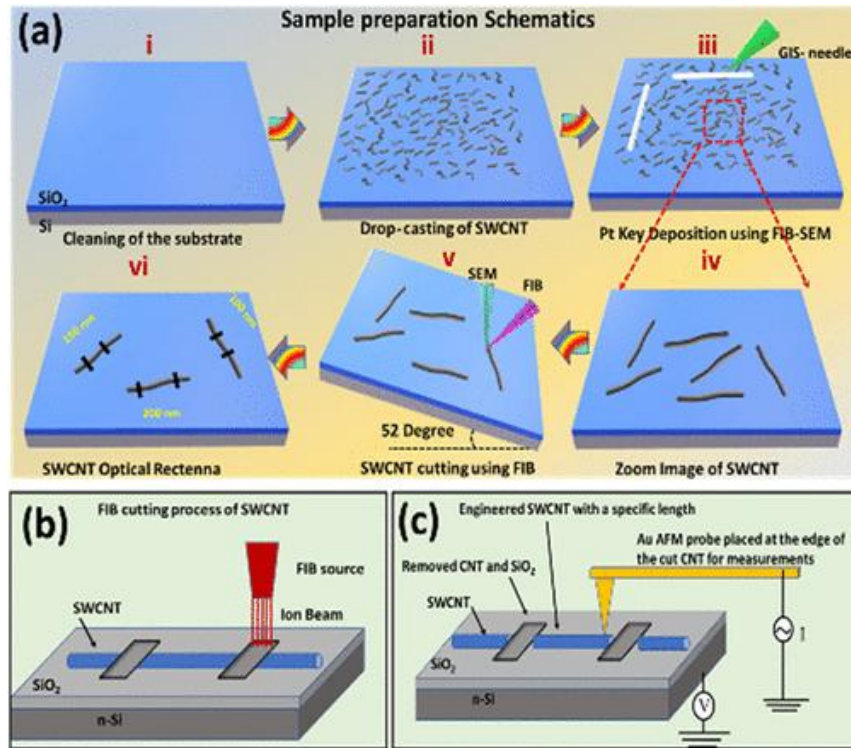
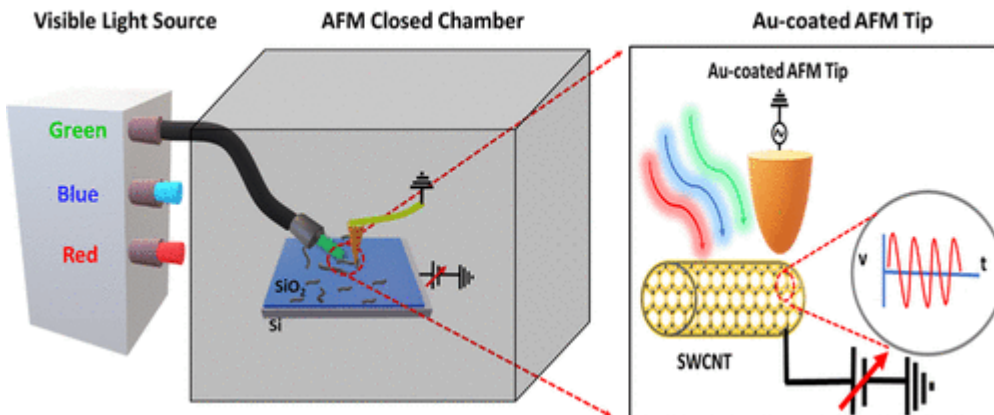




**Optical Rectenna Measurement Schematics**



12-Дәріс

Көміртекті наноматериалдар химиясы.  
Наноматериалдарды функционализациялау.

