNTs فلزات می انجامند و به آن می رسند ، هدایت کایرال آنها بستگی دارد. خواص نانولوله های کربنی مشابه هم با تکنیک های مختلفی مانند تخلیه SWCNTs ، نیست. در حال حاضر ، ی قوس الکتریکی ، پیرولیز هیدروکربن ها در مجاورت کاتالیست SWCNTs. تبخیر لیزری و رسوب دهی بخار شیمیائی تهیه میشوند ، تهیه شده با این تکنیکها مورفولوژی های مختلفی مانند مستقیم نیمه حلقوی خمیده، شاخه ای، فنر مانند و مارپیچ دارند. وجود SWCNTs ساختارهای مختلف باعث گسترش خواص و کاربردهای تازه سنتز شده حاوی نانولوله های متفاوت SWCNTs میشود ولی بسیاری هستند که مانع اصلی استفاده از آنها در تجهیزات نانو با بازدهی با است. مشخص شده است که خواص فیزیکی و بستگی (m,n) به قطر لوله و ساختار آن SWNT الکترونیکی یک

دارد. در بیشتر کاربردها به نانولوله هایی با خواص یکسان احتیاج با CNT داریم. مثال عملکرد یک دستگاه نانو الکترونیک بر پایه ی استفاده از نانولوله های یکسان به میزان چشمگیری بهتر میشود. ترانزیستورهای اثر میدان با نسبت های خاموش/روشن به میزان 106 با استفاده از نانولوله های کربنی غنی شده از (5,10) به دست ، 99% لوله ها جزء می آیند و سرعت تجهیزات به این علت است که 99% لوله ها جزء گروه نیمه هادی ها هستند.

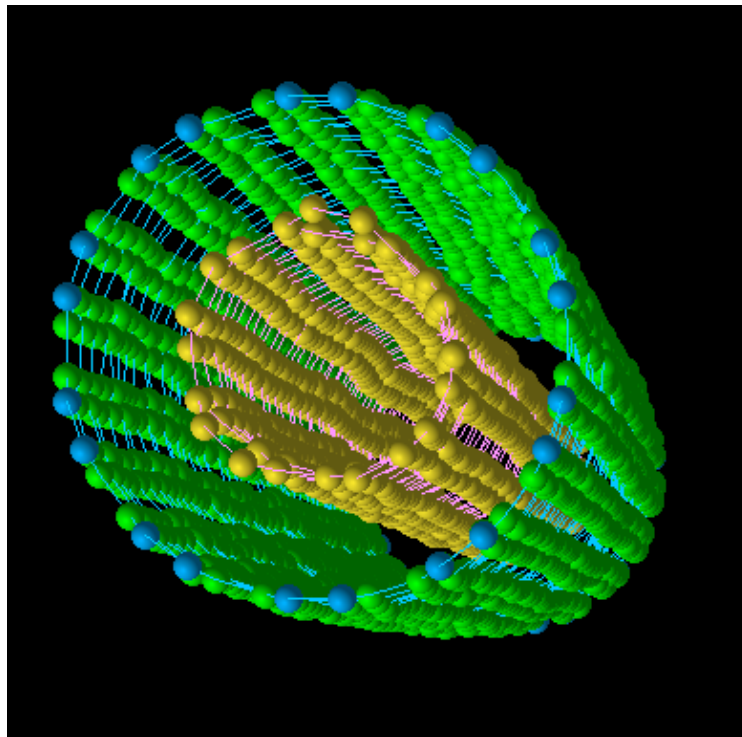


مولکول های آروماتیک در نانو لوله های دارای خواص الکترونیک
SWCNTs



مشخص است که نانو لوله های کربنی برهمکنش قوی با مولکولهای آروماتیک مانند سطح گرافیت دارند. میتوان SWCNTs را به صورت سیستم π الکترون بسط یافته در نظر گرفت که میتواند با دیگر سیستمهای π الکترون از طریق برهمکنشهای π - π ارتباط برقرار کند. چنین برهمکنشهای π - π به عنوان نیروی جلو برنده ی اصلی برای جذب DNA و پلیمرهای آروماتیک روی سطح نانولوله عمل میکند. کشف چگونگی برهمکنشهای انتخابی بین ترکیبات مزدوج π و

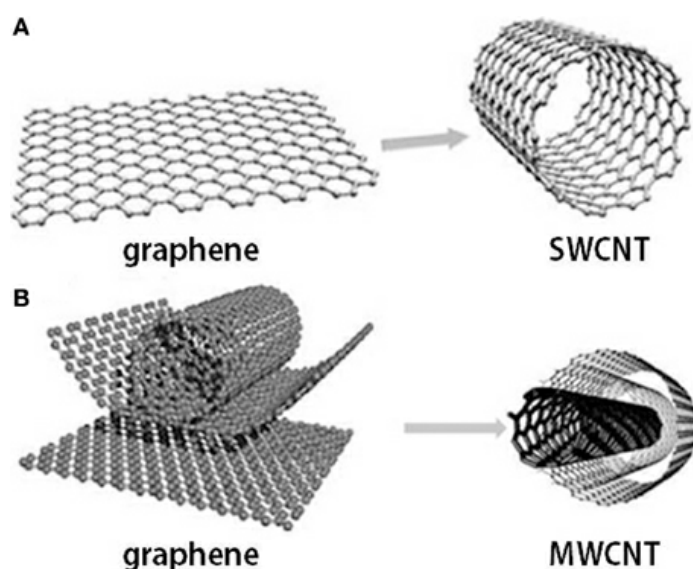
SWCNTs جالب و مهم است. مونومرها و پلیمرهای آروماتیک معینی میتوانند SWCNTs نیمه هادی یا فلزی را به طور انتخابی حل نمایند. چسبیدن π - π بین مولکول آروماتیک و سطح SWCNTs در جهت انتخابی انجام میشود که این مسئله میتواند یکی از دل عملکرد انتخابی این مولکولهای آروماتیک باشد. عاملدار نمودن غیرکوانسی انتخابی SWCNTs نیمه هادی با شیمی پورفیرین مشخص شد. بعضی از مولکولهای آروماتیک میتوانند کمپلکس انتقال بار با SWCNTs فلزی تشکیل دهند.



با شیمی پورفیرین مشخص شده که بعضی از مولکولهای آروماتیک میتوانند کمپلکس انتقال بار با SWCNTs فلزی تشکیل دهند. نانو مشتقات پلیمری Fluorene می توانند به طور انتخابی به

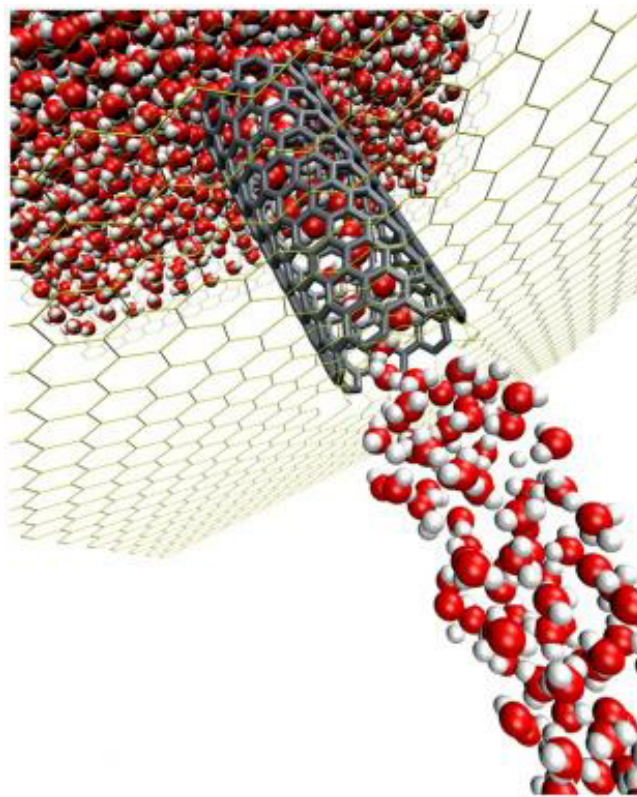
ترتیب نانو لوله های (7,5) و (8,6) و (10,5) را غنی سازی نمایند. ساختار پلیمر و ساختار ح ل هر دو به شدت تأثیر گذار هستند و در بعضی موارد منجر به انتخابگری بسیار با یی بر حسب قطر و زاویه ی کایرال میشوند. از مولکول های تراکمی (دیلز-آلدر) acenes برای متفرق کردن نانو لوله های دارای قطر زیاد استفاده میشود. انتخابگری نانو لوله های با قطر کم ($>2.1\text{nm}$) متمرکز میباشد؛ در حالی که انتخابگری نانو لوله های دارای قطر زیادتر ($\sim 6.1\text{nm}$) مطرح شده است. نانو لوله های کربنی نیمه هادی که قطر آنها بزرگتر (6nm) باشد؛ این نوع از نانو لوله ها بازده بهتری در تجهیزات الکترونیک دارند. نانو لوله های کایرال بزرگ را میتوان با استفاده از آروماتیکهای بنزوئید متراکم جدا نمود در حالی که نانو لوله های کایرال کوچک با مشتقات (پلی-پریلن) جدا میشوند. و ه بر آن با کنترل فرآیند پراکندگی- جداسازی، میتوان نانو لوله فلزی و سپس نانو لوله های نیمه هادی را جدا نمود. ایزومرهای دیپورفیرین کایرال به عنوان موچینهای مولکولی عمل میکنند تا بتوانند به طور انتخابی SWCNTs راستگرد یا چپگرد را جداسازی نمایند. میزان انتخابگری کایرال با کنترل زاویه ی دو وجهی بین پورفیرین ها بهینه میشود. جالب است که مولکولهای دیپورفیرین میتوانند راستگرد یا چپگرد قبل از این کار، تفرق الکترونی با تصحیح خطا بودن شبکه ی کربنی در فضا را تشخیص دهند. این کار باعث میشود که ضریب اطمینان با تری جداسازی نانو لوله های کایرال را انجام دهند

