Дәріс 1.

Көміртекті наноматериалдарға кіріспе: графен, нанотүтікшелер, фуллерендер және гидрофобты күйе

Дәрістің жоспары:

1 Көміртекті наноматериалдардың жалпы сипаттамасы
2 Графеннің құрылысы мен негізгі қасиеттері
3 Көміртекті нанотүтікшелер және олардың жіктелуі
4 Фуллерендер: құрылымы, қасиеттері және алынуы
5 Гидрофобты күйе және көміртекті наноматериалдардың қолданылуы

1 Көміртекті наноматериалдардың жалпы сипаттамасы

Көміртекті наноматериалдар - құрылымдық элементтерінің кемінде бір өлшемі нанометрлік диапазонда болатын көміртек негізіндегі материалдар. Оларға графен, көміртекті нанотүтікшелер, фуллерендер, көміртекті наноталшықтар, нанокеуекті көміртек және нанодисперсті күйе тәрізді жүйелер жатады. Бұл материалдардың физика-химиялық қасиеттері көміртек атомдарының гибридтену күйіне, кеңістіктік орналасуына, бөлшек өлшеміне, ақаулардың мөлшеріне және беттік функционалдық топтардың табиғатына тәуелді.

Көміртектің наноқұрылым түзу қабілеті оның электрондық құрылысының ерекшелігімен түсіндіріледі. Көміртек атомы sp, sp2 және sp3 гибридтену күйлерінде тұрақты коваленттік байланыстар түзе алады. Графен, фуллерендер және нанотүтікшелер негізінен sp2-гибридтенген көміртектен тұрады. Мұндай жүйелерде әрбір көміртек атомы үш көрші атоммен байланысып, делокальданған π-электрондық жүйе түзеді. Осы электрондық құрылым жоғары электрөткізгіштікке, механикалық беріктікке және ерекше оптикалық қасиеттерге негіз болады.

Көміртекті наноматериалдардың маңызды ерекшелігі - олардың меншікті бет ауданының жоғары болуы. Материал өлшемі азайған сайын беткі атомдардың үлесі өсіп, адсорбция, катализ, заряд тасымалдау және беттік реакциялар айқын байқалады. Сондықтан көміртекті наноқұрылымдар сенсорларда, электрод материалдарында, катализатор тасымалдағыштарында, композиттерде және экологиялық сорбциялық технологияларда кеңінен зерттеледі.

2 Графеннің құрылысы мен негізгі қасиеттері

Графен - көміртек атомдары бір атом қалыңдықтағы екіөлшемді гексагональды тор түзетін материал. Оны графиттің жеке атомдық қабаты ретінде қарастыруға болады. Графен торындағы әрбір көміртек атомы үш көрші атоммен sp2-гибридтенген σ-байланыстар арқылы байланысады, ал жазықтыққа перпендикуляр орналасқан p-орбитальдар π-электрондардың делокальданған жүйесін түзеді.

Графеннің екіөлшемді құрылымы оның ерекше қасиеттерін қалыптастырады. Ол жоғары механикалық беріктікпен, иілгіштікпен, жоғары электр және жылуөткізгіштікпен, сонымен бірге үлкен меншікті бет ауданымен сипатталады. Графеннің электрлік қасиеттері электрондардың тор ішінде жоғары қозғалғыштығымен байланысты. Осы себепті графен наноэлектроника, икемді электрондық құрылғылар, сенсорлар, мөлдір өткізгіш қабықшалар, литий-ионды аккумуляторлар және суперконденсаторлар үшін перспективалы материал болып саналады.

Графенді алудың негізгі әдістеріне графитті механикалық немесе сұйық фазалық қабыршақтау, графит оксидін тотықсыздандыру және газдық фазадан химиялық тұндыру (CVD) жатады. Әдісті таңдау алынатын материалдың қабат санына, ақаулылық дәрежесіне, тазалығына және өндірістік мақсатқа байланысты. CVD әдісінде көмірсутек газдары қыздырылған металл бетінде ыдырап, бір немесе бірнеше қабатты графен пленкасын қалыптастырады.

3 Көміртекті нанотүтікшелер және олардың жіктелуі

Көміртекті нанотүтікшелер (КНТ) - графен қабатының цилиндр тәрізді оралуынан түзілген бірөлшемді көміртекті наноқұрылымдар. Қабырғалар санына байланысты олар бір қабырғалы көміртекті нанотүтікшелер (БҚКНТ) және көп қабырғалы көміртекті нанотүтікшелер (КҚКНТ) болып бөлінеді. Бір қабырғалы нанотүтік бір графен цилиндрінен тұрады, ал көп қабырғалы жүйе бірінің ішіне бірі коаксиалды орналасқан бірнеше графиттік цилиндрлерден құралған. Көп қабырғалы нанотүтікшелердегі көршілес қабаттардың арақашықтығы графиттегі қабатаралық қашықтыққа жақын және шамамен 0,34 нм болады.

Нанотүтікшенің атомдық құрылымы графен қабатының оралу бағытымен, яғни хиральдылығымен анықталады. Хиральдық индекстеріне байланысты нанотүтікшелер «кресло» (armchair), «зигзаг» (zigzag) және хиральды түрлерге жіктеледі. Хиральдылық электрлік қасиетке тікелей әсер етеді: кейбір КНТ металлдық өткізгіштікке, ал басқалары жартылайөткізгіштік қасиетке ие болады. Бұл ерекшелік оларды наноэлектрондық элементтер мен өрістік транзисторларда пайдалануға мүмкіндік береді.

