

صلى الله عليه وسلم



دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی

دانشکده مهندسی عمران

گرایش خاک و پی

پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

محاسبه خواص مکانیکی کامپوزیت تقویت شده با

نانوتیوب کربن

استاد راهنما

دکتر حسن قاسم زاده

نگارش

عصمت اکبری

شهریور ۸۹

سپاس خداوند غنی و جل را
که این جهان را خلق نمود

و در دل هر ذره

از آن

جهانی دیگر به

همان عظمت

قرار داد.

تقدیم به

پدر و مادر عزیزم

با تشکر فراوان از استاد محترم

آقای دکتر قاسم زاده

چکیده

هدف از انجام این پایان‌نامه پیش‌بینی مقاومت فشاری کامپوزیت سیمان تقویت شده با نانوتیوب کربن به روش تحلیلی می‌باشد. در ابتدا روش‌های مدل‌سازی نانوکامپوزیت‌ها برای تعیین خواص آنان شامل روش‌های مکانیک مولکولی و روش‌های مکانیک محیط پیوسته بررسی شده و نقاط ضعف و قوت آنان بیان گردیده است. سپس در این پایان‌نامه از روش مکانیک محیط پیوسته استفاده شده است. برای ساده کردن محاسبات ابتدا فرض می‌کنیم که نانوتیوب‌های کربن داخل سیمان به صورت منظم تک‌جهته و همگن چیده شده‌اند. المانی به عنوان حجم پایه معرف از این کامپوزیت انتخاب شده و بوسیله قوانین مقاومت مصالح و روابط الاستیسیته تحلیل شده و معیار گسیختگی ون میسر بر آن اعمال می‌گردد. در ادامه نتایج این تحلیل به کامپوزیت سیمان تقویت شده با چیدمان تصادفی الیاف تعمیم داده می‌شود. برای تحلیل حجم پایه معرف در یک حالت نانولوله کربن به صورت ایزوتروپ کامل و در حالت دیگر به صورت ایزوتروپ جانبی فرض شده است. در حالت نانوتیوب با ایزوتروپ جانبی برای لحاظ کردن توزیع تصادفی نانولوله‌ها در سیمان، ضریب پخش تصادفی بدست آمد. نتایج بدست آمده از این دو حالت با هم و همچنین با داده‌های آزمایشگاهی موجود مقایسه گردیده است.

کلمات کلیدی: نانولوله کربن؛ ماتریس سیمان؛ حجم پایه معرف؛ توزیع تصادفی الیاف؛ روش مکانیک محیط پیوسته.

فهرست مطالب

فصل اول: پیشگفتار.....	۱
۱-۱- مقدمه	۱
۱-۲- آشنایی با نانولوله‌های کربن (CNTs).....	۱
۱-۲-۱- ساختارهای کربن	۳
۱-۲-۲- انواع نانولوله‌های کربن	۵
۱-۲-۳- ساختار نانولوله کربن	۷
۱-۲-۴- روش‌های تولید نانولوله کربن	۹
۱-۲-۵- خالص‌سازی نانولوله‌های کربنی	۱۴
۱-۲-۶- خواص نانولوله‌های کربن	۱۴
۱-۲-۷- کاربرد نانولوله‌های کربن	۱۷
۱-۳- هدف از انجام پایان‌نامه	۲۱
۱-۴- ساختار پایان‌نامه	۲۳
فصل دوم: کامپوزیت‌های نانوتیوب کربن و روش‌های مدل‌سازی آن‌ها	۲۴
۲-۱- مقدمه	۲۴
۲-۲- تعریف نانوکامپوزیت	۲۴
۲-۳- اجزای نانوکامپوزیت	۲۶
۲-۳-۱- نانولوله کربن	۲۶