آلترپو های گرافن یا GA و افزایش هدایت الکتریکی در نانو لوله های چند جداره CNTs



درون نانو لوله های کربنی چند یه CNTs با پر کننده های رسانای جریان الکتریسیته گرافنی مخلوط میشوند تا مواد رسانای جریان الکتریسیته ای به دست آیند که سبک وزن بوده و حداقل مقاومت الکتریکی در مقیاس کمتر از $10^5 \text{ m}/\Omega$ را دارند. این نانو نوارهای گرافنی افزایش غیرخطی در مقدار رسانایی الکتریکی نشان میدهند که این افزایش تابعی از مقدار فاز تقویت کننده است. در یک مقدار مشخص از نانو ذره، که به نام آستانه تراوایی شناخته میشود، نانو ذره قابلیت تشکیل ساختار شبکه ای را دارد. این موضوع سبب افزایش ناگهانی رسانایی الکتریکی نانو نوارهای گرافنی درون نانو لوله های کربنی CNTs میشود. رسانایی ذاتی و

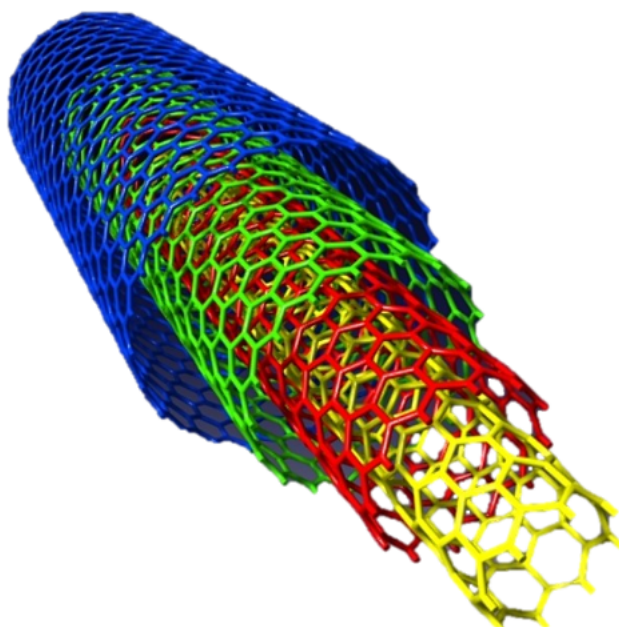
نسبت طول به عرض نانو ذرات پرکننده بر پایه کربن، آنها را انتخابی مناسب برای رسیدن به این آستانه تراوایی در مقادیر کم از فاز پر کننده نانو نوارهای گرافنی درون نانو لوله های CNTs میسازد. صفحات گرافنی بی نقص نشانه هایی از انتقال پرتابی (transport ballistic) را نشان میدهند. اگرچه رسانایی الکتریکی گرافن که با استفاده از روشهای الکتروشیمیایی اطح شده به خوبی گرافن بی نقص نیست، اما هنوز برای تولید نانو نوارهای گرافنی رسانای الکتریکی گزینه مناسبی است.



نانو لوله های کربنی چند یه (CNTs) و گرافن آلتروپ های کربن هستند که از نظر خاصیت الکتریکی ، مکانیکی و سایر خصوصیات فیزیکی منحصر به فرد هستند. گرافن ماده ای دو بعدی است ،

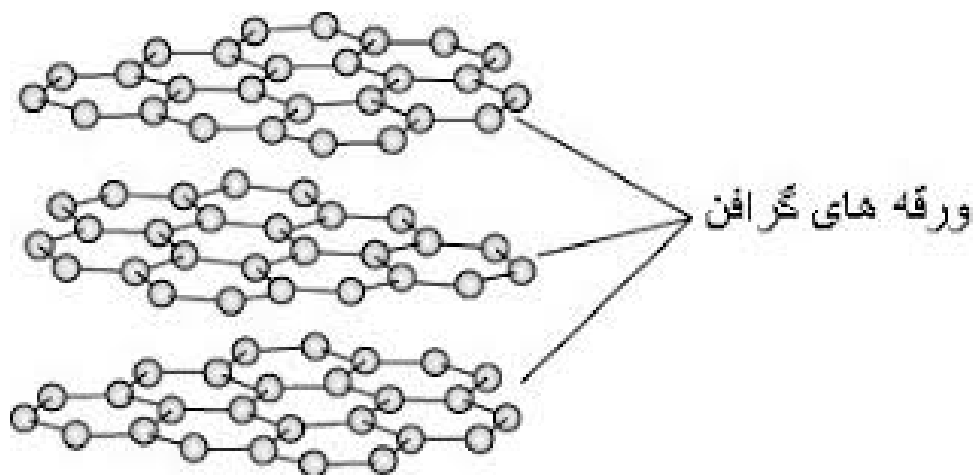
اساساً یک یه واحد گرافیت ، با اتم های کربن که در یک شبکه شش ضلعی و نه زنبوری قرار گرفته اند. نانو لوله های کربنی ساختارهای استوانه ای توخالی ، اساساً یک ورقه گرافن است که درون یک استوانه قرار میگیرد. زاویه ای که در آن نورد می شوند ("کایرال بودن" آنها) و قطر آنها بر خواص آنها تأثیر می گذارد. به دلیل اندازه واحد کوچک ، نانو مواد دارای خواصی هستند که مواد فله معمولی نمی توانند با یکدیگر مطابقت داشته باشند ، از جمله اینها از نسبت مقاومت به وزن با (یعنی آنها قوی هستند اما سبک هستند) و اتصال الکتریکی برتر نانو مواد مبتنی بر کربن - خصوصاً نانو لوله های گرافن و کربن - پتانسیل عظیمی را به عنوان جایگزین مواد در صنایع نانو الکترونیک پدید میآورد.

بررسی ساختار گرافن در نانو لوله های کربنی چند جداره CNTs



نانو لوله های کربنی چند جداره (CNTs) یک التروپ کربن است. آنها به شکل مولکول های کربن استوانه ای شکل می گیرند و دارای خواص جدیدی هستند که باعث می شود آنها در طیف گسترده ای از کاربردهای نانو - میکرو الکترونیک ، مفید واقع شوند. آنها قدرت فوق العاده و خاصیت الکتریکی منحصر به فردی از خود نشان می دهند و رسانای کارآمد گرما هستند. نانولوله های معدنی نیز سنتز شده اند. نانولوله ها اعضای خانواده ساختاری فولرن هستند که شامل buckyballs نیز می شوند. در حالی که buckyballs به شکل کروی هستند ، یک نانولوله استوانه ای است و حداقل یک انتهای