# 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

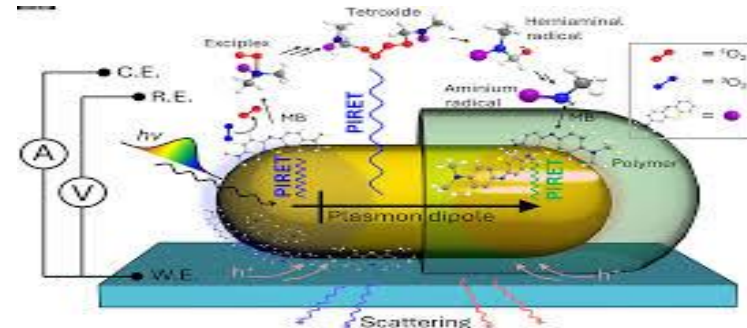
## 1-Дәріс

# Көміртекті наноматериалдар химиясы. Наноматериалдарды функционализациялау

---

КНТ бүйір бетінің пирамидалану бұрышының шамасы фуллерендердікінен аз және олар (15,0) КНТ үшін 0,059 рад, (12,0) КНТ үшін 0,075 рад, (10,0) КНТ үшін 0,090 рад құрайды. Тіпті кішкентай КНТ (8,0) бүйір бетінің пирамидалану бұрышының шамасы  $\theta_p=0,113$  тең болады. КНТ құрылымының ерекшелігі графен қабатының бір ғана бағыттағы оралуы арқылы түзілетіндігінде. Олардың бүйір бетінің пирамидалану бұрышы шамасының нөлден өзгеше болуы графитпен салыстырғанда реакциялық қабілеттілігінің жоғары болуын анықтайды.

КНТ «қалпақтарының» пирамидалану бұрышы әрқашанда олардың бүйір бетінің пирамидалану бұрышынан көп болады. Сондықтан КНТ бүйір бетіндегі атомдармен салыстырғанда «қалпақтарының» реакциялық қабілеттілігі жоғары болады.



КНТ химиясы деп оларды алу, тазалау, модификациялау, солубилизациялау және полимерлеу үдерістерін, сонымен бірге түрлендірілген, солубизирленген, супрамолекулярлық және полимерленген КНТ морфологиясы мен құрылымын айтады.

Оларды түрлендіру бірнеше әдіспен жолмен жүргізілуі мүмкін:

- біртіндеп тотықтыру арқылы жабық түтікшелерді ашу;
- функционализация (КНТ-ге функционалды топтарды байланыстыру);
- КНТ-мен байланысқан функционалды топтардың реакциялары;
- Түтікшелерді әртүрлі қосылыстармен толтыру;
- Көміртек атомдарын басқа элемент атомдарымен алмастыру;
- Түтікшелердің ван-дер-ваальс қабаттарына атомдар мен молекулаларды интеркалирлеу;
- Газдар мен булардың адсорбциясы мен хемосорбциясы;
- Түтікшелердің сыртқы қабаттарын басқа қосылыстармен қаптау және оларды матрица ретінде қолдану.

# Нанотүтікшелердің ашылуы және кесілуі

---

КНТ алу әдістерінің барлығында дерлік ұштары жабық «қалпақты» түтікшелер түзіледі. Алайда КНТ толтыру және сорбенттер, нанокапиллярлар, нанореакторлар немесе матрица ретінде қолдану үшін «қалпақтары» жоқ, ашық нанотүтікшелер қажет етіледі. КНТ ашылу үшін осы «қалпақтарды» жою қажет болады.

Түтікшелерді ашу мен кесу химиялық, электрохимиялық және механикалық әсерлер қамтылатын екі әдістер тобымен жүргізіледі. Әдетте газификация мен еру (деструкция) реакцияларынан тұратын химиялық әдістер қолданылады. КНТ ашылуы мен кесілуі олардың функционалануымен қатар өтеді. Әдісті таңдау бастапқы түтікшелердің құрылысы мен тазалығына, сонымен қатар қоспалардың сипаты мен қасиетіне байланысты болады.

Газификация әдісімен КНТ ашу үшін оттегі пен оның қоспалары (көбінесе, ауа, ауаның инертті газдармен қоспасы, су буы, күкіртсутек), озон,  $\text{CO}_2$ , дымқыл хлор, оттекті немесе сулы плазмада түзілетін радикалдар мен иондар пайдаланылады.

<https://tstu.ru/book/elib/pdf/2013/dyachkova-a.pdf>

# Нанотүтікшелердің ашылуы және кесілуі

---

Оттеkte және ауада тотығу жылдамдығы температура мен оттек концентрациясына байланысты өте жоғары болуы мүмкін болғандықтан, ол шамаларды шектеуді қажет етеді. Температураны 350-500 0-тан өте сирек жағдайда ғана арттырады, ауа қысымын төмендетеді, ал оттек мөлшерін инертті газдар көмегімен төмен деңгейде (1-3 көл.%) ұстайды. Бұл шарттар үдеріс ұзақтығын арттырып, оны дәлірек басқаруға мүмкіндік береді.

