

Министерство образования и науки Российской Федерации
Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Тамбовский государственный технический университет»

ВВЕДЕНИЕ В НАНОТЕХНОЛОГИЮ

Методические указания
для студентов первого курса направления подготовки
210600 всех форм обучения



Тамбов
Издательство ГОУ ВПО ТГТУ
2010

УДК 620.3(076)
ББК Ж60я73-5
В24

Рекомендовано Редакционно-издательским советом университета

Рецензент

Кандидат физико-математических наук,
ведущий специалист Учебно-инновационного центра
«Нанотехнологии и наноматериалы» ГОУ ВПО ТГУ им. Г.Р. Державина

А.В. Шуклинов

Составители:

А.В. Рухов, Е.Ю. Филатова

В24 Введение в нанотехнологию : методические указания / сост. :
А.В. Рухов, Е.Ю. Филатова. – Тамбов : Изд-во ГОУ ВПО ТГТУ,
2010. – 16 с. – 50 экз.

Приведены теоретическая часть и задания для проведения практических занятий по разделу «Углеродные наноматериалы» курса «Современные проблемы нанотехнологии». Рассмотрены история открытия, методы синтеза, физические и структурные свойства основных углеродных наноматериалов: фуллеренов, однослойных и многослойных нано-трубок.

Предназначены для студентов первого курса направления подготовки 210600 всех форм обучения.

УДК 620.3(076)
ББК Ж60я73-5

© Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Тамбовский государственный технический
университет» (ГОУ ВПО ТГТУ), 2010

Учебное издание

ВВЕДЕНИЕ В НАНОТЕХНОЛОГИЮ

Методические указания

Составители:

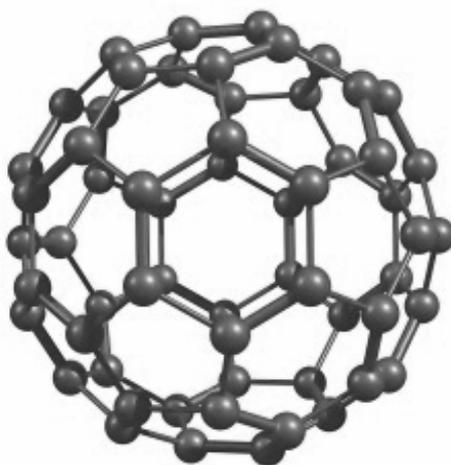
РУХОВ Артём Викторович,
ФИЛАТОВА Елена Юрьевна

Редактор Е.С. Кузнецова
Инженер по компьютерному макетированию М.С. Анурьева

Подписано в печать 24.12.2010
Формат 60×84 /16. 0,93 усл. печ. л. Тираж 50 экз. Заказ № 650.

Издательско-полиграфический центр ГОУ ВПО ТГТУ
392000, Тамбов, Советская, 106, к. 14

ВВЕДЕНИЕ В НАНОТЕХНОЛОГИЮ



◆ Издательство ГОУ ВПО ТГТУ ◆
2010

ВВЕДЕНИЕ

Данные методические указания предназначены для студентов первого курса направления подготовки 210600 всех форм обучения.

Приведены теоретическая часть и задания для проведения практических занятий по разделу «Углеродные наноматериалы» курса «Современные проблемы нанотехнологии». Рассмотрены история открытия, методы синтеза, физические и структурные свойства основных углеродных наноматериалов: фуллеренов, однослойных и многослойных нанотрубок.

Указания содержат методический материал для выполнения трех практических заданий. Каждое задание включает теоретическую часть, в результате знакомства с которой студенты должны освоить основные понятия о терминологии, структурных и физических свойствах углеродных наноматериалов, познакомиться с простейшими методами статистической обработки экспериментальных данных. Первое задание посвящено изучению структурных свойств фуллеренов на примере самостоятельно изготовленной студентом модели. Второе задание посвящено исследованию свойств однослойных углеродных нанотрубок. Цель задания – изучить структурные свойства однослойных углеродных нанотрубок, по представленному изображению нанотрубки определить угол и индекс хиральности, угол вращения и физические свойства. Третье задание посвящено изучению структурных свойств многослойных углеродных нанотрубок и нановолокон с целью определения морфологии и с применением статистических методов, геотермических параметров.

Практическое задание 1

ФУЛЛЕРЕНЫ

Цель занятия. на примере модели фуллерена изучить структурные свойства и проверить следствие теоремы Леонардо Эйлера для платоновских тел.

Методические указания. Фуллерены, бакиболы или букиболы – молекулярные соединения, принадлежащие классу аллотропных форм углерода и представляющие собой выпуклые замкнутые многогранники, составленные из чётного числа трёхкоординированных атомов углерода (гибридизация sp^2).

