

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON
FACULTAD DE CIENCIAS FISICO MATEMATICAS



Estudio de la estructura de los nanotubos e influencia del tipo
de estructura del grafito para la sinterización de nanotubos
mediante microondas

TESIS

Que como requisito parcial para la obtención del Título
de Lic. en Física

Presenta

Israel Nieto López

CD. UNIVERSITARIA

MARZO DEL 2004

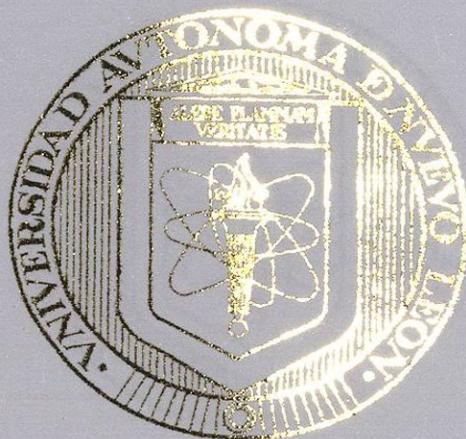
TL
T174
.7
.N54
2004
c.1



1080171464

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO - MATEMÁTICAS



Estudio de la estructura de los nanotubos e influencia del tipo de estructura del grafito para la sinterización de nanotubos mediante microondas

TESIS

Que como requisito parcial para la obtención del título de Lic. En Física

Presenta:

Israel Nieto López

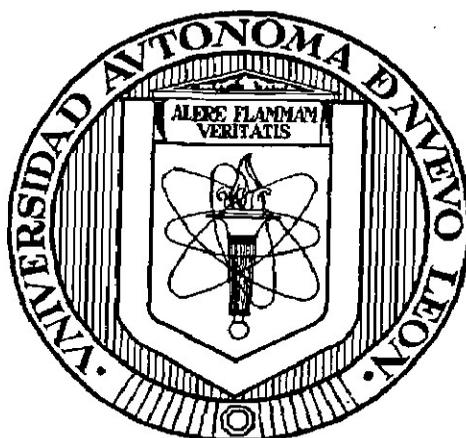
CD. UNIVERSITARIA

MARZO 2004



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO - MATEMÁTICAS



Estudio de la estructura de los nanotubos e influencia del tipo de estructura del grafito para la ~~structurización~~ de nanotubos mediante microondas

Sintesis

TESIS

Que como requisito parcial para la obtención del título de Lic. En Física

Presenta:

Israel Nieto López

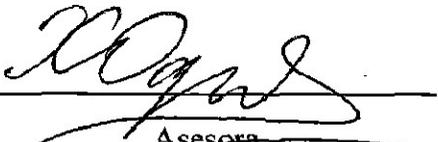
CD. UNIVERSITARIA

MARZO 2004

Universidad Autónoma de Nuevo León
Facultad de Ciencias Físico – Matemáticas

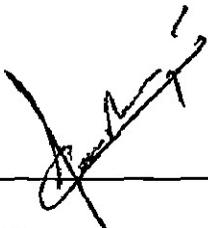
Los miembros del comité de tesis recomendamos que la tesis “Estudio de la estructura de los nanotubos e influencia del tipo de estructura del grafito para la sinterización de nanotubos mediante microondas” realizada por Israel Nieto López sea aceptada para su defensa como opción al grado de Licenciado en Física.

El comité de tesis

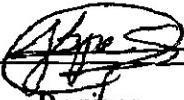

Asesora
Dra. Oxana V. Kharissova



Revisor
M. C. Carlos Martínez
Hernández



Revisor
M. C. Jesús Rivero Jiménez



Revisor
M.C. Jesús Guadalupe Suárez de la Cruz



Vo. Bo.
Dr. Héctor Martín Guerrero Villa
Director de la Carrera de Física

ÍNDICE

Índice de Tablas	i
Índice de Figuras	ii
Resumen	iii

	Capítulo	Página
1	NANOTECNOLOGÍA	1
	1.2 Aplicaciones.	2
2	MATERIALES EN BASE CARBONO	4
	2.1 Carbono	4
	2.2 Hibridación en un átomo de carbono	8
	2.3 Grafito	11
	2.3.1 Grafito bidimensional	16
	2.3.2 π -bandas del grafito bidimensional	21
	2.3.3 σ bandas del grafito bidimensional	24
	2.4 Estructura del diamante	25
	2.5 Fullerenos	27
	2.6 Teorema de Euler	28
	2.7 Nanotubos	31
	2.7.1 Clasificación de los nanotubos	31
	2.7.1.1 Nanotubos de monocapa	32
	2.7.1.2 Nanotubos de multicapa	33
	2.7.2 Estructura de los nanotubos	34

3	TEORÍA Y METODOLOGÍA	37
3.1	Difracción de rayos X	37
3.2	Microscopio electrónico de transmisión (TEM)	39
3.3	Microscopio electrónico de barrido (SEM)	40
4	EXPERIMENTACIÓN	41
4.1	Método de ^{Sintesis} sintetización de nanotubos en aire.	41
4.2	Método de ^{Sintesis} sintetización de nanotubos en vacío.	43
5	RESULTADOS Y DISCUSIÓN	45
5.1	Síntesis de nanotubos con grafito hexagonal tipo Bernal	45
5.1.1	Análisis por difracción de rayos X	47
5.1.2	Análisis por microscopía electrónica de transmisión.	49
5.2	Síntesis de nanotubos con una mezcla de grafito Bernal y romboedral (AB+ABC)	50
5.2.1.	Análisis del grafito mixto por medio de difracción de rayos-X	51
5.2.2.	Análisis por microscopía electrónica de transmisión	54
5.2.3.	Análisis por microscopía electrónica de barrido	57
6	CONCLUSIONES	61
7	RECOMENDACIONES	62
	BIBLIOGRAFÍA	63

Índice de Tablas

Tabla		Página
Tabla I	Prefijos y abreviaturas en el sistema métrico decimal	2
Tabla II	Propiedades del átomo del carbono	5
Tabla III	Isótopos del carbono	6
Tabla IV	Isómeros del carbono	10
Tabla V	Condiciones de los experimentos	44
Tabla VI	Resultados de la síntesis de los experimentos 1-3	45
Tabla VII	Resultados de la síntesis de los experimentos 4-8	50
Tabla VIII	Energía interna del sistema	53
Tabla IX	Características de las estructuras gráficas.	53
Tabla X	Dependencia del diámetro de los nanotubos de carbono con catalizador de plata	55
Tabla XI	Observaciones de los nanotubos en diferentes tiempos	56

Índice de Figuras

Figura	Página
Figura 1. Estructura del benceno	5
Figura 2. P, T Diagrama de fase del carbono.	7
Figura 3. Estructura de acetileno.	8
Figura 4. Estructura del poliacetileno.	9
Figura 5. Estructura del metano.	9
Figura 6. La estructura del grafito hexagonal tipo AA.	12
Figura 7. La estructura del grafito hexagonal tipo “Bernal” o AB.	13
Figura 8. La estructura del grafito romboedral ABC.	14
Figura 9. a) Celda unitaria b) Zona de Brillouin	16
Figura 10. Estructura del diamante.	26
Figura 11. Estructura atómica del fullereno.	28
Figura 12. Estructura cristalográfica de los fullerenos (ccc).	30
Figura 13. a) Estructura sillón b) Estructura zig zag c) Estructura quiral.	31
Figura 14. Red hexagonal del grafito.	34
Figura 15. Esquema de colocación de los crisoles en el desarrollo de los experimentos 1-7	42
Figura 16. Esquema de la ampolleta con grafito y una pieza de cuarzo al vacío.	43

Figura 17. Esquema de colocación de la ampolleta en el desarrollo del experimento 8.	44
Figura 18. Análisis del grafito hexagonal mediante difracción de rayos-X: a) antes del calentamiento ; b) después del calentamiento.	48
Figura 19. Análisis de la mezcla del grafito Bernal y el grafito romboedral por difracción de rayos-X:a) antes de calentamiento por irradiación de microondas; b) después de calentamiento por microondas.	51
Figura 20. Análisis por microscopía electrónica de transmisión de grafito mixto en aire (ver números en tabla X).	54
Figura 21. Análisis por TEM de la muestra obtenida en vacío del grafito mixto	56
Figura 22. Muestras realizadas en aire a) tamaño de la muestra #2, b) tamaño de la muestra #4.	57
Figura 23. Muestras a presión atmosférica a) tamaño del nanotubo muestra 6, b) tamaño del nanotubo muestra 8	58
Figura 24. Muestra en vacío calentada durante 30 minutos.	58
Figura 25. Muestra en vacío calentada durante 60 minutos.	59
Figura 26. Crisol fundido por 90 minutos de calentamiento por irradiación de microondas.	60

RESUMEN

En los últimos años los nanomateriales han tomado un papel muy importante en la ciencia y la tecnología, precisamente esa es una de las razones que motivó a realizar ésta investigación.

En este trabajo se presenta un método de ~~sinterización~~ ^{SINTESIS} de nanotubos por medio de radiación de microondas, aprovechando la capacidad que tiene el grafito de absorber la energía de irradiación de microondas. Para llevar a cabo la experimentación se utilizó un horno de microondas convencional y se procedió a realizar:

- 1.- Calentamiento del grafito hexagonal tipo Bernal por irradiación de microondas en diferentes tiempos y a diferentes condiciones.
- 2.- Calentamiento de grafito mixto 63% grafito hexagonal tipo Bernal y 37% grafito romboedral en diferentes tiempos y a diferentes condiciones.

Las muestras se caracterizaron por medio de Microscopio Electrónico de Barrido, Microscopio Electrónico de Transmisión y Difracción de Rayos X. Estos análisis permitieron llegar a la conclusión de que es posible ~~procesar nanotubos~~ ^{producir} calentando el grafito por irradiación de microondas. Además se estudió la influencia de las condiciones tales como la atmósfera y presencia de catalizador en el proceso, así como la influencia de la estructura del grafito.

Capítulo 1

NANOTECNOLOGÍA

El campo de investigación que se ocupa de estudiar, fabricar, diseñar y controlar materiales a nivel atómico es la nanotecnología. Uno de sus objetivos principales es construir nuevas estructuras átomo por átomo. Sin embargo, la tecnología actual todavía no cuenta con el control necesario para hacerlo con todos los elementos de la tabla periódica. Aunque las complicaciones son muchas, ya se tienen indicios y experimentos que permiten diseñar algunos materiales nanoestructurados. El poder de la nanotecnología ha despertado a nivel mundial una gran cantidad de investigaciones encaminadas al control atómico de los materiales.

A un nivel de conversación coloquial resulta poco intuitivo usar la notación científica, el modo tradicional consiste en usar cientos, miles, millones, etc. Otra opción consiste en la definición de múltiplos y submúltiplos (Tabla I), que no son más que unidades cuyo factor de conversión respecto a la unidad fundamental es una potencia entera de diez. Los múltiplos (mayores que la unidad) y submúltiplos (menores que la unidad) se indican mediante un prefijo. Así, el prefijo kilo- indica una unidad $10^3 = 1000$ veces mayor, con lo que 1 kilo metro = 1000 metros. Que es más fácil de entender para nosotros. Del mismo modo, "micro" significa "millonésima de" (10^{-6}).

Tabla I Prefijos y abreviaturas en el sistema métrico decimal

MÚLTIPLOS			SUBMÚLTIPLOS		
Prefijo	Abreviatura	Valor	Prefijo	Abreviatura	Valor
Deca	D	$10^1=10$	Deci	d	$10^{-1}=0.1$
Hecto	H	$10^2=100$	Centi	c	$10^{-2}=0.01$
Kilo	K	$10^3=1000$	Mili	m	$10^{-3}=0.001$
Mega	M	$10^6=1000000$	Micro	μ	$10^{-6}=0.000001$
Giga	G	$10^9=1000000000$	Nano	n	$10^{-9}=0.000000001$
Tera	T	$10^{12}=1000000000000$	Pico	p	$10^{-12}=0.000000000001$
Peta	P	$10^{15}=1000000000000000$	Femto	f	$10^{-15}=0.000000000000001$

1.2 Aplicaciones

Las propiedades de los materiales pueden cambiar notablemente cuando su tamaño se reduce a partículas de la escala de nanómetros, dichas propiedades han sido sujetas a una gran cantidad de estudios sobre su aplicación a la tecnología para hacer cada vez más cómoda la vida diaria. [1]

Con la partícula de 60 átomos de carbono (fullereno) se encuentra la fabricación de nanocápsulas para almacenar desechos radiactivos, que impiden escapes peligrosos inhibidores de enzimas relacionadas con virus tales como el SIDA.

Además aplicaciones recientes de los nanotubos de carbono se usan como:

Almacenamiento de gases: el principal problema para la creación de automóviles ecológicos, utilizando hidrógeno como combustible, es el almacenamiento de este gas en celdas de pesos livianos que sean capaces de absorber grandes cantidades de gas. Debido a que los manojos de nanotubos de una sola capa cuentan con cavidades internas e ínter tubulares, es posible el almacenamiento de hidrógeno.

Sensores: esta aplicación se debe a que la conductividad de pastillas fabricadas con nanotubos de una sola capa varía dependiendo de la atmósfera gaseosa en la que se encuentran los tubos. Por ejemplo si los tubos son expuestos a una atmósfera que contiene únicamente uno por ciento de amoníaco, la conductividad de los tubos disminuye casi instantáneamente. Asimismo si los nanotubos son expuestos a 200 partes por millón de óxido nitroso, la conductividad de la muestra aumenta rápidamente. Estos resultados demuestran el gran potencial que tiene los nanotubos en el área de sensores de gas peligroso.

Fuentes de emisión de campos: en 1995, Walter de Heer y colaboradores demostraron que los nanotubos de varias capas de carbono se comportan como emisores de campo que operan con altas intensidades de corriente y bajos voltajes. Estos resultados implican que es posible generar pantallas de televisión de ultra definición, ya que cada píxel estaría formado por uno o varios nanotubos.

También se intenta crear nanomáquinas ó nanorobots los cuales regenerarán el cuerpo humano al encontrar la enfermedad después de que congelen el cuerpo humano mediante la práctica criogénica que consiste en preservar un cuerpo mediante su congelamiento con la finalidad de resucitarlo en el futuro.

Capítulo 2

MATERIALES EN BASE CARBONO

2.1 Carbono

El carbono es conocido desde tiempos prehistóricos y se encuentra ampliamente distribuido en la naturaleza. La vida en la Tierra está basada en el carbono. Es un elemento abundante en el Sol, las estrellas, cometas y atmósfera de muchos planetas en forma de CO₂. La energía del Sol y de las estrellas puede atribuirse en parte al ciclo del carbono – nitrógeno [2].

Como se ve en el comportamiento de los átomos para formar cierto número de combinaciones depende de su estructura atómica. El carbono tiene cuatro electrones de valencia (Tabla II). En la última capa del átomo puede almacenar hasta 8 electrones. Cada átomo de carbono puede enlazarse con hasta cuatro átomos diferentes también como con si mismo. Esto forma muchos diferentes compuestos de varios tamaños.

Además el carbono se enlaza en forma de anillos aromáticos, el más sencillo es el benceno que consiste en seis átomos de carbono con seis átomos de hidrógeno (Figura 1). El químico alemán Friedrich August Kekule fue el primero en descubrir su estructura hexagonal C₆H₆ [3].

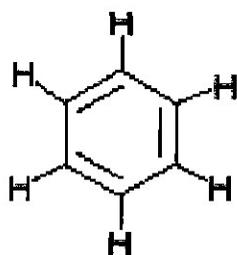


Figura 1. Estructura del benceno.

Las propiedades de los materiales dependen del enlace que exista entre los átomos que componen el material los cuales a su vez dependen de las propiedades de los átomos que los componen por ejemplo, de electrones de valencia, electronegatividad, etc. (Tabla II).