Ауада тотықтыру кезінде жіңішкелеу түтікшелер жуан түтікшелермен салыстырғанда жылдамырақ әрекеттеседі де, қоспа құрамындағы жуан КНТ үлесі артады. Жіңішке түтікшелердің реакциялық қабілеттерінің жоғары болуы тотықтыру кезінде оларда ақаулардың көбірек түзілуімен түсіндіріледі. Сондықтан тотықтыру шарттары жұмсағырақ болған сайын КНТ-дің беткі қабаттарындағы ақаулар саны азырақ болады.

Газтәрізді озон оттекпен салыстырғанда КНТ белсендірек әрекеттеседі. Реакция активті орталықтарда (ақаулар), циклобайланысу арқылы озонидтер түзіп, эфирлі, хинонды функционалды топтармен байланысу арқылы жүзеге асады. Ал температураны арттырған кезде СО мен СО<sub>2</sub> түзе ыдырау байқалады.

# Нанотүтікшелердің ашылуы және кесілуі

---

Көміртекті материалдардың көміртек диоксидімен әрекеттесуі оттектен, озонмен әрекеттесумен салыстырғанда көп эндотермиялық болып табылады. КНТ-ді көміртек диоксидімен тотықтыру ауада тотықтырумен салыстырғанда жоғары температурада өтеді. Ал БҚКНТ тотықтыру кезінде тотығу 600 0C температурада басталады. Сонымен бірге, CO<sub>2</sub> әсері ауа мен оттектен салыстырғанда селективті сипатта болады.

КНТ ашу мен кесу үшін су буын да пайдалануға болады. Су буы - әлсіз тотықтырғыш. Сонымен бірге, су буын разрядпен жұмсақ режимде белсенділендіру арқылы наноматериалдар массивінің беткі қабатындағы аморфты көміртекті жоюға болады. Оларды толық ыдырауға 20-30 минутта қол жеткізуге болады.

Нанотүтікшелердің дымқыл хлор, хлор мен сутек қоспасымен ашылуы зерттелген. Дымқыл хлор әрекеттесудің бірінші сатысында КНТ ұштарында  $\equiv\text{C}-\text{Cl}$  және  $\equiv\text{C}-\text{OH}$  функционалды топтары түзіледі. КНТ-дің әсерлі кесілуіне қол жеткізу үшін олардың сұйытылған фтормен әрекеттесуін қолдануға болады.

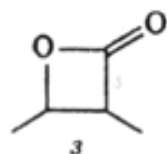
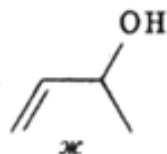
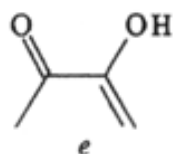
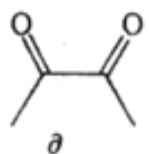
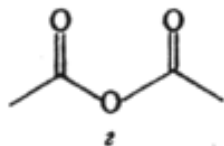
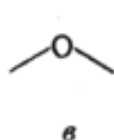
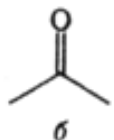
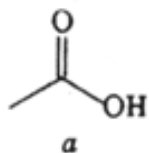
Ауада тотықтыру әдісімен бірге сулы ерітінділерде тотықтыру - азотты, тұз, күкірт, пероксидкүкіртті, хлорлы, трифторсіркелі, пероксисіркелі қышқылдарында және олардың қоспа ерітінділерінде, сутек пероксидінде тотықтыру әдістері де кеңінен тараған.

КНТ ашылуы мен кесілуін механикалық әдіспен де жүзеге асыруға болады. Мысалы, этанолдағы ұсақдисперсті алмаз (диаметрлері 0,1 мкм) пастасында жүзеге асыруға болады. Бұл кезде БҚКНТ ұзындықтары 300-700 нм болатын бөліктерге кесіледі де, материал кеуектерінің орташа мөлшерлері артып, 5-10 нм аралығында болады. Нәтижесінде түтікше өсінділер түрінде жинақталады да, материал абразив бөлшектерімен ластанады.