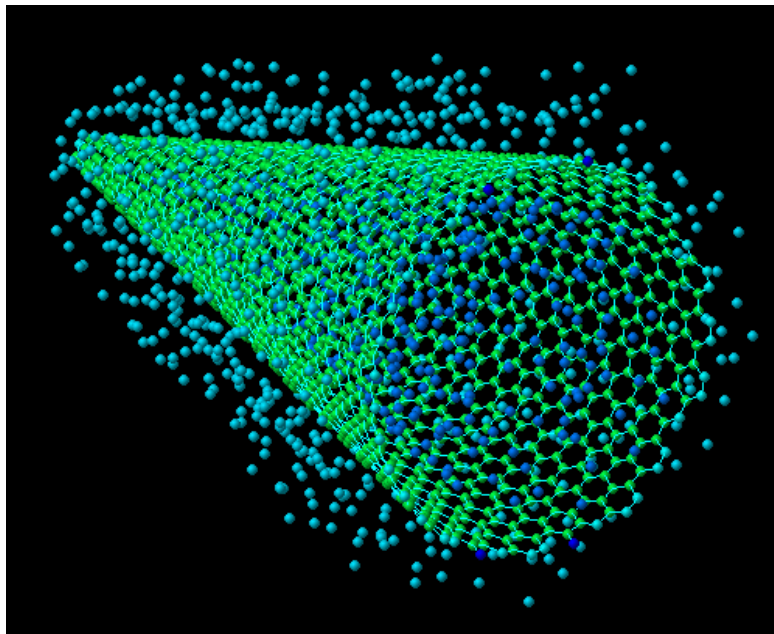
آن به طور معمول با یک نیمکره از ساختار buckyball پوشانده شده است. نام آنها از اندازه آنها گرفته شده است. گرافن ویژگی های نانو الکترونیکی برجسته ، تحرک پذیری الکترونی بسیار با و هدایت بی نظیری در مقیاس نانو دارد. رسانای فوق العاده ای است بطوریکه الکترون ها را با سرعت ده برابر بیشتر از سیلیکون منتقل می کند. این ویژگی هاگرافن را به کاندیدای ایده آلی برای کاربردهای نانو الکترونیکی نسل های آتی از قبیل نانو ترانزیستورها، نانو باتری ها، ابر خازن ها و نانو سنسورها مبدل کرده است. اثرات لبه های نا هموار به عنوان یک مشکل در ساختمان نانو لوله های چند جداره CNTs و در نانو نوار های گرافنی با لبه های یکنواخت ، عرض کم (GNRs) و قابل کنترل ، این عیب را پوشش میدهد.



نانو نوار های گرافنی درون نانو لوله های چند یه CNTs یا چند یه یک رسانای الکترونیکی فوق العاده خوب و یک نیمه رسانا قابل

استفاده در مدار های یکپارچه (آی سی ها)، تراشه های کوچک با میلیون ها ترانزیستور باشد. افزایش طول نانو نوار گرافنی در ولتاژ های پایین باعث کاهش در جریان الکتریکی در نانو لوله ها و نهایتاً ایجاد گاف در منحنی رسانندگی می شود. کاهش رسانش الکتریکی می تواند ناشی از اثرات تداخل کوانتومی باشد و رسانش حاکم بر ساختار در وضعیت حضور گاف در رسانش، بر اساس تونل زنی تشدیدی توصیف می شود. از سوی دیگر با افزایش پهنا ی نانو نوار گرافن همراه با افزایش نقاط اتصال در نانو لوله های CNTs با ناحیه مرکزی، مسیرهای شارش الکترون به ناحیه مرکزی نانو لوله کربنی چند یه CNTs افزایش یافته و رسانش افزایش می یابد. صفحات گرافن و او بر این که بسیاری از خواص الکتریکی، و رسانایی نانو لوله های کربنی را دارند، دارای خواص ترابرد الکتریکی منحصر به فردی نظیر اثر کوانتومی هال نیم صحیح، رسانندگی مینیمم و... می باشند. همچنین صفحات گرافن به جهت ساختار مسطحی که دارند در مقایسه با نانو لوله های کربنی از قابلیت تغییر پذیری بیشتری برخوردار هستند. حامل های بار در گرافن رفتاری شبیه به فرمیون های بدون جرم از خود نشان می دهند. ویژگی های فوق سبب شده است تا گرافن به عنوان کاندیدی مناسب در ساختار های نانو الکترونیک مدنظر قرار گیرد.

رزونانس رامان (RAMAN) برای سنجش فراوانی نانو لوله های چند
یه CNTs



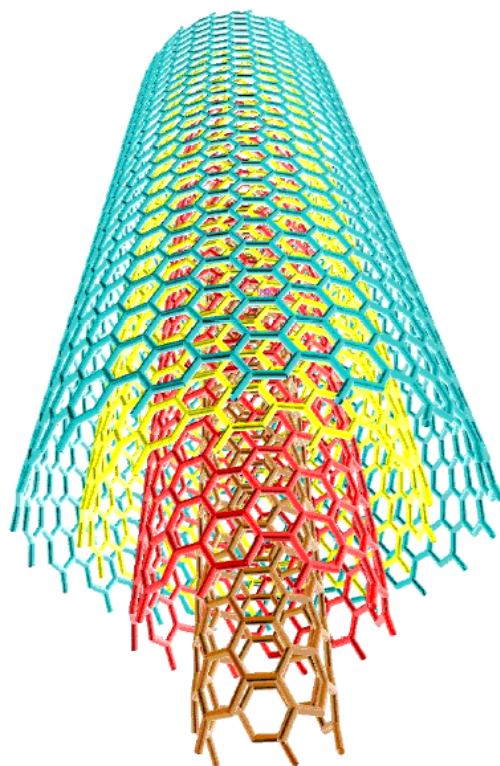
طیف رزونانس رامان (RAMAN) در یک نانو لوله ی منفرد باعث
میشود که بتوان ساختار الکترونی و فونون نانو لوله های چند یه
CNTs را با دقت بیشتری برآورد نمود. هر نانو لوله ی کربنی
ساختار الکترونی ویژه ای دارد و در نتیجه چگالی تراز های ویژه
ی خود را خواهد داشت. بنابراین جزییات رزونانس رامان (RAMAN)
برای تعیین ساختار آنها عالی است. استفاده از روش رزونانس رامان
(RAMAN) برای سنجش فراوانی نانو لوله ها در یک نمونه بسیار
متداول است. در این تکنیک وقتی انرژی لیزر برابر و یا نزدیک
انرژی انتقال الکترونی مجاز نوری نمونه باشد، افزایش شدت

خواهیم داشت که این مسئله وابستگی زیادی به ساختار نانو الکتریکی نمونه دارد. بنابراین رزونانس رامان (RAMAN) برای تعیین ساختار آنها عالی است. نانو لوله های که قطر آنها $<75\text{nm}$ $<dt/0$ 4nm SWNTs/2 باشند (از نوع SWCNTs)، طیف های رامان RBM بین آنها که میشوند ظاهراً $(300\text{cm}^{-1} < \text{WRBM} < 100\text{cm}^{-1})$ معادل جا به جایی متقارن داخل فاز اتم های کربن SWCNT در جهت شعاعی است. band G مربوط به حرکت اتم های همسایه در جهت مخالف در امتداد سطح لوله در گرافیت دو بعدی است که مشخصه ی آن یک پیک چند شاخه در اطراف $(1600\text{cm}^{-1}-1500\text{cm}^{-1})$ است. پیک مربوط به RBM و پیک چندتائی band G در SP2 دیده نمیشود. معمولاً هیچ ترکیب کربنی SP2 باشند یک پیک ترکیباتی که حاوی کربن تکی (band G) به شکل Lorentzian در حدود (1582cm^{-1}) طیف رامان آنها مشاهده میشود. band D در طیف رامان فقط برای اتم های SP2 در حضور (هترو) اتمها، فضا های کربن خالی و یا هرگونه نواقص شبکه به وجود می آید.



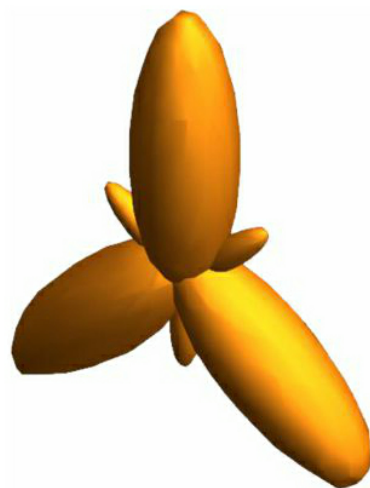
نانو لوله های نیمه هادی با هماهنگی وسیله ی تنظیم ولتاژ میتواند روشن/خاموش شود. برای تمایز SWCNTs فلزی و نیمه هادی با استفاده از نمودار های I-V ارائه داده اند. این محققان فرض کردند که SWCNTs نیمه هادی؛ نسبت خاموش/روشن از مرتبه ی 10 یا بیشتر دارند و جریان خاموش به مقدار (9A-10) یا کمتر دارند که این مسئله برخلاف خصوصیات SWCNTs فلزی است. او بر آن، برای نمونه های غنی شده، سنجش های چهار نقطه ای در مورد فیلمهای نازک مانند (paper bucky) انجام میشود تا سنجش کیفی فراوانی نوع فلزی و نیمه هادی در نمونه انجام گردد. البته بسیاری فاکتورهای دیگر مانند خلوص نمونه و یکنواختی ضخامت یه میتواند مقاومت یه ای نازک را تحت تأثیر قرار دهد. این فاکتورها باید قبل از نتیجه گیری نهایی در نظر گرفته شوند.