Tabla II Propiedades del átomo del carbono

Número Atómico:	6
Masa Atómica:	12,0107UMA
Número de protones/electrones:	6
Número de neutrones (Isótopo 12-C):	6
Estructura electrónica:	[He]2s ² 2p ²
Electrones en los niveles de energía:	2,4
Números de oxidación:	-4, +2 (CO), +4
Electronegatividad:	2,55
Energía de ionización (kJ.mol⁻¹):	1090
Afinidad electrónica (kJ.mol⁻¹):	122
Radio atómico (pm):	77
Radio iónico (pm) (carga del ion):	260 (-4)
Entalpía de fusión (kJ.mol⁻¹):	105,1
Entalpía de vaporización (kJ.mol⁻¹):	710,9
Punto de Ebullición (°C):	4827(sublima)
Volumen atómico (cm³/mol):	3,42

El carbono es un no-metal inodoro e insípido. Relativamente reactivo y reductor de la mayoría de los óxidos a elevadas temperaturas.

El carbono se funde aproximadamente a 4,500 °C (Figura 2). Con oxígeno se quema para producir el óxido CO₂ y la temperatura de inflamación depende del grado de división del carbono.

Es insoluble en la mayoría de los disolventes. Se disuelve en algunos metales fundidos: hierro, cobalto y níquel. Se encuentra en la naturaleza en cinco isótopos [4] (Tabla III) y cuatro formas alotrópicas:

Grafito: hexagonal 2D y 3D, Bernal y romboedral.

Diamante: tetraédrico.

Fullereno: 0D 60 átomos de carbono enlazados en forma esférica.

Nanotubo: 1D n átomos de carbono enlazados en forma de un tubo donde n varía.

Actualmente se piensa que hay otra forma, el carbono blanco y que el carbono amorfo no es una forma alotrópica.

Tabla III Isótopos del carbono

Isótopo	Vida media
C-11	20.3 minutos
C-12	Estable
C-13	Estable
C-14	5730.0 años
C-15	2.5 segundos

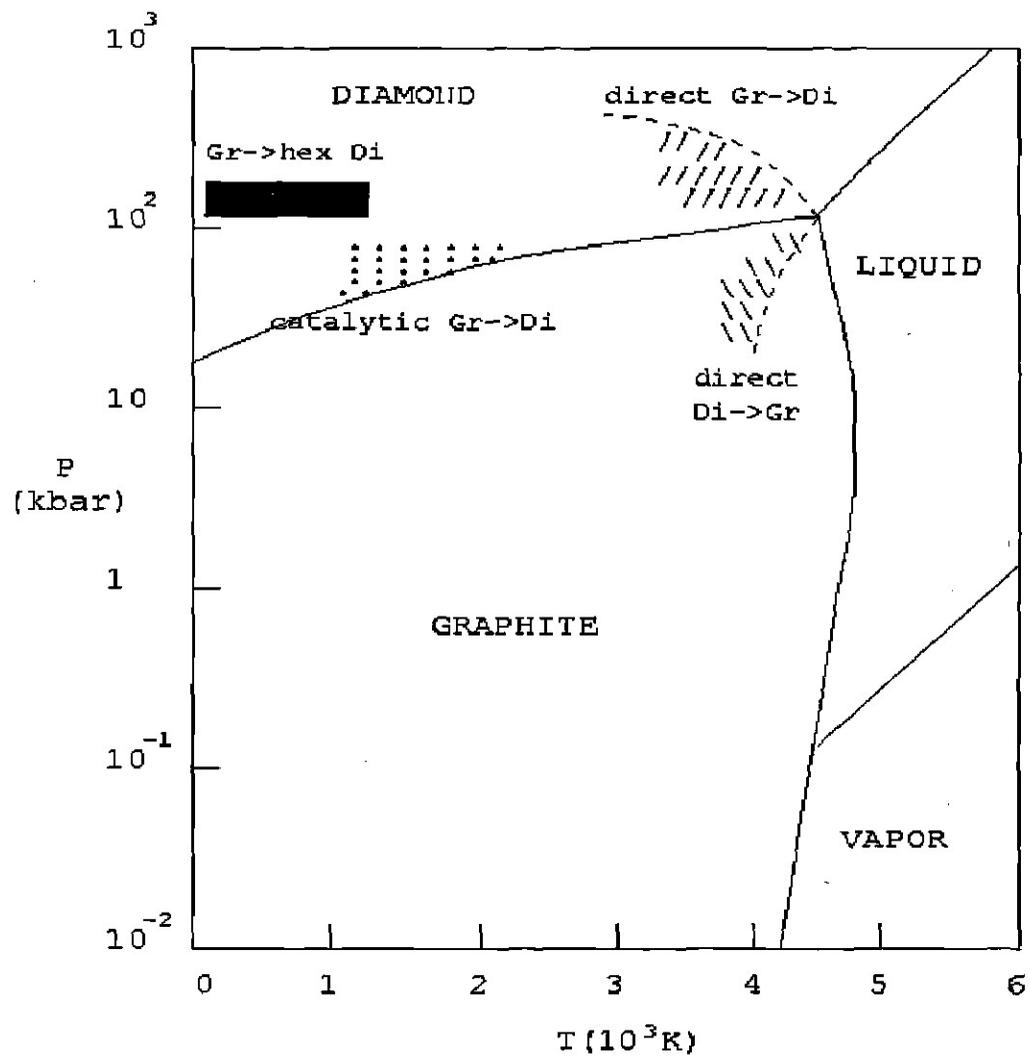


Figura 2. P, T Diagrama de fase del carbono.

2.2 Hibridación en un átomo de carbono

Los materiales en base de carbono, clusters, y moléculas son únicos en muchas formas.

Una distinción relaciona a muchas posibles configuraciones de los estados electrónicos de un átomo de carbono, la cual es conocida como hibridación de los orbitales atómicos.

Cada átomo de carbono tiene seis electrones que ocupan $1s$, $2s^2$, y $2p^2$ orbitales atómicos.

El orbital $1s^2$ contiene dos electrones enlazados muy fuertemente, y ellos son llamados electrones del núcleo (core electrons) cuatro electrones ocupan los $2s^2 2p^2$ orbitales y éstos que están más débilmente enlazados, son llamados electrones de valencia. En la fase cristalina los electrones de valencia dan lugar a $2s, 2p_x, 2p_y$, y $2p_z$ que son importantes en la formación de enlaces covalentes. En los materiales de carbono la diferencia de energía entre el más lejano $2p$ nivel de energía y el más cercano $2s$ nivel de energía en el carbono es pequeño comparado con la energía de amarre de los enlaces químicos. Las funciones de onda electrónica para estos cuatro electrones puede mezclarse fácilmente unos con otros, por eso se combinan los $2s$ y los tres $2p$ orbitales atómicos y aumenta la energía de enlace del átomo de carbono con los átomos vecinos. Esta mezcla de los $2s$ y $2p$ orbitales atómicos es llamada hibridación, así la mezcla de un solo $2s$ electrón con ($n=1,2,3$) $2p$ electrones es llamado sp^n hibridación.

En el carbono, ocurren tres posibles hibridaciones [5]:

$sp \Rightarrow$ por ejemplo el acetileno (Figura 3) $HC\equiv CH$

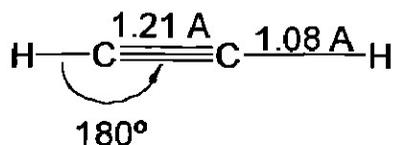


Figura 3. Estructura del acetileno.

$sp^2 \Rightarrow$ por ejemplo poli acetileno (Figura 4) $(HC=CH)_n$

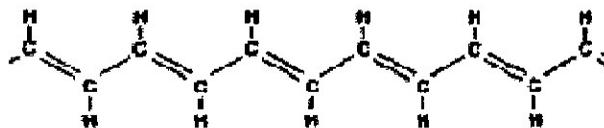


Figura 4. Estructura del poliacetileno [9].

$sp^3 \Rightarrow$ por ejemplo el metano (Figura 5) (CH_4)

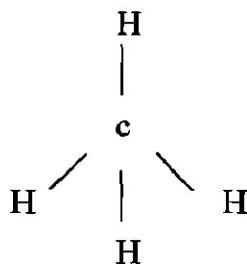


Figura 5. Estructura del metano.

Otros elementos del grupo IV tal como el Si, Ge muestran principalmente la hibridación sp^3 . El carbono difiere del Si y el Ge porque el carbono no tiene orbitales atómicos internos, excepto por el orbital esférico 1s. Y la ausencia de orbitales internos cercanos facilita las hibridaciones envolviendo solo valencia s y p orbitales para el carbono. La falta de hibridación sp y sp^2 en el Si y Ge puede ser relacionada con la ausencia de “material orgánico” hecho de Si y Ge.

Tabla IV Isómeros del carbono

Dimensión	0-D	1-D	2-D	3-D
Isómero	C ₆₀	Nanotubo	Grafito	Diamante
Hibridación	Sp ²	Sp ² (sp)	Sp ²	Sp ³
Densidad [g/cm ³]	1.72	1.2-2.0	2.26	3.515
Largo de enlace	1.40(C=C) 1.46(C-C)	1.44 (C=C)	1.42 (C=C) 1.44 (C=C)	1.54(C-C)
Propiedades Electrónicas	Semiconductor E _g =1.9 eV	Metal o Semiconductor	Semimetal	Aislante E _g =5.47 eV

El carbono es el único elemento de la tabla periódica que tiene isómeros desde 0-dimensiones hasta 3-dimensiones [6], como se muestra en la Tabla IV lo cual depende de la estructura, por tanto introduciremos las estructuras posibles de los materiales de carbono en la fase sólida, las cuales están estrechamente relacionadas con la hibridación spⁿ.

En la hibridación spⁿ existen (n+1)σ enlaces por átomo de carbono, estos σ enlaces crean el esqueleto de la estructura local de la estructura n-dimensional. En la hibridación sp, dos σ enlaces hacen sólo la estructura de una cadena unidimensional (carbyne); en la hibridación sp³, cuatro σ enlaces definen un regular tetraedro los cuales son suficientes para formar una estructura 3-dimensional conocida como el diamante; en la hibridación sp² se tiene 3 σ enlaces formando una estructura planar en 2-dimensiones conocido como grafito, además forma estructuras locales planares 0-dimensionales conocidos como los fullerenos y en cilindros 1-dimensionales conocidos como nanotubos de carbono, en el carbono amorfo es un desorden, es un material 3-dimensional y en el cual existe hibridación sp², sp³ aleatoriamente.

2.3 Grafito

Como ya se mencionó, un átomo libre de carbono tiene una estructura electrónica $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$. En orden de forma de enlace covalente uno de los 2s electrones es promovido al 2p, y los orbitales entonces se hibridizan en una de las tres posibles formas. En el grafito, uno de los 2s electrones se hibridizan con 2 de los 2p's electrones para dar tres sp^2 orbitales a 120° uno del otro sobre el mismo plano que aparentemente se enlaza en una cantidad infinita de moléculas que son similares al benceno y a las moléculas aromáticas, permaneciendo el orbital de la configuración que tiene en p_z , a 90° de este plano, los orbitales sp^2 forman enlaces fuertes σ entre los átomos de carbono en los planos de grafito, donde los p_z , o π orbitales proveen un débil enlace de Van Der Waals entre los planos (Figura 6). La superposición de los π enlaces en los átomos adyacentes en un plano dado provee los enlaces de los electrones en la red que dan al grafito la relativamente alta conductividad eléctrica. El grafito cristaliza en capas atómicas de carbono, con diferentes distribuciones interplanares. Cada plano de los átomos se dispone hexagonalmente. La distancia entre los primeros vecinos es de 1.415Å [5], mientras que la distancia interplanar es de 3.36Å , en este estudio estamos concernidos en tres estructuras grafíticas que definimos a continuación.

Grafito hexagonal AA: lo cual significa que los planos del grafito que están apilados uno sobre el otro son exactamente iguales. En la Figura 6 se presenta la estructura hexagonal de simetría $P6mm$ (Tabla V) con dos átomos por celda primitiva ubicados en las posiciones $(0,0,0)$ y $(1/3,-1/3,0)$ en coordenadas de crystal.

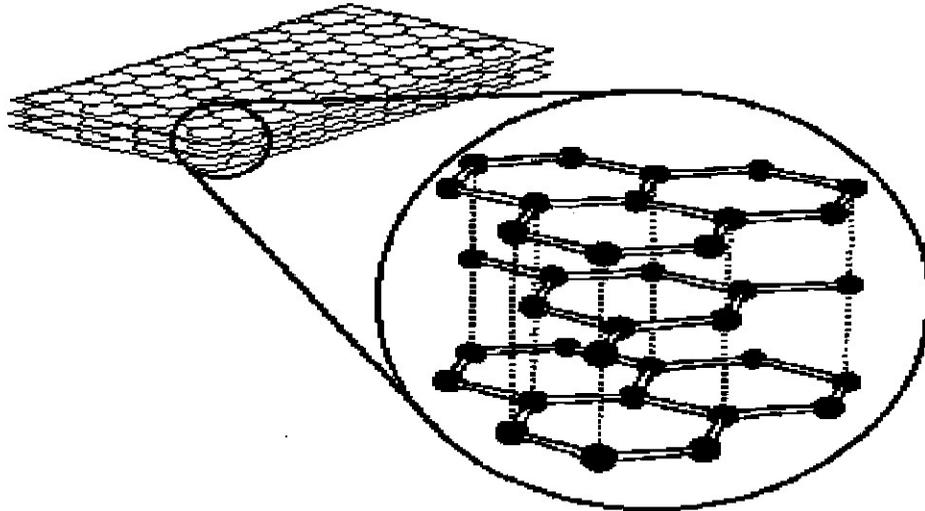


Figura 6. La estructura del grafito hexagonal tipo AA.

Grafito hexagonal AB: lo cual significa que los planos del grafito que están apilados uno sobre el otro son distintos, es decir están movidos uno con respecto al otro.

También conocido como grafito Bernal (Figura 7) estructura hexagonal compacta de simetría $P6mc$ con cuatro átomos por celda primitiva ubicados en las posiciones $(0, 0, 0)$, $(1/3, -1/3, 0)$, $(-1/3, 1/3, 1/2)$ y $(0,0,1/2)$ en coordenadas de crystal.

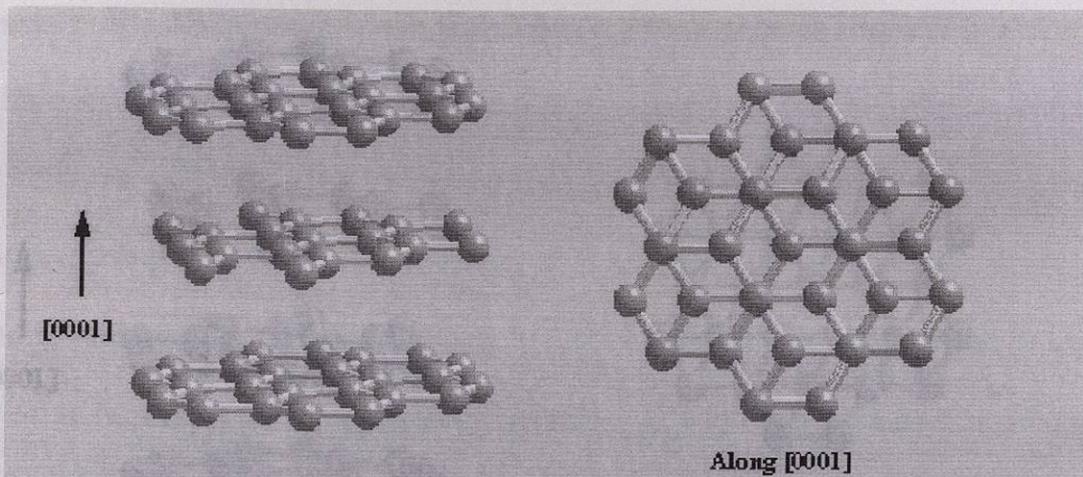


Figura 7. La estructura del grafito hexagonal tipo “Bernal” o AB.

Grafito romboedral ABC: Forma alotrópica del grafito con ABCABC (Figura 8)

secuencia de apilamiento de las capas. La descripción cristalográfica exacta de esta forma alotrópica es dada por el grupo especial D_{3d}^5-R3m .

