

Studium mikrostruktury uhlíkových nanomateriálů pomocí rentgenové difrakce Microstructure of carbon black nanomaterials studied by X-ray scattering

Vedoucí / školitel: RNDr. Milan Dopita, PhD., e-mail: dopita@gmail.com

Konzultant: Mgr. Zdeněk Matěj, PhD., e-mail: matej@karlov.mff.cuni.cz

Zásady pro vypracování

1. Studium doporučené odborné literatury, literaturní rešerže.
2. Rentgenografická měření vzorků.
3. Fitování měřených dat, určení mikrostrukturních parametrů vzorků z rtg měření.
4. Korelace mikrostrukturních parametrů určených z rtg měření s výsledky získanými pomocí dalších komplementárních metod: nízkouhlového rozptylu rentgenova záření - SAXS, měření zeta potenciálu, Ramanovy spektroskopie, BET měření, XPS, a mikroskopických metod – skenovací a transmisní mikroskopie (SEM, TEM).
5. Vytvoření fyzikálních modelů mikrostruktury studovaných materiálů.
6. Korelace elektrické vodivosti vzorků s určenými mikrostrukturními parametry.

Zásadním tématem práce je odpověď na otázku proč jsou některé typy nanokrystalického silně porušeného uhlíku (carbon black) vyráběného technologií parciální oxidace z těžkých ropných zbytků vodivé dobře, jiné méně a některé vůbec. Objasnění fyzikálních důvodů a příčin této vodivosti, či nevodivosti.

Seznam odborné literatury

1. S. Ravi, P. Silva (eds.), Properties of Amorphous Carbon, INSPEC, London, UK, 2003.
2. M. Dopita et al., Adv Eng Mater 15, 2013, 1280.
3. M. Dopita et al., Carbon 81, 2015, 272.
4. Aktuální články z odborných periodik.

Předběžná náplň práce

Materiály na bázi nanokrystalického vysoce porušeného uhlíku (turbostratický uhlík – carbon black) jsou využívány v celé řadě průmyslových aplikací jako jsou refraktorní materiály, v chemii povrchů jako katalyzátory, či nosiče katalyzátorů, různé typy filtrů, jako akumulární média pro skladování zemního plynu a vodíku, jako části mikroelektronických výrobků, jako anodové materiály interkalované Li-ionty v Li-iontových bateriích.

Jejich mikrostrukturní popis je značně ztížen množstvím strukturních defektů krystalové mříže jako fluktuacemi v meziovině vzdálenosti jednotlivých grafitických vrstvách, náhodnými laterální translacemi těchto vrstev, jejich zvrásněním a vzájemnou náhodnou disorientací okolo normály k těmto vrstvám.

Náplň práce bude experimentální studium reálné struktury turbostratických uhlíků vyráběných technologií parciální oxidace z těžkých ropných zbytků. Korelace mikrostrukturních parametrů získaných z rtg měření s dalšími vlastnostmi studovaných vzorků, jejich hustotou, porozitou, kontaminací cizími atomy (vodíkem, kyslíkem, kovy) a kyslíkatými skupinami. Vytvoření mikrostrukturního modelu nanokrystalických, silně porušených, uhlíkatých materiálů. Objasnění fyzikálních příčin vysoké či nízké vodivosti nanokrystalického turbostratického uhlíku vyráběného technologií parciální oxidace z těžkých ropných zbytků.

Další informace: <http://www.xray.cz/tmp/bak-CarbonBlack-details-2015.pdf>

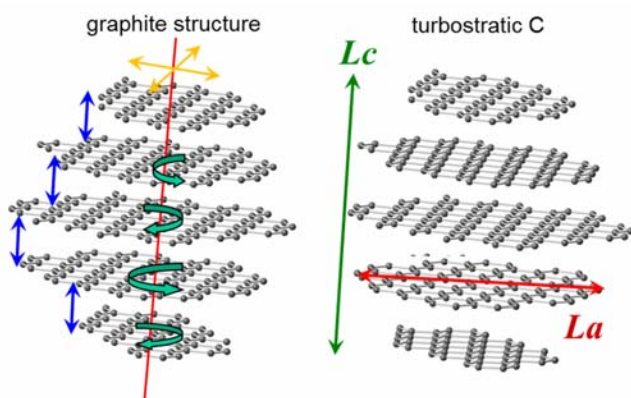
Předběžná náplň práce v anglickém jazyce

Materials on the basis of nanocrystalline highly perturbed carbon (turbostratic carbon – carbon black) are extensively used in whole variety of industrial applications as for example refractory materials, in chemistry of surfaces as catalyzers, or catalyzer holders, various type of filters, as the storing or accumulation media for storing of natural gas and hydrogen, as parts of microelectronic devices, as the anode materials intercalated by Li-ions in Li-ion batteries.

Their microstructural description is complicated by enormous fraction of structural defects of crystalline lattice as fluctuation in interplanar spacings of individual graphitic layers, random lateral translations of these layers, their curvatures and mutual random rotations around the normal to the planes.

