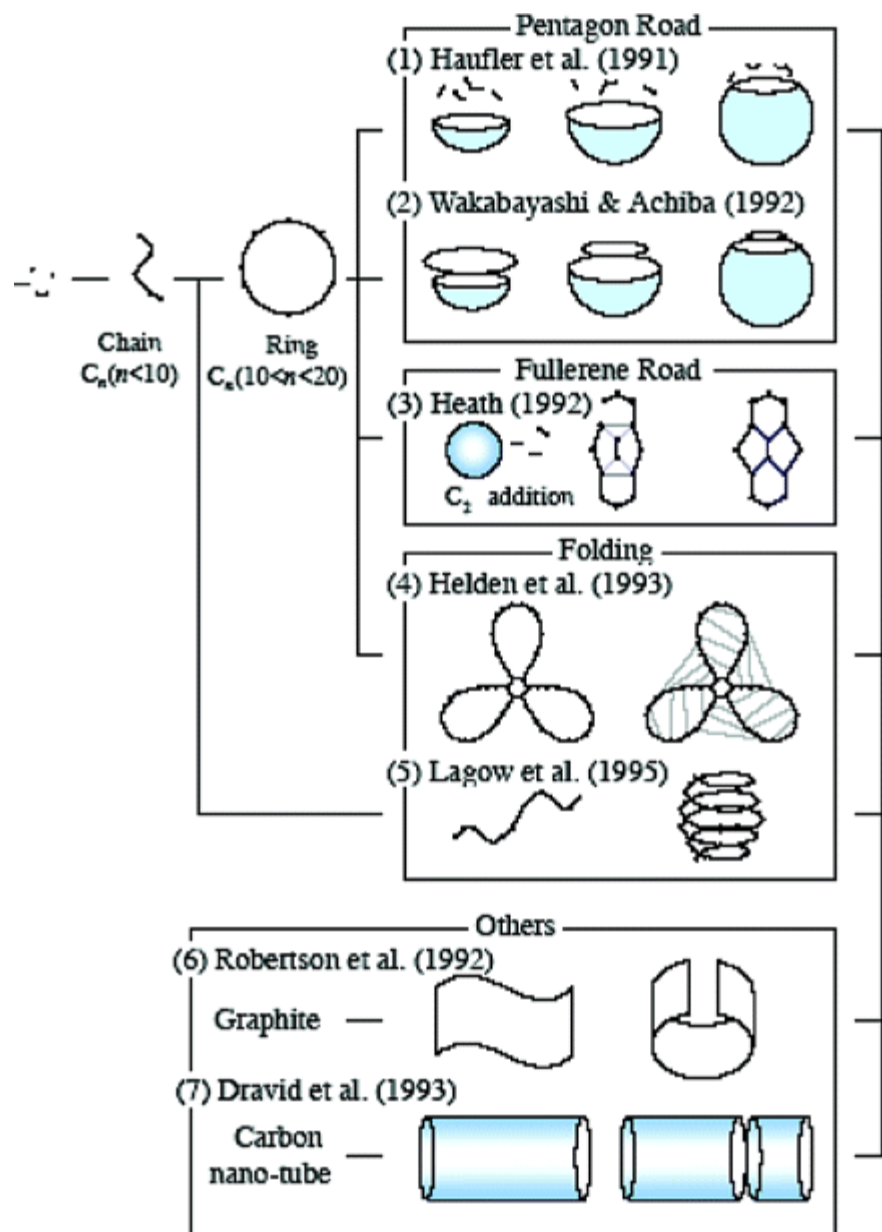


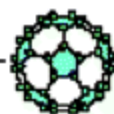


СӘТБАЕВ
УНИВЕРСИТЕТІ



SATBAYEV
UNIVERSITY

11-Дәріс
Нанобөлшектердің жинақталуы



НАНОМАТЕРИАЛДАРДЫҢ ҚҰРЫЛЫМЫ МЕН ҚАСИЕТТЕРІ

7М07103 - МАТЕРИАЛТАНУ ЖӘНЕ ЖАҢА МАТЕРИАЛДАР
ТЕХНОЛОГИЯСЫ

5 (2/0/1/2) КРЕДИТ

СЕМЕСТР: 1, КҮЗ, 2025- 2026 ОҚУ ЖЫЛЫ

ДӘРІСКЕР – КЕРИМКУЛОВА АЛМАГУЛЬ РЫСКУЛОВНА

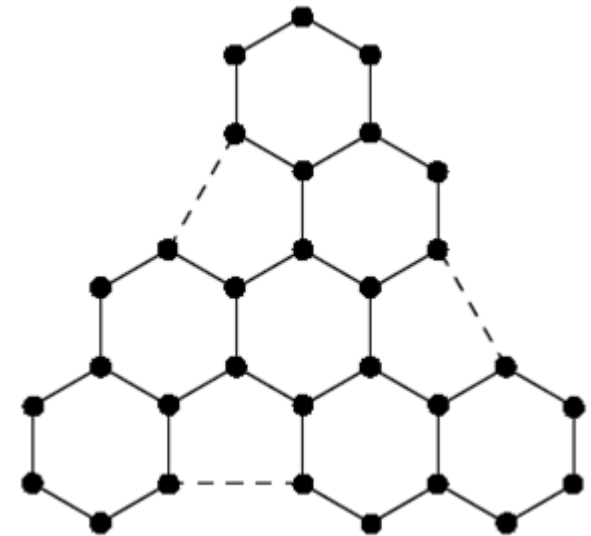
Нанобөлшектердің жинақталуы

Фуллерендердің ашылуы келесі жайтты түсіндірумен байланысты: графиттің абляциясының кейбір шарттарында масс-спектр алынып, онда C60-қа сәйкес шыңның биіктігі басқа кластерлерге сәйкес шыңдардан 40 есе үлкен болды. Бұл жайлы түсіндіру үшін формасы кима икосаэдр болатын C60 тұрақты кластерінің болатындығы ұсынылады, онда барлық атомдар сфералы бетте 12 дұрыс бесбұрыш пен 20 алтыбұрыштың төбелерінде орналасады. Құрылымы мұндай кластер фуллерен деп аталады. Зерттеулер оншақты атомнан тұратын және фуллеренмен бірге басқа кластерлердің де бесбұрыштар мен алтыбұрыштар төбелерінде атомдар орналасатын ұқсас