

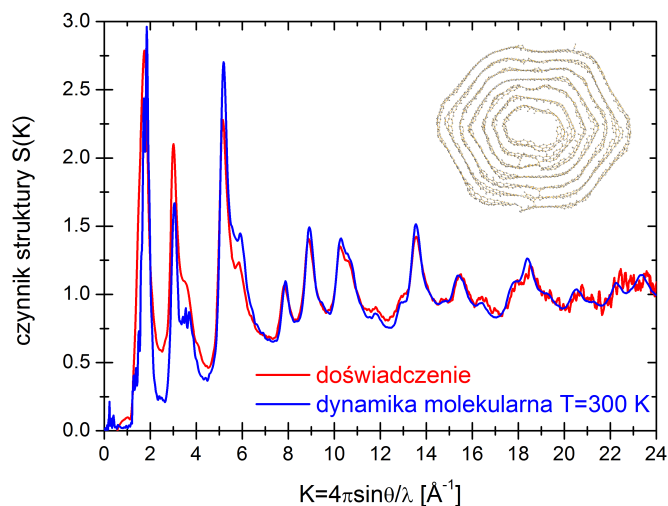
Przemiana nanodiament-nanocelulki węglowe: badania metodą dyfrakcji wysokoenergetycznego promieniowania rentgenowskiego

Łukasz Hawelek^{1,2}, Aleksander Bródka¹, Veijo Honkimaki⁴, John C. Dore³, Satoshi Tomita⁵, Andrzej Burian¹

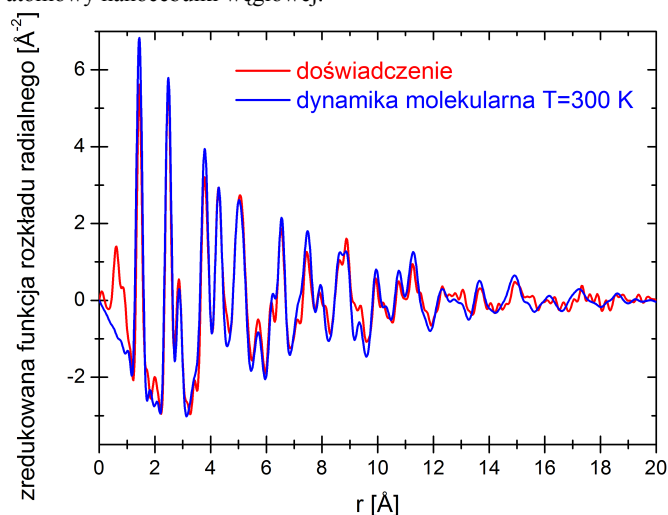
1. University of Silesia, Institute of Physics, Uniwersytecka 4, Katowice 40-007, Poland 2. Institute of Nonferrous Metals, Sowińskiego 5, Gliwice 44-100, Poland 3. University of Kent, Canterbury CT2 7NR, United Kingdom 4. European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), 6, Jules Horowitz, Grenoble 38000, France 5. Graduate School of Materials Science, Nara Institute of Science and Technology, Nara 630-0192, Japan

e-mail: lukasz.hawelek@us.edu.pl

W niniejszej pracy przedstawione zostaną wyniki badań przemiany strukturalnej nanodiamentów o średnicy ok. 47 Å w nanocelulki węglowe w wyniku obróbki wysokotemperaturowej. W badaniach tych zastosowano metodę dyfrakcji wysokoenergetycznego promieniowania synchrotronowego oraz symulacji komputerowych dynamiki molekularnej (DM) z wykorzystaniem potencjału REBO (Reactive Bond Order Potential) [1]. W trakcie procesu transformacji (tzw. grafityzacji) struktury cebulkowe przyjmują kształt sferyczny, a ich finalna forma przybiera kształt nanocząstek wielościennych oraz sferycznych z zamkniętymi powłokami, zbliżonymi do struktur fulerenowych. Tworzenie się wydłużonych nanocząstek wielościennych może być wyjaśnione przez występowanie wyjściowych nanodiamentów w formie aglomeratów nanodiamentowych. W celu zbadania procesu grafityzacji nanodiamentów dla modelu nanodiamentu z pojedynczym diamentopodobnym rdzeniem (~5460 atomów węgla) oraz dla modelu nanodiamentu ze zbliżonym rdzeniem (~13500 atomów węgla) przeprowadzone zostały symulacje DM w temperaturze pokojowej. Następnie dla tej samej liczby atomów, dla obu przypadków, wygenerowano modele atomowe dla dwóch strukturalnych stanów pośrednich w temperaturze 1673 K i 1973 K oraz dla stanu końcowego struktury posiadającej zdeformowane ikozaedryczne fulereny w temperaturze 2273 K. Dla generowanych, a następnie zoptymalizowanych modeli obliczone zostały teoretyczne natężenia i dalej zredukowane funkcje rozkładu radialnego. Poprawność zaproponowanych modeli została zweryfikowana poprzez porównanie wyników teoretycznych z doświadczalnymi zarówno w przestrzeni odwrotnej jak i rzeczywistej. Na rysunku 1 przedstawiono teoretyczny czynnik struktury dla modelu nanocelulki węglowej otrzymanej w temperaturze 2273 K w porównaniu z danymi doświadczalnymi, a na rysunku 2 porównano otrzymany model z doświadczeniem w przestrzeni rzeczywistej. Proponowane przez nas modele nanodiamentu oraz



Rys. 1. Porównanie teoretycznego czynnika struktury z danymi doświadczalnymi dla nanocelulek węglowych otrzymanych temperaturze 2273 K. We wstawce przedstawiono przekrój przez model atomowy nanocelulki węglowej.



Rys. 2. Porównanie teoretycznej zredukowanej funkcji rozkładu radialnego z danymi doświadczalnymi dla nanocelulek węglowych otrzymanych temperaturze 2273 K.

nanocelulek węglowych potwierdzają wcześniejsze obserwacje badanych struktur wykonane przy użyciu transmisyjnego mikroskopu elektronowego [2] oraz nowe podejście do opisu procesu grafityzacji nanocząsteczek diamentowych.

Referencje

- [1] D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott, A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons, *J Phys: Condens Matter* 14 (2002) 783-802.
- [2] S. Tomita, A. Burian, J.C. Dore, D. LeBolloch, M. Fujii, S. Hayashi, Diamond nanoparticles to carbon onions transformation: X-ray diffraction studies, *Carbon* 40 (2002) 1469-1474.