La estructura del grafito romboedral puede ser mejor considerada como un error de extensión en el empaquetamiento del grafito hexagonal. El grafito romboedral puede no ser aislado en forma pura (grafito natural y las preparaciones del laboratorio contienen menos de 40% de grafito romboedral en combinación con el grafito hexagonal) es producido por deformación de grafito hexagonal y se transforma progresivamente al hexagonal ABAB con modificación sobre el calentamiento alrededor de 1600 K.

Kg/m^3 el grafito se utiliza para hacer electrodos, lápices, filtros, lubricantes, etc. En 1799 H. Guilton demostró que el grafito era carbono puro y en 1893 H. B. Castner hizo la primera preparación de grafito puro [3].

El grafito es muy blando y quebradizo, de tacto resbaladizo. Su color va del gris mate al acerado. Se extrae de minas y se purifica por métodos mecánicos y termoquímicos. También se obtiene grafito artificial (por primera vez, Bunsen, en 1842, a partir de hulla por calentamiento y en forma pura H. B. Castner en 1893), de forma industrial desde

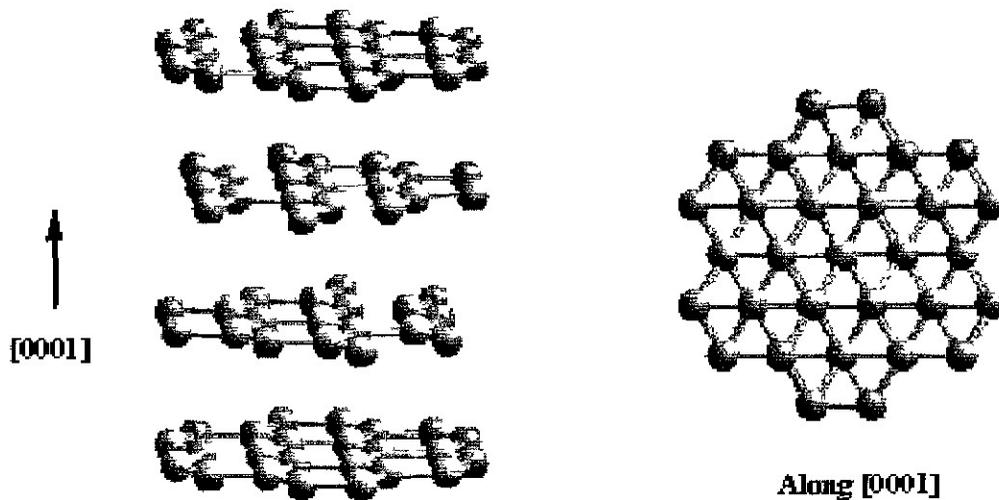


Figura 8. La estructura del grafito romboedral ABC.

En los tres casos la red está formada por capas muy estables que se encuentran unidas muy débilmente. En el desarrollo natural ó el de alta calidad (sintético) del grafito, la secuencia en la que se apilan las capas del grafito es generalmente AB con un espacio interplanar de aproximadamente 0.334 nm, esta estructura es comúnmente llamada como grafito Bernal después que John D. Bernal propuso esta estructura por primera vez en 1924.

El grafito tiene un punto de fusión a los 3527°C (Figura 2), y tiene una densidad de 2260 Kg/m³ el grafito se utiliza para hacer electrodos, lápices, filtros, lubricantes, etc. En 1799 H. Guillon demostró que el grafito era carbono puro y en 1893 H. B. Castner hizo la primera preparación de grafito puro [3].

El grafito es muy blando y quebradizo, de tacto resbaladizo. Su color va del gris mate al acerado. Se extrae de minas y se purifica por métodos mecánicos y termoquímicos. También se obtiene grafito artificial (por primera vez, Bunsen, en 1842, a partir de hulla por calentamiento y en forma pura H. B. Castner en 1893), de forma industrial desde

1895 según un método desarrollado por Acheson [3]: se mezcla coque con brea, alquitrán de hulla o derivados del petróleo y se calcinan; a continuación las varillas obtenidas se transforman en grafito en un horno eléctrico a 2700°C durante varios días. La producción de grafito artificial supera a la del extraído.

El grafito sintético contiene sólo forma hexagonal. La conversión de hexagonal a romboedral se realiza por tratamiento mecánico y al contrario calentando por encima de 1000°C.

2.3.1 Grafito bidimensional

El grafito es una capa tridimensional de red hexagonal de átomos de carbono, una simple capa de grafito, forma un material bidimensional. Incluso en el grafito tridimensional, la interacción con las dos capas adyacentes es pequeña comparada con la interacción intraplana, la separación entre capas que es de 3.35 Å es mucho más grande que la separación entre dos átomos, $a_{c-c}=1.42$ Å. Así la estructura electrónica del grafito 2D es la primera aproximación del grafito 3D.

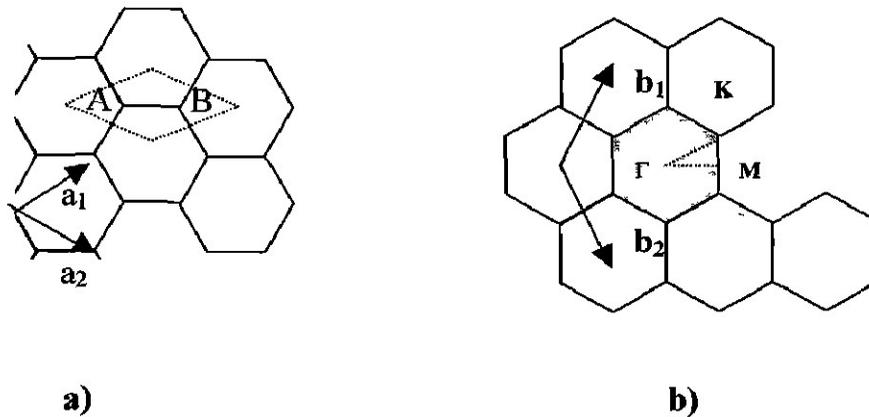


Figura 9. a) Celda unitaria b) Zona de Brillouin

En la Figura 9 mostramos a) la celda unitaria y b) la zona de Brillouin del grafito bidimensional como el rombo punteado y el hexágono sombreado respectivamente, donde

\vec{a}_1 y \vec{a}_2 son los vectores unitarios en el espacio real, y \vec{b}_1 y \vec{b}_2 son los vectores de la red

recíproca. En las coordenadas x,y mostradas en la Figura 9 los vectores unitario en el

espacio real \vec{a}_1 y \vec{a}_2 de la red hexagonal son expresados como

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a, \frac{a}{2} \right) \quad \vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a, -\frac{a}{2} \right) \quad (1)$$

Donde $a = \left| \vec{a}_1 \right| = \left| \vec{a}_2 \right| = 1.42 * \sqrt{3} = 2.46 \text{ \AA}$ es la constante de la red del grafito

bidimensional, correspondiente al vector unitario \vec{b}_1 y \vec{b}_2 de la red recíproca están dadas por

$$\vec{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a} \right), \quad \vec{b}_2 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{a} \right) \quad (2)$$

Correspondiente a la constante de red de $\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$ en el espacio recíproco.

Dos funciones de Bloch, fueron construidas de los orbitales atómicos para 2 átomos de carbono no equivalentes A y B.

Una forma funcional que satisface el teorema de Bloch

$$T_{\vec{a}_i} \Psi = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_i} \Psi, \dots (i = 1, \dots, 3) \quad (3)$$

es

$$\Phi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \varphi_j(\vec{r} - \vec{R}), \dots (j = 1, \dots, n) \quad (4)$$

también llamados orbitales de Bloch.

Introducimos condición a la periódica frontera para cada vector unitario en cada dirección,

$$\Phi_j\left(\vec{k}, \vec{r} + M \vec{a}_i\right) = \Phi_j\left(\vec{k}, \vec{r}\right) \dots (i = 1, \dots, 3) \quad (5)$$

Para que sea consistente la condición a la frontera impuesta sobre el vector de traslación

entonces $T_{M \vec{a}_i} = 1$ por lo tanto $e^{ikMa_i} = 1$ es decir $kMa_i = 2\pi p$

despejando k tenemos

$$k = \frac{2p\pi}{Ma_i} \dots (p = 0, 1, \dots, M-1), \dots (i = 1, \dots, 3) \quad (6)$$

En tres dimensiones, el vector de onda \vec{k} se define para las direcciones x, y, z. Como k_x , k_y , k_z . Así $M^3=N$ vectores de onda que existen en la zona de Brillouin, donde k_i se considera como una variable continua.

Las eigenfunciones en el sólido $\Psi_j\left(\vec{k}, \vec{r}\right) \dots (j = 1, \dots, n)$ donde n es el número de funciones de Bloch, son expresadas por una combinación lineal de las funciones de Bloch

$\Phi_j\left(\vec{k}, \vec{r}\right)$, Como sigue:

$$\Psi_j\left(\vec{k}, \vec{r}\right) = \sum_{j'=1}^n C_{j'}\left(\vec{k}\right) \Phi_{j'}\left(\vec{k}, \vec{r}\right) \quad (7)$$

Donde $C_{j\vec{k}}$ son coeficientes a determinar, ya que las funciones de Bloch satisfacen el teorema de Bloch entonces la combinación lineal de funciones de Bloch deben satisfacer el teorema de Bloch, por tanto las eigenfunciones satisfacen el teorema.

$$E_j(\vec{k}) = \frac{\langle \Psi_j | H | \Psi_j \rangle}{\langle \Psi_j | \Psi_j \rangle} = \frac{\int \Psi_j^* H \Psi_j dr}{\int \Psi_j^* \Psi_j dr} = \frac{\sum_{j,j'=1}^n H_{j,j'}(\vec{k}) C_{j'}^* C_{j'}}{\sum_{j,j'=1}^n S_{j,j'}(\vec{k}) C_{j'}^* C_{j'}} \quad (8)$$

Donde H es el Hamiltoniano del sólido, y las integrales sobre los orbitales de Bloch, $H_{j,j'}(\vec{k})$ y $S_{j,j'}(\vec{k})$ son llamadas matrices de transferencia integral y superposición integral, las cuales son definidas por

$$H_{j,j'}(\vec{k}) = \langle \Phi_j | H | \Phi_{j'} \rangle, \dots S_{j,j'}(\vec{k}) = \langle \Phi_j | \Phi_{j'} \rangle, \dots (j,j' = 1, \dots, n) \quad (9)$$

Derivando parcialmente la ecuación de E y mediante un desarrollo algebraico llegamos

$$\sum_{j'=1}^N H_{j,j'}(\vec{k}) C_{j'} = E_i(\vec{k}) \sum_{j'=1}^N S_{j,j'}(\vec{k}) C_{j'} \quad (10)$$

Definiendo un vector columna como

$$C_i = \begin{pmatrix} C_{i1} \\ \vdots \\ C_{iN} \end{pmatrix} \quad (11)$$

nos da como resultado

$$HC_i = E_i(\vec{k})SC_i \tag{12}$$

Pasando para el lado derecho la expresión anterior tenemos

$$\left(H - E_i(\vec{k})S \right) C_i = 0 \quad \text{si la inversa de la matriz } \left(H - E_i(\vec{k})S \right)$$

existe la multiplicamos por ambos lados de la ecuación y obtenemos $C_i=0$

lo cual significa que no tenemos ninguna función de onda. Entonces concluimos que la matriz no debe de tener inversa y por lo tanto

$$\det[H-ES]=0 \tag{13}$$

la cual es llamada ecuación secular, y es una ecuación de grado n, cuyas soluciones de todos los n eigenvalores de $E_i(k)$ ($i=1,..n$) para un k dado.

2.3.2 π -bandas del grafito bidimensional

La movilidad de los electrones en el plano es alta, como el resultado de la superposición de los orbitales π entre los átomos adyacentes y a temperatura ambiente la resistividad en el plano de alta calidad en un solo cristal de grafito es, aproximadamente $0.4\mu\Omega\text{m}$ [4], sin embargo, la movilidad perpendicular entre los planos es relativamente baja.

Los orbitales de Bloch están dados por

$$\Phi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \varphi_j(\vec{r} - \vec{R}), \dots (j = 1, \dots, n) \quad (14)$$

sustituyendo en la ecuación (8). Cuando consideramos únicamente las interacciones entre los vecinos más cercanos, entonces esto es sólo una integración sobre un solo átomo en

H_{AA} y H_{BB} ,

$$\begin{aligned} H_{AA}(\vec{r}) &= \frac{1}{N} \sum_{R, R'} e^{ik(R-R')} \langle \varphi_A(\vec{r} - R') | H | \varphi_A(\vec{r} - R) \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{R=R'} \epsilon_{2p} + \frac{1}{N} \sum_{R=R'\pm a} e^{\pm ika} \langle \varphi(\vec{r} - R') | H | \varphi(\vec{r} - R) \rangle \\ &+ (\text{ter min os } _ \text{igual } _ \text{o } _ \text{mayor } _ \text{de } _ R = R' \pm 2a) \end{aligned} \quad (15)$$

La máxima contribución al elemento de la matriz H_{AA} es cuando $R=R'$ y esto da la energía de los orbitales de los 2p niveles, ϵ_{2p} , que es el valor de la energía atómica para un átomo libre. Para las contribuciones de los términos en $R=R'\pm a$ o de mayor orden serán por simplicidad considerados cero. De igual manera para H_{BB} también da la energía ϵ_{2p} para el mismo orden de aproximación.

Ahora consideraremos los elementos H_{AB} . Debemos considerar los tres vecinos más cercanos B, relativos al átomo A, que son denotados por los vectores \mathbf{R}_1 , \mathbf{R}_2 y \mathbf{R}_3 .

$$H_{AB}(r) = \frac{1}{N} \sum_R \left\{ \begin{array}{l} e^{ik \cdot R_1} \langle \varphi(r-R) | H | \varphi(r-R-a/2) \rangle + \\ e^{ik \cdot R_2} \langle \varphi(r-R) | H | \varphi(r-R-a/2) \rangle + \\ e^{ik \cdot R_3} \langle \varphi(r-R) | H | \varphi(r-R-a/2) \rangle \end{array} \right\} \quad (16)$$

donde t es la integral de transferencia y está denotada por

$$t = \langle \varphi_A(r-R) | H | \varphi_B(r-R \pm a/2) \rangle \quad (17)$$

Por lo tanto

$$H_{AB} = t(e^{ik \cdot R_1} + e^{ik \cdot R_2} + e^{ik \cdot R_3}) = tf(k) \quad (18)$$

donde

$$\begin{aligned} R_1 &= \frac{a}{\sqrt{3}} \hat{i} \\ R_2 &= -\frac{a}{2\sqrt{3}} \hat{i} + \frac{a}{2} \hat{j} \\ R_3 &= -\frac{a}{2\sqrt{3}} \hat{i} - \frac{a}{2} \hat{j} \end{aligned} \quad (19)$$

entonces

$$\begin{aligned} f(k) &= e^{ik \cdot R_1} + e^{ik \cdot R_2} + e^{ik \cdot R_3} \\ &= e^{i\frac{k_x a}{\sqrt{3}}} + e^{i\left(\frac{k_x a}{2\sqrt{3}} + \frac{k_y a}{2}\right)} + e^{i\left(\frac{k_x a}{2\sqrt{3}} - \frac{k_y a}{2}\right)} \\ &= e^{i\frac{k_x a}{\sqrt{3}}} + 2e^{i\left(\frac{k_x a}{2\sqrt{3}}\right)} \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \end{aligned} \quad (20)$$

Como $f(k)$ es una función compleja y el Hamiltoniano forma una matriz Hermitiana entonces decimos que $H_{BA} = H_{AB}^*$ por lo tanto la matriz de transferencia íntegra está dada por:

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_{2p} & tf(k) \\ tf(k)^* & \epsilon_{2p} \end{pmatrix} \quad (21)$$

La matriz de traslape íntegro está dada por

$$S = \begin{pmatrix} 1 & sf(k) \\ sf(k)^* & 1 \end{pmatrix} \quad (22)$$

Resolviendo la ecuación secular

$$\det(H - ES) = \left(\begin{pmatrix} \epsilon_{2p} & tf(k) \\ tf(k)^* & \epsilon_{2p} \end{pmatrix} - E \begin{pmatrix} 1 & sf(k) \\ sf(k)^* & 1 \end{pmatrix} \right) \quad (23)$$

$$= \begin{pmatrix} \epsilon_{2p} - E & tf(k) - Esf(k) \\ tf(k)^* - Esf(k)^* & \epsilon_{2p} - E \end{pmatrix}$$

$$\det(H - ES) = (\epsilon_{2p} - E)^2 - |f(k)|^2 (t - Es)^2 = 0$$

\Rightarrow

$$(\epsilon_{2p} - E) = \pm \sqrt{|f(k)|^2} (t - Es)$$

\therefore

$$E_{g2D}(k) = \frac{\epsilon_{2p} \pm t \sqrt{|f(k)|^2}}{1 \pm s \sqrt{|f(k)|^2}}$$

2.3.3 σ bandas del grafito bidimensional

Ahora consideraremos las σ bandas del grafito bidimensional. Hay tres orbitales atómicos de enlace covalente por átomo de carbono, $2s$, $2p_x$, y $2p_y$. Así tenemos 6 orbitales de Bloch en los dos átomos de la celda unitaria, produciendo 6 σ bandas. Calcularemos estas 6 σ bandas usando una matriz Hamiltoniana de 6×6 y una matriz de superposición y resolveremos la ecuación secular para cada punto k . Para los eigenvalores así obtenidos, tres de las seis σ bandas son bandas de enlace σ que aparecen debajo de la energía de Fermi, y las otras tres σ bandas son bandas de antienlace σ que aparecen por encima de la energía de Fermi.