құрылымдар түзетіндігін көрсетті. Фуллерендер түзілуінің моделінің дұрыстығының басты критерийлерінің бірі – басқа фуллерендерге қарағанда C60 фуллереннің кең таралуы. Маңызды жетістік Кречмер, Хафманның C60 фуллеренді көп мөлшерде доғалық разрядта графит стерженьдерін буландыру арқылы алу әдісін табу болды.

https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp061173z?utm_source=chatgpt.com

Фуллеренді графит фрагменттерінен жинау

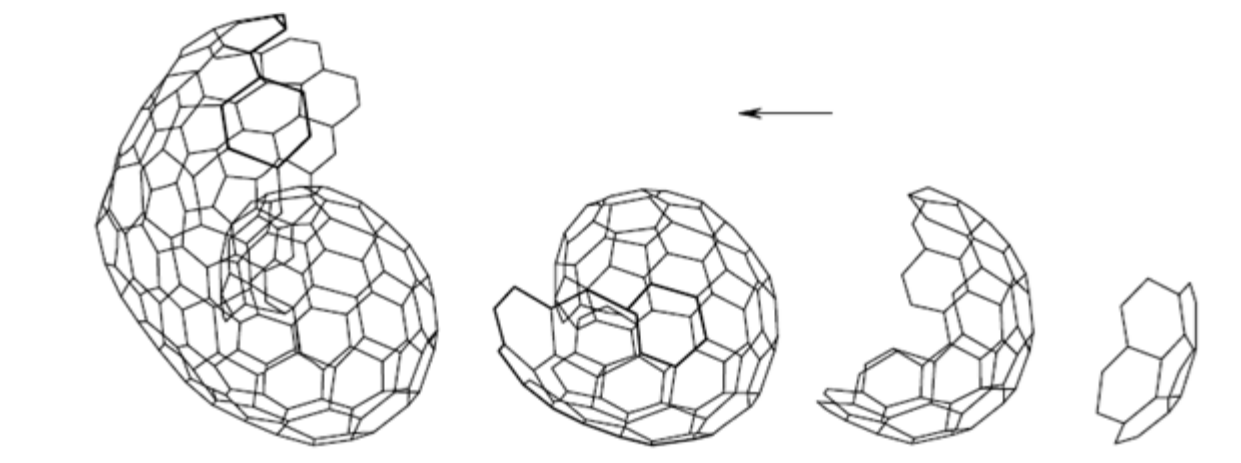
Бастапқыда C₆₀ жазық жапырақшалардың абляциясында графит қабатынан жиналады деп болжанды. Мұндай жинақтың қарапайым тәсілі – қос алтыбұрышты құрылымды C₁₀ - тың 6 кластерін біріктіру. Тостаған тәрізді бұралып келген графит жапырақшаларының формасы - C₆₀ фуллереннің жартысы ұсынылды, олар сосын графиттің кішірек фрагменттерімен қосылып толық C₆₀ фуллеренді түзеді. Осы әдемі модельге сәйкес C₆₀ фуллеренді алудың оңтайлы шарттарының болуы – осы шарттарды графиттің булануынан дәл осындай фрагменттердің түзілуі. Бірақ бұл модельмен келесі жайттарды түсіндіру қиын болды.



