

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za računalništvo
in informatiko



12. Nanocevi

II.Stopnja RI, 2022/2023

Nosilec: prof.dr.Miha Mraz

15. december
2022



1. Uvod

- Nanocevi (angl. *nanotubes*): kategorija nanomaterialov in sinteznih tehnologij izdelave
- Večinoma so osnovni gradniki cevi ogljikovi atomi -> sinteza -> karbonske nanocevi (angl. *carbon nanotubes* - *CNT*)
- Razmerje med dolžino in premerom cevi (cilindra) je velikostnega reda 10^8 , premer cevi velikostnega reda nanometra
- Dve osnovni vrsti cevi:
 - enostenske cevi (angl. *single walled nano tubes* - *SWNT*)
 - večstenske cevi (angl. *multi walled nano tubes* - *MWNT*)



- Karbonske nanocevi: vsak atom je s kemijskimi vezmi povezan s svojimi tremi sosedi (simetričnost in homogenost vezave) z sp^2 vezmi (močnejše od sp^3 vezi, ki jih najdemo npr. v diamantih)
- Razporeditve sosedov vodijo v različne načine vezav -> doseganje različnih kinetičnih, trdnostnih (angl. *space elevator*), termoprevodniških in nenazadnje električnih prevodniških lastnosti „cevi“

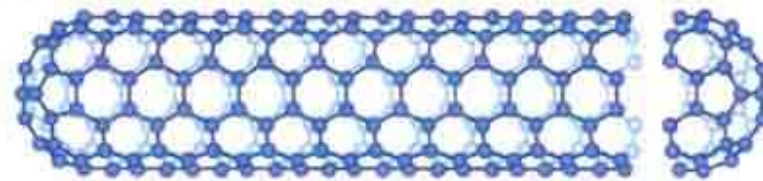




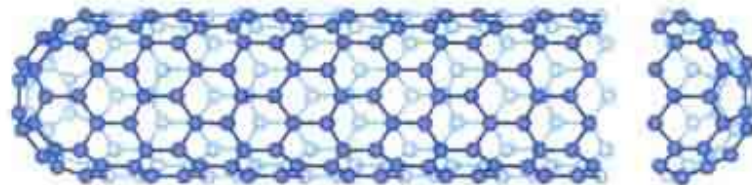
2. Enostenske cevi

- Osnovna parametra arhitekture cevi: n, m
- Tri vrste SWNT:
 - $n=m$: "armchair" tip
 - $m=0$: "zig-zag" tip
 - vsi ostali pari n, m : "chiral" tip

