

Univerza v Ljubljani  
Fakulteta za računalništvo  
in informatiko



# 10. Nanocevi

II.Stopnja RI, 2019/2020

Nosilec: prof.dr.Miha Mraz

5. december  
2019



# 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*)

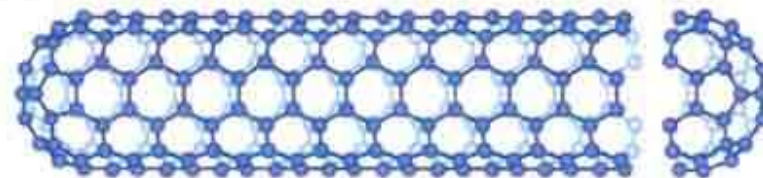


- Karbonske nanocevi: vsak atom je s kemijskimi vezmi povezan s svojimi tremi sosedi (simetričnost in homogenost vezave) z  $sp^2$  vezmi (močnejše od  $sp^3$  vezi, ki jih najdemo npr. v diamantih)
- Razporeditve sosedov vodijo v različne načine vezav -> doseganje različnih kinetičnih, trdnostnih (angl.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

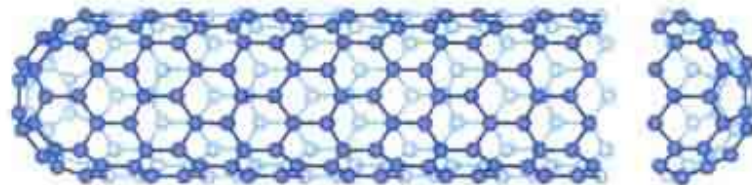


## 2. Enostenske cevi

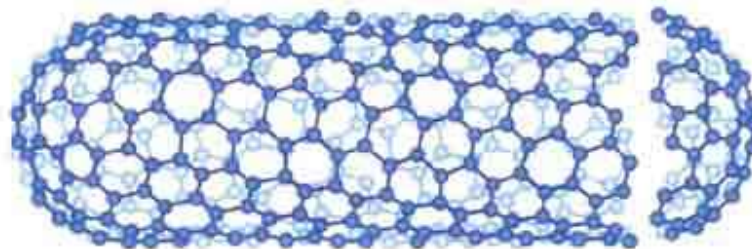
- Osnovna parametra arhitekture cevi:  $n, m$
- Tri vrste SWNT:
  - $n=m$ : "armchair" tip
  - $m=0$ : "zig-zag" tip
  - vsi ostali pari  $n, m$ : "chiral" tip