В молекулах фуллеренов атомы углерода расположены в вершинах правильных шести- и пятиугольников, из которых составлена поверхность сферы или эллипсоида. Самый симметричный и наиболее полно изученный представитель семейства фуллеренов – фуллерен C_{60} (рис. 1), в котором углеродные атомы образуют усеченный икосаэдр, состоящий из 20 шестиугольников и 12 пятиугольников и напоминающий футбольный мяч. Так как каждый атом углерода фуллерена C_{60} принадлежит одновременно двум шести- и одному пятиугольнику, то все атомы в C_{60} эквивалентны, что подтверждается спектром ядерного магнитного резонанса (ЯМР) изотопа ^{13}C .



Рис. 1. Молекула фуллерена C_{60}

Не все связи C–C имеют одинаковую длину. Длина связи C=C, являющаяся общей стороной для двух шестиугольников, составляет 1,39 Å, а связи C–C, общая для шести- и пятиугольника, равна 1,44 Å. Кроме того, связь первого типа двойная, а второго – одинарная, что существенно для химии фуллерена C_{60} .

Следующим по распространённости является фуллерен C_{70} , отличающийся от фуллерена C_{60} вставкой пояса из 10 атомов углерода в экваториальную область C_{60} , в результате чего молекула C_{70} оказывается вытянутой и несколько напоминает своей формой мяч для игры в регби.

До экспериментального открытия фуллеренов ряд учёных представляли результаты теоретических исследований, отражающих возможность существования молекул, состоящих только из атомов углерода, помещённых в вершины выпуклого многогранника, в частности усечённого икосаэдра.

В 1966 г. Дэвид Джонс высказал соображение, что внедрение в графитовый слой, состоящий из правильных шестиугольников, дефектов в виде пятиугольников может превратить этот плоский слой в полую замкнутую оболочку – каркасную молекулу углерода. В 1970 г. японский химик-органик Эйдзи Осава опубликовал короткую статью на родном языке о возможности существования молекулы из 60 атомов углерода, C_{60} , в виде усечённого икосаэдра. Также он предположил, что углерод в такой структуре будет обладать ароматичностью, а, следовательно, молекула окажется стабильной. На следующий год в совместной монографии Осава и Иосиды возможные ароматические свойства этой молекулы обсуждались уже более подробно.

В 1973 г. в СССР был выполнен количественный расчёт электронной структуры каркасной молекулы C_{60} Дмитрием Анатольевичем Бочваром и Еленой Григорьевной Галперн, а также Иваном Вячеславовичем Станкевичем с сотрудниками. Данный расчёт, повторённый несколько лет спустя американцем Давидсоном, показал, что C_{60} может оказаться замкнутой полый молекулой с очень большой разностью между энергиями нижней вакантной молекулярной орбитали и верхней занятой молекулярной орбитали, что является признаком химической стабильности. Орвил Чемпен, специалист в области органического синтеза из Калифорнийского университета в Лос-Анджелесе, в середине 1980-х годов инициировал программу исследований, целью которой являлся синтез молекулы C_{60} в виде усечённого икосаэдра методами органической химии. В 2001 г. в рамках данной программы был достигнут успех: молекула C_{60} была получена в лаборатории методом многоступенчатого органического синтеза.

Однако следует отметить, что результаты теоретических исследований в области замкнутых каркасных молекул углерода до 1985 г. не были по достоинству оценены научным сообществом.

В 1985 г. интернациональная группа учёных – Роберт Керл, Харолд Крото, Ричард Смолли, Хис и О’Брайен – при моделировании процессов в атмосфере гигантских красных углеродных звёзд исследовали масс-спектры паров графита, полученных при лазерном облучении (абляции) твёрдого образца, и обнаружили пики с максимальной амплитудой, соответствующие кластерам, состоящие из 60 и 70 атомов углерода. Они предположили, что данные пики отвечают молекулам C₆₀ и C₇₀, и выдвинули гипотезу, что молекула C₆₀ имеет форму усечённого икосаэдра. Для молекулы C₇₀ была предложена структура с более вытянутой эллипсоидальной формой. По предложению Харолда Крото полиэдрические кластеры углерода получили название фуллеренов, а наиболее распространённая молекула C₆₀ – бакминстерфуллерена, по имени американского архитектора Бакминстера Фуллера, применявшего для постройки куполов своих зданий пяти- и шестиугольники, являющиеся основными структурными элементами молекулярных каркасов всех фуллеренов.

Требуется отметить, что уже в 1984 г. были опубликованы экспериментальные результаты, свидетельствующие о преобладании молекулы C₆₀ в спектре углеродных кластеров¹.