۲۸	 ماتریس ۲-۳-۲
۲۸	 سطح مشترک ۲-۳-۳
۳۰	 روش‌های فعالسازی ۲-۳-۳-۱
۳۱	 اندرکنش نانوتیوب و ماتریس در بارهای فشاری ۲-۴
۳۱	 بار فشاری محوری ۲-۴-۱
۳۴	 بار فشاری شعاعی (جانبی) ۲-۴-۲
۳۸	 اندرکنش نانوتیوب و ماتریس در بارهای کششی ۲-۵
۴۰	 محاسبه طول مهاری نانوتیوب‌ها ۲-۵-۱
۴۱	 تکنیک‌های مدل‌سازی برای تعیین خواص نانوکامپوزیت‌ها ۲-۶
۴۳	 روش‌های پیوسته ۲-۶-۱
۴۴	 مدل‌سازی پیوسته تحلیلی ۲-۶-۱-۱
۴۶	 مدل‌سازی پیوسته عددی ۲-۶-۱-۲
۴۷	 مدل‌سازی مولکولی ۲-۶-۲
۴۷	 روش دینامیک مولکولی (MD) ۲-۶-۲-۱
۴۹	 روش مونت کارلو (MC) ۲-۶-۲-۲
۴۹	 روش Ab Initio ۲-۶-۲-۳
۵۰	 مروری بر تحقیقات پیشین ۲-۷
۵۰	 تحقیقات آزمایشگاهی ۲-۷-۱
۶۸	 تحقیقات تئوری ۲-۷-۲

۸-۲- نتیجه‌گیری ۷۱

فصل سوم: تعیین مقاومت فشاری کامپوزیت سیمان تقویت شده با نانوتیوب کربن به روش پیوسته

تحلیلی ۷۲

۳-۱- مقدمه ۷۲

۳-۲- حجم پایه معرف و روش‌های تحلیل آن ۷۳

۳-۳- تعیین مقاومت فشاری کامپوزیت سیمان تقویت شده با چیدمان منظم الیاف نانوتیوب کربن ۷۵

۳-۳-۱- تحلیل حجم پایه معرف ۷۶

۳-۳-۱-۱- اعمال معیار گسیختگی ون میسنز ۸۰

۳-۳-۲- تعیین مقاومت فشاری کامپوزیت سیمان تقویت شده با چیدمان منظم الیاف ۸۲

۳-۴- تعیین مقاومت فشاری کامپوزیت سیمان تقویت شده با نانوتیوب کربن با چیدمان تصادفی الیاف ۸۳

۳-۵- نتایج آزمایشگاهی کامپوزیت سیمان تقویت شده با نانوتیوب کربن ۸۵

۳-۶- مقایسه نتایج آزمایشگاهی و رابطه تحلیلی بدست آمده ۸۸

۳-۷- بحث و بررسی نتایج ۸۹

۳-۸- اثر پارامترهای مختلف بر مقاومت فشاری کامپوزیت سیمان/ نانوتیوب کربن ۹۱

۳-۸-۱- اثر درصد وزنی نانوتیوب کربن ۹۱

۳-۸-۲- اثر مقاومت فشاری ماتریس سیمان ۹۲

۳-۹- نتیجه‌گیری ۹۳

فصل چهارم: مقاومت فشاری کامپوزیت سیمان تقویت شده با نانوتیوب کربن با فرض ایزوتروپ

جانبی بودن CNT ۹۴

۴-۱- مقدمه	۹۴
۴-۲- تحلیل حجم پایه معرف	۹۴
۴-۲-۱- اعمال معیار گسیختگی ون میسر	۹۶
۴-۲-۲- تعیین مقاومت فشاری کامپوزیت سیمان تقویت شده با چیدمان منظم الیاف	۱۰۱
۴-۳- تعیین مقاومت فشاری کامپوزیت سیمان تقویت شده با چیدمان تصادفی الیاف نانوتیوب کربن	۱۰۱
۴-۴- مقایسه رابطه تحلیلی بدست آمده با نتایج آزمایشگاهی	۱۰۳
۴-۵- اثر پارامترهای مختلف بر مقاومت فشاری کامپوزیت سیمان/ نانوتیوب کربن	۱۰۵
۴-۵-۱- اثر فشار بحرانی کماتش	۱۰۵
۴-۵-۲- اثر درصد وزنی نانوتیوب کربن	۱۰۵
۴-۵-۳- اثر مدول یانگ شعاعی نانوتیوب کربن	۱۰۶
۴-۶- نتیجه گیری	۱۰۷
فصل پنجم: نتیجه گیری و پیشنهادات	۱۰۹
۵-۱- نتیجه گیری	۱۰۹
۵-۲- پیشنهاداتی برای تحقیقات بیشتر	۱۱۰