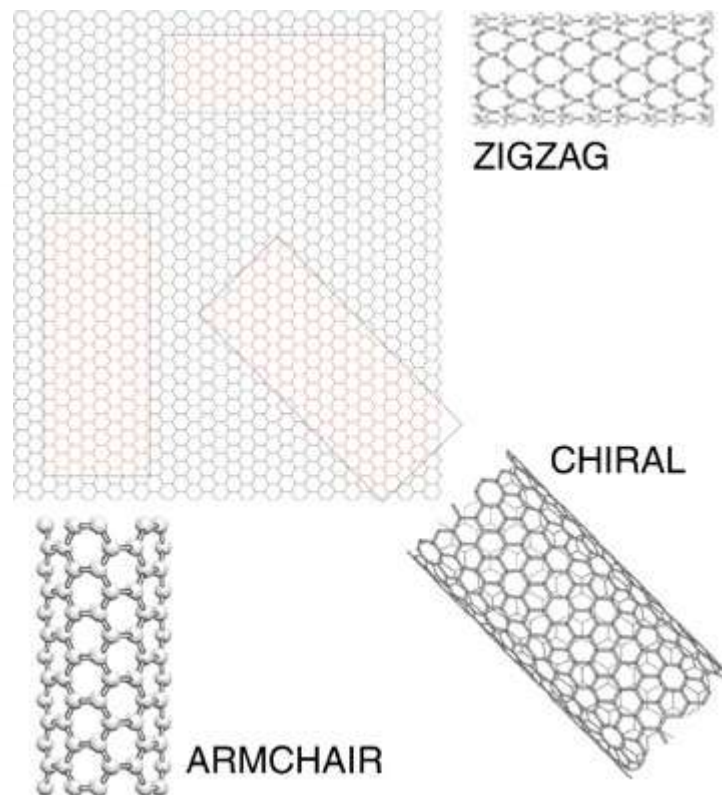
$(n,m) = (5,5)$



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



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

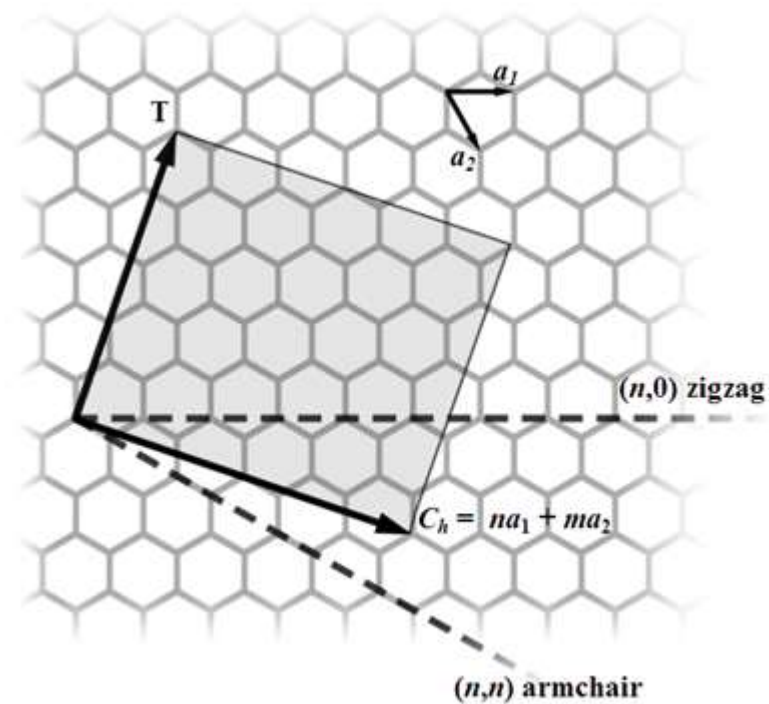


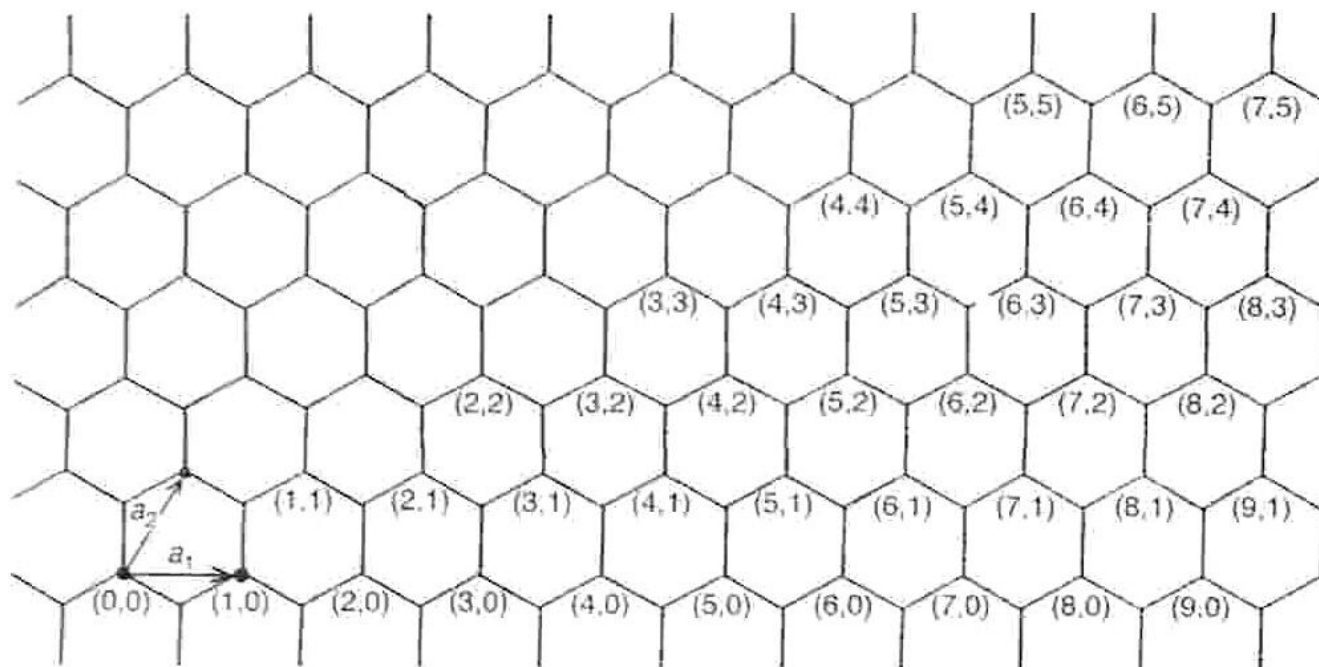


• Matematični zapis formacije vzorca:

- $a_1, a_2$ : 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).