Дәріс 2. Графен: құрылымы, қасиеттері және алу тәсілдері

Дәрістің жоспары:

1. Графен туралы жалпы түсінік және оның құрылымдық ерекшеліктері
2. Графеннің негізгі физикалық және химиялық қасиеттері
3. Графенді алудың негізгі тәсілдері
4. Графеннің қолданылу бағыттары

Графен – көміртек атомдары бір атомдық қалыңдықта орналасқан екіөлшемді кристалдық материал. Оның құрылымы бал арасының ұясына ұқсас дұрыс алтыбұрыштардан тұратын жазық тор түрінде сипатталады. Әрбір көміртек атомы көршілес үш атоммен берік коваленттік байланыс түзеді және sp^2-гибридтелген күйде болады. Осындай атомдық құрылым графенге жоғары механикалық беріктік, электрлік және жылулық өткізгіштік, сондай-ақ салыстырмалы химиялық тұрақтылық береді.

Графен көміртектің басқа наноқұрылымдарының негізі ретінде қарастырылады. Графен қабатын цилиндр түрінде орау арқылы көміртекті нанотүтікшені, тұйық сфералық құрылымға келтіру арқылы фуллеренді, ал көптеген графен қабаттарын бірінің үстіне бірін орналастыру арқылы графитті шартты түрде сипаттауға болады. Осы тұрғыдан алғанда графен көміртекті наноматериалдардың құрылымдық табиғатын түсіндіретін негізгі модельдік жүйелердің бірі болып табылады.

1. Графеннің құрылымы

Графеннің кристалдық торында көміртек атомдары гексагональды симметриямен орналасады. Көміртек атомдарының арасындағы байланыс ұзындығы шамамен 0,142 нм. Әрбір атом үш σ-байланыс түзеді, ал жазықтыққа перпендикуляр орналасқан p-орбитальдардың қабаттасуы делокализацияланған π-электрондық жүйені қалыптастырады. Электрондардың осы еркін қозғалысы графеннің ерекше электрлік қасиеттерінің негізгі себебі болып саналады.

Графеннің қалыңдығы бір атомдық қабатпен шектелгендіктен, оның беткі атомдарының үлесі өте жоғары. Сондықтан графеннің беттік құбылыстары көлемдік материалдарға қарағанда айқын байқалады. Бетінің үлкен меншікті ауданы адсорбция, сенсорлық процестер және катализатор тасымалдағыштарын жасау кезінде маңызды мәнге ие.

2. Графеннің негізгі қасиеттері

Графеннің механикалық қасиеттері оның көміртек атомдары арасындағы берік sp^2-байланыстарымен анықталады. Материал өте жұқа болғанына қарамастан, жоғары серпімділік модулімен және беріктігімен ерекшеленеді. Бұл қасиеттер оны жеңіл әрі берік композициялық материалдар алуда перспективалы арматуралаушы компонент ретінде пайдалануға мүмкіндік береді.

Электрлік қасиеттері жағынан графен жоғары қозғалғыштығы бар заряд тасымалдаушыларымен сипатталады. Оның электрондық құрылымында валенттік және өткізгіштік зоналары Дирак нүктелері деп аталатын нүктелерде түйіседі. Осы ерекшелік графендегі электрондардың квазирелятивистік сипатта қозғалуына

жағдай жасайды. Нәтижесінде графен наноэлектроника, жоғары сезімтал сенсорлар және өткізгіш жабындар үшін маңызды материал болып табылады.

Графен жоғары жылуөткізгіштікке де ие. Жылу энергиясы кристалдық тор арқылы тиімді тасымалданады, сондықтан графенді электрондық құрылғыларда жылуды әкететін компонент ретінде қолдану мүмкіндігі зерттелуде. Сонымен қатар графен көрінетін жарықтың басым бөлігін өткізеді, яғни бір атомдық қабат болғанына қарамастан салыстырмалы мөлдір материал. Бұл ерекшелік мөлдір өткізгіш электродтар жасауда маңызды.

Химиялық тұрғыдан идеал графеннің базальды жазықтығы салыстырмалы инертті. Алайда қабаттың шеттері, құрылымдық ақаулар және функционалдық топтары химиялық реакцияларға белсендірек қатысады. Графенді функционалдандыру арқылы оның суда немесе органикалық еріткіштерде диспергирленуін, полимерлермен үйлесімділігін және сорбциялық қасиеттерін өзгертуге болады.

3. Графенді алу тәсілдері

Графенді алу әдістері шартты түрде «жоғарыдан төмен» және «төменнен жоғары» тәсілдерге бөлінеді. Бірінші бағытта көлемді графит материалы жеке қабаттарға ажыратылады, ал екінші бағытта көміртек атомдары немесе құрамында көміртек бар газдардан графен қабаты тікелей түзіледі.