تضعیف انتقال الکترونی و حضور نقش پراکنده (Dispersant) هنگام
متفرق نمودن نانو لوله های کربنی چند یه CNTs

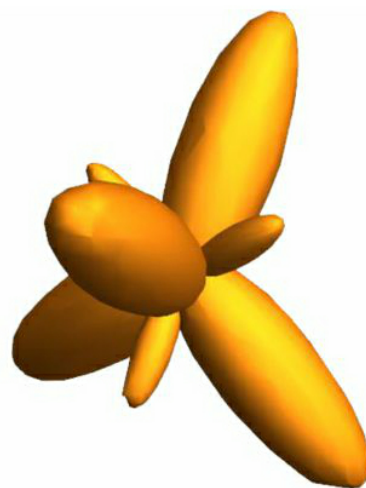


نانو لوله های کربنی چند یه CNTs در بعضی نمونه ها ناخالصی
های زیادی دارند، مانند ذرات چند وجهی گرافنی، کربن آمورف و

ذرات کاتالیست جذب نوری این ناخالصی ها مربوط به طیف میشود و برای ارزیابی کمی حذف زمینه جذب زمینه ضروری است، که در این حالت امکانپذیر نبوده و آنالیز کمی همراه با خطا خواهد بود. مشکل سوم ناشی از حضور دیسپرسانت است که هنگام متفرق نمودن نانو لوله چند یه CNTs دارد پخش میشود که حضور آن موجب گمراهی در تشخیص کمی میزان SWCNT در حالت میگردد. وقتی گروه های عاملی به صورت کووا نسی روی نانو لوله چند یه CNTs قرار میگیرند، پیک های جذبی به صورت کاملاً مشخص ضعیف شده یا حتی ناپدید میشوند زیرا ساختار نانو لوله در بعضی SP2 شش وجهی به ساختار قسمتها از ساختار SP3 تغییر مینماید. اسپکتروسکوپی جذبی NIR-VIS-UV دو استفاده مهم دارد: میزان واکنشهای کووا نسی و انتخاب گری نسبت به نانوله های مختلف. دوپینگ غیر کووا نسی یا جذب مولکولی موجب تهیه شدن الکترونهای وا نسی مانند (dopingP) یا اشباع نوار هدایت مانند (doping-n) میشود.



SP²
HYBRID

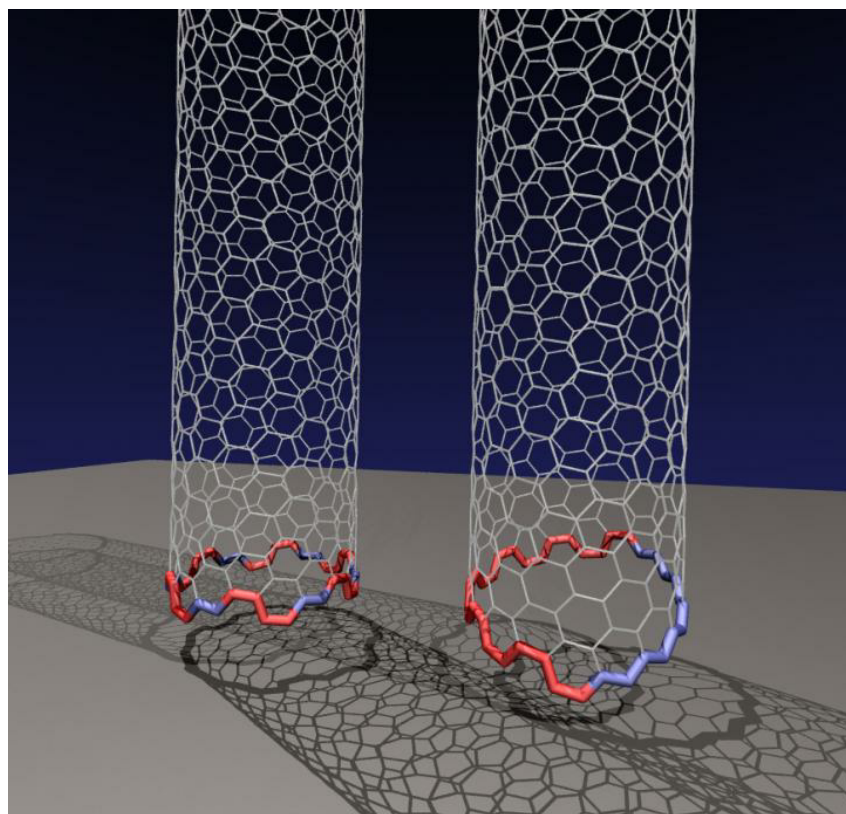


SP³
HYBRID

این بر هم کنش های غیر کوا نسی میتواند شدت پیک های جذبی را تحت تأثیر قرار دهد. هنگام دوپینگ، الکترون دهنده ها مانند (Cs,K) یا الکترون پذیرنده ها تغییرات بسیار مشابهی در طیف (Br₂-) مانند NIR-vis-UV ایجاد می کنند و هر دو باعث تضعیف انتقا ت الکترونی میشوند. اسپکتروسکوپی جذبی برای برآورد فراوانی گونه های فلزی و نیمه هادی با مقایسه ی شدت پیک های مربوطه استفاده شود؛ زیرا موقعیت این پیک های رزونانسی به کایرالیته و قطر وابسته است. برای آنالیز کیفی، اسپکتروسکوپی جذبی عالی است زیرا چهره ی کلی ترکیب نمونه را نشان میدهد؛ اما ارزیابی کمی به چند دلیل امکانپذیر جذب نانولوله ها به (m,n) بستگی دارد. گزارش شده است که نسبت ضرائب خاموشی برای SWCNTs فلزی به نیمه هادی، + 0/352 است که باید مستقل از روش - 009/0 جداسازی یا مواد اولیه آغازی باشد. ولی مقادیر ضرائب خاموشی SWCNTs گزارش شده در منابع علمی همخوانی ندارد و هنوز روش های سنجش بهتری برای تعیین ضریب خاموشی نانو لوله های (m,n) مختلف مورد نیاز است. ثانیاً جذب π قوی در ناحیه طول موج کوتاه موجب میشود که انتقا ت رزونانسی مجزا نباشند. و به بر آن پیچیدگی مربوط به همپوشانی پیک ها مشکل آفرین است. در نتیجه وجود تعداد زیادی از SWCNTs با (m,n) گوناگون با فراوانی ناشناخته به همراه خطاهای مختلف همراه آنالیز

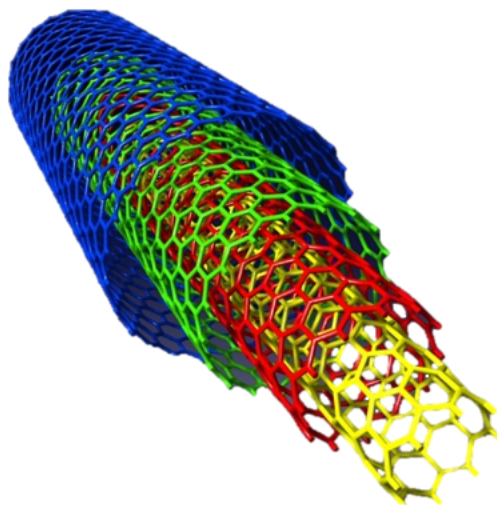
اطاعات، موجب میشود که ارزیابی کمی غلظت گونه ی ویژه ی (m,n) در نمونه مشکل باشد و تنها داده های تخمینی به دست میآید.