فهرست اشکال

- تصویر 1-1: تصویر شماتیک نانولوله‌های کربن ۲
- تصویر 1-2: الف- ساختارهای کربن (گرافیت) ۳
- تصویر 1-2: ب- ساختارهای کربن (الماس) ۴
- تصویر 1-2: ج- ساختارهای کربن (فلورین C60) ۴
- تصویر 1-2: د- ساختارهای کربن (نانولوله‌های کربن) ۴
- تصویر 1-3: الف- نانوتیوب کربن تک‌جداره (SWCNT) ۶
- تصویر 1-3: ب- نانوتیوب کربن چندجداره (MWCNT) ۶
- تصویر 1-4: تعیین ساختار نانولوله کربن ۷
- تصویر 1-5: انواع نانولوله‌ی کربن ۸
- تصویر 1-6: ساخت نانوتیوب کربن تک‌جداره و چندجداره به روش تخلیه قوس الکتریکی ۱۰
- تصویر 1-7: شماتیک تجهیزات روش تبخیر لیزری ۱۱
- تصویر 1-8: نمونه‌ای از نانوتیوب ساخته شده با روش CVD ۱۲
- تصویر 1-9: شکل شماتیک کوره‌ی واکنش در روش CVD ۱۲
- تصویر 1-۱۰: دستگاه مورد استفاده در روش انرژی خورشیدی ۱۳
- تصویر 1-۱۱: دستگاه مورد استفاده در روش عملیات حرارتی ۱۳
- تصویر 2-1: کمانش موضعی و کلی نانولوله کربن در ماتریس پلیمر ۳۱
- تصویر 2-2: مدل تحلیلی در نظر گرفته شده برای کنترل کمانش نانوتیوب در ماتریس ۳۲
- تصویر 2-3: کمانش الاستیک MWCNT تحت فشار شعاعی ۳۴
- تصویر 2-4: رفتار ماتریس‌های شبه‌ترد مسلح شده به الیاف (نانولوله کربن) در کشش پس از وقوع ترک ۳۹

- تصویر 2-5: پل زنی نانوتیوب در ماتریس ترد بعد از وقوع ترک در ماتریس ۳۹
- تصویر 2-6: رفتارهای گوناگون نانوتیوب‌ها پس از ترک خوردگی ۴۰
- تصویر 2-7: مقیاس‌های طولی و زمانی مختلف استفاده شده در تعیین خواص مکانیکی کامپوزیت‌ها ۴۲
- تصویر 2-8: دیاگرام تکنیک‌های مدل‌سازی مواد ۴۳
- تصویر 2-9: مدل پیوسته معادل کامپوزیت PmPV/CNTs ۴۸
- تصویر 2-10: الف) مقاومت فشاری- ب) مقاومت خمشی نمونه‌های آزمایش ۵۳
- تصویر 2-11: سطح گسیخته شده خمیر سیمان با نانوتیوب‌های قابل مشاهده که بین ترک‌ها پل زنی کرده‌اند ۵۳
- تصویر 2-12: مقاومت فشاری نمونه‌های خمیر سیمان که نسبت آب به سیمان الف) 0/3 و ب) 0/4 دارند ۶۰
- تصویر 2-13: مقاومت خمشی نمونه‌های خمیر سیمان که نسبت آب به سیمان الف) 0/3 و ب) 0/4 دارند ۶۱
- تصویر 2-14: مقاومت الکتریکی حجمی دو نوع کامپوزیت بعد از ۲۸ روز مراقبت ۶۳
- تصویر 2-15: منحنی بار- تغییر مکان کامپوزیت‌های با ماتریس سیمان. **Error! Bookmark not defined.** ۷۳
- تصویر 3-1: انواع حجم پایه معرف ۷۳
- تصویر 3-2: نمایی از حجم پایه معرف استفاده شده در این پایان‌نامه ۷۵
- تصویر 3-3: سطح مقطع حجم پایه معرف ۷۸
- تصویر 3-4: حالت اتفاقی استقرار نانوتیوب‌ها در ماتریس ۸۴
- تصویر 3-5: اثر درصد وزنی نانوتیوب کربن (نسبت به وزن کل ماتریس سیمان) بر روی مقاومت فشاری نانوکامپوزیت سیمان ۹۱
- تصویر 3-6: اثر مقاومت فشاری ماتریس سیمان بر روی مقاومت فشاری نانوکامپوزیت سیمان ۹۲

تصویر 3-۷: اثر نسبت پواسون نانوتیوب کربن و ماتریس سیمان بر روی مقاومت فشاری نانوکامپوزیت

سیمان.....Error! Bookmark not defined.

