

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Σκοπός της παρούσας πτυχιακής διατριβής είναι η δημιουργία Νανοαφρών Άνθρακα. Για την δημιουργία νανοαφρών άνθρακα χρησιμοποιήθηκαν δομές schwarzite. Οι δομές schwarzite βρίσκονται αρχικά σε κατάσταση «ατμού», και με κατάλληλη θερμοδυναμική επεξεργασία συμπυκνώνονται σε νανοαφρούς άνθρακα.

Η θερμοδυναμική επεξεργασία των νανοαφρών διετελέστηκε μέσω Μόντε Κάρλο προσομοιώσεων. Στην μέθοδο Μόντε Κάρλο επιστρατεύεται η στατιστική θερμοδυναμική στο πλαίσιο της κλασικής μηχανικής. Η συμπύκνωση των νανοαφρών, επιτεύχθη με την χρήση της ισοβαρής-ισόθερμης συλλογής.

Η θερμοδυναμική επεξεργασία των νανοαφρών χωρίστηκε σε τρία σκέλη: α) εφαρμογή θετικής πίεσης, β) εφαρμογή αρνητικής πίεσης, και γ) τον εφησυχασμό του όγκου σε μηδενική πίεση. Αποτέλεσμα της επεξεργασίας είναι η δημιουργία νανοαφρών με πυκνότητες μικρότερες από 1 g/cm^3 .