Предположение о структуре бакминстерфуллерена, выдвинутое группой Крото–Кёрл–Смолли, было всего лишь гипотезой, не противоречащей полученным экспериментальным результатам. Полученные им результаты масс-спектрологии позволяют судить лишь о массе молекулы, а не о её структуре. Напрямую подтвердить или опровергнуть гипотезу о фуллере позволило бы применение структурно-чувствительных методов исследования, например спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР), однако использование данных методов исследований требует микроскопических объёмов материала, которые невозможно получить лазерной абляцией.

Возможность структурного анализа появилась в 1990 г., благодаря разработке объединённой группой Вольфганга Крёмера (Гейдельберг, ФРГ) и Дональда Хафмана (Таксон, США) простого и производительного способа получения макроскопических количеств фуллеренов C₆₀, C₇₀, C₈₀ и т.д. Метод Крёмера–Хафмана основан на использовании разряда между двумя графитовыми электродами в атмосфере гелия. Излучение разряда приводит к испарению графита и образованию углеродной сажи, состоящей из различных фуллеренов и углеводородных соединений. Дальнейшее разделение сажи на составляющие и выделение чистых фуллеренов основано на растворении последних в органическом растворителе и последующей жидкостной хроматографии.

Открытие Крёмера–Хафмана обеспечило прорыв в получении фуллеренов в количествах, достаточных для применения структурно-чувствительных методов: ЯМР-спектроскопии, инфракрасной спектроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния света, рентгеновской дифрактометрии и др. Гипотеза о структуре бакминстерфуллерена была полностью подтверждена.

В 1996 г. Нобелевская премия по химии была присуждена Крото, Кёрлу и Смолли за экспериментальное открытие фуллеренов.

Требуется отметить, что решающую роль в формировании гипотезы о структуре молекул фуллеренов группой Крото–Кёрл–Смолли сыграло применение теоремы Эйлера о соотношении числа граней, вершин и рёбер в выпуклых многогранниках, которые ещё называют платоновскими телами.

Теорема Леонардо Эйлера устанавливает соотношение между гранями, рёбрами и вершинами выпуклых многогранников: сумма количества вершин и разности количества граней и рёбер равна 2:

$$\Gamma - P + B = 2, \quad (1)$$

где Γ – количество граней; P – количество ребер; B – количество вершин.

Рассмотрим следствие из теоремы Эйлера, непосредственно относящееся к семейству углеродных молекул – выпуклых многогранников, состоящих только из h шестиугольных и p пятиугольных граней. Тогда:

$$\Gamma = p + h. \quad (2)$$

Так как каждое ребро принадлежит двум, а каждая вершина – трём соседним граням, то получаем:

$$2P = 5p + 6h; \quad (3)$$

$$3B = 5p + 6h. \quad (4)$$

Преобразовав уравнения (2) – (4) (умножив левую и правую части уравнения (2) на 6, уравнения (3) на –3, уравнения (4) на 2) и просуммировав, получаем:

$$6(\Gamma - P + B) = p. \quad (5)$$

В соответствии с уравнением (1) получаем:

$$p = 12; \quad (6)$$

$$B = 20 + 2h = 2(10 + h). \quad (7)$$

Из выражений (6), (7) следует, что в любой молекуле фуллерена может быть только 12 пятиугольников, образующих требуемую кривизну графенового листа для создания замкнутого каркаса. Минимальное количество атомов углерода, способных образовать замкнутую каркасную молекулу, состоящую только из пятиугольников, равно 20. Такая молекула

¹ Rohlffing E.A., Cox D.M., Kaldor A.J. Chem Phys. 81, 3322 (1984).

называется фуллереном C₂₀. Число шестиугольников может варьироваться, при этом количество атомов углерода **всегда остаётся чётным**.

Уравнение (7) достоверно поясняет преобладание кластеров углерода с чётным числом атомов в масс-спектре (рис. 2), наблюдавшемся группой исследователей из компании Эксон уже в 1984 г.². Требуется отметить, что топологический анализ достоверно показывает невозможность существования фуллереноподобной структуры из 22 атомов углерода ($p = 12, h = 1$).