Los cálculos del Hamiltoniano y la matriz de superposición es realizada analíticamente, usando un pequeño número de parámetros. De aquí en adelante colocaremos los elementos de la matriz de acuerdo con las identidades atómicas para el átomo libre: $2s^A$,

$2p^A_x$, $2p^A_y$, $2s^B$, $2p^B_x$, $2p^B_y$. Entonces los elementos de la matriz acoplados al mismo átomo pueden ser expresados por una pequeña matriz de 3x3 que es un pequeño sub-block de la matriz de 6x6.

$$H_{AA} = \begin{pmatrix} \epsilon_{2s} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{2p} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{2p} \end{pmatrix}, \dots, S_{AA} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

donde ϵ_{2p} esta dado por la ecuación (14) y ϵ_{2s} es la energía orbital del nivel 2s.

Los elementos de la matriz para los orbitales de Bloch entre los átomos A y B pueden ser obtenidos tomando los componentes de $2p_x$ y $2p_y$ en dirección paralela o perpendicular al enlace σ .

2.4 Estructura del diamante

El diamante tiene enlace covalente, pocos cristales tan importantes son hechos de átomos unidos juntos en el cristal por fuerzas covalentes. Un número no menos importante depende de fuerzas covalentes en una o dos dimensiones y de las fuerzas de Van Der Waals.

El ejemplo por excelencia del primer tipo es el diamante. Cada átomo de carbono tiene cuatro enlaces en forma tetraédrica con sus cuatro átomos de carbono vecinos por enlace covalente. Estos enlaces son poco diferentes de los encontrados entre los átomos de carbono en moléculas orgánicas. El calor para la sublimación del diamante, a la forma gaseosa de los átomos de carbono, está experimentalmente establecido en cerca de 710 KJ* mol⁻¹. Un cristal de diamante con un número de Avogadro η de átomos tendrá 2η

enlaces de carbono. La conversión de un cristal a átomos gaseosos requerirá una expansión de la energía al doble de la energía de enlace. La energía del enlace es entonces calculada como $355 \text{ KJ} \cdot \text{mol}^{-1}$.

La estructura del diamante está basada en la red cúbica centrada en las caras o *fcc*. La celda primitiva consiste en dos redes *fcc*, la primera centrada en el punto (0,0,0) y la segunda está centrada en el $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, o sea que está desplazada $\frac{1}{4}$ respecto de la diagonal del cubo de la primera red (Figura 10).

La característica de la estructura del diamante es el enlace tetraédrico, en el cual cada átomo está enlazado con otros cuatro átomos vecinos. La estructura del diamante está relativamente vacía, la máxima proporción de espacio ocupado por esferas sólidas es 0.34, lo cual representa un 46% del espacio ocupado por las estructuras *hcp* o *fcc*.

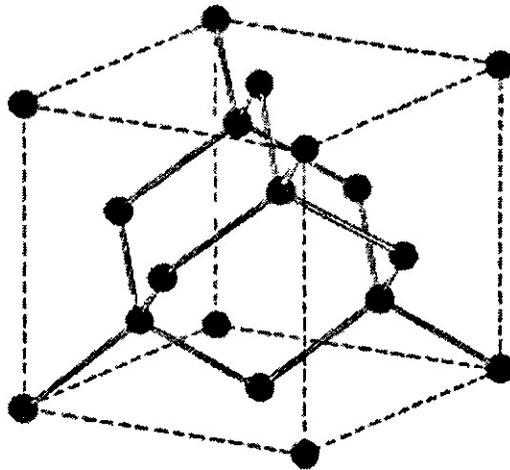


Figura 10. Estructura del diamante.

2.5 Fullerenos

En 1985 se identificó un nuevo tipo de configuración atómica ó molécula de carbono, con la composición genérica C_{60} (Figura 11), después encontraron que el carbono también puede crear una composición genérica en la que n puede variar desde 20 hasta varios cientos, en estas configuraciones los átomos de carbono ocupan los vértices de una estructura poliédrica hueca compuesta por un cierto número de hexágonos, pero siempre 12 pentágonos en medio. Estas estructuras asemejan los domos geométricos de R. Buckminster Fuller. Estas nuevas formas de los arreglos de los átomos de carbono fueron encontradas en forma de un balón de fútbol que fueron llamados fullerenos por **Robert F. Curl, Harold W. Kroto y Richard E. Smalley** [11,12,13]. El número de átomos de carbono puede variar y por esta razón el número de estructuras alotrópicas aumentará [14]. Los fullerenos creados por Robert F. Curl, Harold W. Kroto y Richard E. Smalley se formaron mediante condensación del átomo de carbono en una atmósfera de gas inerte.

Existen diversas maneras de obtener formas alotrópicas de carbono, las cuales son obtenidas, por ejemplo, mediante unos intensos pulsos de láser sobre la superficie de carbono ó haciendo saltar un arco eléctrico entre dos electrodos de grafito.

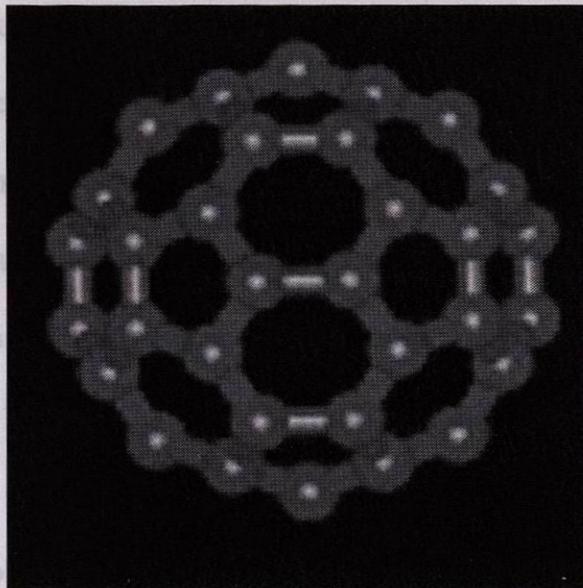


Figura 11. Estructura atómica del fullereno.

2.6 Teorema De Euler

El Teorema de Euler [15] es un teorema que relaciona el número de caras, vértices y aristas de un poliedro simple (sin orificios) cualquiera.

$$C + V = A + 2 \quad (24)$$

Es decir la suma del número de las caras y el número de los vértices de cualquier poliedro es igual a la de sus aristas más dos. Aunque además, él proponía que para un polígono de n vértices, donde n es incluso un número mayor que 22, por lo menos un poliedro puede ser construido con 12 pentágonos y $(n-20)/2$ hexágonos, es decir, que es posible construir un poliedro con 12 pentágonos y ningún hexágono.

Como ya hemos mencionado existen diferentes tipos de moléculas de carbono aparte de las ya mencionadas antes (grafito, diamante, C_{60}) las cuales son el C_{20} , C_{70} , C_{76} , C_{80} , C_{90} puede continuar indefinidamente agregándole bandas de 10 en 10 al C_{60} , a éstos se les llama nanotubos los cuales pueden variar de largo desde algunas pocas décimas de nanómetros hasta varios micrómetros, y el diámetro externo aparece entre los 25 nm hasta 500 nm.

Veremos algunos ejemplos para comprender la estructura de formación de los fullerenos:

C_{20} : Consiste tan sólo de 12 pentágonos y no tiene hexágonos, esto significa que es un dodecaedro regular. Como los ángulos de un pentágono miden 108° concluimos que cada átomo de carbono está enlazado a sus tres vecinos mediante funciones de onda que se parecen a las tetraédricas ya que el carbono presenta una situación especial esto es que los electrones de la capa L pueden estar en la configuración excitada sp^3 es decir un electrón en la sub-capa s y 3 electrones en la sub-capa p la que forma ángulos de 109.5Å .

El electrón de valencia restante ocupa la cuarta función de onda sp^3 , este electrón se puede localizar más en el exterior del poliedro y es muy reactivo siendo responsable del enlace del C_{20} con otros átomos, como en el caso del $C_{20}H_{20}$, molécula conocida como dodecaedro.

C_{60} : Es de las formas alotrópicas cerradas más conocidas, en esta molécula los átomos de carbono forman 20 hexágonos juntos con los doce pentágonos requeridos. A medida que se añaden átomos de carbono a las fullerenos el número de hexágonos aumenta, por

tanto el ángulo de enlaces entre los átomos de carbono se acerca a 120° y su enlace se aproxima a las funciones de onda triplanares sp^2 . El cuarto electrón de valencia de cada átomo de carbono ocupa, entonces, una función de onda p_z . El C_{60} puede existir como molécula o formar varios compuestos como el $C_{60}H_{60}$ así como compuestos más complejos, mediante los electrones p_z . El C_{60} forma una red cúbica centrada en las caras (Figura 12) y es semiconductor, sin embargo, cuando se contamina con ciertos elementos (por ejemplo K, Rb o Tl) y los materiales se colocan dentro de cada molécula o en lugares intersticiales de la red, el material puede funcionar como aislante, semiconductor, conductor o superconductor. Dependiendo de la cantidad o tipo de contaminante por cada molécula. Por ejemplo la composición estequiométrica $K_3 C_{60}$ es un conductor que por debajo de los $18^{\circ} K$ [7] se vuelve un superconductor, si en su defecto se le agrega demasiado potasio por molécula de C_{60} el sólido es un aislante.

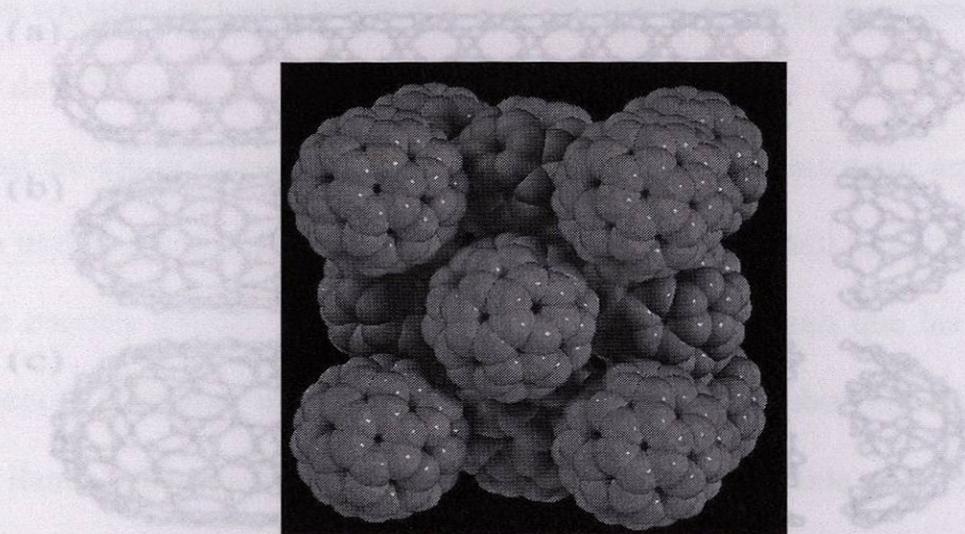


Figura 12. Estructura cristalográfica de los fullerenos (ccc).

Figura 13. a) Estructura sillón, b) Estructura zig zag, c) Estructura quiral.

2.7 Nanotubos monocapa (single-wall)

En 1993 Iijima y Toshinari Ichihashi de NEC, y Donald Bethune y colegas de la IBM, [5] independientemente reportaron la síntesis del nanotubo monocapa de carbono. El cual

2.7.1 Clasificación de los nanotubos

Existen dos tipos de nanotubos:

- 1) Los nanotubos de una capa (single-wall)
- 2) Los nanotubos de multicapa (multiwalled)

Además existen tres tipos de arreglo atómico (Figura 13):

- a) sillón
- b) zigzag
- c) helicoidal ó quiral

Un método de preparación de los nanotubos de monocapa fue descrito por el grupo de Smalley en 1996, como el método de preparación de C_{60} . El método de

preparación consistió en la evaporación con láser de grafita, produciendo un rendimiento alto

de tubos de diámetro uniforme. Esta uniformidad dio un diámetro de 10-20 nm. Esta

uniformidad dio un diámetro de 10-20 nm. Esta uniformidad dio un diámetro de 10-20 nm.

prepararon usando un método de evaporación con láser de grafita. Aquellos que se

nombre de cuerdas (ropes). Los primeros experimentos indicaron que las muestras de

cuerdas (ropes) eran homogéneas. Sin embargo, los experimentos posteriores mostraron una estructura

específica llamada cuerdas (ropes). Los primeros experimentos indicaron que las muestras de

siguientes sugirieron que las muestras de sogas podían ser menos homogéneas de lo que

se había pensado. Sin embargo las cuerdas dieron un importante empujón a la

investigación.

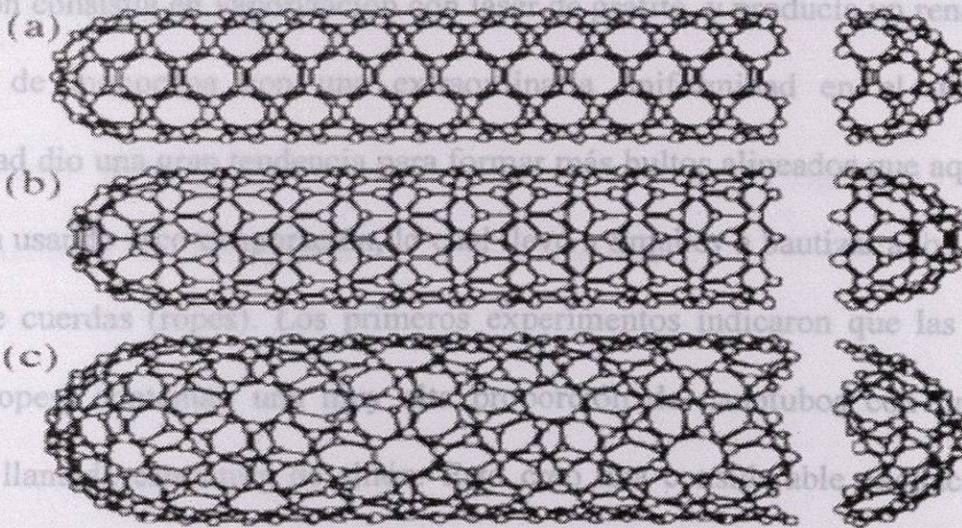


Figura 13. a) Estructura sillón, b) Estructura zig zag, c) Estructura quiral.