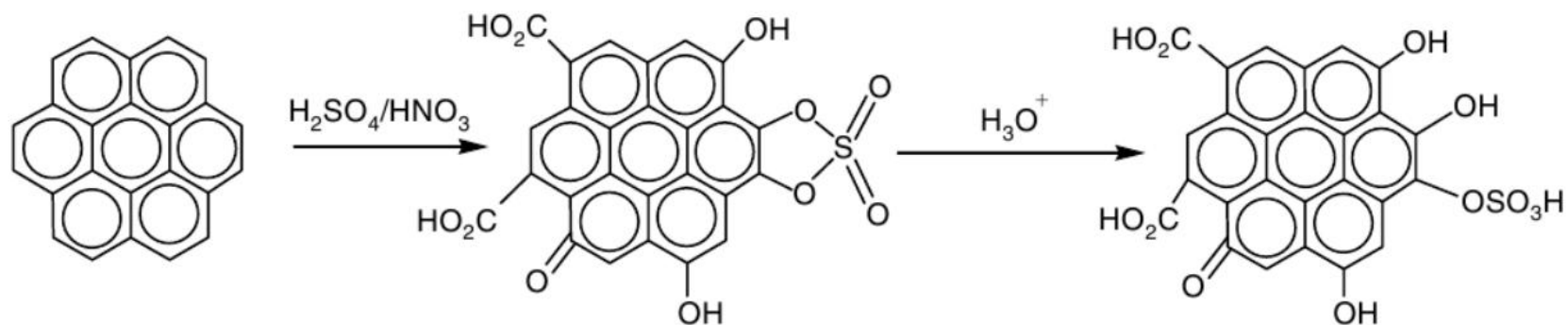
КНМ ашылуы мен кесілуі үшін сонымен бірге қарқынды ұсақтау қолданылады, ал салыстырмалы үлкен КҚКНТ-ді кесуде фокусталған лазерлі сәулелендіру, электронды немесе ионды ағындар пайдаланылады.

Ашық БҚКНТ өздігінен жабылуы (коалесценция) шамамен 1300 0C температурада ультракүлгін вакуумде жүргізіледі. Ал аморфты көміртек қатысында температураны 800 0C дейін төмендетуге болады. Сонымен бірге, үдеріс температурасын электронды ағынмен сәулелендіруді қолдану арқылы төмендетуге болады.