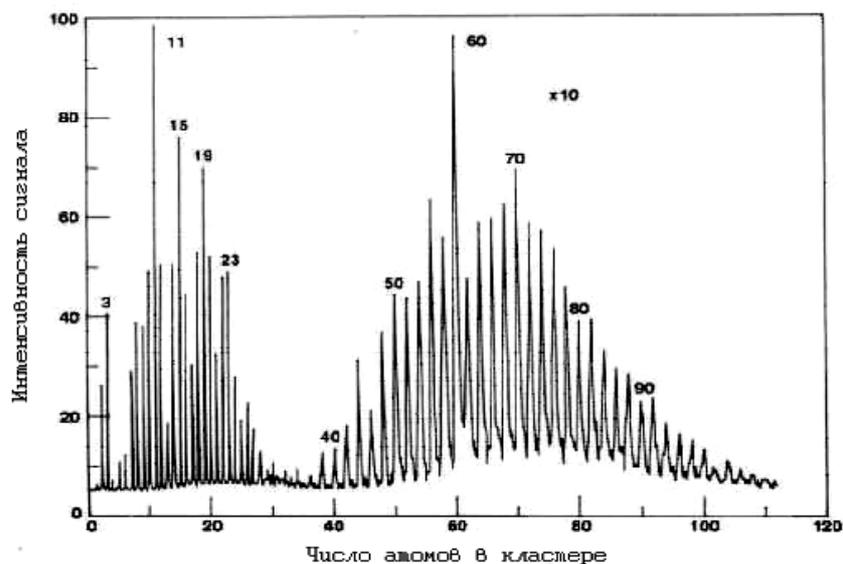


Рис. 2. Масс-спектр кластеров углерода в сверхзвуковом пучке, образующемся при лазерном испарении углеродной мишени в атмосфере геллия

Порядок выполнения работы

1. Изучить представленные методические указания.
2. Получить от преподавателя развёртку на плоскости фуллерена, напечатанную на листе бумаги.
3. При помощи канцелярских принадлежностей (клея и ножниц) с соблюдением необходимых мер предосторожности изготовить модель фуллерена.
4. Определить масштаб изготовленной модели.
5. На примере изготовленной модели проверить теорему Эйлера для платоновских тел.
6. На примере изготовленной модели проверить следствия из теоремы Эйлера для платоновских тел (6), (7).
7. Сделать выводы.

Практическое задание 2

ОДНОСЛОЙНЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ

Цель занятия: изучить структурные свойства однослойных углеродных нанотрубок и методику определения угла и индексов хиральности, угла вращения.

Методические указания. Первые однослойные углеродные нано-трубки (ОУНТ) независимо были получены группами под руководством Д. Бетсуна и С. Иджимы. Использовался метод сублимации – десублимации углерода, электродуговой способ с применением катализатора, добавленного в графитовые электроды (кобальта, никеля или железа), стимулирующего рост однослойных нанотрубок. Металл-катализатор предотвращал формирование многослойных нанотрубок и фуллеренов, а также позволял понизить температуру синтеза.

Бездефектные ОУНТ представляют собой цилиндрические структуры из свёрнутых графеновых слоёв, состоящих из атомов углерода.

В графене наблюдается *SP*²-гибридизация электронных оболочек, т.е. объединение одной *S*-орбитали и двух *P*-орбиталей, дающее в результате три *SP*²-гибридизованные орбитали, повёрнутые друг относительно друга на 120° в плоскости (рис. 3).

Лежащие в плоскости σ -связи отвечают за сильное ковалентное связывание между атомами, в то время как π -связи, расположенные нормально, – за слабое взаимодействие между слоями графена, например в графите.

² Rohlifing E.A., Cox D.M., Kaldor A.J. Chem Phys. 81, 3322 (1984).

Длина окружности любой углеродной нанотрубки выражается в терминах вектора хиральности $C_h = na_1 + ma_2$, который соединяет два кристаллографически эквивалентных участка на двухмерном графеновом листе (рис. 4).

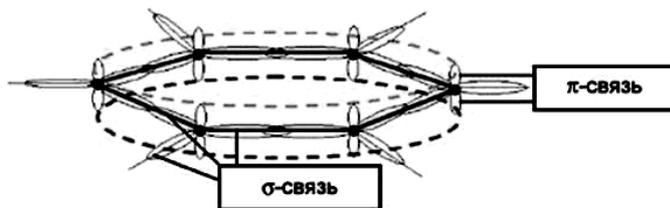


Рис. 3. Графитовый слой. Схематическое представление химической связи между атомами углерода

Вектор хиральности C_h (OA) – задаваемый на гексагональной решётке углеродных атомов единичными векторами a_1 и a_2 и углом хиральности Θ относительно зигзагообразной оси. Вдоль зигзагообразной оси $\Theta = 0^\circ$. Вектор решётки OB = T элементарной ячейки одномерной нанотрубки и угол вращения Ψ и трансляция t . Последние два параметра являются основными для определения трансляционной симметрии – тип симметрии, при которой объект совмещается с собой при сдвиге на определённый вектор.

