

Дәріс 2.

Нанокұрылымды материалдар. Нанокұрылымды материалдарға сипаттама

Дәрістің жоспары:

1. Нанокұрылымды материалдар
2. Нанокластерлер, нанокристаллдар, наноұнтақтар
3. Көміртекті наноматериалдар, фуллерендер, тубулярлық нанокұрылымдар

Нанәлем - бұл кеңістіктің бір бөлігі, атомдардан өзін-өзі ұйымдастыру арқылы тірі немесе тірі емес заттың қалыптасуы. Наноәлемнің болашағы наноэлектроника немесе нанохимия немесе нанобиология ғана емес. Наножүйелердің ең маңызды қолданбалы мәні бейорганикалық, органикалық және биологиялық элементтің конвергенциясы (ұқсастығы) және табиғатта бұрын-соңды болмаған жаңа заттардың жаласуы.

Нанокұрылымды материалдар (нанокристаллды, нанокомпозитті, нанофазалы, наноталшықты және т.б.) негізгі құрылымды элементтері (кристаллиттер, талшықтар, қабықшалар, кеуектер) кемінде бір бағытта өлшемі 100 нм ден аспайтын құрылымдар.

Материалтану зерттеулерінің міндетіне материалдардың құрылымы мен қасиеттері арасындағы алуан түрлі байланыстарды зерттей отырып олардағы таңдаулы нанокұрылымдарды анықтау кіреді, бұл зерттеулер нәтижесінде наноматериалдарды жасау технологиясы мен кейінгі пайдаланылуының тығыз байланысы жүзеге асырылады.

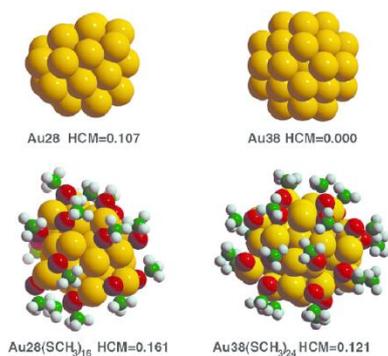
Өзінің бірегей қасиеттерінің арқасында нанокұрылымды материалдар (бұдан ары - наноматериалдар) қазіргі материалтануда алдыңғы орынды алады. Нанотехнологиялар және наноматериалдар туралы ақпараттық ағын едәуір өсті – журналдар мен жинақтарда мақалалар, көптеген конференциялар мен семинарлардың еңбектерінде көптеп шығуда.

Нанобөлшектер өлшемдері 100 нанометрден аз атомдардан немесе молекулалардан тұрады.

Нанокұрылым (англ. nanostructure) — табиғи не қолдан жасалынған нанообъектілердің жиынтығы, қасиеттері тек қана олардың құрылымдық элементтерінің өлшемдеріне ғана емес сонымен қатар кеңістіктегі орналасуына тәуелді. Химиялық құрамы және фазаларының таралуына байланысты нанокұрылымдарды бірнеше түрге бөлуге болады: бірфазалы, беттері бірдей және бірдей емес статистикалық көп фазалы, матрицалық көпфазалы. Құрылымдық бірліктерінің өлшемдері бойынша ажыратылатын құрылымды материалдардың түрін төрт түрге бөлуге болады: 0 – атомдық кластерлер және бөлшектер, 1-мультиқабат (көпқабат), 2- ультромайда дәнекті жабынды, 3- көлемді нанокристаллды материалдар.

Менделеев кестесіндегі зат атомдары арасында 1 нм кіші немесе тең қашықтықта тартылыс күштері пайда болады. Осы күштер әрекетінің нәтижесінде берік байланыстары бар (ковалентті, ионды немесе металл) және әлсіз (Ван-дервальс, сутегі) атомдық конфигурациялар пайда болуы мүмкін. Аз мөлшерде атомдары бар атом қауымдастықтарын (*атомные ассоциаты*) молекулалар немесе кластерлер деп атайды. Бөлшектің өлшемі кіші болған сайын және температура төмен болған сайын оның кванттық қасиеттері күшейе түседі. Нанокластерлер 1 нм -100 нм диапазонында зат құрылысының молекулярлық деңгейінде бола отырып, қасиеттері жағынан атомдар мен микрокөлшектерден түбегейлі ерекшеленеді. Наноәлемде түрлі нанообъектілерді жасауда осы нанокластерлер негізгі «элементтер» болып табылады.

Нанокластерлер - өзіне тән өлшемі 1-10нм поликристалдық нанокұрылым түрінде болатын нанобөлшектердің түрі. Кластерлер (англ. cluster – шоқ, шоғыр, үйілім) – белгілі бір қасиетке ие, дербес бірлік ретінде қарастырылатын біртекті элементтердің қосылыстары. Нанокластер молекулаға ұқсас. Өлшемі бірнеше нанометр нанокластерде атомдардың басым бөлігі оның бетінде орналасқан, үлкен атомдар үшін нанокластерлер - 10% -дан астам. Әдетте нанокластерде 1000-ға дейін атом болады.