انتقال بالستیک الکترون بدون اصطکاک از سطح نانو لوله های کربنی CNT و CNTs



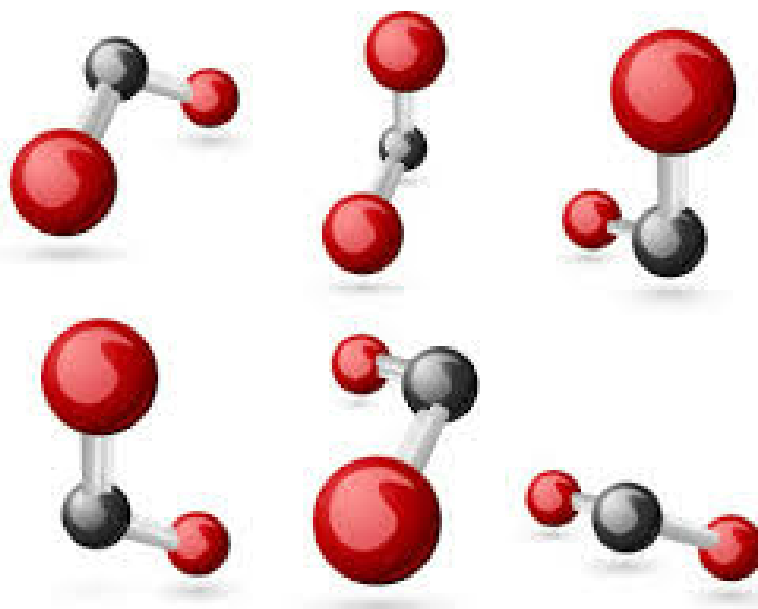
از آنجایی که نانو لوله های کربنی قادرند جریان الکتریسته را به وسیله انتقال بالستیک الکترون بدون اصطکاک از سطح خود عبور دهند- این جریان صد برابر بیشتر از جریانی است که از سیم مسی عبور میکند- لذا نانو لوله ها انتخاب ایده آلی برای بسیاری از کاربردها

های میکرو الکترونیک میباشند. بر حسب شکل هندسی شان نانولوله ها بر حسب نحوه رول شدن صفحات گرافیتی سازنده شان به صورت رسانا یا نیمه رسانا در میآیند. به عبارت دیگر از آنجا که نانولوله ها در سطح مولکولی همچون یک باریکه سیمی در هم تنیده به نظر میرسند. اتم های کربن در قالب شش وجهی به یکدیگر متصل میشوند و این الگو های شش وجهی دیواره های استوانه ای را تشکیل میدهند که اندازه آن تنها چند نانومتر میباشد. زاویه پیچش نوعی نانو لوله، که به صورت زاویه بین محور الگوی شش وجهی آن و محور لوله تعریف میشود، رسانا یا نارسانا بودن را تعیین میکند. که تغییر شعاع نیز امکان بستن طول باند و عایق نمودن نانو لوله فلزی را فراهم میکند. پس میتوان گفت دو پارامتر اساسی که در این بین نقش اساسی بازی میکنند، یکی ساختار نانو لوله و دیگری قطر و اندازه آن است. از یک هادی به یک نیمه هادی و یا یک عایق قابل تغییر در سطح الکتریکی نانو لوله ها بسته به اینکه مولکول های انتقال بالستیک الکترون بدون اصطکاک از سطح نانو لوله های کربنی در سطح نانو لوله مناسب میباشد.



نانو لوله های چند جداره کربنی CNTs از بسیاری از لوله های یک جداره متحرک ساخته شده است. به دلیل یه های اضافی آنها ، لوله های چند جداره از انواع تک دیواره ای قوی تر هستند. CNTs ها انواع نانو لوله های مورد استفاده در ادوات نانو الکترونیک هستند. در نانو لوله ها هر سه اتم کربن قابلیت ذخیره یک یون لیتیم را دارند در حالی که در گرافیت هر شش اتم کربن توانایی ذخیره یک یون لیتیم را دارند. همچنین توانایی ذخیره انرژی در نانو لوله ها چند برابر حجم الکتروود های گرافیتی است. با عبور مایع از میان ک ف هایی از نانو لوله های کربنی تک جداره، و چند جداره ولتاژ الکتریکی ایجاد میشود. از این تکنیک برای ساخت حسگرهای جریان مایع برای تشخیص مقادیر بسیار اندک مایعات و نیز برای ایجاد ولتاژ در کاربرد های نانو - میکرو الکترونیکی نیز استفاده میشود. همچنین نشان داده شده است که مایعات با قدرت یونی با ولتاژ بیشتری تولید میکنند.

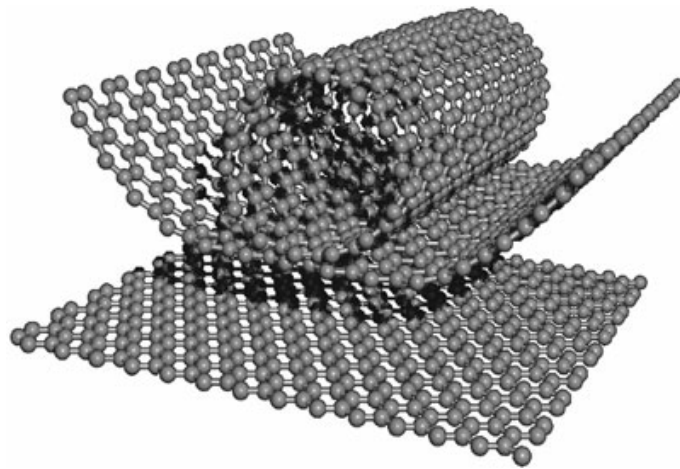
و (SWCNT برهمکنش مولکول های آروماتیک نانو لوله های SWCNTs)



مشخص است که نانولوله های کربنی برهمکنش قوی با مولکولهای را به صورت SWCNTs آروماتیک مانند سطح گرافیت دارند. میتوان الکترون بسط یافته در نظر گرفت که میتواند با دیگر π سیستم ارتباط برقرار π - π الکترون از طریق برهمکنش های π سیستم های

کند.

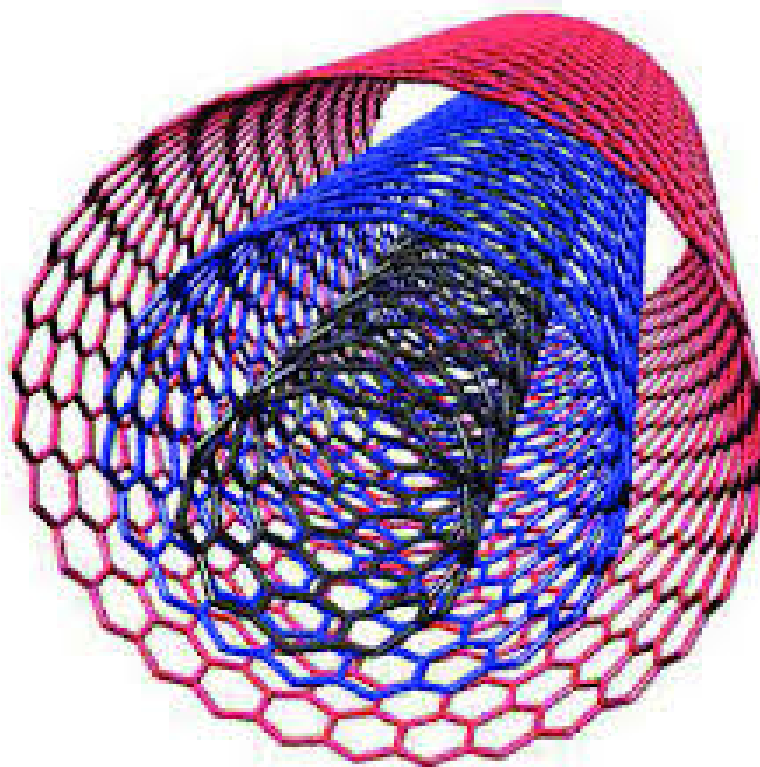
به عنوان نیروی جلو برنده ی اصلی برای π - π چنین برهمکنشهای و پلیمرهای آروماتیک روی سطح نانو لوله عمل میکند DNA جذب و π کشف چگونگی برهمکنش های انتخابی بین ترکیبات مزدوج جالب و مهم است. مونومرها و پلیمرهای آروماتیک معینی SWCNTs نیمه هادی یا فلزی را به طور انتخابی حل SWCNTs میتوانند در SWCNTs بین مولکول آروماتیک و سطح π - π نمایند. چسبیدن جهت انتخابی انجام میشود که این مسئله میتواند یکی از دلایل عملکرد انتخابی این مولکولهای آروماتیک باشد. عاملدار نمودن نیمه هادی با شیمی پورفیرین SWCNTs غیرکوانتوم انتخابی مشخص میشود. بعضی از مولکول های آروماتیک میتوانند کمپلکس Fluorene فلزی تشکیل دهند. مشتقات پلیمری SWCNTs انتقال بار با میتوانند به طور انتخابی به ترتیب نانولوله های ساختار پلیمر و ساختار حل هر دو به شدت تأثیرگذار هستند و در بعضی موارد منجر به انتخابگری بسیار با بر حسب قطر و زاویه ی کایرال برای متفرق کردن (acenes) میشوند. از مولکولهای تراکمی دیلز-آلدر نانولوله های دارای قطر زیاد استفاده کردند. در مورد انتخابگری متمرکز ($< 2.1 \text{ nm}$) مولکول های آروماتیک نانولوله های با قطر کم بود، در حالی که درانتخابگری مولکول های آروماتیک در ساختار بکار برده شده است ($\sim 6.1 \text{ nm}$) نانو لوله های دارای قطر زیادتر



