

Università degli Studi di Milano
Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali
Corso di laurea in Chimica

Le Schwarziti
(estratto)

Tesi di laurea di: Pinco Pallino
Matr.: 333333
Relatore: Prof. Mario Rossi
Correlatore: Pippo Bianchi

Anno Accademico 2004/2005

SOMMARIO

1	Introduzione.....	3
2	Le Schwarziti.....	3
2.1	Descrizione.....	3
2.2	Letteratura.....	4
2.3	La schwarzite fcc-(C ₂₈) ₂	4
2.3.1	Descrizione.....	4
2.3.2	Proprietà.....	5
3	Progettazione di nuovi materiali.....	5
3.1	Descrizione di un algoritmo genetico.....	5

1 Introduzione

La ricerca di nuovi materiali per nuovi dispositivi elettronici su scala nanometrica ha portato a una intensificazione degli studi sia sperimentali che teorici sulle possibili fasi del carbonio. Fullereni e nanotubi si sono già rivelati materiali estremamente interessanti per la nanoingegneria. Proponiamo qui uno studio teorico di un'altra possibile fase sp^2 del carbonio: le schwarziti¹.

Le schwarziti sono strutture grafite caratterizzate da ibridizzazione sp^2 , mappabili su superfici tridimensionali periodiche a curvatura negativa che delimitano due labirinti periodici, infiniti interpenetranti, ma non comunicanti. Questi cristalli hanno, rispetto alla grafite, una maggiore area specifica per l'intercalazione, congiunta a una struttura covalente tridimensionale e a proprietà meccaniche molto migliori.

2 Le Schwarziti

2.1 Descrizione

Le schwarziti sono strutture tridimensionali periodiche a minima superficie (si veda Figura 1). Tali superfici hanno valor medio della curvatura nullo e curvatura gaussiana (prodotto delle due curvatures principali: una positiva e l'altra negativa) in ogni punto non positiva.

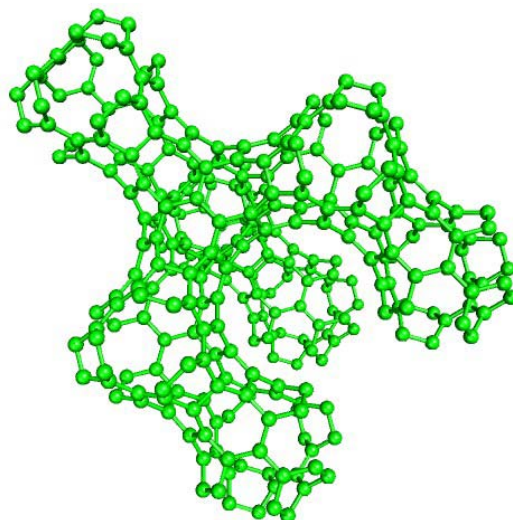


Figura 1: parte di schwarzite

¹ Dal noto matematico Schwarz.

2.2 Letteratura

Le schwarziti più interessanti fin qui studiate sono quelle riportate in tabella più sotto.

D	12 ettagoni	40 esagoni	108 atomi
D	12 ettagoni	70 esagoni	168 atomi
P	24 ettagoni	0 esagoni	56 atomi
P	24 ettagoni	80 esagoni	216 atomi
D	6 ottagoni	4 esagoni	24 atomi
D	6 ottagoni	40 esagoni	96 atomi
P	12 ottagoni	6 esagoni	44 atomi
P	12 ottagoni	80 esagoni	192 atomi

Tabella 1: proprietà delle schwarziti più studiate

2.3 La schwarzite fcc-(C₂₈)₂

E' il più piccolo cristallo di tipo schwarzite ipotizzabile. E' inoltre visibile la caratteristica che rende questa schwarzite unica: la chiralità.

2.3.1 Descrizione

Questa schwarzite ha un reticolo di tipo diamante in cui ogni atomo è sostituito dalla cella rappresentata in figura. Il ruolo svolto dai legami nel diamante è in questa struttura svolto dai tubi che infatti hanno simmetria tetraedrica.

I legami indipendenti sono quattro, ma la struttura ideale da cui si è iniziato il rilassamento ha tutti i legami lunghi 1.42 Å.

La sua cella unitaria è riportata in Figura 2

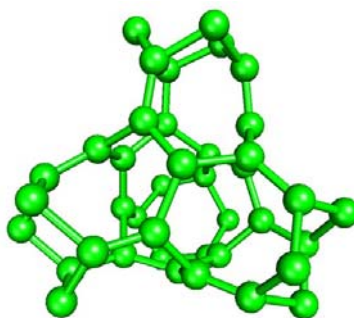


Figura 2: cella unitaria della schwarzite fcc-(C₂₈)₂.

2.3.2 Proprietà

Riportiamo le proprietà strutturali:

$$\begin{aligned} \text{densità} &= 1.33 \text{ gr} / \text{cm}^3 \\ E_{\text{coh}} / \text{atomo} &= -7.66 \text{ eV} \\ E_{\text{coh}} - E_{\text{grafite}} &= 0.72 \text{ eV} \end{aligned}$$

e il modulo di bulk:

$$\begin{aligned} \text{modulo di bulk} &= 1.58 \text{ Mbar} \\ \text{rigidità/legame} &= 16.12 \text{ Mbar } \text{Å}^3 \end{aligned}$$

dove la rigidità per legame b è definita come in Equazione 1:

$$b = \frac{2}{3} BV_{at}$$

Equazione 1: rigidità per legame

3 Progettazione di nuovi materiali

3.1 Descrizione di un algoritmo genetico

Dato un problema ben definito le cui soluzioni siano rappresentabili come stringhe simboliche, un algoritmo genetico le cerca con la seguente sequenza di operazioni:

- 1) Si inizia generando una popolazione iniziale di soluzioni candidate chiamate cromosomi.
- 2) Si calcola la funzione di fitness $f(x)$ di ogni cromosoma x della funzione.
- 3) Si ripetono gli step successivi fino ad arrivare alle soluzioni desiderate.
 - a) Selezione
 - ☉ Coppia
 - ☉ Probabilità
 - b) Crossover
 - c) Mutazione

INDICE DELLE FIGURE

Figura 1: parte di schwarzite.....	3
Figura 2: cella unitaria della schwarzite fcc-(C28) ₂	4

INDICE DELLE TABELLE

Tabella 1: proprietà delle schwarziti più studiate	4
--	---

INDICE DELLE EQUAZIONI

Equazione 1: rigidità per legame	5
--	---