

## Лекция 4 Нанокұрылымды материалдардың қалыптасу механизмі. Нанокұрылымды материалдардың қалыптасу механизмі. Нанокристаллды материалдар.

### Дәрістің жоспары:

- 1 Жоғарыдан-төмен және төменнен жоғары технологиялары
- 2 Нанотехнологиялардың зор мүмкіндіктері
- 3 Негізгі ғылыми терминдер мен анықтамалар

Затты өндеуде және нанокұрылымдар мен наноматериалдар жасауда екі түбегейлі, екі түрлі жол бар. Бұл әдістерді шартты түрде «жоғарыдан-төмен» және «төменнен-жоғары» технологиялары деп атайды.

«Жоғарыдан-төмен» жолы физикалық денелердің өлшемін, ультрамикроскоптық, нанометрлік параметрлердегі объектілер алынғанша, механикалық, не басқа жолмен кішірейтуге негізделген.

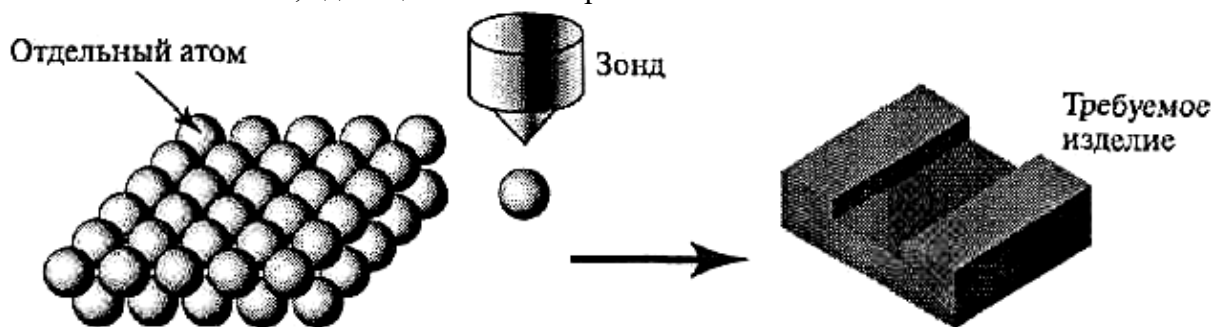
Қарапайым мысал ретінде, құрылымы фотолитографиялық өндеу арқылы жасалатын кейбір жартылай өткізгішті құралдарды айтуға болады. Фотолитография кезінде жартылай өткізгішті лазер сәулесімен өндеп, схеманың алдын-ала жоспарланған конфигурациясын алуға болады. Айырушы қабілеті (яғни, жасалатын схеманың ең кіші элементінің өлшемі) лазер сәулесінің толқын ұзындығымен анықталады. Қазіргі кезде, осындай сәулелердің ең қысқа толқындылары 100 нм-лік дәлдікке дейінгі микроөндеу жүргізуге жарамды, бірақта бұл технология күрделі және өте қымбат құралдарды қажет ететініндіктен, үлкен масштабты өндіріске қолдануға келмейтінін айта кету керек.



Сурет 1 - Жасалу жолы: жартылай өткізгішті техникадағы литография

«Төменнен-жоғары» жолының мәні жасалатын конструкцияны жинау, қажетті ретпен орналасатын тікелей «төмен деңгейдегі» элементтерден жүргізілетіндігінде. Бұл әдісті үйреншікті, детальдардың өлшемін кішірейтуге негізделген миниатюризацияның «жоғарыдан-төмен» жолына «қарама-қарсы» деп айтуға болады.

«Төменнен- жоғары» жолының мысалы ретінді сканерлеуші электронды микроскоп не басқа осындай құралдың көмегімен кристалдық бетке атомдарды даралап орналастыруды айтуға болады. Бұл әдіспен тек жеке атомдарды емес, олардың бүтін қабаттарын да түсіруге болады. Әрине, қазіргі кезде бұл әдістің өнімділігі мен дәйектілігі өте төмен болғанымен, әдістің болашағы зор.



Сурет 2 - Жасалу жолы: Сканерлеуші туннельдік микроскоп көмегімен элементтердің өздігінен жиналуы және өндеу.

Тірі ағзада биологиялық жасаушалар - бөліну (митоз) арқылы құралады. Осы тұрғыдан, атомдардың «өз еркімен» күрделі заттар мен материалдарға қалай және қандай айнала алатындығы қызығушылық туғызады. Жалпы айтсақ, «төменнен- жоғары» (заттың өзін-өзі ұйымдастыруы) жиі кездесетін құбылыс.

Атомдар мен молекулалардың әсерлесуі бастапқы гомогендік қоспалардан жоғары деңгейде тәртіптелген күйлерге алып келе алатындығы баршаға белгілі.