Механикалық қабыршақтандыру – графиттің жеке қабаттарын механикалық жолмен ажыратуға негізделген ең қарапайым әдістердің бірі. Бұл тәсіл жоғары сапалы, ақауы аз графен үлгілерін алуға мүмкіндік береді, бірақ өнім мөлшері аз болғандықтан өнеркәсіптік масштабта қолданылуы шектеулі.

Сұйық фазалық қабыршақтандыру кезінде графит қолайлы еріткіште диспергирленіп, ультрадыбыстық немесе механикалық әсер арқылы жұқа графен қабаттарына бөлінеді. Әдіс салыстырмалы түрде қарапайым және үлкен көлемде материал алуға мүмкіндік береді, алайда алынған бөлшектердің өлшемдері мен қабат саны біркелкі болмауы мүмкін.

Графен оксидін алу және оны тотықсыздандыру – кең таралған химиялық бағыттардың бірі. Алдымен графит күшті тотықтырғыштар әсерінен графит оксидіне айналады, одан кейін қабаттарға ажыратылып графен оксиді алынады. Кейін химиялық немесе термиялық тотықсыздандыру арқылы тотықсыздандырылған графен оксиді түзіледі. Бұл әдістің артықшылығы – көп мөлшерде материал алу мүмкіндігі; кемшілігі – бастапқы идеал графенмен салыстырғанда құрылымдық ақаулардың көбірек болуы.

Химиялық бу фазасынан тұндыру (CVD) әдісінде метан немесе басқа көмірсутек газы жоғары температурада мыс, никель тәрізді металл бетінде ыдырап, көміртек атомдарынан графен қабаты түзіледі. CVD тәсілі үлкен ауданды және салыстырмалы біркелкі графен пленкаларын алуға қолайлы болғандықтан электроника мен сенсорлық құрылғылар өндірісінде маңызды орын алады.

Эпитаксиалды өсіру әдісінде графен кремний карбиді сияқты кристалдық материалдардың бетінде жоғары температура әсерімен қалыптасады. Кремний

атомдарының беттен бөлінуі нәтижесінде көміртекке бай қабат қайта құрылып, графен түзіледі. Әдіс сапалы қабат алуға мүмкіндік береді, бірақ жоғары температура мен арнайы жабдықтарды қажет етеді.

4. Графеннің қолданылу бағыттары

Графеннің қасиеттерінің үйлесуі оны көптеген технологиялық салаларда қолдануға мүмкіндік береді. Электроникада графен транзисторлар, өткізгіш пленкалар және икемді электрондық құрылғылар үшін зерттеледі. Энергетика саласында ол литий-иондық аккумуляторлар, суперконденсаторлар және отын элементтері электродтарының құрамына енгізіледі. Үлкен меншікті бет ауданы мен электрөткізгіштігі электродтық материалдардың тиімділігін арттыруға мүмкіндік береді.

Экологиялық технологияларда графен және оның туындылары сорбенттер, мембраналар және су тазарту жүйелерінің функционалдық компоненттері ретінде қарастырылады. Графен оксидінің оттекті функционалдық топтары металл иондары мен органикалық қосылыстардың адсорбциясына жағдай жасайды. Сонымен бірге графен негізіндегі мембраналар жоғары селективті бөлу процестерінде перспективалы материал ретінде зерттелуде.

Қорытынды

Графен – атомдық қалыңдықтағы екіөлшемді көміртекті материал және қазіргі наноматериалтанудың негізгі нысандарының бірі. Оның гексагональды sp^2-құрылымы жоғары механикалық беріктік, электрлік және жылулық өткізгіштік, үлкен меншікті бет ауданы сияқты бірегей қасиеттерді қалыптастырады. Графенді механикалық және сұйық фазалық қабыршақтандыру, графен оксидін тотықсыздандыру, CVD және эпитаксиалды өсіру әдістерімен алуға болады. Әдісті таңдау қажетті материал сапасына, қабат санына, өнім көлеміне және қолданылу саласына байланысты жүргізіледі.

Дәрісті бекіту сұрақтары:

1. Графен дегеніміз не және оның құрылымы қалай сипатталады?
2. Графендегі sp^2-гибридтенудің рөлі қандай?
3. Графеннің негізгі механикалық, электрлік және жылулық қасиеттерін атаңыз.
4. Графенді алудың «жоғарыдан төмен» және «төменнен жоғары» әдістерінің айырмашылығы неде?
5. CVD әдісінің графен алу кезіндегі негізгі ерекшелігі қандай?

Әдебиеттер:

1. Geim A.K., Novoselov K.S. The rise of graphene. Nature Materials. 2007. Vol. 6. P. 183–191.
2. Novoselov K.S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. Science. 2004. Vol. 306. P. 666–669.
3. Суздалев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М.: КомКнига, 2006.