2.7.1.1 Nanotubo de monocapa (single-wall)

En 1993 Iijima y Toshinari Ichihashi de NEC, y Donald Bethune y colegas de la IBM [5] independientemente reportaron la síntesis del nanotubo monocapa de carbono. El cual puede ser descrito como una hoja de grafito enrollada en forma de un cilindro tal que la estructura sea unidimensional y tenga una simetría axial. Tiene un diámetro de aproximadamente 0.7-10.0nm aunque en la mayoría de las observaciones de los nanotubos monocapa tiene un diámetro menor de 2 nm y están rizados o doblados más que derechos. Si la razón del largo entre diámetro es tan grande como 10^4 - 10^5 entonces estos nanotubos pueden ser considerados como nanoestructuras unidimensionales.

Un método alternativo de preparación de los nanotubos de monocapa fue descrito por el grupo de Smalley en 1996, como el método de preparación de C_{60} . El método de preparación consistía en vaporización con láser de grafito, y producía un rendimiento alto de tubos de monocapa con una extraordinaria uniformidad en el diámetro. Esta uniformidad dio una gran tendencia para formar más bultos alineados que aquellos que se prepararon usando arco-evaporación, lo cual llevó a Smalley a bautizar a los bultos con el nombre de cuerdas (ropes). Los primeros experimentos indicaron que las muestras de cuerdas (ropes) contenían una muy alta proporción de nanotubos con una estructura específica llamada estructura de sillón. Esto creó una considerable excitación, trabajos siguientes sugirieron que las muestras de sogas podían ser menos homogéneas de lo que se había pensado. Sin embargo las cuerdas dieron un importante empujón a la investigación de nanotubos.

2.7.1.2 Nanotubo multicapa (multi-wall)

En 1991 Iijima [5] describió un tipo de los nanotubos producidos por el método convencional de arco-evaporación los cuales contenían al menos dos capas concéntricas y generalmente tenían un diámetro interno de alrededor de 4 nanómetros, así que era importante direccionar una pregunta a la relación estructural entre los cilindros sucesivos. Esto fue discutido por Zhang y colegas y por Reznik [5] cuyas amplias investigaciones llegaron a conclusiones similares.

Si los tubos de grafito son concéntricos y están separados por una distancia de aproximadamente 0.334 nm entonces el tubo sucesivo debería de diferir en la circunferencia por:

$$(2\pi \times 0.334)nm \approx 2.1nm$$

Inmediatamente se ve que no es posible para un nanotubo de zig-zag ya que no es un múltiplo preciso de 0.246 nm, el ancho de un hexágono.

2.7.2 Estructura de los nanotubos

Existen dos posibles estructuras de alta simetría para nanotubos, conocidas como zig-zag y armchair (sillón) como lo muestran las Figuras 13a y 13b. En la práctica se cree que la mayoría de los nanotubos no tienen esta forma de alta simetría ya que existen estructuras en las que los hexágonos son arreglados helicoidalmente alrededor del eje del tubo, como lo muestra la Figura 13(c), estas estructuras son conocidas comúnmente como quiral.

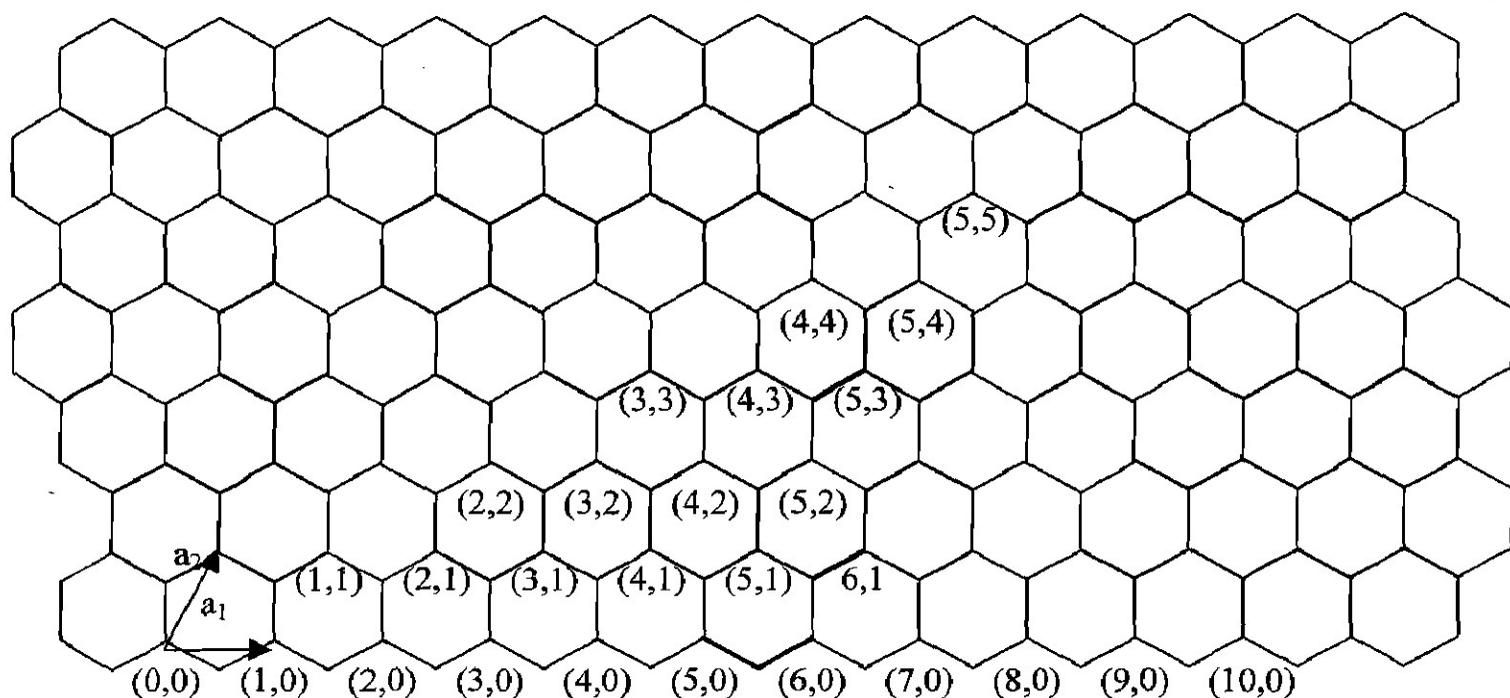


Figura 14. Red hexagonal del grafito y esquema de numeración de los nanotubos.

La forma más simple de especificar un tubo individual es en términos de un vector, el cual etiquetaremos como C , uniendo dos puntos equivalentes de la red de grafito original.

El cilindro se produce por enrollamiento de las sábanas de grafito tal que los puntos finales del vector son sobreimpuestos. De acuerdo con la notación de Dresselhaus cada par de enteros (n,m) representan una posible estructura del tubo. Entonces el vector C se puede expresar como:

$$C = na_1 + ma_2 \quad (25)$$

Donde a_1 y a_2 son los vectores base de la celda unitaria de la sábana del grafito, y $n \geq m$. Como se puede ver en la Figura 14, para $m=0$ y cualquier n obtenemos todos los tubos de zig-zag y cuando $m=n$ entonces obtenemos todos los tubos de armchair y con cualquier otra pareja de coordenadas obtenemos el tubo quiral. En el caso de los dos nanotubos arquetipos que pueden ser capados de la molécula del C_{60} , el tubo zig-zag es representado por los enteros (9,0) y donde el armchair es denotado por (5,5). La magnitud de C en nanómetros se obtiene de la ley de coseno

$$C = \sqrt{(|a_1|n)^2 + (|a_2|m)^2 - 2|a_1||a_2|nm \cos(\theta)} \quad (26)$$

ya que $|a_1| = |a_2| = 0.246nm$ y $\theta = 120$ entonces la ecuación anterior se convierte a

$$C = 0.246\sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (27)$$

Por tanto el diámetro es

$$d_i = 0.246 \frac{\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}{\pi} \quad (28)$$

El ángulo chirial es el ángulo que hay entre el vector resultante \mathbf{C} y \mathbf{a}_1 y está dado por

$$\theta = \text{sen}^{-1} \left(\frac{\sqrt{3}m}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \right) \quad (29)$$

Capítulo 3

TEORÍA Y METODOLOGÍA

3.1 Difracción de rayos X

Las líneas espectrales de los rayos X de los átomos tienen una longitud de onda del orden de 1Å , un tanto mayor que los espaciamentos interatómicos típicos en el sólido, los cuales son del orden de $2\text{-}3\text{ Å}$. Por lo tanto, para los rayos X, un cristal se comporta como una rejilla de difracción tridimensional. Para una rejilla óptica ordinaria, el espaciamiento puede deducirse a partir de la separación de los máximos de difracción y midiendo las intensidades relativas de órdenes diferentes puede averiguarse algo acerca de la estructura de las líneas de la rejilla. En una forma exactamente similar, midiendo la separación de los máximos de difracción de los rayos X por un cristal, puede encontrarse el tamaño de la celda unitaria y, midiendo las intensidades, puede averiguarse algo acerca del arreglo de los átomos dentro de la celda unitaria.

3.1.1 Ley de Bragg

W. L. Bragg [7] demostró en 1913 que la posición de los haces de rayos X difractados por un cristal podían explicarse considerando un modelo muy simple en el que los rayos X se reflejan en un ángulo igual al ángulo reflejado en los diferentes planos atómicos del cristal. Los haces difractados se encuentran sólo en posiciones especiales que corresponden a interferencias constructivas de los rayos reflejados en planos reticulares paralelos.

Consideremos en un cristal una serie de planos atómicos paralelos regularmente espaciados una distancia d y reflejando parcialmente la radiación de longitud de onda λ .

$$\Delta l = 2d \sin(\theta)$$

Cuando esta magnitud es un número entero n de longitudes de onda se observa un refuerzo de la radiación reflejada en los planos sucesivos. La condición de reflexión constructiva es, pues,

$$\Delta l = 2d \sin(\theta) = n\lambda$$

que constituye la ley de Bragg. Una consecuencia importante de la ecuación anterior es que las longitudes de onda de los rayos incidentes han de cumplir la condición $\lambda \leq 2d$ para que se produzca la reflexión de Bragg.

3.2 Microscopio electrónico de transmisión (TEM)

Un microscopio óptico está limitado en su potencia para amplificar, por la longitud de onda de luz visible. Ya que el microscopio electrónico utiliza, como su nombre lo indica, electrones para iluminar y la longitud de onda de los electrones es mucho menor que la de la luz, puede mostrar estructuras más pequeñas. La longitud de onda más corta de la luz visible es de alrededor de 4 ángstrom. La longitud de onda del electrón es de alrededor de 0.5 ángstrom. Existen dos tipos básicos de microscopios electrónicos: el microscopio electrónico de transmisión y el microscopio electrónico de barrido.

El microscopio electrónico de transmisión también conocido como TEM (por sus siglas en inglés de “Transmission Electronic Microscopy”) consiste en un haz de electrones, el cual es producido por un filamento caliente de wolframio en la parte superior de una columna a la que se hace vacío y es acelerado hacia abajo de la columna por la acción de un alto voltaje de entre aproximadamente 75 a 120 kV [8]. Se utilizan bobinas electromagnéticas para condensar el haz de electrones y entonces se le hace pasar a través de una sección de bajo espesor (cerca de los 100 nm ó menos) de una muestra metálica colocada en la plataforma, para situar las muestras la zona de la muestra examinada debe ser muy delgada de forma que los electrones sean capaces de atravesarla. De los electrones que llegan a la muestra algunos son absorbidos y otros son dispersados, por los que estos cambian de dirección. Después que el haz de electrones ha pasado a través de la muestra, es focalizado, ampliado, y proyectado sobre una pantalla fluorescente. Una región de la muestra metálica que tiende a dispersar mucho los electrones, aparecerá oscura en la pantalla.

3.3 Microscopio electrónico de barrido (SEM)

Es el mejor método adaptado al estudio de la morfología de las superficies. A diferencia de un microscopio óptico que utiliza fotones del espectro visible, la imagen entregada por el SEM se genera por la interacción de un haz de electrones que "barre" un área determinada sobre la superficie de la muestra.

La parte principal de un microscopio electrónico de barrido es la denominada columna de electrones la cual lleva alojados en su interior los siguientes elementos:

- Un cañón de electrones con un filamento que actúa como emisor o fuente de iluminación, por analogía con un sistema óptico.
- Un sistema de lentes electromagnéticas encargado de focalizar y reducir a un diámetro muy pequeño el haz de electrones producido por el filamento.
- Un sistema de barrido que hace recorrer el haz de electrones ya focalizado por la superficie de la muestra.
- Uno o varios sistemas de detección que permiten captar el resultado de la interacción del haz de electrones con la muestra y transformarlo en una señal eléctrica.
- Una salida conectada a una o varias bombas que producen el vacío necesario para que el conjunto funcione adecuadamente.

Capítulo 4

EXPERIMENTACIÓN

Los experimentos fueron hechos por dos métodos diferentes: el primer tipo de experimento se realizó a presión atmosférica y el segundo se llevó a cabo en el vacío.

4.1 Método de ^{Síntesis} ~~sintetización~~ de nanotubos en aire.

Durante el método de sintetización de nanotubos se utilizó un microondas tipo doméstico con una potencia de 800 W y una frecuencia de 2.45 Ghz, alimentado por una fuente de corriente alterna con una diferencia de potencial de entre 110-120V y una frecuencia de 60 Hz. Para la obtención de nanotubos de carbono se utilizó grafito de 99.8% de pureza.

El calentamiento del grafito con 99.8% de pureza por medio de microondas llega aproximadamente a los 1200 grados centígrados, el grafito se evapora durante el calentamiento, por esta razón se utilizaron los porta muestras de cuarzo para facilitar el análisis de las muestras mediante microscopio de fuerza atómica (MFA), microscopio electrónico de barrido (MEB), microscopio electrónico de transmisión (MET) y difracción de rayos X.

Debido a que la temperatura de fusión del cuarzo es arriba de 1200 grados centígrados, este material puede ser utilizado para depósito de los nanotubos de carbono y éste en su caso nos permite hacer el análisis de manera más simple para la Microscopía de Fuerza Atómica y Microscopía de Transmisión (MT) el cuarzo fue desgastado con diferentes tipos de porosidad y se le dio un máximo pulido con una lija de 4000 granos por

centímetro cuadrado. Calentando las muestras, en una atmósfera, se utilizaron crisoles de alúmina (Al_2O_3).

En este experimento, calentamos, con un microondas doméstico de características ya mencionadas 8 gramos de grafito mixto (es decir aproximadamente 30% romboédrico y 70% hexagonal) durante diferentes tiempos 30, 60 y 90 minutos (Tabla V). En el cual utilizamos 2 crisoles en la forma que aparece en la Figura 15.