Тірі ағзалар, «өлі» жасаушаларды қорытып, оларды жаңа «тірі» жасаушаларға айналдыра алатындығы осының мысалы болады. Қазіргі кезде, тірі ағзаларда нанотүтікше, нанокристалл және т.с.с. құрылымдардың болатындығы белгілі болды.

Молекулалық химияда ерекше қызуғушылығы бар өзін-өзі ұйымдастыру процестері «жоғарыдан-төмен» жүре алмайтындығы айқын. Биологиялық заттардың құрылуы және жинақталуы атомды-молекулалық деңгейде жүгізіледі де, оны тірі ағзалар жоғары өнімділікпен өткізе алады. Бұл, біз қолданатын «төменнен-жоғары» процестерінің өнімсіздігі техникалық деңгейінің төмендігін және оны дамытуға жол бар екенін көрсетеді. Тірі ағзада биологиялық жасаушалар - бөліну (митоз) арқылы құралады. Осы тұрғыдан, атомдардың «өз еркімен» күрделі заттар мен материалдарға қалай және қандай айнала алатындығы қызығушылық туғызады. Жалпы айтсақ, «төменнен- жоғары» (заттың өзін-өзі ұйымдастыруы) жиі кездесетін құбылыс.

Атомдар мен молекулалардың әсерлесуі бастапқы гомогендік қоспалардан жоғары деңгейде тәртіптелген күйлерге алып келе алатындығы баршаға белгілі. Тірі ағзалар, «өлі» жасаушаларды қорытып, оларды жаңа «тірі» жасаушаларға айналдыра алатындығы осының мысалы болады. Қазіргі кезде, тірі ағзаларда нанотүтікше, нанокристалл және т.с.с. құрылымдардың болатындығы белгілі болды.

Молекулалық химияда ерекше қызуғушылығы бар өзін-өзі ұйымдастыру процестері «жоғарыдан-төмен» жүре алмайтындығы айқын. Биологиялық заттардың құрылуы және жинақталуы атомды-молекулалық деңгейде жүгізіледі де, оны тірі ағзалар жоғары өнімділікпен өткізе алады. Бұл, біз қолданатын «төменнен-жоғары» процестерінің өнімсіздігі техникалық деңгейінің төмендігін және оны дамытуға жол бар екенін көрсетеді.

### ***Нанотехнологиялардың зор мүмкіндіктері***

«Жоғарыдан-төмен» және «төменнен- жоғары» принциптеріне сүйенетін, нанометрлік масштабтағы объектілер мен түрлі процестерге негізделіп жасалатын нақты құралдардың мысалдарын көрсетейік. *Аса қуатты және аса миниатюрлік компьютерлер*

Жақын арада ЭЕМ-дың (олардың жұмыс сипаттамаларының артуымен бірге) өлшемдерінің күрт кішіреуін күтуге болады, сол арқылы өте кіші, тіпті микроскопиялық есептеуіш жүйелерін жасауға болады. Нанотехнологиялар электр тоғы электрондардың шамалы ғана (оншақтыдан бірнеше мыңға дейінгі) санымен анықталатын транзисторларды жасауға мүмкіндік береді, соның нәтижесінде қосылу-ажырату (*on-off*) процестері жеке электронның тәртібімен анықталады. Тәжірибеде бұл электр тізбектерінің (және де үлкен есептеуіш жүйелердің де) өлшемдерінің ең шекті кіші деңгейге жеткізу мүмкіндігін, олардың жұмысында жаңа принциптердің ( микроәлемнің физикалық заңдылықтарының, кванттық механиканың) қолдануын көрсетеді.

#### *Аса сезімтал және өте тұрақты биодатчиктер*

Қазіргі кезде қолданылып жүрген биологиялық датчиктердің жұмысы, басты түрде, оттегінің қатысуымен өтетін түрлі ерекше реакцияларға негізделіп, оның нәтижесіндегі химиялық реакциялар, соған сәйкес электр сигналдары арқылы тіркеледі. Бірақта, биологиялық молекулалар оттегіні алынған өзгерістер не құбалыстарға «жаратпайтындығын» еске алу керек. Нанотехнологиялар, реакциялары тотығу процестеріне негізделмеген, «қолдан жасалған» молекулалар алуға мүмкіндік береді.