The topic of the work will be the experimental study of real structure of turbostratic carbon materials prepared using the partial oxidation method from heavy petroleum residuals. Correlation of microstructural parameters obtained from XRD measurements with additional properties of studied materials, their density, porosity, contamination with other atoms (hydrogen, oxygen and metals) and oxygen groups. Development of microstructural model of nanocrystalline, highly perturbed carbon based materials. Clarification of the physical reasons of high or low conductivity of nanocrystalline turbostratic carbon materials prepared using the partial oxidation method from heavy petroleum residuals.

Obrazová příloha:



mutual layers rotations
 d_{c_0} fluctuation
x-y shifts
curvatures of graphitic layers

Fig. 1 Model of the unperturbed graphite structure and turbostratic carbon clusters. Individual defects i.e. the fluctuations in the graphitic plane distances, shifts of the graphitic planes and rotation of graphitic planes, creating the turbostratic carbon structure from unperturbed graphitic structure are shown with the arrows. The curvatures of individual graphitic layers are not shown in the figure.

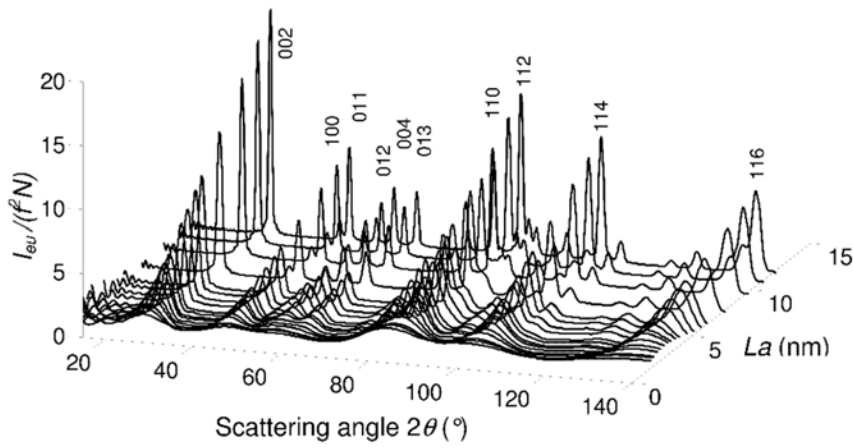


Fig. 2 The cluster size effect. Calculated coherently scattered intensity contribution from spherical graphitic carbon (ideal unperturbed AB stacking) cluster. The diameter of the cluster L_a is varied between 0.9 – 12 nm, which corresponds approx. to 49 – 100000 atoms in the cluster.

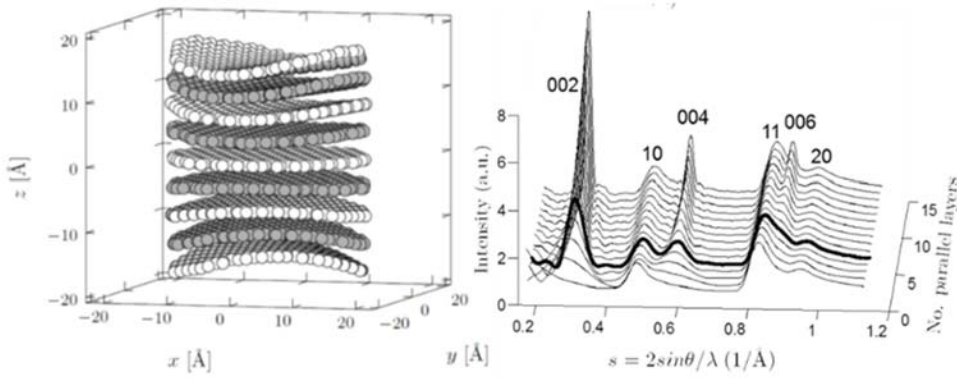


Fig. 3 Model of turbostratic carbon cluster of cylindrical shape (a). Calculated coherently scattered intensity contribution from cylindrical turbostratic carbon cluster with diameter $L_a = 10 \text{ \AA}$; number of parallel layers varied between 1 and 15 (b).

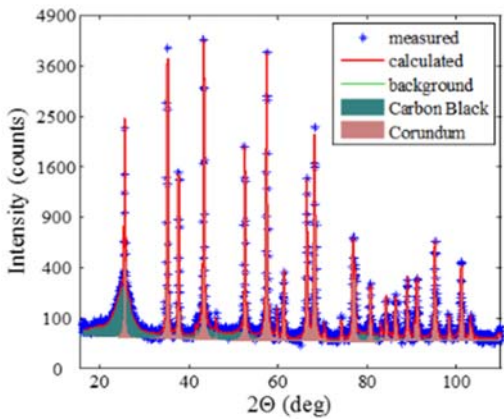


Fig. 4 Measured and refined x-ray scattering patterns from mixture of crystalline phase (corundum) and turbostratic carbon (25 wt. %) sample.