Тостаған тәрізді бұралып келген - C₆₀ фуллереннің жартысы болып табылатын графиттің жазық фрагменті

«Ұлу» моделі

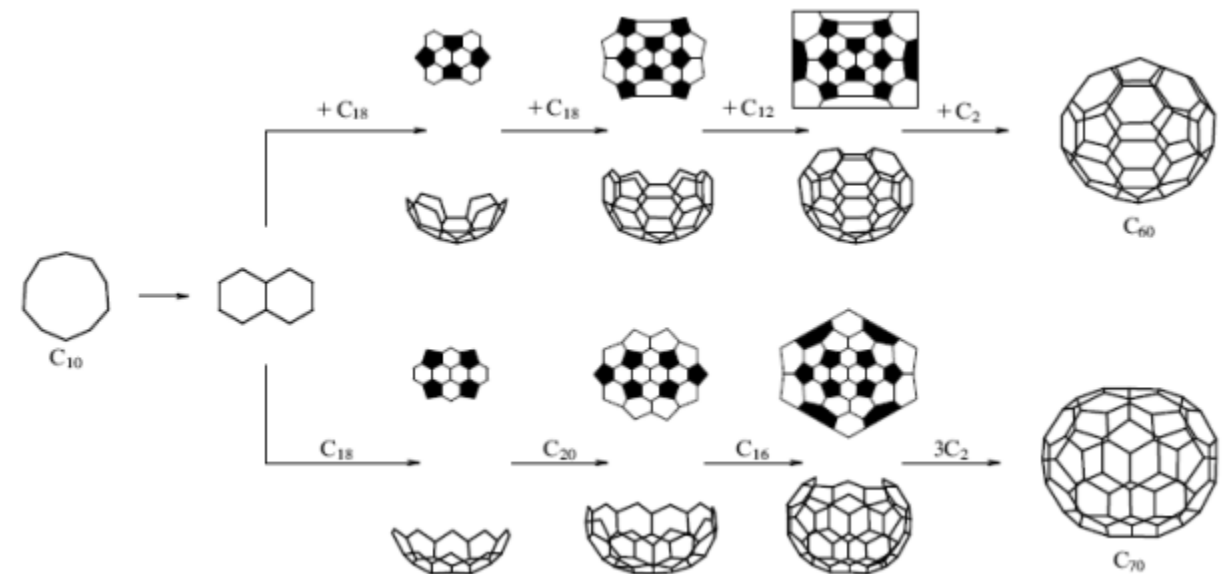
Фуллерендердің түзілуін болжайтын келесі модель - «ұлу» моделі. Бұл модель бойынша фуллеренді алғанда плазмада өсетін көміртекті кластер қисайған жапырақша формасында болады, атомдар арасындағы байланыстарды бесбұрыштар мен алтыбұрыштар түзеді. Өсу процесінде бұл жапырақша аралық еркін байланыстар санын азайтуға тырысады. Қарастырылған модельде көміртекті кластердің өсуі ұлу қабыршағының өсуіне ұқсас (сурет).