نانولوله های کربنی نیمه هادی که قطر آنها بزرگتر باشد بازده بهتری با استفاده از SWCNTs در تجهیزات الکترونیک دارند. پراکندگی انتخابی از آروماتیک های بنزوئید متراکم را مانند پنتاسن، آنتراسن و تکثیر نموده اند. نانو لوله های کایرال بزرگ (quaternylene) مشتقات را میتوان با استفاده از آروماتیک های بنزوئید متراکم جدا نمود در حالی که نانولوله های کایرال کوچک با مشتقات پلی-پریلن جدا میشوند. و به بر آن با کنترل فرآیند پراکندگی- جداسازی، میتوان نانولوله فلزی و سپس نانولوله های نیمه هادی را جدا نمود ایزومرهای نوری نانولوله ها را با استفاده از مولکول های آروماتیک دیپورفیرین جداسازی نمودند ایزومرهای دیپورفیرین کایرال به عنوان موچینه های مولکولی عمل میکنند تا بتوانند به طور انتخابی راستگرد یا چپگرد را جداسازی نمایند. میزان انتخابگری SWCNTs کایرال با کنترل زاویه ی دو وجهی بین پورفیرینها بهینه میشود جالب است که مولکولهای دیپورفیرین میتوانند راستگرد یا چپگرد قبل از این کار، تفرق الکترونی با تصحیح خطا بودن شبکه ی را SWCNT و SWCNT در فضای نانو لوله های کربنی و SWCNT تشخیص دهند. یا میتوانند تا حدی انانتیومرهای را جدا کند. این کار باعث میشود که نانو مولکول های SWCNTs

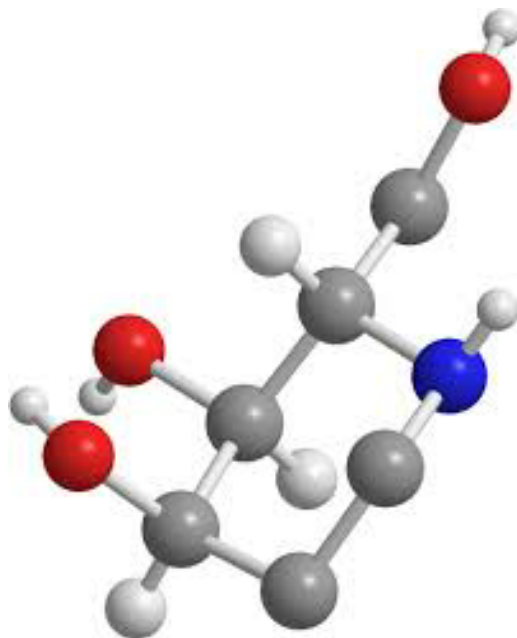
آروماتیک با ضریب اطمینان با تری جداسازی نانولوله های کایرال را انجام دهند.

روش شناسی شبیه سازی در نانو دینامیک مولکولی نانو لوله ها تک یه و چند یه (تحقیقات و طراحی)



تئوری، مدلسازی و شبیه سازی به عنوان یک ابزار طراحی پیشگویانه به طور وسیعی در تکثیر و ساخت مولکول های دینامیک نانو لوله های SWCNT و SWCNTs استفاده می شوند. روشهای عمومی که قادر به انجام شبیه سازیهای مولکولی چند مقیاسی/چند پدیده ای هستند برای طراحی نانو لوله های SWCNT و SWCNTs و سیستمها و ابزارهای جدید در مقیاس نانو توسعه خواهند یافت.

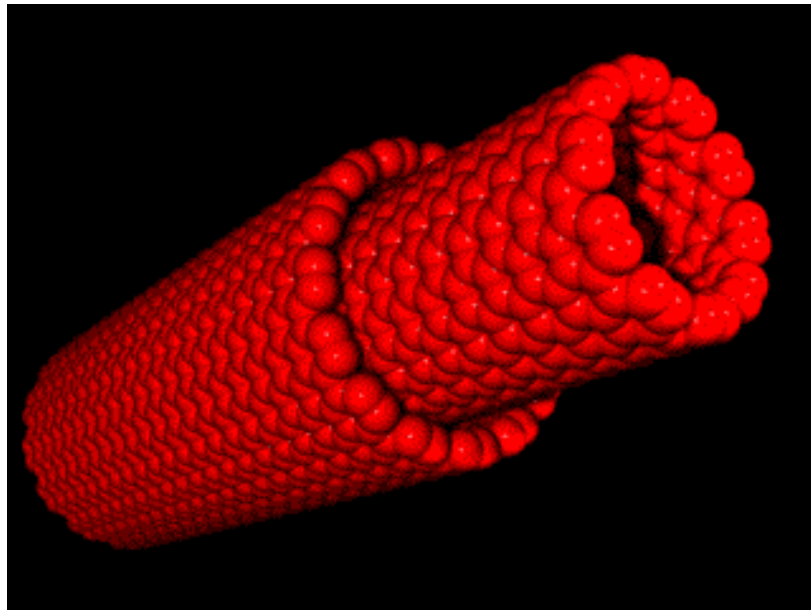
شبیه سازیهای نانو مولکولی دینامیک در زمینه‌های مختلفی نظیر سنسورهای زیستی بیوسنسورها، طراحی فیلترها، همچنین شناسایی دینامیک سیستم‌های پیچیده نانو لوله‌های تک‌تایی و چندتایی کمک خواهند نمود. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تعیینی یا (Deterministic): روشی است برای محاسبه مسیر حرکت اتمها یا مولکولها در سیستمهای چند اتمی بیش از ده اتم تا چندین میلیارد اتم استفاده می‌شود. شبیه‌سازی مونت کارلو (Stochastic): یک روش عددی است که با نمونه برداری با اهمیت از فضای حالت نانو مولکولی سعی در رسیدن به حالت نهایی تعادلی سیستم دارد. این روش براساس احتمال، پیکربندی سیستم مورد بررسی را به شرایط انرژی (مینیمم) نزدیک می‌سازد. دینامیک مولکولی Initio Ab: دینامیک مولکولی Initio Ab یا دینامیک مولکولی کوانتومی مسیر حرکت سیستم اتمی را بوسیله حل کردن معادلات شرودینگر و کسب اطلاعات در مقیاس زیر اتمی انجام می‌دهد.



روش شناسی شبیه سازی در نانو دینامیک مولکولی نانو لوله ها از هنر دستکاری مواد در مقیاس اتمی یا مولکولی و به ساخت نانو لوله ها و ادوات ؛ قطعات و لوازم دارای ابعاد میکرو یا نانو و دارای عملکرد در مقیاس نانو میباشد ؛ رشد و تکثیر نانو لوله ها و ادوات نانو که بر پایه دستکاری تک تک اتم ها و مولکول ها استوار است بدین منظور که بتوان ساختاری پیچیده را با خصوصیات نانو مولکولی متفاوت ایجاد نمود. در واقع بیشتر پدیده های جالب مشاهده شده در مقیاس نانو ناشی از اهمیت اثرات (مکانیک کوانتومی) و خواص موجی بودن در برابر خاصیت ذره ای بودن (و اثرات سطحی هستند. در روش شناسی شبیه سازی در نانو دینامیک مولکولی نانو لوله ها پیچیده ترین تاثیر اندازه ذرات تاثیر بر خواص مغناطیسی ماده است. یک ماده توده ای فرومغناطیسی با حوزه های مغناطیسی که هر کدام حاوی هزاران اتم هستند، شناخته می شود. در یک حوزه مغناطیسی جهت چرخش الکترون ها یکسان است، اما حوزه های مغناطیسی متفاوت، جهات چرخش متفاوتی دارند. تغییر فاز مغناطیسی وقتی رخ می دهد که یک میدان مغناطیسی بزرگ، تمام حوزه های مغناطیسی را یک جهت کند. به عنوان مثال در مورد نانو ذرات ، حوزه های مغناطیسی مشخصی دیده نمی شود. بنابراین تصور می شود که در ساختار نانو مولکول و مواد سیستم های ساده تری وجود خواهد داشت ؛ ذرات مغناطیسی کوچک و حتی جامدات غیر مغناطیسی با اندازه دانه

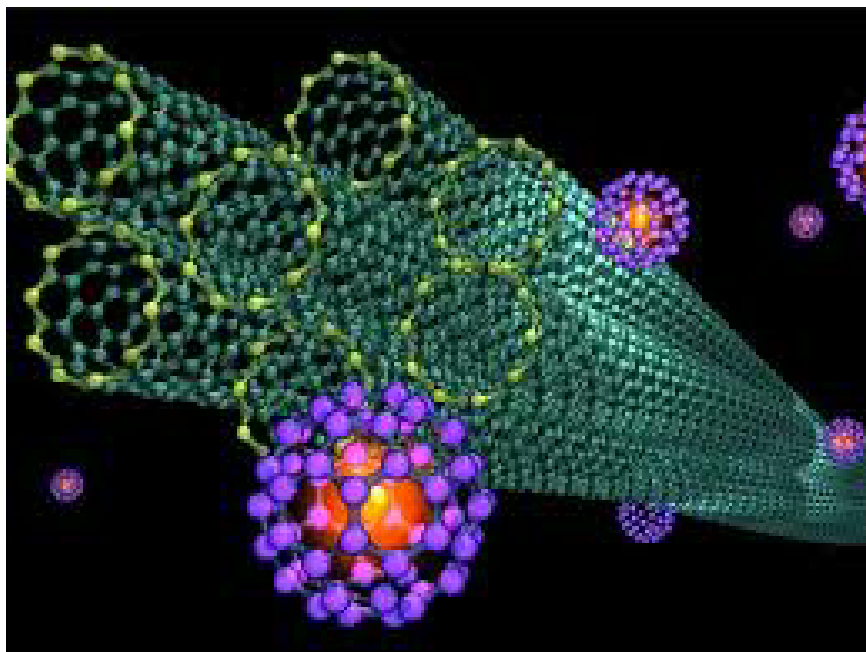
کوچک ، نوع جدیدی از خواص مغناطیسی را نشان می دهند. این خواص متأثر از خاصیت کوانتومی اندازه ذرات است .