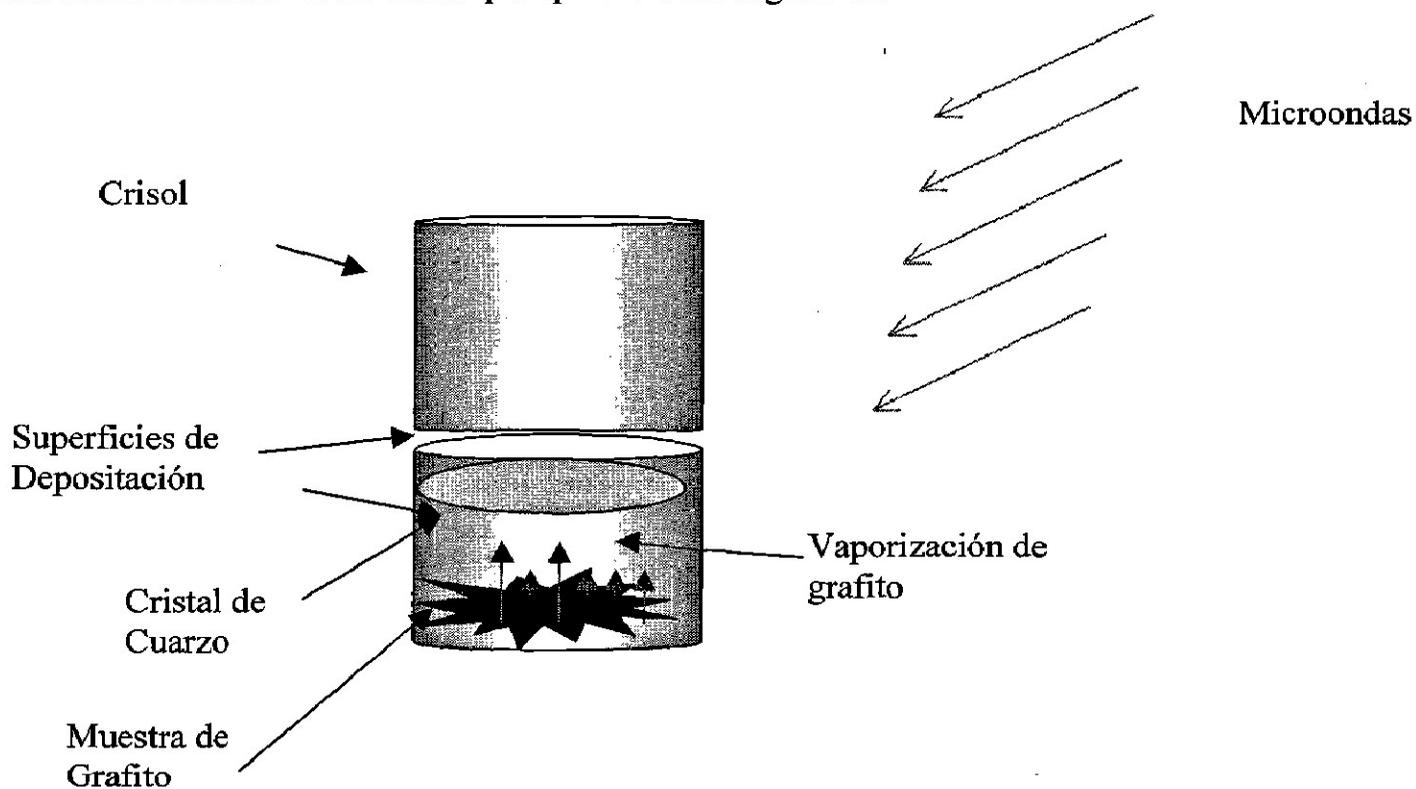


Figura 15. Esquema de colocación de los crisoles en el desarrollo de los experimentos 1-7.

Sintetización

4.2 Método de ~~sintetización~~ de nanotubos en vacío.

Durante el método de sintetización de nanotubos en vacío se utilizó un microondas tipo doméstico con una potencia de 800 W y una frecuencia de 2.45 GHz, alimentado por una fuente de corriente alterna con una diferencia de potencial de entre 110-120V y una frecuencia de 60 Hz. Para la obtención de nanotubos de carbono se utilizó grafito de 99.8% de pureza.

Además se utilizaron los porta muestras de cuarzo para facilitar el análisis de las muestras mediante microscopio de fuerza atómica (MFA), microscopio electrónico de barrido (SEM), microscopio electrónico de transmisión (TEM) y por difracción de rayos X.

El vacío se creó colocando una ampollita de cuarzo abierta por un extremo y cerrada por el otro en una bomba de vacío y sellando el extremo abierto aplicando calor y un poco de torsión, quedando la ampollita como lo muestra la Figura 16, para después colocarlo en el microondas y calentarlo durante 60 minutos.

En la Tabla V, se muestran los datos y condiciones de las muestras utilizadas durante la investigación experimental.

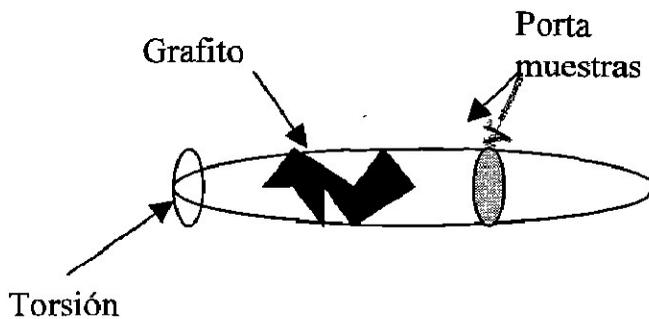


Figura 16. Esquema de la ampollita con grafito y una pieza de cuarzo al vacío.

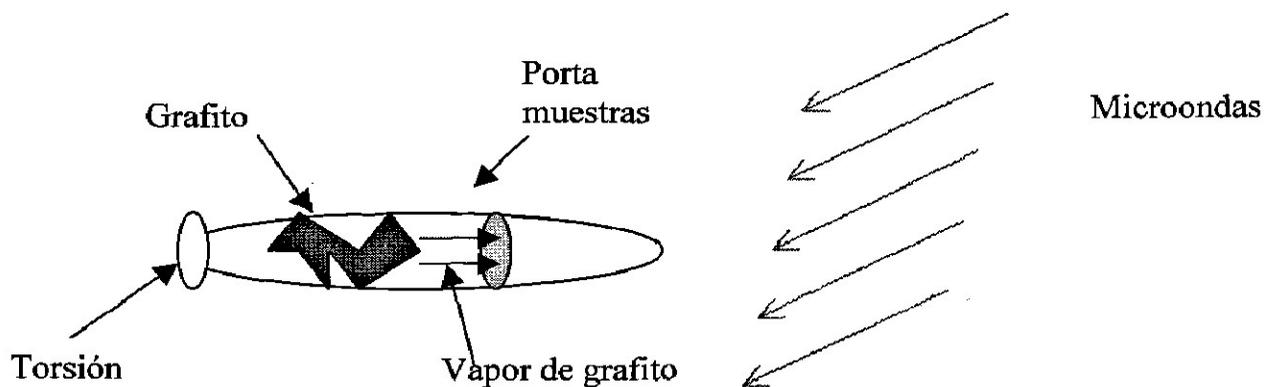


Figura 17. Esquema de colocación de ampolleta en el desarrollo del experimento 8.

Tabla V Condiciones de los experimentos

Número de experimento	Material colocado	Tiempo	Atmósfera	Catalizador
1	Grafito Hexagonal AB	60 minutos	Aire	Sin
2	Grafito Hexagonal AB	60 minutos	Aire	Ag
3	Grafito Hexagonal AB	60 minutos	Aire	Au
4	Grafito Bernal AB+ABC	30 minutos	Aire	Ag
5	Grafito Bernal AB+ABC	60 minutos	Aire	Ag
6	Grafito Bernal AB+ABC	90 minutos	Aire	Ag
7	Grafito Bernal AB+ABC	60 minutos	Aire	Sin
8	Grafito Bernal AB+ABC	60 minutos	Vacío	Sin

Capítulo 5

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

El presente capítulo da cuenta de los resultados del análisis de las materias primas y del análisis microestructural del material obtenido, a fin de determinar, como fue dicho en el capítulo anterior, cuál material es mejor para el proceso de nanotubos mediante calentamiento por irradiación de microondas.

En los experimentos se utilizaron grafito hexagonal tipo Bernal y una mezcla del grafito hexagonal tipo Bernal y grafito romboedral.

5.1 Síntesis de nanotubos con grafito hexagonal tipo Bernal

Se estudiaron las muestras de los experimentos #1-3 en las cuales se utilizó como materia prima el grafito hexagonal tipo Bernal.

Tabla VI Resultados de la síntesis de los experimentos 1-3

Número de muestra	Condiciones	Catalizador	Tiempo	Observaciones
1	Aire	Ag	60 minutos	No aparecen nanotubos
2	Aire	Au	60 minutos	No aparecen nanotubos
3	Aire	Sin	60 minutos	No aparecen nanotubos

↑
No se d
No se d
P
m

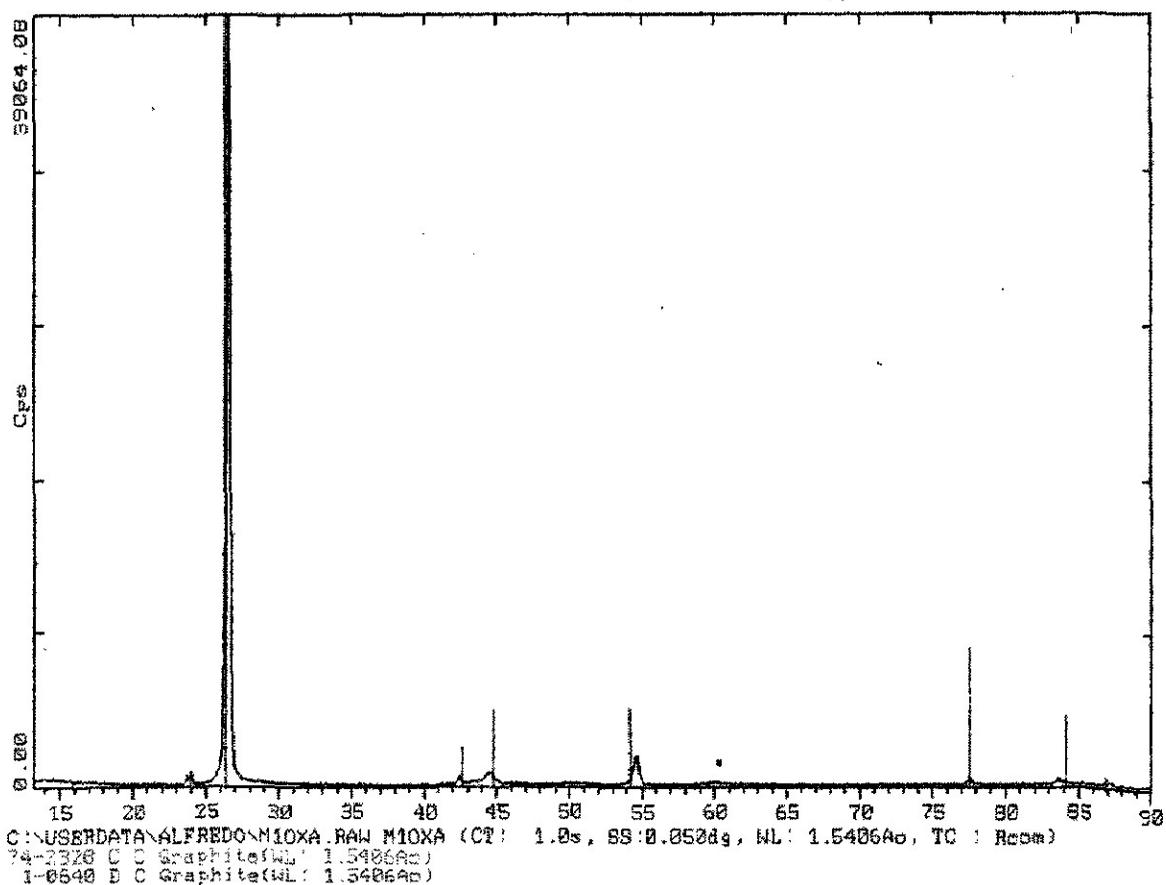
Se m

La diferencia en estas muestras se refiere al catalizador. Como es sabido, la presencia de un catalizador mejora el proceso de la producción del material de diferentes maneras: permite trabajar a temperaturas más bajas o mejorar el proceso de crecimiento. En nuestro caso se esperaba que la presencia del catalizador nos permitiera que la punta del nanotubo no se cerrara muy rápido y éste en su caso facilitara el proceso de crecimiento del producto.

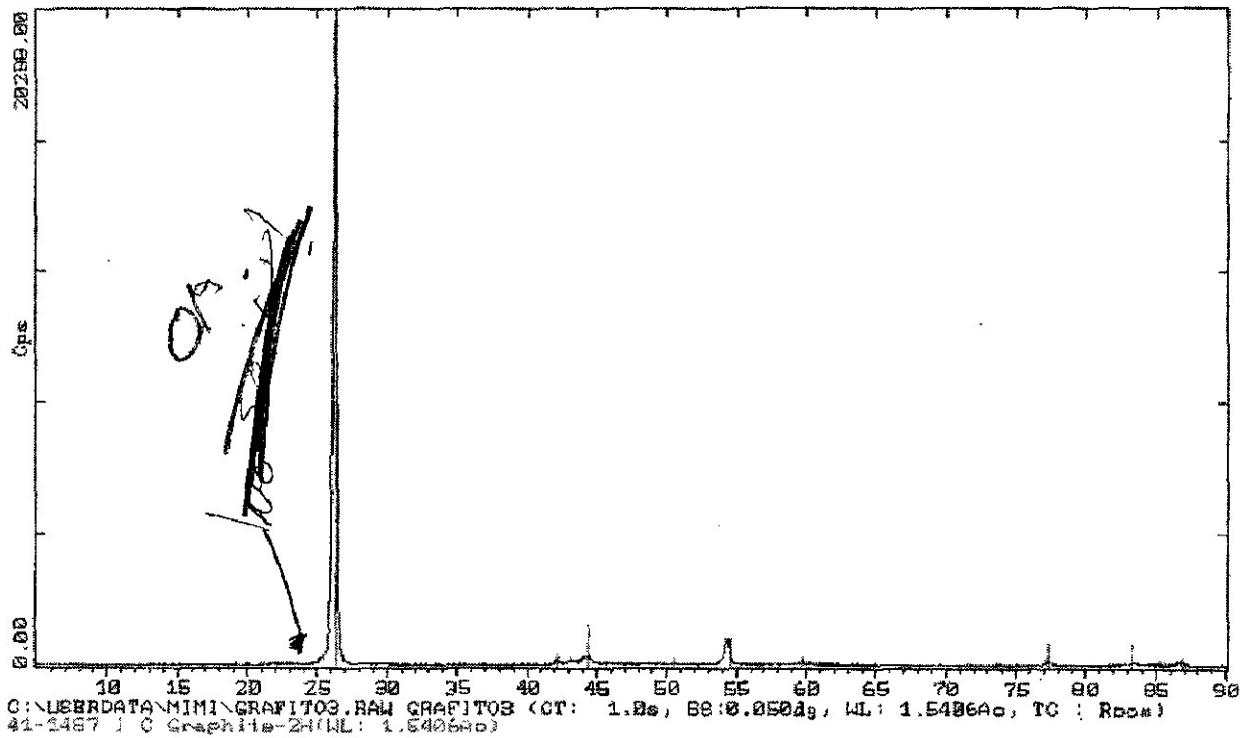
Para caracterizar las muestras se utilizó el microscopio de transmisión. Los resultados nos muestran que utilizar grafito hexagonal tipo Bernal para la producción de nanotubos de carbono mediante irradiación de microondas no es efectivo, ya que no se observaron nanotubos de carbono.

5.1.1 Análisis por difracción de rayos X

Con el propósito de ver la situación exacta de los cambios antes y después del calentamiento por irradiación de microondas se hizo análisis del grafito hexagonal tipo Bernal antes y después del calentamiento por difracción de rayos X (Figura 18).



a)



b)

Figura 18. Análisis del grafito hexagonal mediante difracción de rayos-X:
 a) antes del calentamiento ; b) después del calentamiento.

En la Figura 18(a) aparece un muy pequeño pico entre 23° y 24°. Este es un pico de grafito romboedral. Calculando los porcentajes se detectó que hay menos de 1% presente de grafito romboedral. Como ya se mencionó con anterioridad, procesando el grafito hexagonal sintético existe una fase de grafito romboedral.

Después del calentamiento (Figura 18(b)) desaparece el pico del grafito romboedral, esto indica que mediante el calentamiento por irradiación de microondas el grafito Bernal se queda sin cambios y no tiene cambios estructurales como el grafito romboedral.

NO SE ENTIENDE

Si desaparece... ¿por qué?
 ¿no hay cambios?
 (?)