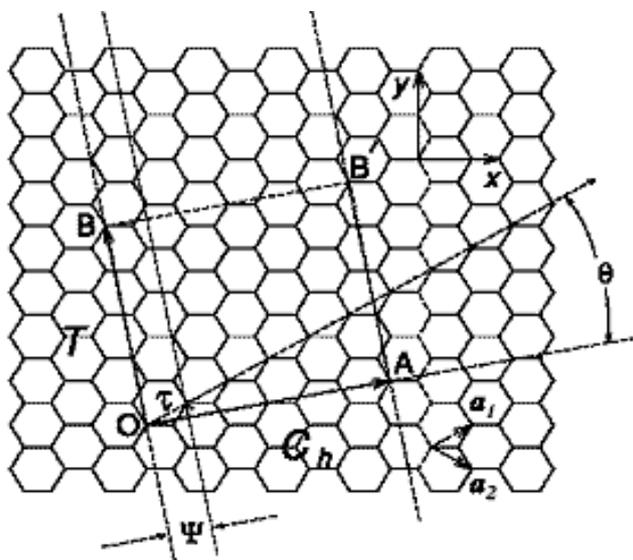


Рис. 4. Фрагмент двухмерного графенового листа

Угол хиральности является одним из определяющих параметров физико-химических свойств синтезируемых углеродных нанотрубок. Так, в диапазоне $0^\circ \leq \Theta \leq 30^\circ$ электропроводящие свойства ОУНТ могут изменяться от полупроводниковых до металлических (рис. 5).

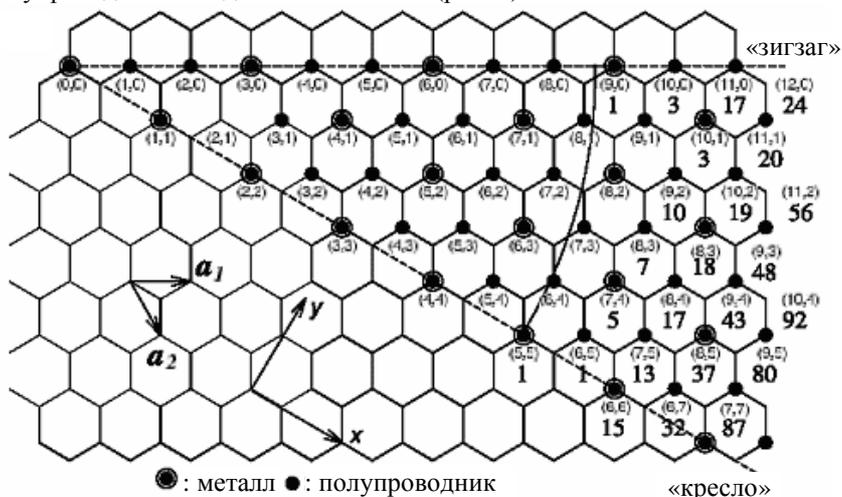


Рис. 5. Электрические свойства ОУНТ в зависимости хиральности

ОУНТ могут состоять из двух отдельных поверхностей с различными физическими и химическими свойствами. Первая – боковая (цилиндрическая) часть трубки, вторая – закрытый торец, по форме напоминающий половину молекулы фуллерена.

Различают три типа структур нанотрубок, которые могут быть получены при свёртывании графенового листа в цилиндр (рис. 6). «Зигзаг» и креслообразные нанотрубки соответствуют углам хиральности $\Theta = 0^\circ$ и 30° , хиральные нанотрубки соответствуют $0^\circ < \Theta < 30^\circ$. Пересечение вектора OB (который является нормальным к C_h) с первым узлом решётки определяет элементарный одномерный ($1D$) вектор трансляции T . Элементарная ячейка одномерной решётки – прямоугольник, определяемый векторами C_h и T (рис. 4).

Цилиндр, соединяющий две полусферические оголовки полуфуллерена углеродной нанотрубки (рис. 6), сформирован в результате сворачивания графенового слоя в трубку в направлении, задаваемом вектором C_h , и сшивки слоя в цилиндр по двум OB и AB' (рис. 4). Линии OB и AB' являются двумя перпендикулярами к вектору C_h на каждом из концов C_h . В (n, m) обозначениях для $C_h = na_1 + ma_2$, индексы $(n, 0)$ или $(0, m)$ обозначают зигзагообразные нанотрубки, а индексы (n, n) – креслообразные нано-трубки.