تصویر 4-۱: بارگذاری حجم پایه معرف۹۸

تصویر 4-۲: اثر فشار بحرانی کمانش نانوتیوب کربن بر روی مقاومت فشاری نانوکامپوزیت سیمان برای

مدول‌های مختلف شعاعی نانوتیوب (E_{rf})۱۰۵

تصویر 4-۳: اثر درصد وزنی نانوتیوب کربن (بر حسب وزن کل ماتریس سیمان) بر روی مقاومت

فشاری نانوکامپوزیت‌های سیمانی برای مقاومت‌های فشاری مختلف ماتریس سیمان (σ_{ym})۱۰۶

تصویر 4-۴: اثر مدول الاستیک شعاعی نانوتیوب کربن بر روی مقاومت فشاری نانوکامپوزیت سیمان

برای فشارهای مختلف کمانش نانوتیوب ($p_{crit, f}$)۱۰۷

تصویر 4-۵: اثر نسبت پواسون نانوتیوب کربن و ماتریس سیمان بر روی مقاومت فشاری نانوکامپوزیت

سیمان.....Error! Bookmark not defined.

فهرست جداول

جدول 1-1: خواص فیزیکی نانولوله کربن	۱۵
جدول 1-2: مقایسه خواص مکانیکی نانولوله‌های کربن با مصالح دیگر	۱۶
جدول 2-1: بار کمانشی نانوتیوب در ماتریس بر اساس آزمایشات در حالتی که $E_m = 2 \text{ GPa}$	۳۴
$E_{NT} = 1/2$ و $v = 0/25$	
جدول 2-2: ترکیب نمونه‌های مختلف	۵۱
جدول 2-3: مخلوط آب، MWCNTs خالص و پلیمر اسید پلی اکریلیک	۵۵
جدول 2-4: مخلوط آب، MWCNTs خالص و سمغ عربی	۵۵
جدول 2-5: مخلوط آب، پلیمر اسید پلی اکریلیک و MWCNTs عاملی‌ساز شده بوسیله گروه	
COOH	۵۵
جدول 2-6: ترکیب هر نمونه	۵۶
جدول 2-7: مشخصات نانوتیوب‌های کربن مورد استفاده در آزمایش	۶۲
جدول 2-8: نتایج مقاومت فشاری و خمشی نمونه‌های آزمایش	۶۳
جدول 2-9: مشخصات نانوتیوب کربن چندجداره استفاده شده در آزمایش	۶۳
جدول 2-10: مقاومت فشاری و خمشی خمیر سیمان با و بدون MWCNTs	۶۴
جدول 2-11: مشخصات نانوتیوب‌های کربنی چندجداره مورد استفاده در آزمایش	۶۶
جدول 2-12: مشخصات الیاف کربن مورد استفاده در آزمایش	۶۶
جدول 2-13: نتایج مقاومت فشاری و خمشی نمونه‌های آزمایش	۶۷
جدول 2-14: پژوهش‌های پیشین در زمینه مدل‌سازی نانوکامپوزیت‌ها	۶۸
جدول 3-1: خواص ماتریس سیمان	۸۵
جدول 3-2: مقاومت نمونه‌ها بعد از ۲۸ روز مراقبت	۸۶

جدول 3-3: خواص نانوتیوب‌های کربن.....	۸۶
جدول 3-4: خواص ماتریس سیمان خاکستر بادی.....	۸۶
جدول 3-5: نسبت ترکیبات مختلف.....	۸۷
جدول 3-6: مقاومت نمونه‌ها بعد از ۲۸ روز مراقبت	۸۷
جدول 3-7: خواص ماتریس سیمان پرتلند.....	۸۷
جدول 3-8: مقاومت نمونه‌ها بعد از ۲۸ روز مراقبت	۸۸
جدول 3-9: مقاومت فشاری نانوکامپوزیت‌های سیمان /CNT، (MPa).....	۸۸
جدول 4-1: مقایسه مقاومت فشاری نانوکامپوزیت‌های سیمان / CNT بدست آمده از روش‌های	
مختلف، (MPa).....	۱۰۳