5.1.2 Análisis por microscopía electrónica de transmisión.

Se analizó el material que se adhirió a la placa de cuarzo raspando sobre la superficie de él en los lugares que tenían un tono café, el polvo que resultó después de la raspadura se colocó en gotas de diferentes líquidos, tales como alcohol isopropílico y etilenglicol. Los mejores resultados fueron obtenidos con el etilenglicol, ambas muestras se colocaron en el "ultrasonic cleaner" y después se colocó una gota de la mezcla disuelta en el alcohol en una rejilla muy delgada, la cual estaba recubierta con colodion.

Durante la caracterización de las muestras 1-3 mediante el MEB no aparecieron nanotubos de carbono, eso indica que la presencia de los catalizadores tales como Ag y Au no ayuda a mejorar el proceso de obtención de los nanotubos.

¿mejora o no? 

5.2 Síntesis de nanotubos con una mezcla de grafito Bernal y romboedral (AB+ABC)

Como fue mencionado en el capítulo anterior, la mezcla de grafito se compone de aproximadamente 37% grafito romboedral y 63% de grafito hexagonal (Bernal). Se hicieron pruebas a diferentes tiempos y en distintas condiciones como lo muestra la Tabla V y se observaron los siguientes resultados en base al análisis mediante el microscopio electrónico de barrido, microscopio electrónico de transmisión y se analizó el grafito antes y después del calentamiento mediante difracción de rayos-X.

Como se calculó en % el contenido de nanotubos?

Tabla VII Resultados de la síntesis de los experimentos 4-8

Número de experimento	Tipo de grafito	Tiempo	SEM	TEM	Difracción De Rayos-X
4	Bernal y romboedral AB+ABC	30 minutos	10-20% de nanotubos	Nanotubos multicapa	Disminución del grafito romboedral
5	Bernal y romboedral AB+ABC	60 minutos	40% de nanotubos	Nanotubos multicapa	Menos de 1% del grafito romboedral
6	Bernal y romboedral AB+ABC	90 minutos	Se fundió el cuarzo y el crisol	Nanofibras	Menos de 1% del grafito romboedral
7	Bernal y romboedral AB+ABC	60 minutos	60% de nanotubos	Nanotubos multicapa	Menos de 1% del grafito romboedral
8	Bernal y romboedral AB+ABC	60 minutos	95% de nanotubos	Nanotubos monocapa	Menos de 1% del grafito romboedral

h ↑ *m gcr?* ↑

5.2.1. Análisis del grafito mixto por medio de difracción de rayos-X.

Con un cuidadoso análisis del grafito mixto (63% hexagonal y 37% romboedral) antes y después del calentamiento por el método de difracción de rayos X, se observa una disminución importante de grafito romboedral (ABC) después del calentamiento como lo muestra la Figura 19.

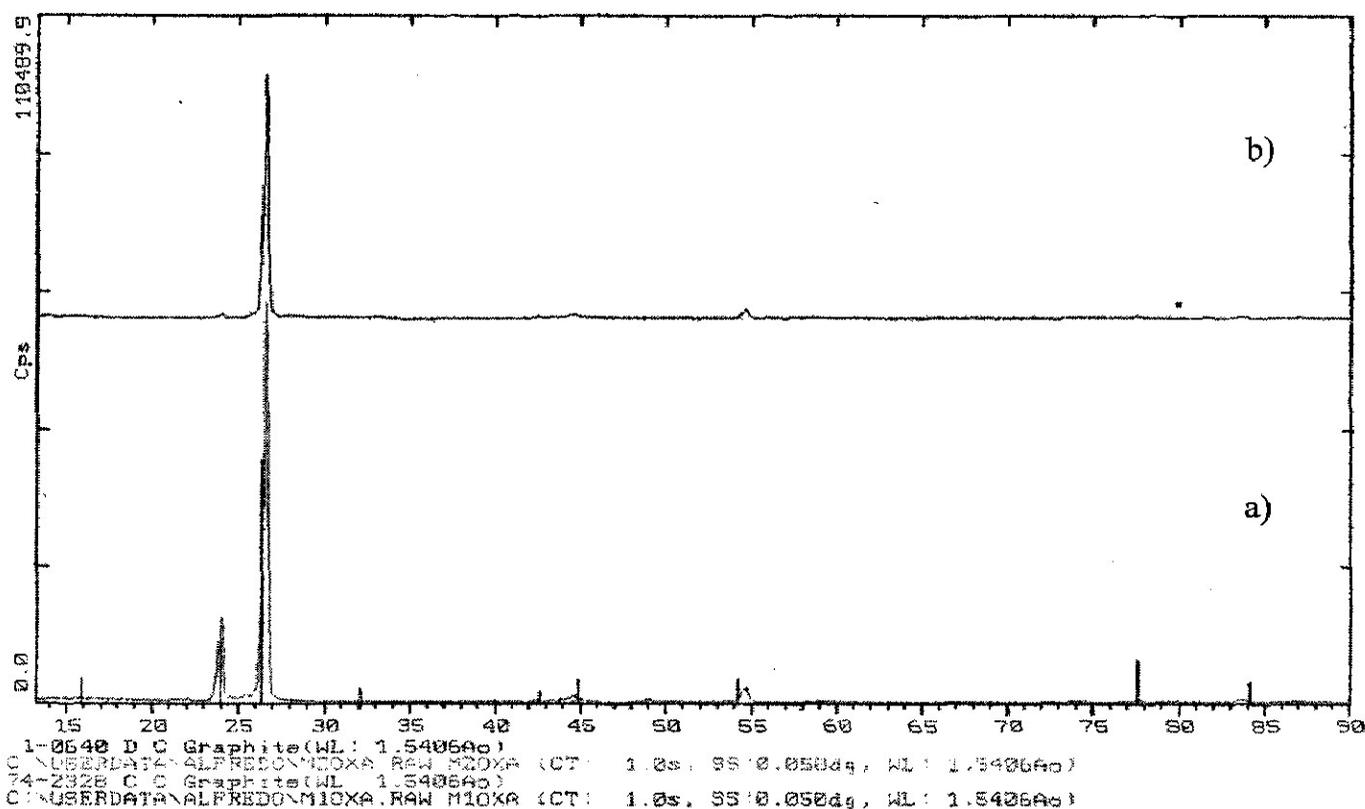


Figura 19. Análisis de la mezcla del grafito Bernal y el grafito romboedral por difracción de rayos-X: a) antes de calentamiento por irradiación de microondas; b) después de calentamiento por microondas.

Como se puede ver en la Figura 19 la cantidad del grafito Bernal no cambia. Estos resultados enfocaron al estudio de las estructuras de este tipo de grafito y durante el estudio se detectó una diferencia en la distancia c entre las capas del grafito en donde existe una fuerza muy débil. Como se puede ver en la Tabla IX, los diferentes tipos de grafito tienen diferentes dimensiones de "a" y "c". Esto produce un cambio en la estructura y la energía de Van Der Waals entre las capas disminuye.

no se p...
c
102

Se hicieron cálculos de la fuerza de Van Der Waals para estructura hexagonal y es menor a 4.1×10^4 J/mol. La fuerza de Van Der Waals depende de:

¿Como? 9/10/21

- 1) distancia
- 2) electronegatividad

chico

En nuestro caso la distancia "c" en la estructura romboedral es de 33.46 Å que en comparación con los 6.8 Å de la estructura hexagonal es relativamente grande e influye en la fuerza de Van Der Waals. Lo cual permite que la separación entre las capas suceda más rápidamente y en este caso permitirá la formación de los nanotubos. Al calentar el grafito mediante irradiación de microondas a temperaturas de 800°C a 1000°C, tiene la siguiente energía:

$$E = kT$$

Tabla VIII Energía interna del sistema

Temperatura °K	Energía J/K
1073	$1.4814 \cdot 10^{-20}$
1273	$1.7575 \cdot 10^{-20}$
1473	$2.0336 \cdot 10^{-20}$

¿y que con esto?

Tabla IX Características de las estructuras gráficas

	Dimensiones (Å)		Simetría
	a	c	
Grafito hexagonal AB	2.47	6.8	P6mc
Grafito romboedral	2.46	33.46	D_{3d}^5 -R3m

no se aplica

5.2.2. Análisis por microscopía electrónica de transmisión

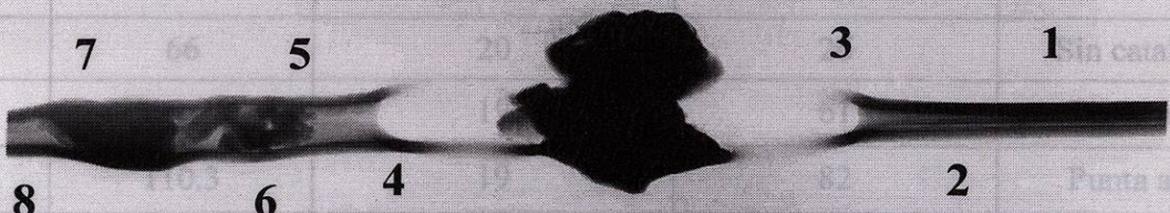
En la imagen anterior se puede observar que se crearon nanotubos tanto con catalizador como sin él, además se observa que el diámetro del nanotubo depende de si entra el

Por microscopía electrónica de transmisión se analizaron las muestras de vapor de grafito adherido al depósito de cuarzo. El análisis se realizó con el mismo procedimiento que se utilizó en el grafito hexagonal. energía suficiente para que este continúe su crecimiento y tiendan a unirse.

26

Tabla X Dependencia del diámetro de los nanotubos de carbono con catalizador de plata

#	Diámetro del nanotubo	Anchura del grafito μm	Diámetro del canal nm	Observaciones
1	55	18.5	17	Sin catalizador
2	7	20	3	1 Sin catalizador
3				Punta abierta
4	110.3	19	82	2 Punta abierta
5	82.2	20	43.2	Con catalizador
6	103.7	17.7	68.3	Con catalizador
7	132.5	18.5	75.5	Con catalizador
8	71.1	19.7	31.7	Con catalizador



100 nm

Figura 20. Análisis por microscopía electrónica de transmisión de grafito mixto en aire (ver números en Tabla X).

7
6

No se apr.

En la imagen anterior se puede observar que se crearon nanotubos tanto con catalizador como sin él, además se observa que el diámetro del nanotubo depende de si entra el catalizador o no, esta imagen originalmente eran tres piezas separadas antes de aplicarle el haz de electrones donde algunos electrones al chocar con el material de grafito (que está en el centro) le ceden energía suficiente para que este continúe su crecimiento y tiendan a unirse.

?

Tabla X Dependencia del diámetro de los nanotubos de carbono con catalizador de plata

#	Diámetro del nanotubo	Anchura del grafito nm	Diámetro del canal nm	Observaciones
1	55	18.5	17	Sin catalizador
2	66	20	26	Sin catalizador
3	99.2	19	61	Punta abierta
4	110.3	19	82	Punta abierta
5	82.2	20	42.2	Con catalizador
6	103.7	17.7	68.3	Con catalizador
7	112.5	18.5	75.5	Con catalizador
8	71.1	19.7	31.7	Con catalizador

5.2.3. Análisis por microscopía electrónica de barrido

Con el microscopio electrónico de barrido se analiza la superficie del depósito de cuarzo, observando una mayor cantidad en el experimento hecho en vacío que en el experimento realizado a presión atmosférica. Las imágenes muestran las imágenes.

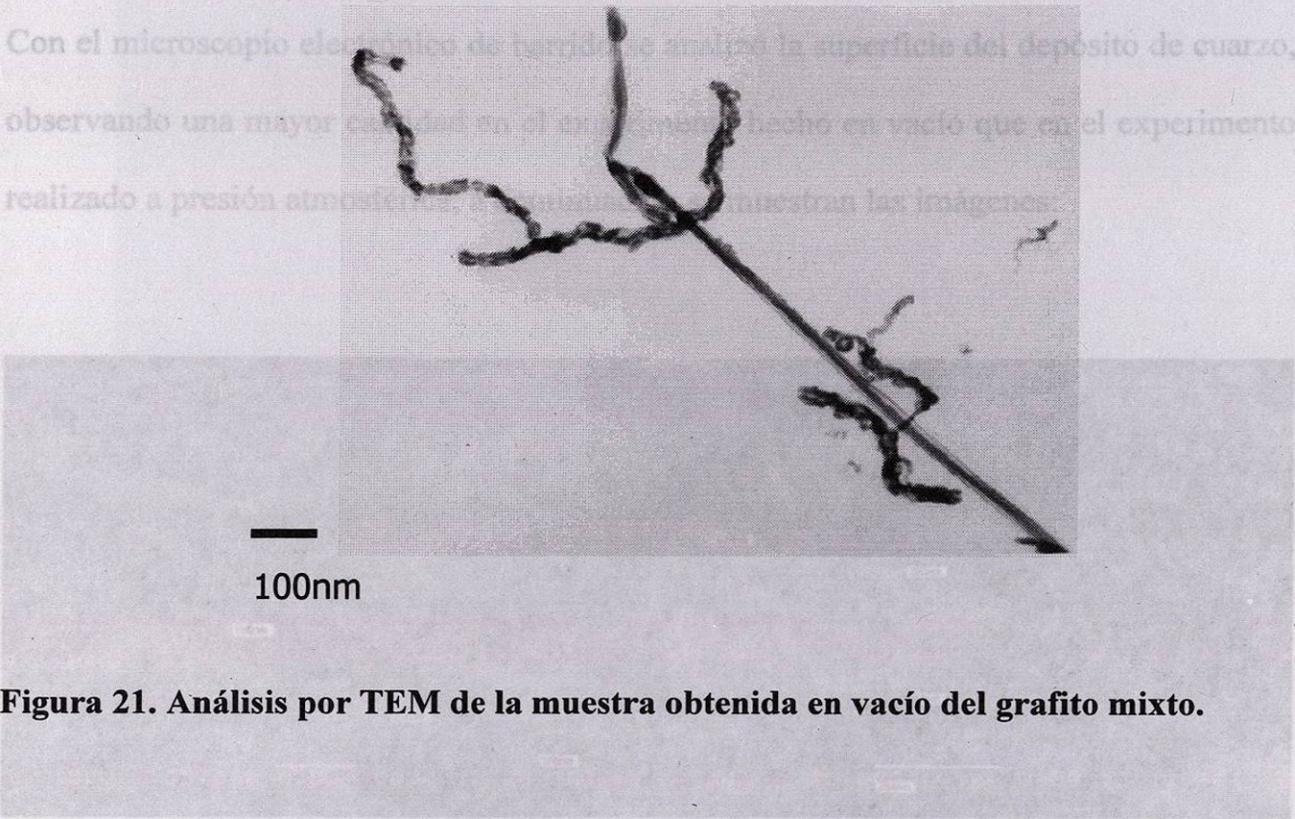


Figura 21. Análisis por TEM de la muestra obtenida en vacío del grafito mixto.

Tabla XI Observaciones de los nanotubos en diferentes tiempos

Número de muestra	Tiempo de calentamiento	Observación
4	30	Aparecen nanotubos con diámetros entre 220-280 nm
5	60	Aparecen nanotubos con diámetros de 400 nm y más de 5 micrómetros de longitud
6	90	Aparecen nanotubos de 400 nm de diámetro y 8 micrómetros de longitud

5.2.3. Análisis por microscopía electrónica de barrido

Con el microscopio electrónico de barrido se analizó la superficie del depósito de cuarzo, observando una mayor cantidad en el experimento hecho en vacío que en el experimento realizado a presión atmosférica, a continuación se muestran las imágenes:



a)

b)

Figura 22. Muestras realizadas en aire
a) tamaño de la muestra #2, b) tamaño de la muestra #4.