Сурет 2.1 – Алтынның нанокластерлері

Мысалы, сфералық формаға ие, i атомнан тұратын кластерді қарастырайық:

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3 = vi,$$

Мұндағы R – нанокластер радиусы, v – бір бөлшекке келетін көлем. Бір бөлшекке келетін көлемді келесі өрнекпен сипаттасақ:

$$v = \frac{4}{3}\pi a^3$$

Мұндағы a – бір бөлшектің орташа радиусы. Онда:

$$R = ai^{\frac{1}{3}}$$

Көптеген кластерлер үшін a -ның өлшемі 0,1нм құрайды. Соңғы теңдеуден, 1000 бөлшектен тұратын кластердің өлшемі 1 нм құрайды.

Нанокластерлердің маңызды сипаттамасы олардың бетінің ауданы болып табылады:

$$S = 4\pi R^2 = 4\pi a^2 i^{\frac{2}{3}}$$

Ғалымдар анықтағандай, кластер бетіндегі атомдардың үлесі кластер өлшемінің өсуімен азаяды. Беттің елеулі әсері кластерлердің көлемі 100 нм-ден аз болғанда байқалады.

Нанокристалл – наноөлшемді кристалл. Нанокристалл - наноқұрылым бірлігі, кристалдық нысандағы заттың ең аз мөлшері. Нанокристаллдар ерекше физикалық қасиеттері бар материал ретінде құнды. Мысалы, алмас пен боразон өте қатты, флюорит толқын ұзындықтарының кең ауқымы үшін мөлдір. Нанокристаллдар сыртқы әсерлердің (жарық, механикалық кернеулер, электр және магнит өрістері, радиация, температура, қысым) әсерінен өз қасиеттерін өзгертуге қабілетті. Нанокристаллдардан жасалған бұйымдар мен элементтер радиоэлектроникада, кванттық электроникада, акустикада, есептеу техникасында әртүрлі түрлендіргіштер ретінде қолданылады. Бастапқыда техникада табиғи нанокристаллдар қолданылған, бірақ олардың қоры шектеулі және сапасы әрдайым жоғары бола бермейді. Сонымен қатар, көптеген құнды қасиеттер тек синтетикалық кристаллдардан табылды. Сондықтан жасанды өсіру қажеттілігі туындады. Нанокристаллдарды өсірудің мынадай әдістері белгілі. а) Стокбаргер; б) Чохральский; в) Вернейля; г) Аймақтық балқыту.

Нанобөлшектер (наноұнтақтар) – бұл кіші өлшемді, өлшемдері 0,1-ден 100 нм-ге дейінгі, қатты заттар. «Нанобөлшек» пен «наноұнтақ» түсініктері көбінесе бір мағынада, бірақ алғашқысының изоляциялық сипатын, ал екіншісінің көпшілік сипатын ескеру қажет

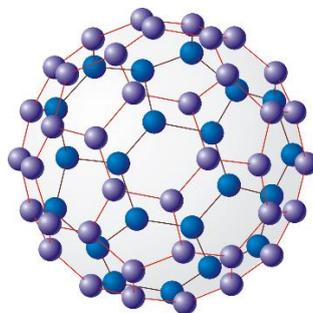
(ұнтақ - өлшемдері 0,001 ден 10^3 мкм-ге дейінгі бір-бірімен жанасатын қатты бөлшектердің жиынтығы). Нанобөлшектер өлшемдері кішірейген сайын, 10-нан бірнеше мың атомы бар (түрлі мәліметтерге сай, 2000 – 10 000), кластерлерге ауысады деп есептеледі. Нанобөлшектерге, қазіргі кезде, жартылай өткізгішті кванттық нүктелер мен полимерлік дендримерлерді де жатқызады. Дендримерлер - молекулаларының тармақтары симметриялы, қайталанатын структуралы макромолекула.

Наноматериалдардың қосымша көптеген негізгі түрлерін айқындауға болады: Консолидацияланған *наноматериалдар*, *наножартылай өткізгіштер*, *нанополимерлер*, *нанобиоматериалдар*, *фуллерендер*, *тубулярлық наноқұрылымдар және т.б.*

Консолидацияланған (лат. – біріктіру, нығайту, шоғырланым, шоғырландыру) наноматериалдарға, аморфтық күйден кристаллизациялану процесін қадағалайтын ұнтақтық технологиялар, дәйекті пластикалық деформация және басқа да пленкалар мен жабындылар түсіру әдістері арқылы алынатын түрлі компактiлер, металдар, құймалар мен қоспалардан жасалған пленкалар мен жабындыларды жатқызады. Бұл материалдардың нанодәнектері (нанокристаллиттері) изоляцияланған (яғни, жеке құрылымдар сияқты) не шала байланысқан күйде емес, консолидацияланған күйде болады. Дәнекаралық қабақшалардың берiктілігі консолидацияланған наноматериалдарда әжептеуір үлкен болады.