فهرست علائم و اختصارات

$\vec{C}_h$	بردار کایرال
(n,m)	شاخص کایرال
$(\vec{a}_1, \vec{a}_2)$	بردارهای واحد شبکه شش ضلعی دوبعدی گرافن
θ	زاویه کایرال
(n,0)	نانولوله کربن تک جداره زیگزاگی
(n,n)	نانولوله کربن تک جداره صندلی راحت
(n,m)	نانولوله کربن تک جداره کایرال
ν	نسبت پواسون
m	مدول برشی در زاویه $\pi/4$ از محور اصلی
μ	مدول برشی طولی
k	مدول بالک کرنش صفحه‌ای
u_r	جابجایی شعاعی
u_θ	جابجایی مماسی
σ_r	تنش شعاعی
σ_θ	تنش مماسی
τ	تنش متوسط جداری میان نانوتیوب و ماتریس
ε_z	کرنش طولی

$\bar{S}$	مقاومت فشاری نانوکامپوزیت سیمان در حالت چیدمان منظم الیاف
S_c	مقاومت فشاری نانوکامپوزیت سیمان در حالت چیدمان تصادفی الیاف
α	ضریب پخش تصادفی الیاف نانولوله کربن
b	شعاع خارجی حجم پایه معرف
d	قطر نانوتیوب کربن
w_f	درصد وزنی نانوتیوب کربن در کامپوزیت
φ	درصد حجمی نانوتیوب کربن در کامپوزیت
ρ_f	چگالی نانوتیوب کربن
L	طول نانوتیوب کربن
a	شعاع نانوتیوب کربن
E_f	مدول یانگ نانوتیوب کربن
σ_{yf}	مقاومت فشاری نانوتیوب کربن
σ_{ym}	مقاومت فشاری ماتریس
E_m	مدول الاستیک ماتریس
ρ_m	چگالی ماتریس

فصل اول: پیشگفتار

۱-۱- مقدمه

فناوری نانو که یک رویکرد جدید در تمامی رشته‌هاست، توانایی تولید مواد، ابزار و سیستم‌های نوین را با دستکاری در سطوح اتمی و مولکولی دارد. امروزه حوزه کاربردی این فناوری به تمامی علوم کشیده شده است. گستره‌ی کاربرد آن در علوم پزشکی، فناوری زیستی، مواد، فیزیک، مکانیک، برق، الکترونیک و شیمی به حدی است که می‌توان از آن به عنوان یکی از انقلاب‌های بزرگ علمی دنیا نام برد. این فناوری روشی نو برای حل مشکلات و پاسخگویی به بسیاری از سؤالات مطرح در علوم مختلف ارائه می‌کند که تاکنون بشر موفق به رفع و یا پاسخ دادن به آن‌ها نشده است. به همین دلیل از این فناوری به عنوان انقلاب صنعتی و علمی قرن بیست و یکم یاد می‌کنند. در واقع نانو تکنولوژی یک شاخه جدید علم نیست بلکه یک رویکرد تازه به علوم مختلف است.

یکی از ساختارهای استثنائی که در نانو تکنولوژی بکار گرفته می‌شود نانوتیوب کربن می‌باشد که دارای خواص مطلوب مکانیکی، الکتریکی و مقاومت شیمیایی قابل ملاحظه‌ای است. در ادامه به شرح مختصری از این ماده پرداخته می‌شود.

۱-۲- آشنایی با نانولوله‌های کربن (CNTs)

نانولوله‌های کربنی سازه‌هایی در مقیاس اتمی و با یک ساختار منحصر به فرد از اتم‌های کربن می‌باشند که بدلیل ویژگی خاص آن‌ها به کربن جادویی نیز معروفند (۱). کشف نانولوله‌های کربنی را در سال ۱۹۹۱ به سومیو ایجیما نسبت می‌دهند که در حین مطالعه روی سطوح الکترودهای گرافیتی

مورد استفاده در تخلیه قوس الکتریکی متوجه آنها شد (2). این مواد در واقع تک ورقه های گرافیتی (گرافن) هستند که به شکل استوانه ای پیچیده شده اند. قطر نانولوله های کربنی در حدود چند نانومتر و طولشان در حدود چند میکرومتر است که شکل شماتیک آنها در تصویر 1-1 آمده است.