Ұлу моделіне сәйкес көміртекті кластердің өсуі

Кластерлерден жинау

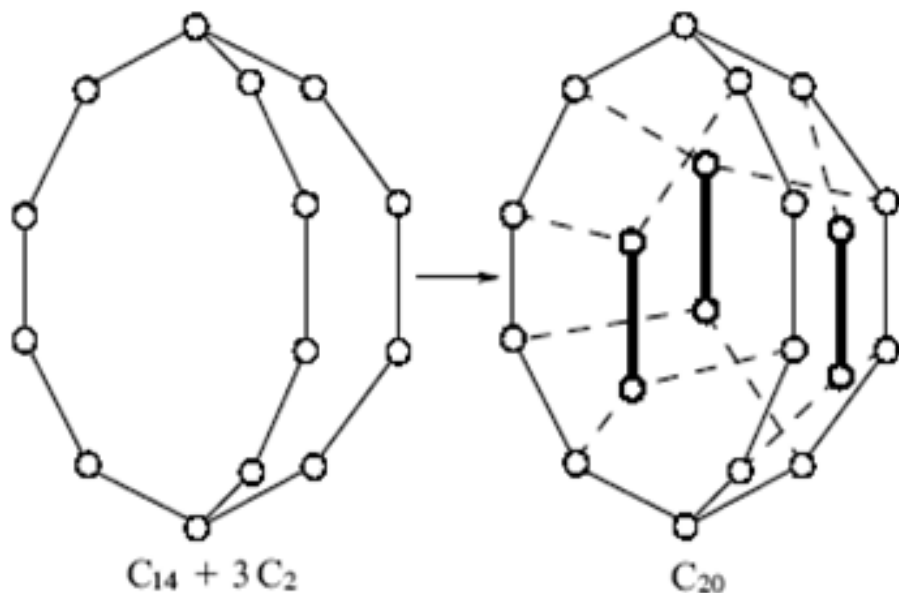
Бұл бөлімде құрылымы «фуллерендер фрагменттерінің» құрылымымен сәйкес келетін әртүрлі кластерлерден фуллерендер жинақталатын модельдер қарастырылады. Жоғарыда келтірілген модельдерге тиісті кемшіліктер «бесбұрыш ережесі» деп аталатын фуллерендердің түзілу моделінде жойылған. «Бесбұрыш ережесіне» сәйкес өсетін жапырақша жанған кезде бесбұрыштар алтыбұрыштармен бөлінеді де, соңында C_{60} фуллереннің түзілуіне алып келеді. C_{60} – дан үлкен кластерлердің басым саны тек атомдардың жұп санынан құралған, сондықтан бесбұрыш ережесі C_{60} – тің өсуі C_2 – нің кезекпен қосылуы нәтижесінде жүзеге асатыны туралы болжаммен толықтырылған. жұмыста бесбұрыш ережесіне сай C_2 - ден C_{60} пен C_{70} өсу сызбанұсқалары келтірілген. Фуллерендердің үлкен фрагменттерден, атап айтқанда C_{60} – тің үш C_{20} – дан жинақталуының бірнеше тәсілдері ұсынылған, сондай – ақ: C_{60} – тің алты C_{10} – нан; «сақиналардан жинақталу» моделі (сурет) $C_{10}+C_{12}+2C_{18}+C_2=C_{60}$, $2C_{10}+2C_{20}+C_{24}=C_{84}$, $C_{10}+C_8+C_{20}+C_{16}+3C_2=C_{70}$, тағы басқа ұқсас фрагменттерде жинақтау тәсілдері ұсынылған.



Кластерлерден жинау

Фуллерендерді синтездеу кезінде буферлі газға сутек қосқанда (синтезді тоқтату үшін) ароматты көмірсутектер C_nH_m , $n=15-20$ алынады. Бұл кезде алынған көмірсутектердің құрылымы көмірсутек кластерлерінің құрылымына ұқсас болды, олар алдыңғы модельдерде фуллерендерге ізашар болып табылады. Бұл жайт бірақ плазма суыған соң көмірсутектер түзілетін ыстық көміртекті кластерлердің дәл сондай өлшемдері мен құрылымы бар екендігін дәлелдей алмайды. Құрылымы әртүрлі көміртек кластерлерінің энергиясын теориялық есептеу, электрондық қозғалғыштығы мен фотоэмиссия спектрін эксперименттік зерттеулер 15-20 атомнан тұратын мұндай кластерлердің құрылымын дәл есептеу бициклді C_{10} кластері нөл температурада да тұрақсыз екендігін көрсетті.