#### *Жоғары тиімді отын элементтері*

Автомобильдердің шығаратын газдары (көмір қышқыл газы және т.б.) парник эффектісінің және қоршаған ортаның ласталуының негізгі себебі екені белгілі. Сол себепті,

бүкіл әлемде іштен жану двигателдерінде бензинды алмастыра алатын жаңа энергия көздерін ізденістіру жұмыстары белсенді жүргізілуде. *Бұл тұрғыдан ең тиімді отындық элементтер болып тұр, бірінші кезекті сутекті элементтер* (сутегі жанғанда экологиялық таза су буы ғана пайда болады). Мұндай «экологиялық қауіпсіз» процестердің дамуы, олардың төмен тиімділігімен тежелген еді. Бірақта, соңғы жылдары көміртегінің жаңа кристалдық формалары (*нанокөміртекті түтікшелер деп аталған*) жасалды. Олардың сутегінің зор мөлшерін адсорбциялау мүмкіндігі бұл бағытта үлкен жетістіктерге жетуге болатынына сендіреді.

### **Негізгі ғылыми терминдер мен анықтамалар**

Зерттеу объектісі туралы ғылым жүйесінің негізінде оның заттық-материалдық базасын, құрылымдық тәртіптелуін және тұрақтылығын, кеңістіктік-уақыттық ұйымдастырылуын талдау, және де синтез бен жұмыс істеуінің шарттарына байланысты белгілі және бұрыннан белгісіз қасиеттерінің сандық және сапалық көрінісі жатыр.

Наножүйелердің өндірісіне қатысты, макро- және микрожүйелерге тән емес жаңа дәстүрлі емес қасиеттерінің пайда болуының геометриялық шекарасы бірнешедең 100 нм-ге дейін нақты анықталған. Әрине, геометриялық параметрі жағынан зерттелетін объектіні осындай сипаттауыш өлшем, тек абсолют шама ретінде емес, сондай метрикалық шамаларда материалдың белгілі бір фундаменталды параметрлеріне қатысты қаралуы қажет. Сондықтан, «нано» қосымшасы – негізгі құрылымдық элементтің ұзақтылығының сипаттамасы ғана емес, зерттеу объектісінің, болжанатын құбылыстардың және оларды сипаттау әдістерінің ерекше жалпы бейнеленуі болып табылады.

***Сонымен қатар, «наноәлемнің», тіпті микроскопиялық сипаттауыш өлшемді дәстүрлі объектілермен салыстырғанда да, ең басты көріністері ретінде келесі құбылыстарды айтуға болады:***

- *симметрияның дәстүрлі емес түрлерінің көрінуі әсіне бөліну шекараларының ерекше бірлесуі, динамикалық қайта тұрғызылатын құрылымды конформациялар;*
- *өзін-өзі тәртіптеу және өзін-өзі ұйымдастыру құбылыстарын, матрицалық көшіру эффектілердің мен тепе-теңдіктен ашақ күйлердегі синтездің көрінісі болатын, жасанды тәртіптеу процестерінің үстінен қарау;*
- *жоғары «өрістік» активтілігі және нанобөлшектер негізіндегі ансамбльдер, интеграцияланған бейорганикалық және органикалық табиғаттардағы композицияларды қоса, беттерінің жоғары «каталитикалық» (химиялық) таңдаушылығы;*
- *төмен энергия тұтыну, жоғары жылдамдықты және кооперативтік синергетикалық процесс түрімен көрінетін, энергияның, зарядтың берілу және конформациялық өзгеріс процестерінің ерекше жүруі;*

Аталған ерекшеліктердің «наноәлемде» байқалуының негізгі себептері келесі жағдайлар деп болжауға болады:

- *наноөлшемді жүйелерге көшкенде, түрлі процестерге бөлшектің бетінің көлеміне қатынасының өзгеруінің әсері;*
- *энергетикалық, өрістік және нанобөлшектердің ауқымды көлемін қаптайтын беттің «заттық» тепе-теңсіздігі;*
- *нанокомпозициялардағы бөліну шекараларының ауданы үлкен болғандығынан түрлі өлшемдік эффектілерінің ролінің күшейуі;*
- *энергетикалық активті нанобөлшектерінің үлкен коллективтерінде дәстүрлі емес тәртіптелу, энергия мен зарядтың тасымалдану механизмдерінің көрінісі;*
- *зарядтың, энергияның тасымалдану және конформациялық өзгерістердің энергетикалық және кеңістіктік жетімділігін қамтамасыз ететін, бөлшектердің кіші сипаттауыш өлшемдері мен олардың тәртіптелуінің ерекше сипаты.*

Сонымен, наножүйелер өндірісінің базисі болып, наномасштабтарға көшкендегі, наноқұрылымдағандағы зарядтың, энергияның, массаның және информацияның тасымалдану және таралу процестерінің ерекшелігімен анықталатын, материалдық

жүйелердің бұрын белгісіз жаңа қасиеттері мен мүмкіндіктері болып табылады, яғни, жасанды не табиғи реттелген наножүйелердің интеграциясы болып табылатын объектілерге көшкенде.