Индексы хиральности однослойной нанотрубки (m, n) однозначным образом определяют её диаметр D . Эта связь имеет следующий вид:

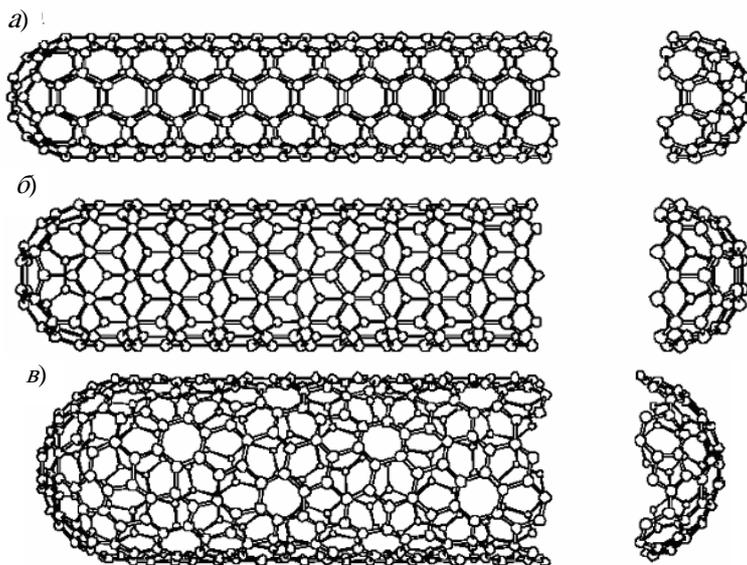


Рис. 6. Схематические модели однослойных углеродных нанотрубок с осью нанотрубки, нормальной к вектору хиральности, который направлен по:

а – $\Theta = 30^\circ$ направление («кресло» (n, n) нанотрубка); **б** – $\Theta = 0^\circ$ направление («зигзаг» $(n, 0)$ нанотрубка); **в** – общее направление типа OB (рис. 3), с $0^\circ < \Theta < 30^\circ$ (хиральная (n, m) нанотрубка)

$$D = \frac{a_0}{\pi} \sqrt{3(m^2 + n^2 + mn)}, \quad (8)$$

где $a_0 = 1,42 \text{ \AA}$ – расстояние между соседними атомами углерода в графитовой плоскости.

Связь между индексами хиральности (m, n) и углом θ даётся соотношением:

$$\theta = \arcsin \frac{3m}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}. \quad (9)$$

Из (9) следует, что $\Theta = 30^\circ$ для (n, n) креслообразной нанотрубки и $(n, 0)$ зигзагообразная нанотрубка имела бы $\Theta = 60^\circ$. С учётом принятого ограничения, что угол хиральности $0^\circ < \Theta < 30^\circ$, угол 60° будет эквивалентен $\Theta = 0^\circ$ для зигзагообразной нанотрубки из-за наличия плоскости симметрии. Различия в диаметре нанотрубки D и угле хиральности являются причиной различий в свойствах углеродных нанотрубок. Число гексагонов N на единичную ячейку хиральной нанотрубки, определяемой целыми числами (n, m) , вычисляется по формуле:

$$N = \frac{2(n^2 + m^2 + nm)}{d_r}, \quad (10)$$

где $d_r = d$, если $|n - m|$ не кратно трём, или $d_r = 3d$, если $|n - m|$ кратно трём, d – больший общий делитель для (n, m) .

Если разница $|n - m|$ кратна трём, такие ОУНТ обладают металлическими свойствами. Полуметаллами являются также все ахиральные трубки типа «кресло». В других случаях ОУНТ показывают полупроводниковые свойства.

Диаметры ОУНТ находятся в диапазоне 0,3 ... 5 нм.

Отличительными особенностями ОУНТ являются простота их строения, меньшее число дефектов и, как следствие, высокие механические и физико-технические характеристики. Вместе с тем следует отметить, что практическое применение этих наноструктур ограничивается электроникой и приборостроением, где требуется сравнительно небольшое количество углеродных нанотрубок высокого качества.

Порядок выполнения работы

1. Изучить представленные методические указания.
2. Получить от преподавателя изображение ОУНТ, полученное методом зондовой микроскопии субатомного разрешения или молекулярного дизайна.
3. Определить ось симметрии ОУНТ.
4. Любым доступным методом определить угол хиральности Θ .
5. На кристаллографически эквивалентный двухмерный графеновый лист нанести развёртку ОУНТ.
6. Определить направление единичных векторов a_1 и a_2 .
7. Построить вектор хиральности C_h . Методом треугольника или параллелограмма определить значения индексов хиральности l и m . Определить угол вращения Ψ и трансляция z .
8. Используя формулу (9), проверить правильность определённого угла хиральности по пункту 4 (погрешность не более 5%).
9. Используя формулу (8), рассчитать диаметр ОУНТ.
10. Сделать выводы об электрических свойствах представленной ОУНТ.

Практическое задание 3

МНОГОСЛОЙНЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ И НАНОВОЛОКНА

Цель занятия: изучить структуру многослойных углеродных нано-трубок и нановолокон, научиться определять их геотермические параметры и морфологию.