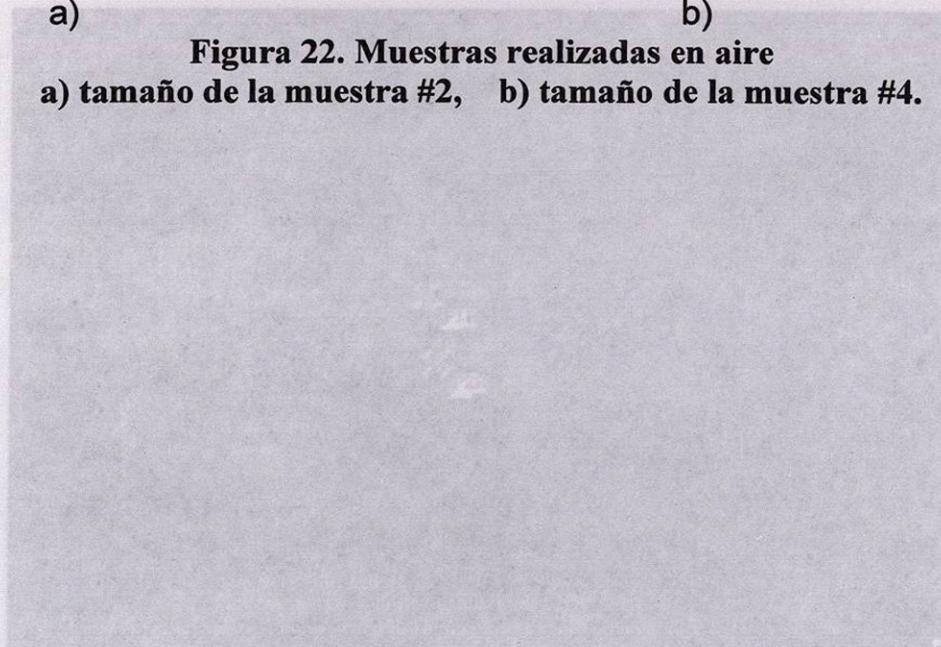
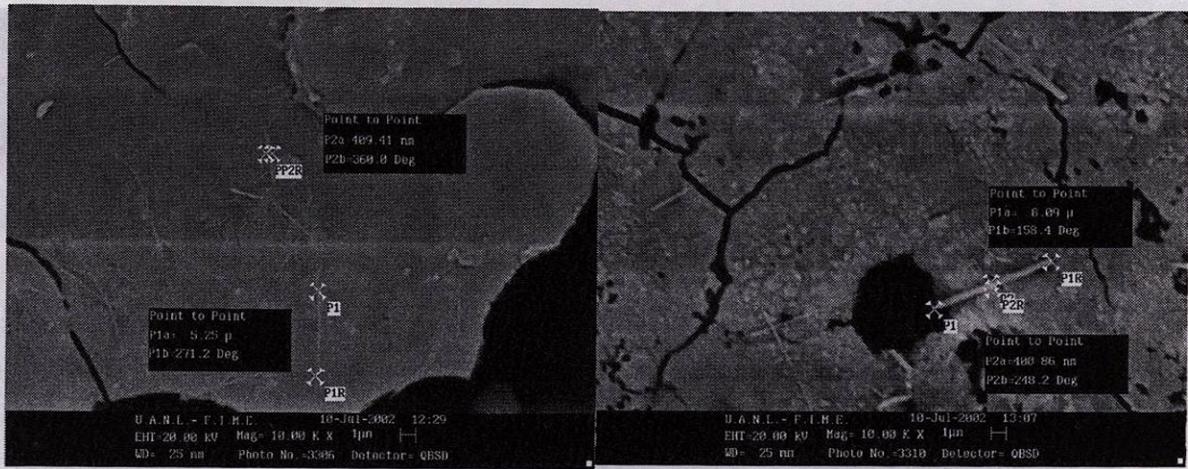


Figura 24. Muestra en vacío calentada durante 30 minutos.



a)

b)

Figura 23. Muestras a presión atmosférica
a) tamaño del nanotubo muestra 6, b) tamaño del nanotubo muestra 8.

Figura 25. Muestra en vacío calentada durante 60 minutos.

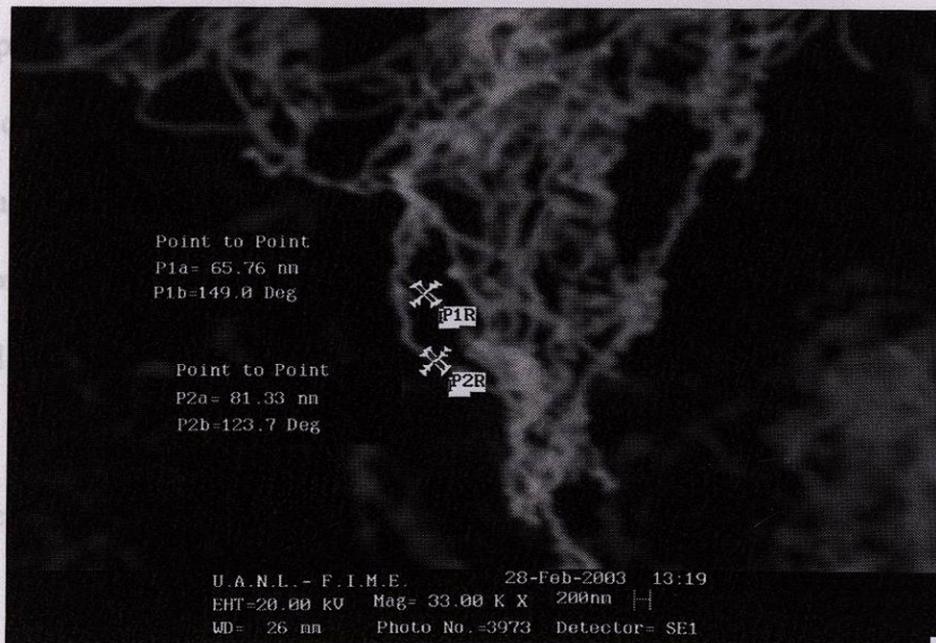


Figura 24. Muestra en vacío calentada durante 30 minutos.

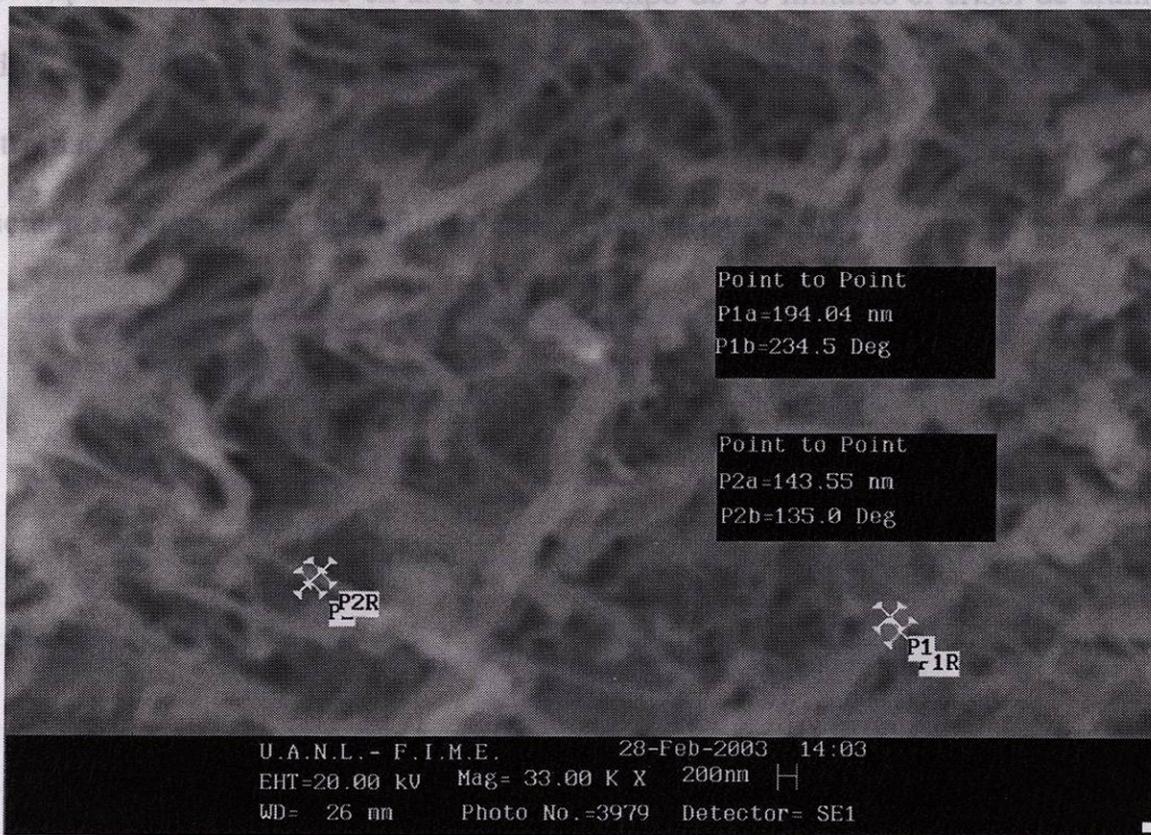


Figura 25. Muestra en vacío calentada durante 60 minutos.

Como se puede verificar en las imágenes anteriores, existe un mayor porcentaje de nanotubos en los experimentos realizados en vacío que los experimentos realizados en aire, pero además, los nanotubos son más ordenados en aire que en vacío aunque más anchos y cortos.

También al hacer la comparación entre las Figuras 24 y 25, se observa que el tiempo óptimo de sintetización es de 60 minutos, de igual manera que en los experimentos realizados en aire.

En el experimento realizado en aire con un tiempo de 90 minutos el crisol de alúmina se fundió, esto ocurre por la capacidad que tiene el alúmina de absorber las ondas electromagnéticas en la región de microondas, las cuales le ceden energía a la alúmina y aumentan su temperatura hasta fundir dicho crisol (Figura 26).

- Se observó que el grafito hexagonal que Bernal con 99.8% de pureza no sintetiza nanotubos de carbono en las etapas de calentamiento y irradiación utilizadas.

- El grafito mixto de Bernal no sintetiza nanotubos de carbono en la etapa de calentamiento y irradiación.

- El tamaño del nanotubo de carbono que se sintetiza por irradiación de microondas, varía con el tiempo de irradiación.

- Es más óptimo el grafito hexagonal tipo Bernal y 37% romboédrico.

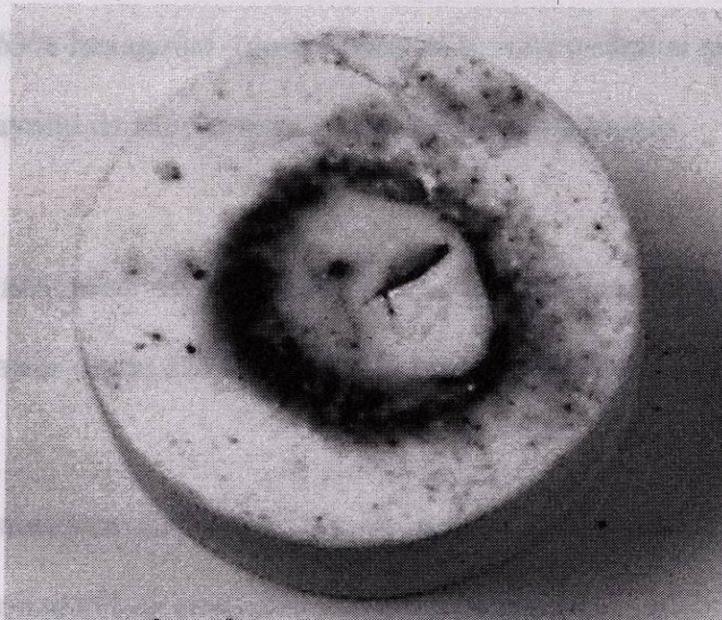


Figura 26. Crisol fundido por 90 minutos de calentamiento por irradiación de microondas.

es decir, en una síntesis de nanotubos multicapa y en vacío se sintetizan nanotubos multicapa.

Capítulo 6

CONCLUSIONES

bajo la condición es experimental de esta presión

- Se observó que el grafito hexagonal tipo Bernal con 99.8% de pureza no sintetiza nanotubos de carbono en los tiempos de calentamiento y condiciones utilizadas.
- El grafito mixto 63% hexagonal tipo Bernal y 37% romboedral si sintetiza nanotubos de carbono en la mayoría de los tiempos y en todas las condiciones.
- El tamaño del nanotubo depende del tiempo de calentamiento por irradiación de microondas, variando desde 220 a 400 nm en los tiempos de 20 a 60 minutos.
- Es más óptimo sintetizar nanotubos de carbono con grafito mixto 63% hexagonal tipo Bernal y 37% romboedral en vacío que a presión ordinaria.
- Existe una diferencia en la forma del nanotubo dependiendo de la atmósfera utilizada, es decir, en una atmósfera ordinaria se sintetizan nanotubos multicapa y en vacío se sintetizan nanotubos monocapa.

Capítulo 7

RECOMENDACIONES

Al utilizar el método de sintetización de nanotubos por medio de irradiación de microondas se recomienda lo siguiente:

- No utilizar crisoles de alúmina ya que el tiempo de irradiación por microondas se limita a menos de 90 minutos.
- Trabajar con grafito romboedral puro.
- Utilizar guía de microondas para variar potencia y frecuencia.
- Trabajar en vacío para aumentar el porcentaje de sintetización.

BIBLIOGRAFÍA

- 1.- Mauricio y Humberto Terrones, Revista de la Academia Mexicana de Ciencias, Volumen 54, Número 1200, páginas 30-52. *un?*
2. - Carl Sagan, "Pale blue dot", Random House, Año 1994.
3. - Gordon M. Barrow, "Physical Chemistry", Mc-Graw Hill, 3a. edición, Año 1973.
4. - Virgilio Acosta, "Curso de Física moderna", Harla, Año 1975.
- 5.- Peter J.F. Harris, "Carbon nanotubes and related structures", Cambridge University, Año 2001.
- 6.- R. Saito, G. Dresselhaus & M. S. Dresselhaus, "Physical properties of carbon nanotubes", Imperial College Press, Año 2001 -
7. - M. Alonso y E. Finn, "Física", Prentice Hall, Año 1995.
8. - Charles Kittel, "Introduction of solid state of physics", Ed. John Wiley, Fifth Edition, Año 1976.
9. - William F. Smith, "Fundamentos de la ciencia e ingeniería de materiales", Mc Graw Hill, Año 1998.
10. - http://www.crq4.org.br/informativo/dezembro_2000/pagina07.html *(?)*

- 11.** - Richard E. Smalley, Nobel Lecture: "Discovering the fullerenes", Rev. Mod. Phys.,
Número 69, Año 1997, página 723.
- 12.-** Robert F. Curl, Nobel Lecture: "Dawn of the fullerenes, experiment and
conjectures", Rev. Mod. Phys., Número 69, Año 1997, página 691.
- 13.-** Harold Kroto, Nobel Lecture: "Symmetry, space, stars and C₆₀", Rev. Mod. Phys.,
Número 69, Año 1997, página 703.
- 14.-** R. Taylor, "Lecture makes on fullerene chemistry", Imperial College Press, Año
1999.
- 15.-** James R. Newman, Enciclopedia Sigma "El mundo de las matemáticas 4", Editorial
Grijalbo, Año 1976.

AUTOBIOGRAFÍA

Israel Nieto López

Candidato para obtener título de Lic. En Física

Tesis:

Estudio de la estructura de los nanotubos e influencia del tipo de estructura del grafito para la sinterización de nanotubos mediante microondas

Datos personales:

- Lugar y fecha de nacimiento: Monterrey, Nuevo León, 18 de agosto de 1978

Estudios preliminares:

- Primaria: Esc. Prim. "Año internacional del niño" Generación: 1984- 1990
- Secundaria: Prof. "José Juan Charles Luna" Generación: 1990-1993
- Preparatoria: Universidad Metropolitana de Monterrey Generación:1995-1997

Artículos:

- O.V.Kharissova, I.Nieto López, U. Ortiz, J.A.Aguilar, M.Hinojosa, Condensation of Carbon Vapor in the Microwave Oven, MRS, Symp.Proc., Nanomaterials for Structural Application, 2003, Vol.740, pp.I7.25.1-6

Congresos:

- 2003, XII International Materials Research Congress, Cancún, México, Influence of the graphite structure on the formation of carbon nanotubes.
- 2002, Fall Meeting MRS, Boston, Ma., U. S. A., (December 2 - 6) Condensation of Carbon Vapor in the Microwave Oven.

