

## №2 Лекция

### Көміртекті материалдардың жалпы жіктелуі. Көміртекті нанотүтікшелер.

**Дәрістің мақсаты:** көміртекті материалдарды жіктеу әдістерімен таныстыру, Химанның үштік диаграммасын талқылау. Көміртекті нанобөлшектердің талшықты пішінінің "архитектурасының" әртүрлілігімен таныстыру.

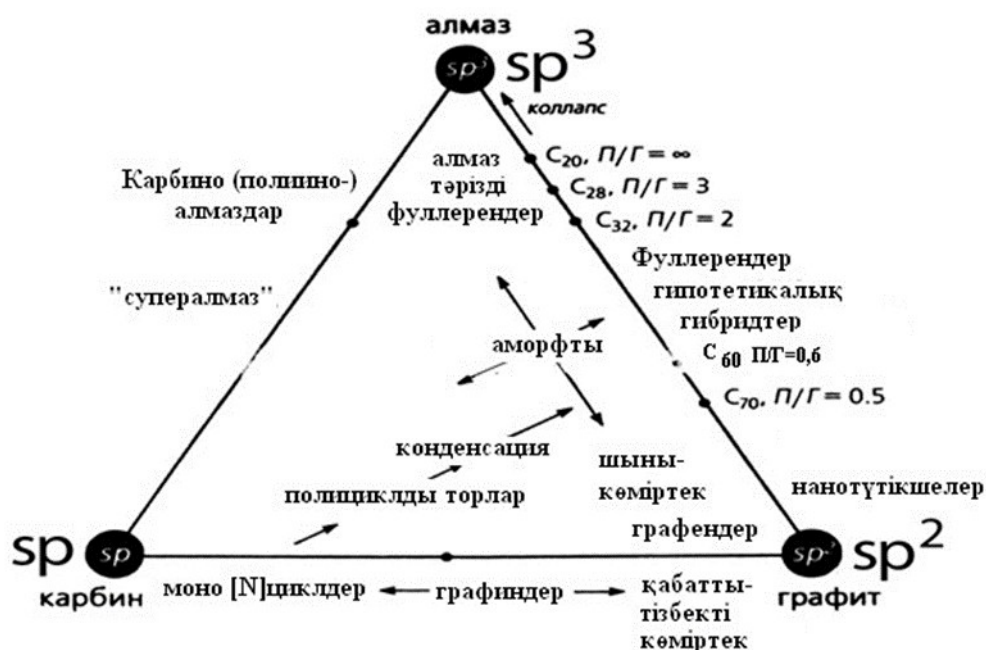
**Көміртекті материалдардың жалпы жіктелуі.** Көміртек атомы байланыстың үш негізгі түрімен сипатталады:  $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$ .  $Sp^2$  графиті будандастырылған  $\delta$  - және  $\pi$  - байланысқан жалпақ көміртекті құрылымнан тұрады. Идеал графиттің құрылымы көміртек атомдарымен алтыбұрышты байланысқан және параллель қатпарларда орналасқан қабаттардан тұрады. Бұл қабаттар бір-бірімен дәлдік бойынша реттелген белгілі бір ретпен орналасады. Графитте, бензол сақинасындағыдай,  $\delta$  байланыстары локализацияланған, ал  $\pi$  электрондары делокализацияланған жүйені құрайды. Графиттегі әрбір байланыстың  $1/3$  бөлігі қосарланған, ал  $2/3$  бөлігі екі таңбалы балладалар.  $SP^2$  және  $sp^3$  фуллерендер мен КНТ-да будандастыру күйлері арасында гибридті орбитальдар бар. Әрбір фуллерендегі  $sp^3$ -будандастырылған байланыстардың саны бір лобқа қатаң сәйкес келеді, ал графиттегі КНТ осы қасиеттерге ұқсас.

Көптеген ғылыми және көркем әдебиеттерде фуллерендер графит, гауһар және карабиннен басқа көміртектің жаңа аллотропты немесе полиморфты түрі ретінде сипатталады. Алайда, мұндай жуықтау өте жеңілдетілген және қайшылықтарды тудырады.

Біріншіден, кристалды денелердегі аллотропия және полиморфизм ұғымдары бір ұғым беретінін ескерсек, Гауһар мен графиттің кем дегенде екі модификациясы бар. Екіншіден, карабиннің бірнеше кристалды политиптік модификациялары да белгілі (мысалы, олардың бірі "АҚ көміртек" немесе 1968 жылы табиғатта табылған чаоит). 1995 жылы Полин тізбекті карбиннің тағы екі модификациясы синтезделді –С–С– С-С-және карболит деп аталды. Бұл жағдайда сызықтық поликум Лена тізбегі бар құрылымдар =C=C=C=C=C=C = болуы мүмкін деген болжамдар бар. Үшіншіден, P - T диаграммасында тек Гауһар мен графиттің термодинамикалық тұрақтылық аймақтары бар.

Төртіншіден, фуллерендер-кристалдық күйде бірнеше кристалдық пішіндер түзетін қосылыстардың кең класына жатады. Мысалы, C<sub>60</sub> фуллериттері үш модификация, ал C<sub>70</sub> фуллериттері кем дегенде төрт модификация жасау арқылы кристалданады. Сонымен, егер біз барлық фуллериттерді монокристалды модификация ретінде қарастыратын болсақ, онда КНТ-ны қайда апаратынымыз белгісіз болар еді.

Неміс ғалымы Р. б. Химанның идеясы көміртекті материалдарды жіктеуде жемісті болды. Ол көміртектің әртүрлі формаларын үшбұрышты диаграмма түрінде көрсетті (сурет.1.7), үш  $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$  бір будандастыру күйіне сәйкес келетініне байланысты.