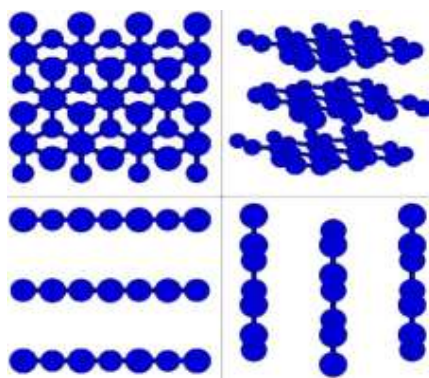


تصویر 1-1: تصویر شماتیک نانولوله های کربن

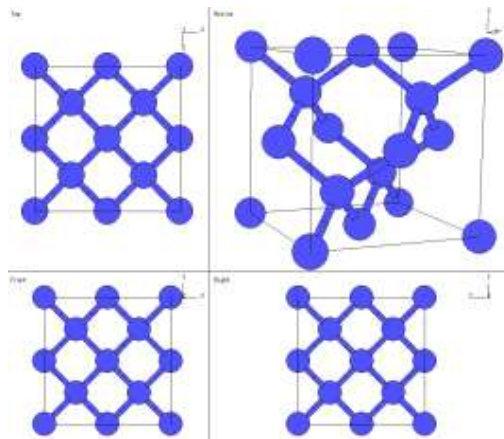
این ماده که مستحکم تر از فولاد، سبک تر از آلومینیوم و رساناتر از مس است کاربردهای زیادی دارد که مهمترین آنها شامل الکترونیک، حسگرها، مواد و مصالح ساختمانی، فیلرها (پرکننده ها) و ساخت انواع کامپوزیت های مستحکم با خواص ویژه است. با وجود متغیر بودن نتایج آزمایش های تعیین مشخصات مکانیکی نانولوله های کربنی، این نتایج نشان از عالی بودن خواص مکانیکی آنها دارد. بطور مثال مقاومت کششی نانولوله ها $100-240$ GPa، مدول یانگ آنها 1000 GPa، کرنش الاستیک آنها 5% و کرنش نهایی آنها نیز $20-30\%$ برآورد شده است. با مقایسه این مواد با مصالح ساختمانی نظیر فولاد و بتن به مشخصات فوق العاده نانولوله های کربن پی می بریم. به گونه ای که نانو لوله با داشتن مقاومت کششی 50 تا 100 برابر فولاد، وزنی در حدود 17% آن دارد (3). در جای دیگر آقای Yu و همکارانش (4) مقاومت کششی نانولوله های چند جداره با طول و قطر مختلف را محاسبه کردند که نتایج در محدوده $11-63$ Gpa بوده است.

۱-۲-۱- ساختارهای کربن

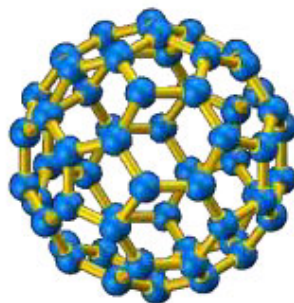
به طور کلی کربن در چهار قالب گرافیت، الماس، فلورین و نانولوله یافت می شود. گرافیت دارای ساختاری است که اتم‌ها بصورت شش گوشه در صفحات موازی یکدیگر قرار دارند که به هر یک از این صفحات گرافن می‌گویند. الماس دارای ساختاری با پیوندهای بسیار قوی است که در تمام جهات بهم پیوسته شده و آن را به سخت‌ترین ماده موجود در طبیعت تبدیل کرده است. فلورین از ۶۰ اتم کربن با چیدمان پنج و شش ضلعی تشکیل شده است که بصورت کروی استقرار یافته‌اند. فلورین‌ها در سال ۱۹۸۵ توسط روتو و اسمالی هنگام کار بر روی طیف جرمی نمونه کربن بخار شده کشف شدند و از آن زمان به بعد تحقیقات گسترده‌ای برای کشف سایر ترکیبات فلورین آغاز گردید که فلورین‌های با C70 و C80 نیز شناسایی شده و ترکیبات دیگر در حال تولید و شناسایی می‌باشند (5). اگر لایه‌های گرافیت به شکل لوله درآیند، نانوتیوب ایجاد می‌شود. ساختارهای کربن در شکل 1-2 نشان داده شده‌اند (۶).