تخلیه قوس الکتریکی در تولید نانو لوله های کربنی الکترونیکی



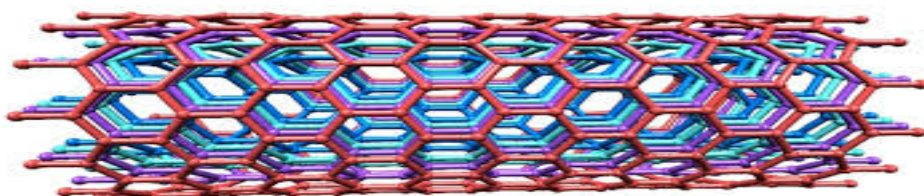
در علم نانو الکترونیک از روش قوس الکتریکی برای تولید نانولوله های کربنی استفاده کرد. در این روش از یک منبع تقریباً کم ولتاژ برای ایجاد جرقه بین دو الکترود استفاده می شود . کاتالیست فلزات واسطه به منظور تسریع تولید نانولوله های کربنی به آند گرافیتی اضافه میگردد. در حین ایجاد جرقه، جریان الکتریکی

بزرگی (بین 51 تا 001) آمپر) از میان دو الکتروود که تقریباً در فاصله یک میلیمتری از هم درون اتاقک قرار دارند، عبور می‌کند. سپس نانولوله های کربنی به همراه دستهای از محصولات جانبی تولید شده روی کاتد جمعآوری می‌گردند. کنترل این روش به سبب دمای بالای آن (حدود 3011 کلوین) سخت است. همچنین برای اجرای این روش بایستی محیط اطراف دستگاه خلاء بوده و در فشار پایینی بین 001 تا 301 تور قرار داشته باشد. این فرآیند مانند سایش لیزری، در محیط یک گاز بی اثر (معمولاً هلیوم یا آرگون انجام می‌شود. نقش گاز در این فرآیند، پایدار نمودن جرقه الکتریکی است که منجر به فراهم شدن شرایط رسوب دهی می‌گردد. پایداری قوس الکتریکی و شدت جریان اعمالی از عوامل موثر بر بازدهی تولید نانولوله های کربنی با این روش است. از عیوب این روش می‌توان به پرهزینه بودن آن، شدت حرارت با و تولید مواد جانبی ناخواسته مانند ذرات گرافیتی اشاره کرد. نانولوله های تولیدی به این روش به شدت طنابی شکل و چند جداره هستند. در نانو الکترونیک از محیط نیتروژن مایع برای تولید نانولوله کربنی با روش قوس الکتریکی استفاده شد. محیط مایع منجر به ایجاد یک محیط عاری از اکسیژن برای انجام واکنش و خنک سازی محصولات می‌شود. بنابراین با استفاده از محیط مایع، این روش ارزان تر و مقرون به صرفه تر می‌گردد.



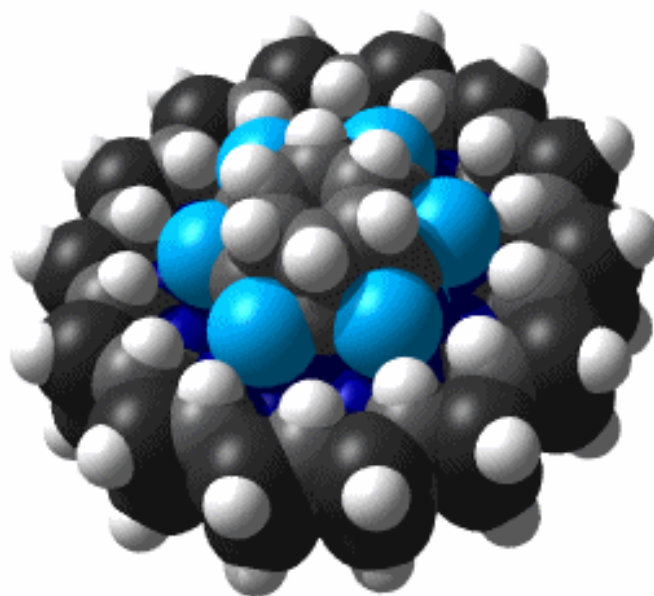
نانو لوله های کربنی در تولید نانو ترانزیستور ها در علم نانو الکترونیک استفاده میشود و نانو ترانزیستور ها در تولید نانو چیپ ها نقش کلیدی دارد. در نانو الکترونیک نانولوله کربنی تک دیواره به جای چند دیواره تولید می شود. بازدهی آن به نوع کاتالیزور فلزی بستگی دارد. قطر این نانولوله ها بین 5 تا 01 نانومتر است و طول آنها تا صدها میکرومتر رشد می کند. شایان ذکر است که انتهای همه نانولوله های تک دیواره به صورت کامل با کالک نیم کره ای بسته می شود. نانولوله های کربنی تک دیواره تولید شده با این روش خالصتر از نانولوله های تولید شده با سایر روش ها هستند.

تأثیر دمای واکنش بر اندازه نانو ذرات گرافن و جریان پذیری نامحدود در نانو لوله های کربنی (CNT و CNTs)



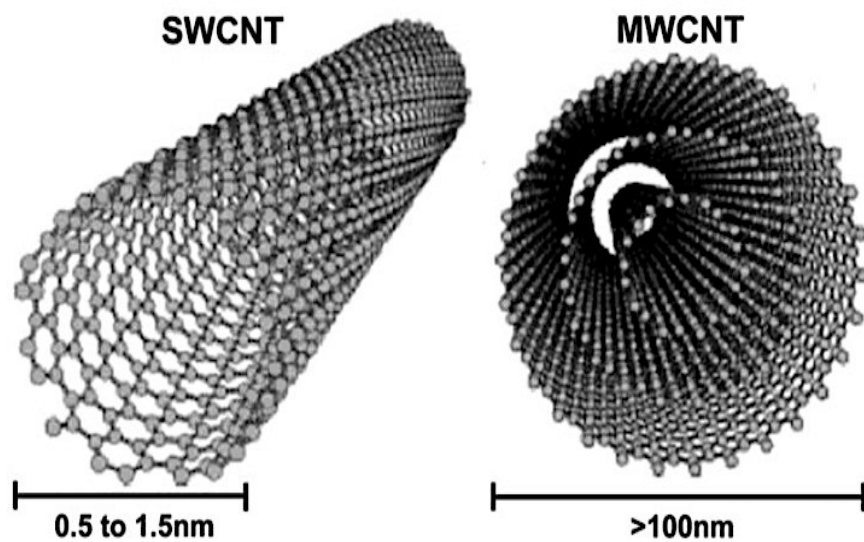
تأثیر دمای واکنش بر اندازه نانو ذرات گرافن و جریان پذیری نامحدود در نانو لوله های کربنی CNT و CNTs دمای واکنش در تعیین اندازه متفاوت میباشد و توزی اندازه ذرات نقش چشمگیری ایفا میکند. یک دمای واکنش مناسب، باعث تولید نانو بلورهایی با اندازه باریک میشود. در چنین دمایی، مراحل هسته زایی و رشد به صورت مجزا اتفاق میافتد و حتی میتواند در شروع مرحله رشد تأخیر اندازد، به این گونه که بعد از تشکیل هسته ها انجام گیرد به طور کلی، افزایش دمای واکنش، سرعت واکنش احیا را افزایش میدهد. اما در مورد تاثیرات دما بار ریختن و اندازه ذرات نانو مواد

و دمای بهینه برای تولید نانوذرات الکترو شیمیایی با روش احیای شیمیایی را به صورت تجربی برای شرایط مختلف تولید به دست آورد. در مورد سانتز نانوذرات روش احیای شیمیایی، که با افزایش دمای واکنش، اندازه نانو ذرات الکتروشیمیایی افزایش یافته و ذرات نا یک نواخت به دست آمده است. این رفتار در دمای پایین تر، سرعت رشد هسته ها کمتر است و اندازه ذرات تولید شده کوچکتر، و یکنواختی ذرات نیاز بیشتر است. تأثیرات دما را بار احیای شیمیایی نانو مواد بررسی و تاثیر بر ذرات الکتروشیمیایی که دما تأثیرات چشمگیری بر شکل، اندازه و ریخت نانو ذرات دارد. در دماهای پایین (صفر درجه) سرعت واکنش بسیار کم میباشد و فرایند کامل شدن واکنش احیا ساعتها طول میکشد. در دمای بین 10 تا 55 درجه سلسیوس، با افزایش دما سرعت واکنش افزایشی افتاده و اندازه ذرات تولیدی نیز بزرگتر میشود.



