

Analiza właściwości nanostruktur węglowych

Liczba stron: 81

Nazwa Szkoły Wyższej: Politechnika Świętokrzyska w Kielcach

Rodzaj pracy: magisterska

Rok oddania: 2010

Zawartość pracy:

II. Plan pracy

1. Charakterystyka fulerenów i nanorurek węglowych pod kątem elektrycznym
2. Nanokompozyty węglowe typu nikiel-węgiel, pallad-węgiel
3. Analiza symulacyjna własności elektronowych i widmowych. Charakterystyka narzędzi programu HyperChem.

III. Cel pracy

Celem pracy jest zapoznanie się z budową i właściwościami struktur węglowych oraz wykonanie analiz symulacyjnych wybranych struktur w programie HyperChem

Wstęp8

1. Ogólna charakterystyka fulerenów.....	10
1.1 Geneza odkrycia fulerenów.....	11
1.2 Metody otrzymywania fulerenów.....	12
1.2.1 Metoda laserowa.....	13
1.2.2 Metoda elektrołukowa.....	13
1.2.3 Metoda płomieniowa.....	15
1.2.4 Inne metody otrzymywania fulerenów.....	16
1.3 Funkcjonalizacja fulerenów	17
1.3.1 Fulereny endohedralne.....	17
1.3.2 Fulereny egzohedralne.....	18
1.3.3 Heterofulereny.....	20
1.4 Budowa i właściwości fulerenów.....	20
1.5 Geneza odkrycia nanorurek węglowych.....	27
1.6 Otrzymywanie nanorurek	28

1.6.1 Metoda elektrołukowa.....	28
1.6.2 Metoda katalityczna	30
1.6.3 Metoda laserowa.....	31
1.6.4 Inne metody otrzymywania nanorurek.....	33
1.7 Struktura nanorurek	34
1.7.1 Nanorurki jednościenne.....	35
1.7.2 Nanorurki wielościenne.....	36
1.7.3 Inne konfiguracje nanorurek.....	37
1.8 Właściwości nanorurek węglowych.....	38
2. Nanokompozyty węglowe	42
2.1 Wytwarzanie nanokompozytów węglowych.....	42
2.2 Właściwości i wykorzystanie nanokompozytów typu nikiel-węgiel	43
2.3 Właściwości i wykorzystanie nanokompozytów typu pallad- węgiel.....	45
3. Analiza symulacyjna własności elektronowych i widmowych wybranych struktur.....	53
3.1 Narzędzia symulacyjne.....	53
3.2 Obliczenia dla cząsteczki fulerenu C ₆₀	56
3.3 Obliczenia dla fulerenu i grafenu.....	60
ZAKOŃCZENIE.....	76
LITERATURA	77
SPIS ILUSTRACJI.....	79
SPIS TABEL.....	81

Wstęp

W 1959 roku słynny fizyk-noblista Richard Feynman, słowami historycznej już dziś maksymy: „Tam na dole jest mnóstwo miejsca” (ang. „There’s plenty of room at the bottom”) [2], wypowiedział się o możliwości budowania obiektów atom po atomie. Proces układania atomów następcy Feynmana nazwali bardziej uczenie: „fizyczną mechanosyntezą”. Bezpośrednim skutkiem tego pomysłu była wizja mikroskopijnego urządzenia, chwytającego atomy i układającego je według zadanego programu. W ten sposób narodziła się nanotechnologia.

Nanotechnologia to nowoczesna szeroka dziedzina nauki, stwarzająca szerokie możliwości. Pojęcie to jest najczęściej definiowane jako otrzymywanie i zastosowanie struktur, których co najmniej jeden wymiar jest wyrażany w

nanometrach. Najczęściej, wymiary tych struktur zawierają się w przedziale od 1 do 100 nm (rzadziej do kilkuset nm) [25]. Pod pojęciem nanotechnologia rozumiemy materiały, techniki i urządzenia funkcjonujące na poziomie „nano”.

Dziedzina ta wysuwa się obecnie na prowadzenie wśród najintensywniej rozwijających się kierunków badań. Przyczyn jest kilka:

- nanometria przejawia nowe właściwości, inne niż przy rozmiarach charakterystycznych dla morfologii ciała stałego,
- w nanoskali pojawiają się nowe zjawiska, nieznane w przypadku obiektów mikrokrystalicznych,
- rozwój fizykochemii ciała stałego zmusza do poszukiwań coraz mniejszych i sprawniejszych nanoukładów elektronicznych – nośników pamięci, rezystorów, tranzystorów czy kondensatorów: zgodnie ze sprawdzającą się prognozą o dwukrotnym zmniejszaniu się procesorów co około 3 lata,
- ogromny postęp w rozwoju technik komputerowych umożliwiając dziś teoretyczne rozważania dotyczące właściwości modelowych układów nanometrowych [2].

Jednym z bardziej znanych pierwiastków wykorzystywanych w nanotechnologii jest węgiel, który znajduje się na czwartym miejscu najczęściej występujących pierwiastków we wszechświecie, po wodorze, helu i tlenie. Z ponad 15 mln znanych dziś związków chemicznych, przytłaczająca większość to związki węgla. Jest obecny we wszystkich organizmach żywych. Tym bardziej istotne staje się prowadzenie badań nad nowymi formami i związkami węgla, ze względu na ich interesujące właściwości oraz możliwości praktycznych zastosowań w wielu dziedzinach nauki i techniki.

Celem niniejszej pracy jest zapoznanie się z budową i właściwościami popularnych nanostruktur węglowych oraz wykonanie analiz symulacyjnych wybranych struktur węglowych w programie HyperChem.

W rozdziale pierwszym przedstawiona została charakterystyka grupy nanomateriałów, jaką stanowią fulereny i nanorurki węglowe. Omówiona została historia ich odkrycia, budowa i najważniejsze właściwości fizykochemiczne. Zostały również opisane podstawowe sposoby otrzymywania tych struktur.

W rozdziale drugim scharakteryzowane zostały wybrane nanokompozyty węglowe typu nikiel-węgiel oraz pallad-węgiel oraz opisane zostały możliwości ich

wykorzystania.

Rozdział trzeci natomiast zawiera analizę symulacyjną właściwości elektronowych i widmowych wybranych struktur nanowęglowych z wykorzystaniem programu do obliczeń kwantowo-mechanicznych HyperChem.

To jest gotowa, obroniona praca. Gdyby chcieli Państwo zlecić napisanie zupełnie nowej pracy, to zapraszamy na stronę [pisanie prac](#) - sprawdzony serwis!