C_2 микрокластерлерінің бір-бірімен қосылуы нәтижесінде жинақталу

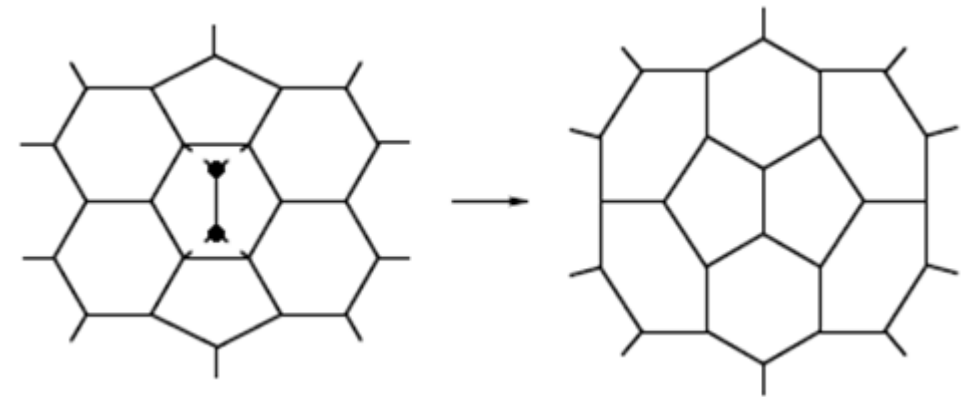


C_2 микрокластерлерінің бір-бірімен қосылуы нәтижесінде түзілген байланыстар үзік сызықпен, C_2 микрокластерлерін қосатын атомдар арасындағы байланыс

Суретте C_2 микрокластерлерінің оның құрылысына кірістіріп қойылуы нәтижесінде осы кластердің C_{20} фуллереніне дейін өсу сызбанұсқасы

Фуллерен жолы

«Фуллерен жолы» деп аталған фуллерендердің түзілу моделі ұсынылды, оған сәйкес көміртекті кластерлер 30 – 40 атом болса фуллерен болып табылады және кластердің ары қарай өсуі фуллереннің C2 микрокластерін қосу арқылы өсуі болып табылады. Бірақ кейінгі талқылаулар бойынша 100 атомнан аса кластерлердің де фуллерендерге айналу мүмкіндігін эксперименттер көрсетті (сурет).



C2 микрокластерінің фуллеренге қойылу
сызбанұсқасы

Студенттердің өзін-өзі тексеруге арналған бақылау сұрақтары:

- 1) Наноқосылыстарды алудың қандай әдістерін білесіздер?
- 2) Нанокристалды ұнтақтарды синтездеу әдісі жөнінде не білесіз?
- 3) Нанотүтікшелерді алудың қандай әдістерін білесіз?
- 4) Нанобөлшектерді жалында алу қалай жүзеге асырылады?
- 5) Нанобөлшектердің жинақталуы туралы не білесіз?

Әдебиеттер

1. Kroto H.W.; Heath J.R.; O'Brien S.C.; Curl R.F.; Smalley R.E. C₆₀: Buckminsterfullerene. *Nature* **318** (1985) 162–163. link.springer.com
2. Krätschmer W.; Lamb L.D.; Fostiropoulos K.; Huffman D.R. Solid C₆₀: A New Form of Carbon. *Nature* **347** (1990) 354–358. ui.adsabs.harvard.edu
3. Kroto H.W. The stability of the fullerenes C_n... (n=24–70). *Nature* **329** (1987) 529–531 — IPR идеясының бастапқы формулировкасы. Nature
4. Fowler P.W.; Manolopoulos D.E. *An Atlas of Fullerenes*. Oxford Univ. Press, 1995 — IPR және изомерия бойынша классика. scispace.com+1
5. Heath J.R. Synthesis of C₆₀ from small carbon clusters (the “Fullerene Road”). In: *Fullerenes — Synthesis, Properties and Chemistry of Large Carbon Clusters*, ACS Symp. Ser. 481 (1992) 1–23. link.springer.com
6. McElvany S.W.; Ross M.M.; Callahan J.H. Mechanisms for tailor-made fullerene formation (ring coalescence evidence). *Science* **259** (1993) 1594–1596. science.org+1
7. Irle S.; Zheng G.; Wang Z.; Morokuma K. QM/MD: the “Shrinking Hot Giant” route to fullerenes. *J. Phys. Chem. B* **110** (2006) 14531–14545. pubs.acs.org
8. Yamaguchi Y.; Maruyama S. A molecular dynamics simulation of the fullerene formation process. *Chem. Phys. Lett.* **286** (1998) 336–342; және авторлардың толық MD баяндамалары. ResearchGate+1
9. Ahmad S.; Irfan M.; Riffat M. Modelling of C₂ addition route to the formation of C₆₀: cyclic-ring, pentagon and fullerene roads (preprint/талдау). 2016. arxiv.org+1
10. Chung S.H. Nucleation of fullerenes as a model for soot formation (қатысты аналитика). *Proc. Combust. Inst.* **33** (2011) 1739–1746. PubMed
11. Mansurov Z.A. Complete scheme for fullerene, graphene and soot formation (шолу). *Eurasian Chem.-Technol. J.* **20** (2018) 263–273. ect-journal.kz
12. Kroto H.W. Nobel Lecture: C₆₀ Buckminsterfullerene, the Birth of Fullerene Science (1996) — тарихи контекст және модельдерге шолу. NobelPrize.org