Эта часть работы выложена в ознакомительных целях. Если вы хотите получить работу полностью, то приобретите ее воспользовавшись формой заказа на странице с готовой работой:

<https://stuservis.ru/doklad/100948>

Тип работы: Доклад

Предмет: Физическая химия

-

Основной задачей нанотехнологии является создание материалов с определенными свойствами, зависящими в первую очередь от дисперсности составляющих элементов, наночастиц. Получаемые современными химическими методами наночастицы характеризуются функцией распределения по размеру, при этом их состав и строение являются неопределенными. В результате достаточно сложно осуществить соотнесение наблюдаемых физико-химических свойств наноматериала с конкретным составом или структурой частицы. Следовательно, фундаментальный и практический интерес для нанотехнологии представляет изучение атомных кластеров строго определенного состава и строения.

Собственно сами термодинамические функции состояния кластеров углерода, даже если они получены, трудно целенаправленно использовать из-за многообразия структур возможных кластеров углерода. Поэтому необходима их классификация. Теоретически углерод может иметь бесконечное число аллотропных модификаций [1]. Различные виды самих алло-тропов углерода и различные их классификации подробно описаны в литературе [2, 3].

Наиболее последовательная классификация аллотропов углерода получается, если рассматривать количество атомов углерода, находящихся в первой координационной сфере каждого из атомов, т.е. координационное число (КЧ). Графическая классификация аллотропов углерода детально изложена в [2], когда вершинам равностороннего треугольника отвечают модификации с координационными числами атомов углерода: 2 (карбин), 3 (графен, фуллерены, графит) и 4 (алмаз).

Поскольку поверхностные атомы кластеров углерода имеют КЧ от 1 до 3, а не от 2 до 4, как в аллотропах, то кластеры не всегда могут быть классифицированы подобно аллотропам. Только фуллерены, представляющие собой оболочки поверхностных атомов, могут быть описаны соответствующими кластерами. Поэтому для кластеров, моделирующих основной структурный мотив аллотропа (назовем их аллотропоподобными, т.е. алмазоподобными, графеноподобными и т.п. кластерами), но имеющих поверхностные атомы, следует ввести иную схему классификации. Опираясь на идею графической классификации аллотропов, возможная схема классификации аллотропоподобных кластеров S_n представлена на рис. 1.

Вершины квадрата на рис. 1 отвечают диуглероду C_2 с координационным числом углерода, равным 1 (к.ч. = 1); карбину (carbyne, c, к.ч. = 2); графену (graphene, gn), графиту (graphite, gt), фуллеренам (fullerene, f), нанотрубкам (nanotube, tb, к.ч. = 3) и алмазу (diamond, d, к.ч. = 4).

Рис. 1. Графическая схема классификации аллотропоподобных кластеров S_n по арифметически среднему координационному числу атомов углерода в кластере. Внутри окружностей, указаны координационные числа атомов углерода

Энергии стабилизации всех линейных и циклических кластеров [4], удовлетворительно согласуются с величиной W_n (рис. 2). Поэтому, в основном, стабильность кластеров определяется локальной структурой его атомов углерода.

Рис. 2. Изменение энергии стабилизации кластеров углерода C_4-C_{26} [4] в зависимости от значения среднего эффективного координационного числа атомов углерода в кластерах. Сплошная линия регрессии относится к линейным кластерам с нечетным количеством атомов углерода. Штриховая - к кластерам состава $4t+2$, где $t = 1, 2, 3, 4, 5, 6$. Обозначения точек: черные ромбы относятся к линейным нечетным кластерам, светлые ромбы - линейным четным, черные треугольники - нечетным циклам

1. Станкевич И.В., Никеров М.В., Бочвар Д.А. Структурная химия кристаллического углерода: геометрия, стабильность, электронный спектр // Усп. химии. 1984. Т. 53, № 7. С. 1101-1124.

2. Беленков Е.А., Ивановская В.В., Ивановский А.Л. Наноалмазы и родственные углеродные

- наноматериалы. Компьютерное моделирование. Екатеринбург: УрО РАН - 2008. - 169 с.
3. Раков Э.Г. Нанотрубки и фуллерены. М: Университетская книга, Логос. 2006. 371 с.
4. Li P. DFT studies on configurations, stabilities, and IR spectra of neutral carbon clusters // J. At. Mol. Sci. 2012. V. 3, N. 4. P. 308-322.
5. Ионов С.П., Кузнецов Н.Т. // Журн. неорган. химии. 2003. Т. 48. № 8. С. 1350.
6. НАНОЧАСТИЦЫ БОРА: РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ И СВОЙСТВА Ионов С.П., Кузнецов Н.Т. Журнал неорганической химии. 2011. Т. 56. № 10. С. 1669-1677.
7. Бамбуров В.В., Ивановская А.Н., Еняшин А.Н. и др. // Докл. АН. 2003. Т. 388. № 5. С. 624.
8. А.Н.Еняшин, А.Л.Ивановский. Журн. физ. химии, 79, 1085 (2005)
9. Ю.Е. Лозовик, А.М. Попов. УФН 167, 7, 751 (1997).
10. В.В. Роткин, Р.А. Сурис. ФТТ 41, 5, 809 (1999).
11. А. П. Шпак, Ю. А. Куницкий, В. А. Карбовский, Кластерные и наноструктурные материалы (Киев: Академперіодика: 2001).
12. І. Ф. Казо, О. Д. Мавланова, Фізика і хімія твердого тіла, 11, № 2: 453 (2010).
13. Л. Н. Сидоров, М. А. Юровская и др., Фуллерены (Москва: Издательство «Экзамен»: 2005).
14. С. В. Чернобук, А. Ю. Попов, П. П. Когутюк, В. А. Макара, И. Ф. Казо, Материаловедение, № 5: 45 (2010).
15. Филоненко, В.П. Гетеро-графеновая и гетеро-алмазная фазы, синтезированные в системе В С N под давлением / В.П. Филоненко, И.П. Зибров, В.А. Сидоров, М.В. Тренихин // Физикохимические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2013. – Вып. 5. – С. 353-361.
16. Филоненко, В.П. Синтез новой кубической фазы в системе В С N / В.П. Филоненко, В.Н. Хабашеску, В.А. Давыдов, И.П. Зибров, В.Н. Агафонов // Неорганические материалы. – 2008. – Т.44. – №4. – С. 462-468.
17. Н.И. Файнер и др., “Тонкие пленки карбонитридов кремния и бора: синтез, исследование состава и структуры”, Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева, XLV:3 (2001), 101-108
18. В.А. Кривченко и др., “Исследование поликристаллических алмазных пленок, легированных бором, методами спектроскопии рамановского рассеяния и спектроскопии оптического поглощения”, Журнал технической физики, 77:11 (2007),
19. Н.И. Файнер и др., “Тонкие пленки карбонитридов кремния и бора: синтез, исследование состава и структуры”, Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева, XLV:3 (2001), 101-108
20. <https://chem21.info/info/713751/>

Эта часть работы выложена в ознакомительных целях. Если вы хотите получить работу полностью, то приобретите ее воспользовавшись формой заказа на странице с готовой работой:

<https://stuservis.ru/doklad/100948>