

8 Zusammenfassung und Ausblick

Zusammenfassung : Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine UHV-Kammer aufgebaut, an welcher Messungen zur Adsorptions- und Desorptionskinetik (Haftfaktormessungen, TDS, LITD) und Messungen zum elektrischen Transport (4-Punkt-Widerstandsmessungen, Thermokraftmessungen) für verschiedene Adsorbate auf SWNT-, HOPG- und C_{60} -Oberflächen durchgeführt wurden. Für alle Adsorbate wurde eine Physisorption auf den drei Oberflächen festgestellt, die durch systematische Auswertung der TD-Spektren durch VdW-Potentialterme erklärt werden konnte (siehe Abschnitt 5.4). Eine Ausnahme bildet NO_2 , für welches eine chemische Reaktion mit dem SWNT-Material nachgewiesen werden konnte (siehe Abschnitt 5.3). Die Bindungsenergien auf dem SWNT-Material lagen 50 % über den Bindungsenergien auf Graphit, was aber auf die höhere Oberflächenrauigkeit und damit auf höher koordinierte Adsorptionsplätze zurückgeführt werden kann (siehe Abschnitt 5.2.1). Wir erwarten daher weder für die glatte Graphitoberfläche noch für die rauen Nanorohrproben einen Ladungstransfer zwischen Adsorbat und Substrat. Für polare Adsorbate wurde eine stärkere Wechselwirkung mit Defektstellen beobachtet. Auch der durch die Leitfähigkeitsmessungen gezeigte Einfluss von Adsorbaten auf die SWNT-Eigenschaften wurde auf eine stärkere Wechselwirkung bestimmter (polarer) Adsorbate mit Defektstellen in der SWNT-Struktur zurückgeführt (siehe Abschnitt 7). Generell ist der zeitliche Ablauf der Änderung durch die Diffusion des Gases zu den Defektstellen hin wie auch durch eventuell vorhandene Barrieren begrenzt. Nun zu den wichtigen Ergebnissen im Einzelnen:

- Die Bindungsenergien E_B von 19 verschiedenen Adsorbaten wurden auf HOPG und SWNT-Material und teilweise auf C_{60} -Film bestimmt (siehe Tabelle 5.3).
- Die Anfangshaftwahrscheinlichkeiten r_0 auf SWNT-Material und HOPG waren für die untersuchten Adsorbate ungefähr 1 (siehe Zusammenfassung in Abschnitt 4).
- Die Wechselwirkung von inerten (nicht-polaren) und polaren Adsorbaten mit dem SWNT-Material ist stark von der Diffusion durch dieses poröse Material (60 % innere Volumina) beeinflusst (siehe Abschnitt 5.2.1). Die Höhe der Diffusionsbarriere für die Oberflächendiffusion auf den SWNT-Bündeln wurde in guter Übereinstimmung mit

Molekularmechanik-Rechnungen aus LITD-Messung zu 6 kJ/mol bestimmt (siehe Abschnitt 6).

- Aus hohen Adsorbatbedeckungen wurde für das SWNT-Material eine spezifische Oberfläche von $140 \text{ m}^2/\text{g}$ ermittelt, die mit einer Adsorption an der Außenseite von SWNT-Bündeln konsistent ist (siehe Abschnitt 5.2.1).
- Für die Einkapselung von C_{60} in das Innere von SWNT wurde der wahrscheinlichste Einkapselungsmechanismus mit einer Einkapselungsrate von $1 \cdot 10^7$ Molekülen pro Sekunde bei entsprechenden Reaktionsbedingungen ermittelt (siehe Abschnitt 5.2.2).
- Inhomogenitäten in der SWNT-Struktur beeinflussen die Wechselwirkungen von polaren Adsorbaten, was die TD-Spektren extrem verbreitert und die Zu- bzw. Abnahme der elektrischen Leitfähigkeit erklärt (siehe Abschnitte 5.2.3 und 7).
- Die Dissoziation von NO_2 auf dem SWNT-Material und eine anschließende Oxidation der Nanoröhren-Defektstellen konnte nachgewiesen werden (siehe Abschnitt 5.3). Die Leitfähigkeitsmessungen zeigen einen entsprechenden Ladungstransfer (siehe Abschnitt 7).
- Wasser benetzt keine der drei untersuchten Oberflächen (siehe Abschnitt 5.5).

Ausblick : Weiterführende Experimente könnten geeignete schwingungsspektroskopische Messungen sein, um den Ladungstransfer bei der Adsorption direkt zu beobachten. Leitfähigkeitsmessungen sollten mit defektangereicherten und kovalent funktionalisierten SWNT-Proben durchgeführt werden. Durch geeignete Wahl der funktionalen Gruppen sollte eine auf eine spezielle Substanz selektive Empfindlichkeit erzeugt werden können (Sensor). Eine interessante Frage ist, ob man dadurch die hydrophobe Eigenschaft des Materials beeinflussen kann. Mit dem SWNT-Material verwandte Kohlenstoffmaterialien werden auf ihre Eignung als chemische Katalysatoren hin untersucht, wobei die Frage nach den reaktiven Zentren auf diesen Materialien noch ungeklärt ist. TD-Messungen mit geeigneter Manipulation der Proben können zur Ermittlung dieser reaktiven Zentren einen Beitrag leisten. Weitere interessante Untersuchungen wären TD-Experimente mit SWNT-Proben, die nur aus halbleitenden bzw. metallischen Nanoröhren bestehen. Aufgrund der wesentlich höheren statischen Polarisierbarkeit der metallischen Nanoröhren [Ben94] (diese haben möglicherweise auch die VdW-Bindung in unseren Proben dominiert) sollte schon bei inerten Gasen ein starker Unterschied

zwischen den beiden Proben zu beobachten sein. Eine Trennung von metallischen und halbleitenden Nanoröhren wurde vor kurzem unter Ausnutzung der unterschiedlichen Polarisierbarkeiten dieser beiden Nanorohr-Typen erreicht [Kru03] und lässt hoffen, solche Experimente in nicht allzu ferner Zukunft durchführen zu können.