Көміртекті нанотүтікшелердің механикалық қасиеттері де ерекше. Олардың Юнг модулі шамамен терапаскаль деңгейіне жетуі мүмкін, ал төмен тығыздықпен үйлескен жоғары меншікті беріктік КНТ-ны композициялық материалдарды армирлеу үшін тартымды етеді. Сонымен қатар нанотүтікшелер жоғары жылуөткізгіштікке, химиялық тұрақтылыққа және үлкен ток тығыздығын тасымалдау қабілетіне ие.

КНТ синтездеудің негізгі тәсілдері - доғалық разряд, лазерлік абляция және газдық фазада химиялық тұндыру. Өнеркәсіптік масштабта CVD әдісі жиі қолданылады, себебі температураны, көмірсутек көзін және Fe, Co немесе Ni негізіндегі катализатордың құрамын өзгерту арқылы түтікшелердің диаметрін, ұзындығын және шығымын басқаруға болады. Алынған нанотүтікшелерді кейін қоспалардан тазарту және олардың бетіне функционалдық топтар енгізу арқылы белгілі бір ортаға бейімдеу жүргізіледі.

4 Фуллерендер: құрылымы, қасиеттері және алынуы

Фуллерендер - көміртек атомдары тұйық қуысты молекулалық каркас түзетін нөлөлшемді көміртекті наноқұрылымдар. Ең белгілі өкілі C60 фуллерені болып табылады. Оның молекуласы 12 бесбұрышты және 20 алтыбұрышты фрагменттен құралған және геометриялық тұрғыдан футбол добына ұқсайды. C70 молекуласының пішіні созылыңқы болып келеді. Фуллерен молекулаларындағы көміртек атомдары негізінен sp2-гибридтенген, бірақ сфералық қисықтық байланыс бұрыштарының идеал графен құрылымынан ауытқуына әкеледі.

Фуллерендердің электрондарды қабылдау қабілеті, салыстырмалы тұрақтылығы және химиялық модификацияға бейімділігі олардың ғылыми және практикалық

маңызын арттырады. Фуллерен каркасының сыртқы бетіне әртүрлі функционалдық топтарды қосуға, ал кейбір жағдайларда ішкі қуысына атомдар немесе шағын бөлшектер енгізуге болады. Осы қасиеттер фуллерен туындыларын органикалық фотоэлектроникада, фотосенсибилизаторларда, сенсорларда және биомедициналық зерттеулерде қолдануға негіз болады.

Фуллерендерді алудың классикалық тәсілдерінің бірі - инертті атмосферада графит электродтары арасындағы доғалық разряд кезінде көміртекті буландыру. Түзілген күйе құрамынан фуллерендер органикалық еріткіштер арқылы экстракцияланып, кейін хроматографиялық немесе басқа бөлу әдістерімен тазаланады. Сонымен қатар лазерлік буландыру және жоғары температуралық көміртек буын конденсациялау тәсілдері қолданылады.

5 Гидрофобты күйе және көміртекті наноматериалдардың қолданылуы

Күйе немесе техникалық көміртек - көмірсутектердің толық емес жануы немесе термиялық ыдырауы нәтижесінде түзілетін ұсақ дисперсті көміртекті материал. Оның бастапқы бөлшектері әдетте нанометрлік масштабта болады және синтез барысында агрегаттар мен агломераттар түзеді. Күйе бөлшектерінің құрылымы толық кристалдық графитке сәйкес келмейді: оларда реттелген графит тәрізді домендер мен ақаулы, аморфты аймақтар қатар кездеседі.

Гидрофобты күйе деп сумен нашар суланатын және беттік энергиясы төмен көміртекті күйе материалын айтады. Гидрофобтық қасиет беттегі полярлы оттекті функционалдық топтардың аз мөлшерімен және ароматты көміртекті фрагменттердің басымдығымен байланысты. Егер күйе беті тотығу арқылы карбоксил, гидроксил және карбонил топтарымен байытылса, оның гидрофильдігі артады. Керісінше, бетті бейполярлы органикалық фрагменттермен модификациялау немесе белгілі бір термиялық өңдеу гидрофобтықты күшейте алады.

Гидрофобты күйе резеңке және полимер өндірісінде толтырғыш және күшейткіш компонент ретінде, электрөткізгіш композиттерде, жабындарда, бояуларда және суды тебетін беттер жасауда қолданылады. Бөлшек өлшемі, меншікті бет ауданы, агрегат құрылымы және беттік химия күйенің диспергирленуіне, полимермен әрекеттесуіне және соңғы материалдың механикалық және электрлік қасиеттеріне тікелей әсер етеді.

Дәрісті бекіту сұрақтары:

1. Көміртекті наноматериалдардың негізгі түрлерін атаңыз.
2. Графеннің атомдық құрылысының ерекшелігі неде?
3. Бір қабырғалы және көп қабырғалы көміртекті нанотүтікшелердің айырмашылығы қандай?

Әдебиеттер:

1. Кобояси Н. Введение в нанотехнологию. - М.: БИНОМ, 2005. - 134 с.
2. Суздалев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. - М.: КомКнига, 2006. - 592 с.
3. Пул Ч., Оуэнс Ф. Нанотехнологии. - М.: Техносфера, 2006. - 336 с.