Сурет.1. Көміртектің аллотропиялық түрлерінің үштік диаграммасы және жіктеу схемасы. P / Г-пентагондар мен алтыбұрыштардың қатынасы; А\Г- алмас-графит тәрізді будандардың қатынасы

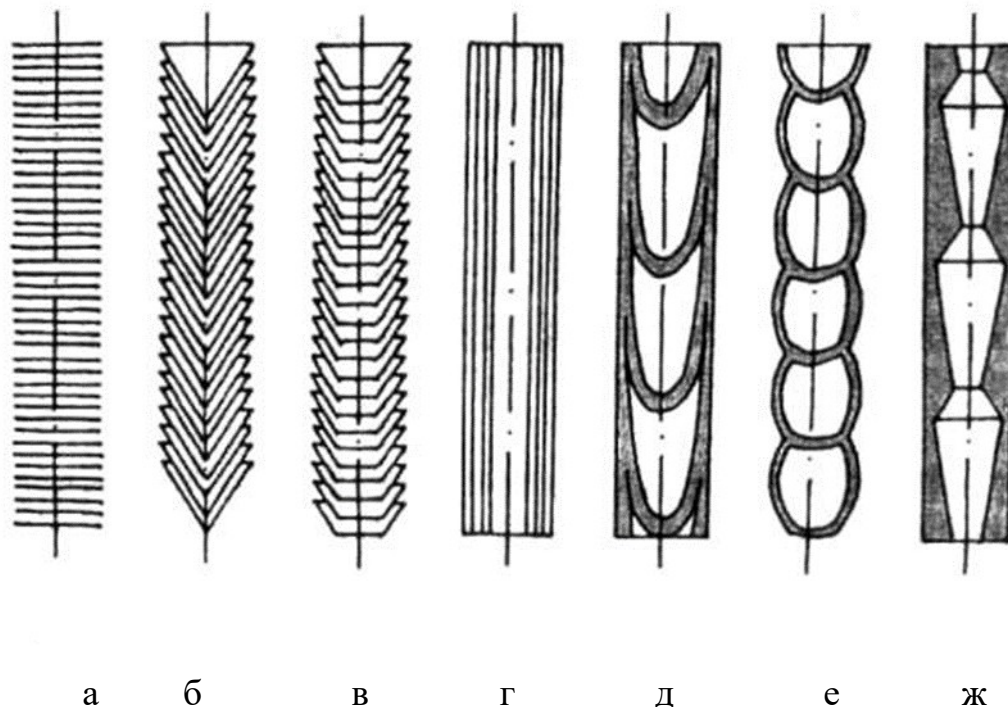
Бұл диаграммада чаоит, тетра-көміртек және басқа да көптеген көміртек формалары өз орнын табады.

Бұл жағдайда үшбұрыштың бүйір қабырғаларында екі будандастырылған күй араласқан пішіндер, ал үшбұрышты еденде-үш будандастырылған күй араласқан пішіндер орналасады. Қатты лобтағы "графит" және "гауһар" байланыстары бар фуллерендер  $sp^2$  -  $sp^3$  күйлері арасында орын алады. Нанотүтікшелер де сол аралықта, бірақ графитке жақын жерде орналасқан. Бүгінгі таңда үшбұрышты диаграмма үнемі жаңартылып, толықтырылып отырады.

## КӨМІРТЕКТІ НАНОБӨЛШЕКТЕРДІҢ ТАЛШЫҚТЫ ФОРМАСЫНЫҢ МОРФОЛОГИЯСЫ

КХДР-дің "архитектурасы" әр түрлі. Оларда графен қабаттары талшықтың өсуіне перпендикуляр немесе оған белгілі бір бұрышта орналасуы мүмкін ("шырша құрылымы", "балық сүйегі"). Ішкі қуыстармен толтырылған және мерзімді тосқауылдардан тұратын әдеттегі бамбук құрылымы суретте

көрсетілген.2.



а - "монеталар жиынтығы" нанотүтікшесі, б - "майшабақ" нанотүтікшелері (конустар жиынтығы, "балық сүйегі"), в - "шыныаяқтар жиынтығы", г - "орыс орамасы" нанотүтікшесі, д - бамбук нанотүтікшесі, е-сфералық бөліктері бар нанотүтікшелер, з-полиэфир бөліктері бар нанотүтікшелер/

КНТ морфологиясы мен құрылымы сыртқы әсерлерден өзгеруі мүмкін. Мысалы, 1700-2000 0С инертті ортада диаметрі 10-60 нм аморфты КНТ күйдіру олардың графен қабатын қалыптастыру үшін кристалдануына әкеледі. Процесс екі кезеңнен өтеді бірінші кезеңде шағын графит кристалдары түзіледі, ал екінші кезеңде кристаллиттер қайта бағытталады, үлкейеді және турбостратикалық графитке ұқсас реттелген үш өлшемді құрылымды құрайды.

Бір-біріне лақтырылған кесілген конус тәрізді CNS жоғары температурада күйдіру цилиндрлік қабырғалары бар CCNT түзілуіне әкеледі. Аралық сатыларда сыртқы цилиндрлік қабаты бар құрылымдар, ал ішкі қабаттарда-цилиндрлік күйде орналасқан графен қабаттары пайда болатындығы анықталды.

CCNT морфологиясы механикалық сыртқы әсерден өзгерістерге ұшырайды. Мысалы, шар диірменінде CCNT-ді ұзақ уақыт ұнтақтау түтіктердің қысқаруына, иілуіне және ашылуына әкеледі. Нәтижесінде сорбциялық сыйымдылық пен түтіктердің нақты бетінің ауданы артады. Бұл кезде қондырғылар кішірейіп, CCNT ішкі қабаттары ажыратылуы мүмкін.