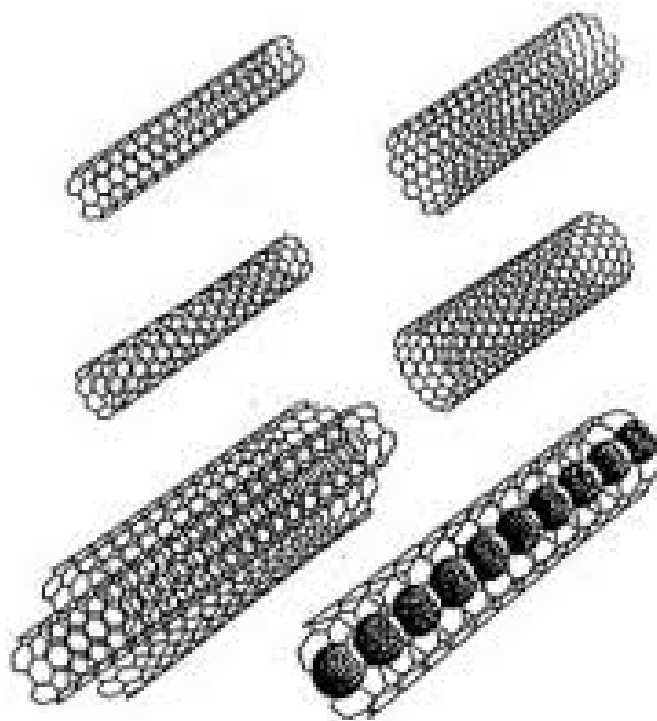
با افزایش دمای واکنش اندازه ذرات تولیدی کاهش یافته است .
پدیده افزایش ساعت هسته زایی متناسب با افزایش دما شده که
باعث کاهش اندازه ذرات تولیدی میشود . واکنش احیای الکترو
شیمیایی اندازه نانو ذرات تولیدی در دمای 09 درجه سلسیوس
نسبت به ذرات تولیدی در 59 درجه سلسیوس به ذرات کوچکتر
است. تأثیر زمان واکنش بر اندازه نانو ذرات زمان واکنش نیز یکی
از پارامترهای مهم در کنترل اندازه و اندازه محصول نهایی است.
راهبرد واکنش در مراحل اولیه رشد، میتوان نانو ذرات الکترو
شیمیایی کوچکتری به دست آورد. راهبرد به بازده کلی واکنش
آسیب میزند، زیرا پایش ماده در این حالت به طور جزی به نانو
ذرات الکتروشیمیایی تبدیل شده است. زمانی که پیش ماده به
محلول واکنش اضافه میشود ، ب فاصله هسته زایی شروع میشود
و نانو بلورهای کوچک تشکیل می شود که موجب تغییر مشخص در
رنگ محلول میشود. با گذشت زمان، هسته های تولید شده به هم
میچسبند و ذرات بزرگتری تشکیل میدهند.

ساختارهای ژئومتری (SWCNT) در تهیه ی یک نانو لوله ی کربنی



ساختار ژئومتری (SWCNT) در تهیه ی یک نانو لوله ی کربنی با پیچش بخشی از صفحه ی گرافن (مربع_مستطیل نمایانگر یک سلول واحد لوله نشده) است که با بردار انتقال Ch مشخص میشود. پس از نوع سنتزی که در دو روش مذکور انجام شده است. اگرچه ت شهایی در جهت کنترل خواص و کیفیت CNTs در فرآیند CVD انجام گرفته است ولی هیچکدام از این روش ها نمیتواند تعداد زیادی SWCNTs مشابه و یکسان ایجاد نماید و تک گونه ایجاد نمیگردد. در

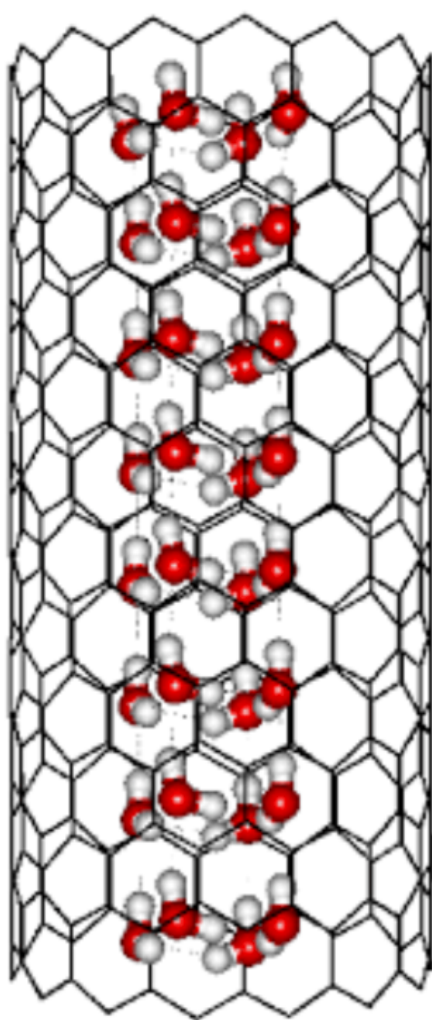
حال حاضر به نظر میرسد که نسبت به روشهای کنترل در حین سنتز، روشهای جداسازی پس از سنتز را بهتر بتوان تجاری سازی نمود. البته اگر روشهای جداسازی در حین سنتز منجر به تولید تک گونه به میزان زیاد گردد، ارزان قیمت تر خواهد بود. روشهای جداسازی، از دی الکترو فورز با جریان متناوب و اکسیداسیون ناشی از جریان الکتریکی جهت غنی سازی نانو لوله های فلزی پیشرفته یا نیمه هادی، استفاده نموده اند. در جداسازی SWCNTs بر اساس اختلاف ساختاری و هدایت آنها از طریق روشهای مختلف شیمیائی انجام شده است، روشهای مختلف برای ایجاد گونه های مختلف SWCNTs بحث میشود و روشهای جداسازی بعد و حین سنتز در یک گروه قرار میگیرند ولی تمرکز روی روشهای جداسازی شیمیائی است.



تفاوت‌های ساختاری موجود بین CNTs و CNT را میتوان به صورت صفحات گرافیتی با شبکه‌ی هگزاگونی که به صورت استوانه لوله شده‌اند. نانو لوله‌ها با تعداد یه‌هایی که دیواره‌های استوانه‌ای آنها را می‌سازند مشخص میشوند؛ نانولوله‌های کربنی تک دیواره (SWCNTs) و نانولوله‌های کربنی چند دیواره (MWCNTs) و SWCNT از یک صفحه‌ی گرافن با اندازه مشخص به دست آمده است. با توجه به تقارن استوانه‌ای، براساس شکل استوانه‌ای (تنها میتوانیم آن را در یک جهت لوله کنیم تا 2 اتم در امتداد هم قرار گیرند. برای توصیف ساختار SWCNT، دو پارامتر به کار برده میشوند. یکی Ch است که از اتم اصلی شروع بردار کایرال شده به سمت اتم بعدی جهت گیری مینماید و به آن بردار لوله شدن نیز گفته میشود و طول آن معادل محیط دایره‌ی نانو لوله است. SWCNTs کایرال از لحاظ نوری فعال هستند و میتوانند دو جهتگیری غیر معادل مارپیچی داشته باشند. فرآیند لوله شدن میتواند هم از با و هم از زیر صفحه‌ی گرافن انجام شود. این دو لوله تصاویر آینه‌ای یکدیگر خواهند بود و در این حالت، صفحه‌ی گرافن صفحه‌ی آینه است. این دو حالت، ایزومرهای چپ گرد (M) و راستگرد (P) را ایجاد می‌نمایند. در مورد نانولوله‌های کایرال، این صفحه‌ها، صفحه‌ی انعکاس نامیده میشود و دو نانو لوله معادل هم هستند.

نانو لوله های کربنی

Carbon Nano Tube



نویسنده : دکتر افشین رشید