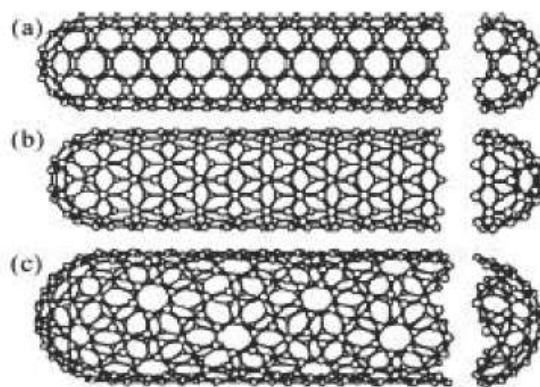
تصویر ۱-۲: الف- ساختارهای کربن (گرافیت)



تصویر ۱-۲: ب- ساختارهای کربن (الماس)



تصویر ۱-۲: ج- ساختارهای کربن (فلورین C60)



تصویر ۱-۲: د- ساختارهای کربن (نانولوله‌های کربن) (۶)

۲-۲-۱- انواع نانولوله‌های کربن

■ نانولوله کربن تک‌جداره^۱ (SWCNTs)

نانوتیوب‌های تک‌جداره در سال ۱۹۹۱ توسط ایجیما کشف شدند و دارای قطری بین ۰/۴ - ۳ nm می‌باشند. SWCNT از یک صفحه گرافیتی با اندازه معلوم که در جهت مشخصی پیچیده شده بدست می‌آید و می‌تواند بدون درپوش یا با درپوش باشد که ساختار درپوش مشابه فلورین C60 می‌باشد. بیشتر SWCNTs قطر نزدیک به ۱nm دارند و طول آن‌ها چندین هزار برابر بزرگتر از قطر آن‌هاست. SWCNT با قطر چند سانتی‌متر نیز ساخته شده است. با توجه به جهت لوله شدن صفحات گرافیتی، سه نوع نانولوله تک‌جداره ممکن است بوجود آید:

(۱) دسته صندلی (صندلی راحتی)^۲

(۲) زیگزاگ^۳

(۳) کایرال^۴

■ نانولوله کربن چندجداره^۵ (MWCNTs)

نانوتیوب‌های چندجداره نیز در سال ۱۹۹۳ توسط ایجیما کشف شدند. قطر خارجی MWCNTs در محدوده ۲-۶۰nm و قطر داخلی آن‌ها در محدوده ۱-۲۰nm است. روش تولیدی MWCNT متفاوت از نوع تک‌جداره آن است و دارای دیواره ضخیم‌تریست چون از چندین استوانه کربنی هم محور تشکیل گردیده است که با فاصله ۰/۳۴ nm (حد فاصل بین لایه‌ای گرافیت) از هم جدا شده‌اند و توسط پیوند واندروالس نیز به یکدیگر متصل هستند. رفتار نوع SWCNT تابع چگونگی