Наножартылай өткізгіштер, *нанополимерлер* (поли-көп, мер – өлшем, көп молекулалы), *нанобиоматериалдар* изоляцияланған күйде де, толық емес консолидацияланған күйде де болып, гибридітік (гибрид – табиғаты әр түрлі қосылыстардың жиынтығы, бірігуі, қоспасы) материалдар түзе алады.

Фуллерендер мен тубулярлық (*tubularis*; лат. *tubulus түтікше*) *түтікшеге қатысты, пішіні түтікше тәрізді*) наноқұрылымдар, 1985 жылы көміртегінің жаңа аллотроптық түрі – фуллерендер деп аталған C_{60} және C_{70} кластерлері алынғаннан бастап (Нобель сыйлығының лауреаттары Н.Крото, Р.Керлу және Р.Смолли жұмыстарынан кейін), және, әсіресе, 1991 ж. жапон ғалымы С. Иджиманың графиттің электрдоғалық булануынан пайда болған заттарында көміртегі нанотүтікшелерін тапқанынан бастап, көптеген зерттеулердің объектісіне айналды.



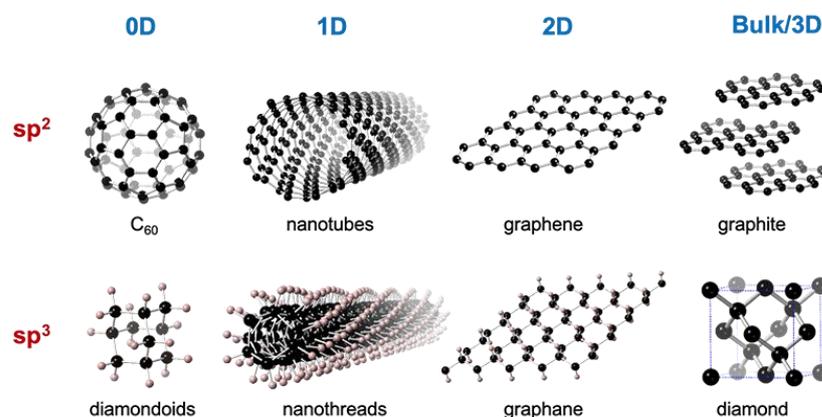
Сурет 2.2 – Фуллерен

Айта кету керек, фуллерендер мен нанотүтікшелер бұдан бұрын да байқалған еді. Көміртекті наноқұрылымды материалдардың ерекшеліктері өткізгіштігін қадағалауға болатын, жоғары механикалық берiктікке ие, химиялық инертті құрылғылар мен жаңа материалдарды алуда кең қолданысқа ие. Сондай ақ, фуллерен, нанотүтікше, графен сияқтылар күн батареялары, сутекті отын элементтері мен сутекті сақтау құрылғыларында және тағы да басқа облыстарда перспективті болып келеді.

Тубулярлық наноқұрылымды материалдар, яғни көміртекті нанотүтікшелер ерекше қасиетке ие болуына байланысты өндірістің көптеген орындарында қолданысқа ие бола алады. Өткізгіштігі бақыланатын, жоғары механикалық берiктік, химиялық инерттілігі, жаңа қондырғылар және жаңа материалдар жасау үшін, өндірісте кеңінен қолданылуы мүмкін. Фуллерен, нанотүтік, графен сияқты көміртекті наноқұрылымды материалдар,

көптеген облыстарда кеңінен таралған, соның ішінде, күн батареяларында, сутекті отын элементтерінде және сутекті сақтау құрылғыларында.

КНТ - диаметрі 1...50нм және ұзындығы бірнеше микрометр болатын көміртекті нанотүтікшелер.



Сурет 2.3 – Көміртекті нанокұрылымды материалдар

Дәрісті бекіту сұрақтары:

1. Нанокұрылымды материалдарға түсінік беріңіз
2. Нанокластердегі атомдар санын қандай формуламен есептеуге болады?
3. Нанокұрылымды материалдардың басқа да түрлеріне мысал келтіріңіз
4. Кластерлердің, нанобөлшектердің және наноұнтақтардың бір бірінен айырмашылығы және ұқсастығы неде?
5. Көміртекті наноматериалдардың ерекшеліктерін 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.