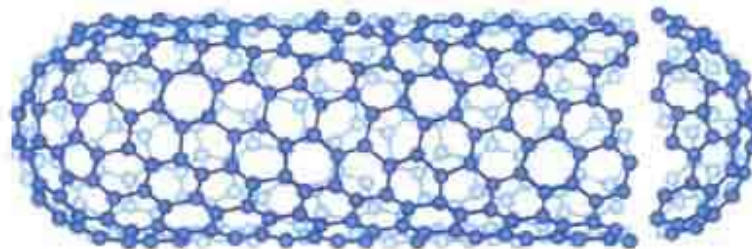




$(n,m) = (5,5)$

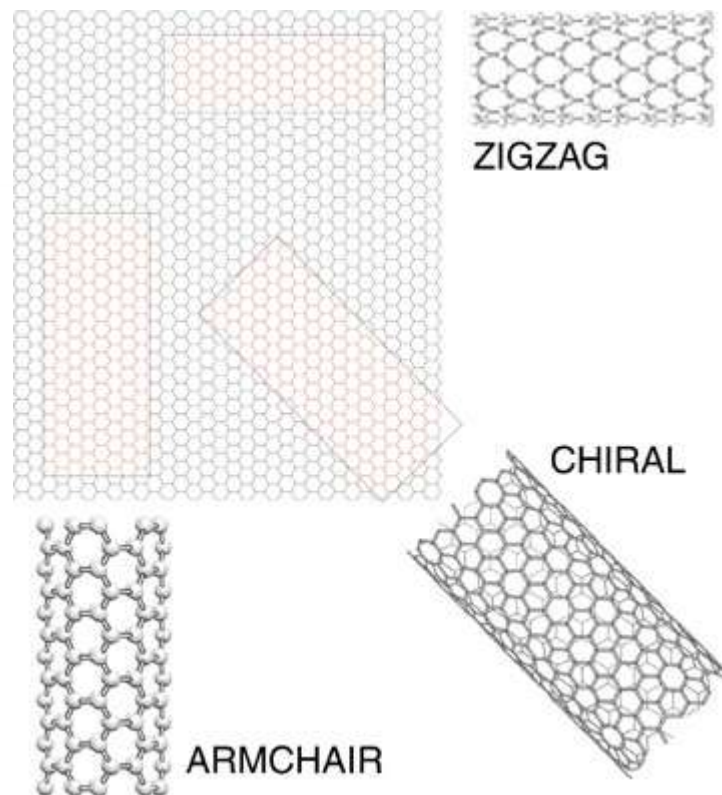


$(n,m) = (9,0)$



$(n,m) = (10,5)$



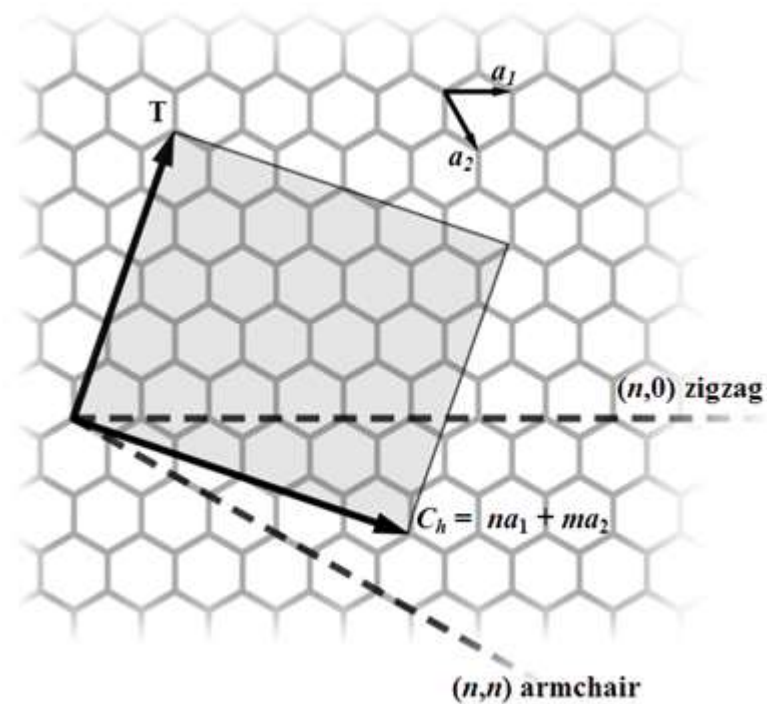


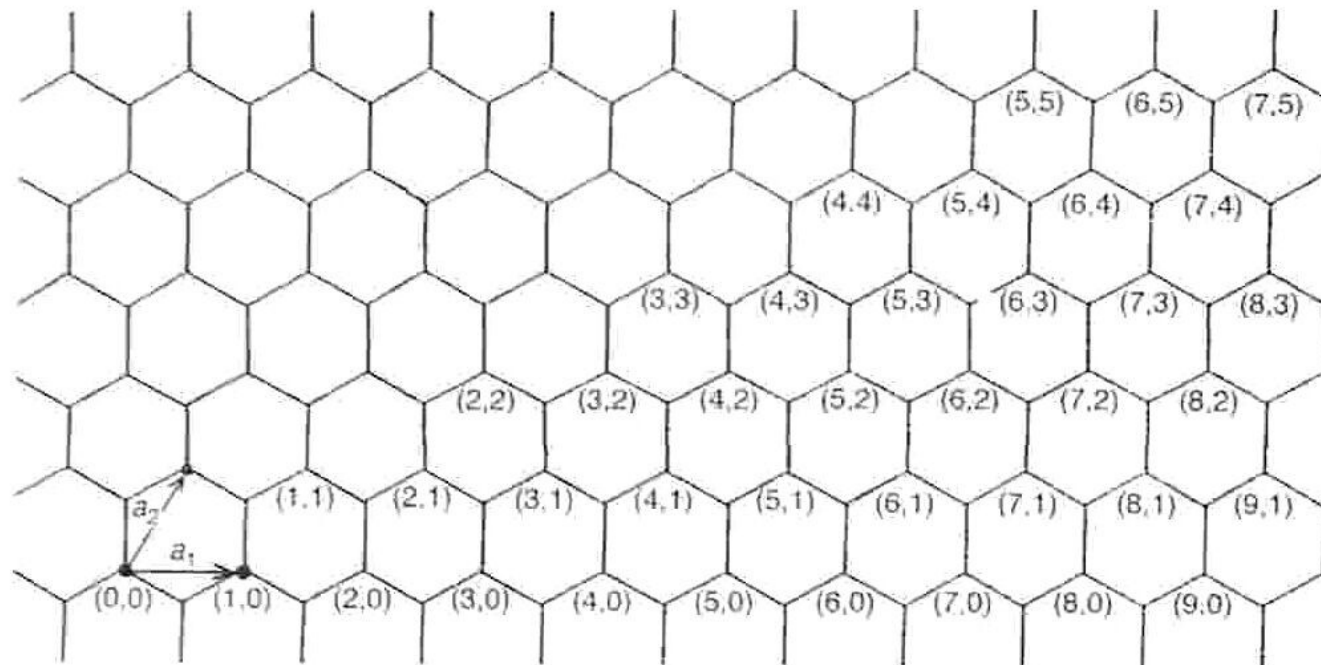


- Matematični zapis formacije vzorca:

- a_1, a_2 : enotska vektorja,
- n, m : horizontalni in vertikalni ničelni ali celoštevilčni pozitivni odmik od izhodišča koordinatnega sistema $(0,0)$

$$c = a_1 * n + a_2 * m$$







- Razvojni motivi -> izboljšani materiali
 - Velika trdnost
 - Toplotna odpornost (do 700 st.C ob prisotnosti kisika)
 - Toplotna prevodnost
 - Posebne električne značilnosti:
 - Izredno dobre prevodnosti el.toka (upornost 10^{-6} ohm/m)
 - Enosmernost kanala: tok elektronov možen le vzdolž osi cevi
- Vpliv vezave na električne značilnosti SWNT-CNT
 - $n=m$ (armchair): čisti prevodnik (angl. *metallic*) z 10^3 večjo gostoto električnega toka od klasičnih prevodniških medijev
 - $n-m$ je večkratnik števila 3: polprevodniki z majhno pasovno vrzeljo
 - Ostale relacije med n in m : značilnosti klasičnih polprevodnikov





- Procesna struktura: prevodniške in polprevodniške nanocevi (=kombinacija različnih nanocevi)
- Iz NCT izdelani že prvi FET tranzistorji (IN-VIVO delovanje v kontekstu temperature)
- Slabosti:
 - Majhne proizvodne zmoglosti
 - Cena 2010: 50 USD/gram
 - Možnost toksičnosti materialov
 - Problematika spajanja cevi v kompleksnejše strukture





3. Razpoložljiva orodja

- NanoTubeModeller (zgolj strukturno orodje za načrtovanje arhitektur posamezne nanocevi)
- CoNTub v.2.0 (poleg načrtovanja posameznih nanocevi omogoča tudi njihovo povezovanje)
- Nanorex Inc. (širša paleta orodij)
- Ascalaph Designer (univerzalno orodje za molekularne simulacije)
- Tubegen (generator struktur nanocevi)
- Materials Studio 5.5. (modeliranje in evaluacija materialov),
- Atomistix Virtual NanoLab and Atomistix ToolKit (orodje za simulacijo in analizo fizičnih in kemijskih lastnosti nanomaterialov).