^۱ Single Walled Carbon Nanotubes

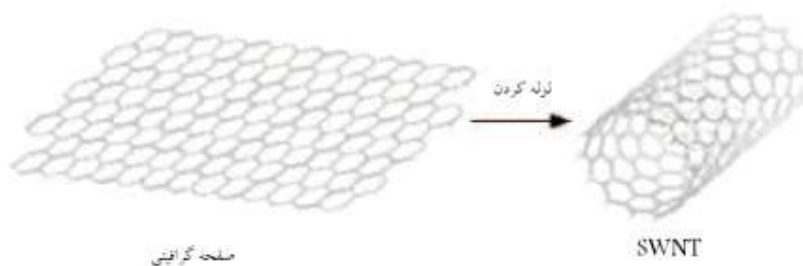
^۲ Armchair

^۳ Zigzag

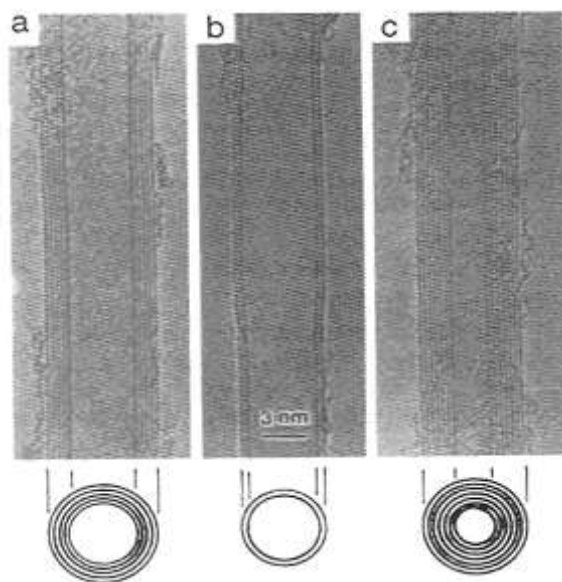
^۴ Chiral

^۵ Multi Walled Carbon Nanotubes

پیوند بین اتمهاست در حالیکه در MWCNT، رفتار نانوتیوب علاوه بر اندرکنش اتمها به اندرکنش بین لایه‌های مختلف نیز بستگی دارد (۷). بعنوان مثال در MWCNT لغزش میان لایه‌های مختلف گزارش شده است. در شکل ۳-۱ دو نوع نانوتیوب نشان داده شده‌اند.



تصویر ۳-۱: الف- نانوتیوب کربن تک‌جداره (SWCNT)

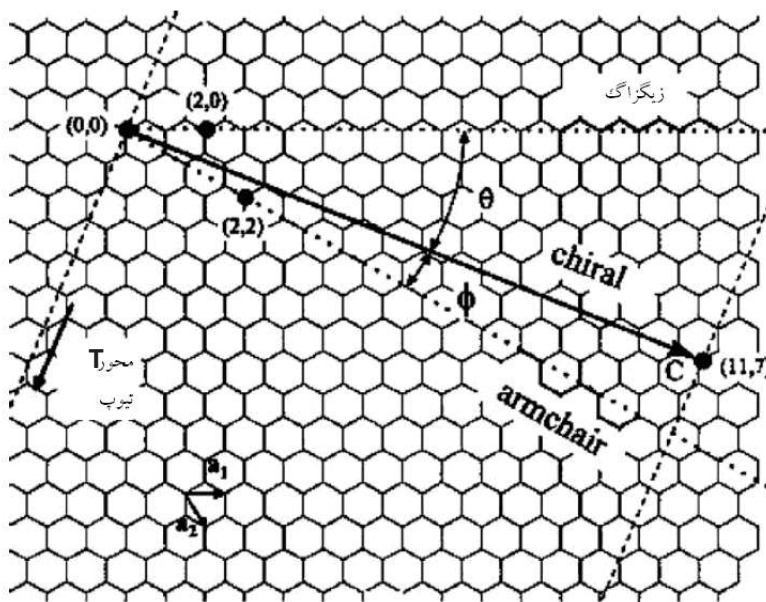


تصویر ۳-۱: ب- نانوتیوب کربن چندجداره (MWCNT) (6)

جهت لوله شدن صفحات گرافیتی نیز توسط بردار کایرال مشخص می‌شود که در ادامه بردار کایرال شرح داده شده است.

۳-۲-۱- ساختار نانولوله کربن

با توجه به شکل ۱-۴ دو اتم از گرافن انتخاب می‌شوند. یکی به عنوان مبدأ در نظر گرفته می‌شود و صفحه را می‌پیچانیم (لوله می‌کنیم) تا اتم دوم روی اتم مبدأ منطبق گردد. برداری که از اتم مبدأ به جهت اتم دیگر اشاره می‌کند بردار کایرال نامیده می‌شود.



تصویر ۱-۴: تعیین ساختار نانولوله کربن (۱)

$$\vec{Ch} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad ۱-۱$$

زاویه بین بردار کایرال $(\vec{Ch})$ و $\vec{a}_1$ ، زاویه کایرالیته (θ) نامیده می‌شود. n و m مقادیر اسکالر هستند.

پس بردار کایرال جهت لوله شدن صفحات گرافیتی را نشان می‌دهد و طول آن برابر محیط نانولوله می‌باشد. بدیهی است که محور نانولوله (T) عمود بر جهت بردار کایرال می‌باشد. اگر $m=0$ $(\theta=0^\circ)$ نانولوله‌ی زیگزاگ نامیده می‌شود و اگر $n=m$ $(\theta=30^\circ)$ نانولوله‌ی آرمچیر می‌نامند.