Методические указания. Многослойные углеродные нанотрубки (МУНТ) отличаются от однослойных значительно более широким разнообразием форм и конфигураций. Разнообразие структур проявляется как в продольном, так и в поперечном направлении.

Возможные разновидности поперечной структуры многослойных нанотрубок представлены на рис. 7. Структура типа матрёшки (*russian dolls*) (рис. 7, а) представляет собой совокупность коаксиально вложенных друг в друга однослойных цилиндрических нанотрубок. Другая разновидность этой структуры (рис. 7, б) представляет собой совокупность вложенных друг в друга коаксиальных призм. Последняя из приведённых структур (рис. 7, в) напоминает свиток (*scroll*).

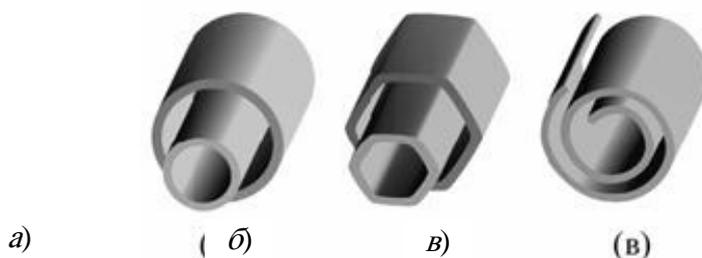


Рис. 7. Модели поперечных структур многослойных нанотрубок:
а – матрёшка; б – шестигранная призма; в – свиток

Структура экспериментально наблюдаемых МУНТ во многом отличается от представленной выше идеализированной картины. Прежде всего это касается дефектов, наличие которых в МУНТ приводит к искажению их структуры. Так, присутствие пяти- и семичленных циклов в структуре не приводит к нарушению их цилиндрической формы, причём при внедрении пятичленного цикла образуется выпуклый изгиб, а при внедрении семичленного – вогнутый.

Для всех структур на рис. 7 характерно значение расстояния между соседними графитовыми слоями, близкое к величине 3,4 Å, присущей расстоянию между соседними плоскостями кристаллического графита, а у дефектных МУНТ оно может достигать 0,4 ... 0,5 нм.

Межслоевое расстояние d_c в бездефектных МУНТ зависит от диаметра трубок $D_{тр}$ и уменьшается по мере его увеличения:

$$d_c = 0,344 + 0,1e^{-\frac{D_{тр}}{2}}. \quad (11)$$

Число слоёв чаще всего составляет не больше 10, но в отдельных случаях достигает нескольких десятков.

Реализация той или иной структуры многослойной нанотрубки в конкретной экспериментальной ситуации зависит от условий синтеза. Наиболее типичной структурой многослойных нанотрубок является структура типа матрёшки (рис. 7, а), в которой трубки меньшего размера последовательно вложены в трубки большего размера.

Свойства углеродных нанотрубок и нановолокон прежде всего зависят от природы химической связи между атомами углерода. Поскольку углеродная нанотрубка может быть представлена как свёрнутый в цилиндр графитовый лист, очевидно, что типы связей этих структур подобны.

Ещё более разнообразны по структуре и морфологии углеродные нановолокна (УНВ), в которых атомные слои могут располагаться под углом к оси волокна. Однако и здесь в большинстве случаев эти слои представляют собой атомные сетки из сочлѐнных шестиугольников.

На рисунке 8 показаны только некоторые возможные конструкции расположения графеновых слоѐв в МУНТ и УНВ.

Основными параметрами МУНТ и УНВ являются средний внешний (D) и внутренний (d) диаметр, средняя длина (L), количество графеновых слоѐв (n) и угол конусности (γ) для структур б, в, д – ж рис. 8.

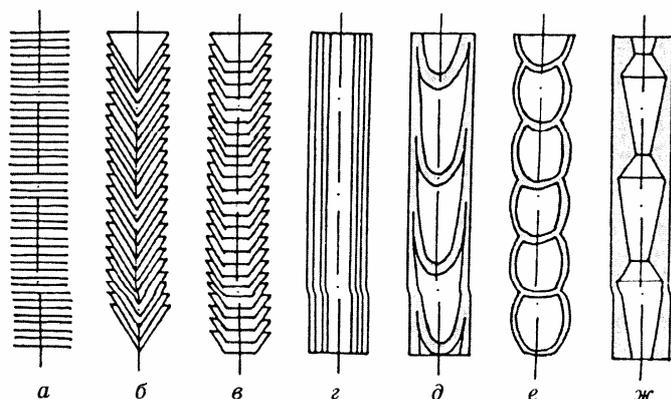


Рис. 8. Морфологические разновидности МУНТ и УНВ:

- a* – нановолокно «столбик монет»; *б* – нановолокно «ёлочной структуры» (стопка конусов, «рыбья кость»); *в* – нанотрубка «стопка чашек» («ламповые абажуры»); *г* – нанотрубка «русская матрёшка»;
- д* – бамбукообразное нановолокно; *е* – нановолокно со сферическими секциями;
- ж* – нановолокно с полиэдрическими секциями

Существует достаточно большое количество методик определения среднего внешнего и внутреннего диаметра МУНТ и УНВ. В рамках данного практического занятия предлагается следующий подход. На изображении (рис. 9), полученном методами просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения, проводится осевая линия нанотрубки. Равномерно по длине осевой линии строятся пять нормалей к ней. Построенные нормали образуют пять сечений, в которых с использованием масштабной линии определяют внешние (по наружным графеновым слоям или их элементам) и внутренние (по внутренним графеновым слоям или их элементам) диаметры МУНТ. С использованием статистического метода Стьюдента рассчитываются значения, абсолютные и относительные погрешности определения внешнего и внутреннего диаметра.

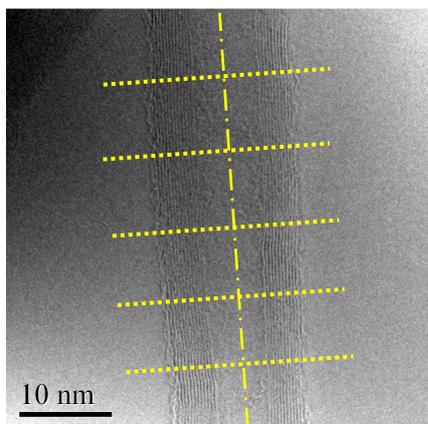


Рис. 9. Изображение МУНТ, полученное методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения

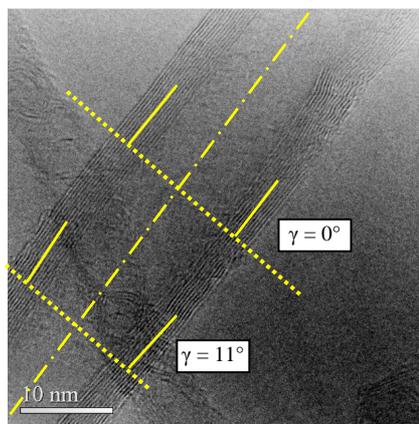


Рис. 10 Изображение углеродного нановолокна с морфологией «стопка чашек» и переменным углом конусности

Углом конусности называют угол между графеновыми слоями с одинаковым номером (рис. 10). Измерение угла конусности также проводится в пяти сечениях, образованных нормальными в осевой линии нанотрубки (рис. 9). Для расчёта угла используется любой доступный способ. С использованием статистического метода рассчитывается среднее значение, абсолютное и относительное отклонение изменения угла конусности.

На примере расчёта среднего значения внутреннего диаметра МУНТ рассмотрим применение метода Стьюдента. С использованием измеренных значений внутреннего диаметра d_i , где $i = 1 \dots 5$, среднеарифметически определяется среднее его значение:

$$\bar{d} = \frac{\sum_{i=1}^n d_i}{n}, \quad n = 5. \quad (12)$$

Для каждого значения d_i вычисляется квадратичная ошибка:

$$\Delta d_i^2 = (\bar{d} - d_i)^2. \quad (13)$$

Далее рассчитывается значение абсолютной ошибки с использованием выражения:

$$\Delta d = \pm 2,8 \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \Delta d_i^2}{n(n-1)}}, \quad n = 5. \quad (14)$$

Относительная ошибка определяется следующим образом:

$$\epsilon_d = \frac{\Delta d}{d}. \quad (15)$$

Порядок выполнения работы

1. Изучить представленные методические указания.
2. Получить от преподавателя изображение МУНТ или УНВ, полученное методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения.
3. С использованием рис. 8 методом сравнения определить морфологию представленных на изображении МУНТ или УНВ.
4. Определить и построить осевую линию МУНТ или УНВ.
5. Определить количество графеновых слоёв, образующих МУНТ или УНВ.
6. Построить пять нормалей к осевой линии.
7. По сечениям, образованным нормальными, определить значения внешних (D_i) и внутренних (d_i) диаметров, углов конусности (γ_i).
8. С использованием метода Стьюдента рассчитать средние значения, абсолютные и относительные отклонения определения внешнего ($\bar{D} \pm \Delta D, \epsilon_D$) и внутреннего ($\bar{d} \pm \Delta d, \epsilon_d$) диаметров и угла конусности ($\bar{\gamma} \pm \Delta \gamma, \epsilon_\gamma$).
9. Сделать выводы.