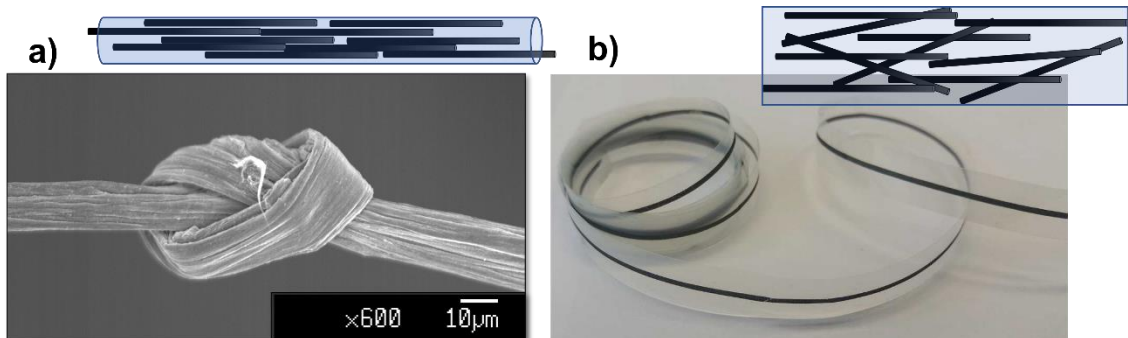


Nanorurki węglowe (ang. carbon nanotube - CNT), t.j. rurki o nanośrednicach i ściankach zbudowanych z heksagonalnej sieci atomów węgla, charakteryzują się bardzo unikalnymi właściwościami elektrycznymi, termicznymi i mechanicznymi, które byłyby wysoce pożądane przy formowaniu różnego rodzaju przewodników elektrycznych. Istnieje wiele możliwych sposobów łączenia nanorurek w makroskopowe przewodniki, jednak niestety ich unikalne właściwości są wtedy najczęściej tracone. Niedawno wysunięto teorię, że odpowiednio ustrukturyzowane włókna CNT (dowolnie długie i mikrocienkie włókna wykonane z nanorurek ułożonych wzdłużnie – Rys. 1a) mogą przezwyciężyć ten problem i przenieść unikalne właściwości termiczne, elektryczne i mechaniczne poszczególnych CNT do makroskali. Szeroko zakrojone badania eksperymentalne prowadzone na całym świecie wskazują, że najlepsze wyniki w tym zakresie uzyskuje się obecnie poprzez koagulacyjne przędzenie włókien z zawiesin ciekłokrystalicznych CNT. Główną wadą tej metody jest jednak konieczność stosowania superkwasów, które są niebezpieczne i toksyczne.



**Ryc. 1. a)** Włókno CNT i rysunek ułożenia CNT. **b)** Drukowana ścieżka przewodząca z CNT i rysunek ułożenia CNT w płaszczyźnie.

Celem obecnego projektu jest podjęcie badań eksperymentalnych i teoretycznych, które pozwolą na opracowanie skalowalnych metod wytwarzania bezkwasowych ciekłych kryształów, które mogą być dalej wykorzystywane do przędzenia włókien CNT. W tym celu Kierownik projektu chciałaby połączyć swoje unikalne doświadczenie w pracy z włóknami CNT zebrane za granicą oraz metodologię wytwarzania past przewodzących i tuszy do zastosowań w elektronice drukowanej opracowaną na Politechnice Warszawskiej (Rys. 1b). Badania eksperymentalne będą obejmowały testowanie różnych rozpuszczalników wysokowrzących stosowanych do formowania past sitodrukowych, dobór odpowiednich koagulantów, zastosowanie różnych typów nanorurek (zmieniających się długości, liczby ścianek, chiralności). W ramach badań zbadane zostaną również potencjalne metody umożliwiające skalowanie produkcji bezkwasowych ciekłych kryształów CNT oraz przędzenie włókien CNT na małą skalę.

W celu lepszego zrozumienia danego układu i ograniczenia wysiłków eksperymentalnych w znalezieniu najlepszych składników (rozpuszczalników, koagulantów), projekt będzie realizowany we współpracy z dr Karoliną Milowską (Ikerbasque Research Fellow – CIC nanoGUNE, Hiszpania), która będzie współpromotorem doktoranta i poprowadzi teoretyczną część projektu. W tej części projektu zostaną podjęte zostanie modelowanie z pierwszych zasad (DFT – teoria funkcjonałów gęstości, DFTB -metoda ciasnego wiązania oparta o DFT) oraz symulacje dynamiki molekularnej i Monte Carlo wykorzystujące reaktywne pola siłowe. Modelowanie to pozwoli na wyjaśnienie mechanizmów oddziaływania między nanorurkami, a cząsteczkami rozpuszczalnika. Natomiast symulacje z wykorzystaniem reaktywnych pól siłowych pozwolą wyjaśnić ich oddziaływanie w większej skali i dynamikę tego oddziaływania przy zachowaniu dokładności obliczeń DFT. Szczególnie symulacje Monte Carlo pozwolą wydłużyć skalę czasową.

Oczekuje się, że uzyskane wyniki badań pozwolą na uzyskanie wysokoprzewodzących włókien CNT. Jednocześnie oczekuje się, że będą miały ogromne znaczenie dla poprawy wydajności mniej przewodzących, ale niedrogich i wysoce wszechstronnych drukowanych przewodników CNT.