Соңғы тұжырым, нанотехнологиялар бойынша әдебиеттердегі, «*жоғарыдан-төмен*» не «*төменнен-жоғары*» парадигмасына жиі көңіл бөлінгендікке байланысты. Яғни, наножүйелік объектілер жасау өндірісінде нәтижеге жетудегі мүмкін болған екі бағыттың болуындағы туралы айтылып отыр.

Бірінші бағыт – бұл, шынына келсек, физикалық *редукционизм* – зерттелетін объектіні қайта-қайта кішірейту арқылы «*үлкеннен кішіге*» бару жолы. Қазіргі кезде 100 нм-лік шектен өткен, классикалық интегралдық микросхемалардың нанотехнологиясы осы жолмен дамуда. Бірақта, күрделі, көп элементті, көп деңгейлі бұйым (мысалға, микросхема) жасау, жүйені біртүтіндікке жеткізу үшін, интеграцияны қажет етеді.

Басқа бағыт – наноматериалдар технологиясына тән, жасанды синтезделетін не өзін-өзі ұйымдастырушы объектінің жүйелі қасиеттерін зерттейтін, *холостық* принцип деп аталатын (грек тілінде *holos* – бүтін, біртұтас) біртұтастық бағыт болып табылады. Бұл бағыттың алғашқымен көп ұқсастықтары да бар, себебі, бірінші бағыттың эволюциялық дамуының нәтижесінде алынған элементтердің өлшемдерінің кішілігі, наноэлементтерден құралған кооперативті біртұтас жүйелердің қасиеттеріндей болғанда, олардың интеграциясына алып келуі керек.

Ғылыми басылымдардағы мәліметтерді талдау арқылы, сонымен бірге *наножүйелер өндірісі* туралы түсініктерді дамыту және жалпылау арқылы, объектілердің таза геометриялық ерекшеліктерін (параметрлерін) емес, нақты *функционалды-жүйелік қасиеттерінің* көрінісін ең толық бейнелейтін, «*нано*» *тіркемесі бар базалық түсініктерді айтайық:*

- *Наножүйе* – наномасштабтық факторлардың байқалғанына байланысты, кванттық-өлшемдік, синергетикалық-кооперативті, «аса зор» эффектілер және басқа құбылыстар мен процестер ретінде көрінетін, олардың кооперациясы объектілерде жаңа қасиеттердің пайда болуын қамтама етілетін, реттелген не өзімен-өзі реттелген, бір-бірімен байланысқан, нанометрлі сипаттауыш өлшемді түріндегі объект.
- *Наноматериалдар* – наномасштабтық факторлардың байқалғанына байланысты, материалдар мен жүйелерде бұрыннан белгісіз механикалық, электрфизикалық, оптикалық, жылуфизикалық және басқа да қасиеттерінің пайда болуын қамтама ететін, наноөлшемдік элементтерінің кооперациясы нәтижесінде физикалық және (не) химиялық әсерлесуінің ерекше болатын, нанометрлік сипаттауыш өлшемді жасанды не табиғи реттелген реттелмеген базалық элементтердің жүйесі болып табылатын заттар не заттардың композициясы.

Қазіргі кезде, наножүйелер өндірісінің фундаменталды мәселелері ретінде, келесі зерттеу бағыттарын атап кетуге болады:

- *молекулалардың ансамбльдері, молекулааралық әсерлесулері және молекулалық динамикасы;*
- *нанобөлшектердің, конформациялардың, фазааралық шекаралардың өлшемдік және функционалды қасиеттері;*
- *наномасштаптау және кванттық-өлшемдік эффектілері;*
- *наноқұрылымданған материалдардағы тепе-теңсіздік процестері мен синергетикалық құбылыстары;*
- *органикалық және бейорганикалық табиғаттағы заттырды матрицалық синтездеу, жинау, өзін-өзі жинау теориялары мен молекулалық тануы.*

Дәрісті бекіту сұрақтары:

- 1 Жоғарыдан-төмен және төменнен-жоғары әдісінің негізгі артықшылықтарын атаңыз
- 2 Нанотехнологияның қандай зор мүмкіндіктерін білесіз?

3 Наножүйелер өндірісінің фундаменталды мәселелері ретінде зерттеу бағыттарын атаңыз.

Әдебиеттер тізімі:

1. Алфимова, М.М. Занимательные нанотехнологии / М.М. Алфимова. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2015. - **823** с.
2. В.И. Марголин и др. Введение в нанотехнологию / В.И. Марголин и др. - М.: Лань, 2012. - 464 с.
3. Гусев, А. И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии / А.И. Гусев. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. - 416 с.