# Наноматериалдарды функционализациялау

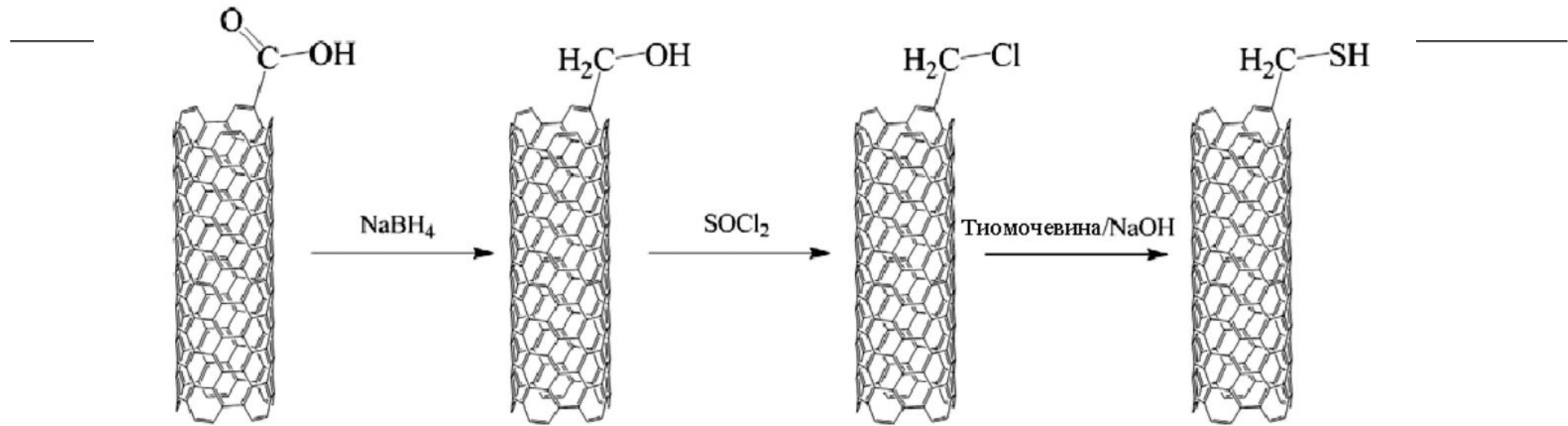


Құрамында оттегі бар функционалды топтар: а- карбоксильді, б- кетонды, в- эфирлі, г- ангидридті, д- хинонды, е- фенолды, ж- гидрохинонды, з- лактонды



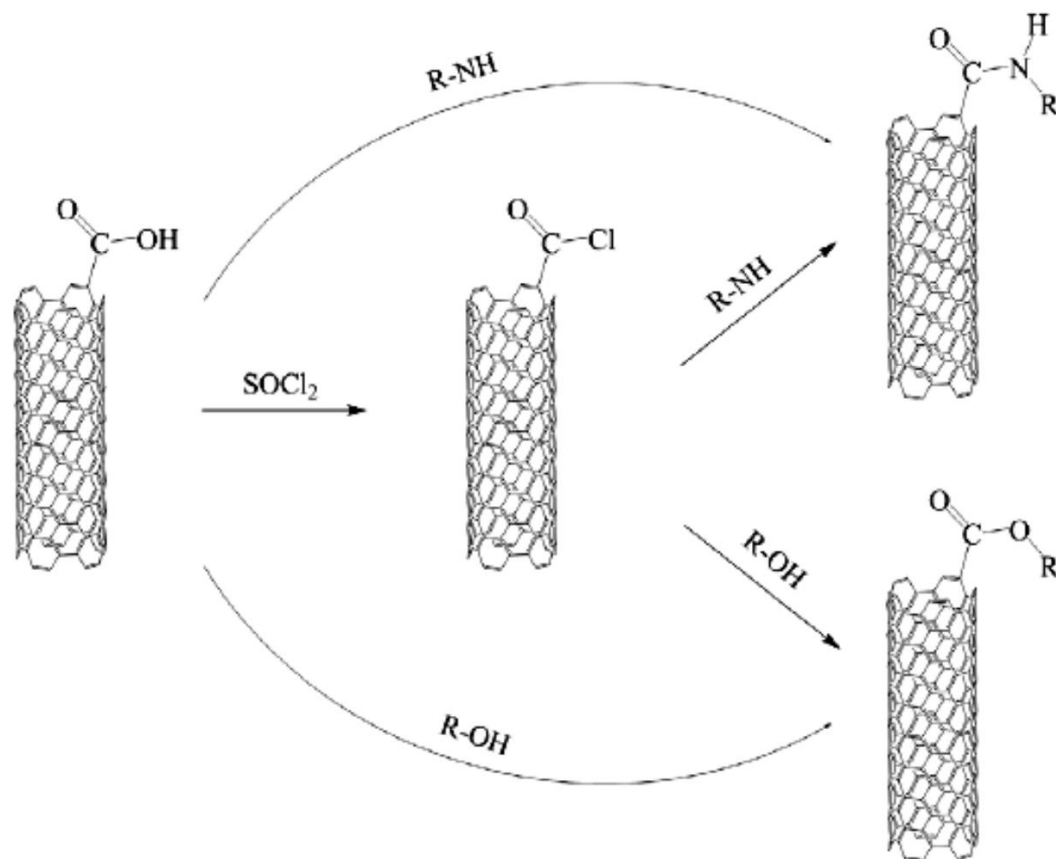
$\text{HNO}_3$  және  $\text{H}_2\text{SO}_4$  қоспасымен тотығу кезінде КНТ бетінде күкіртқұрамды функционалды топтардың түзілу сұлбасы.

# Наноматериалдарды функционализациялау



Тотыққан бір қабатты нанотүтікшелердің (КНТ) тиолдану  
схемасы

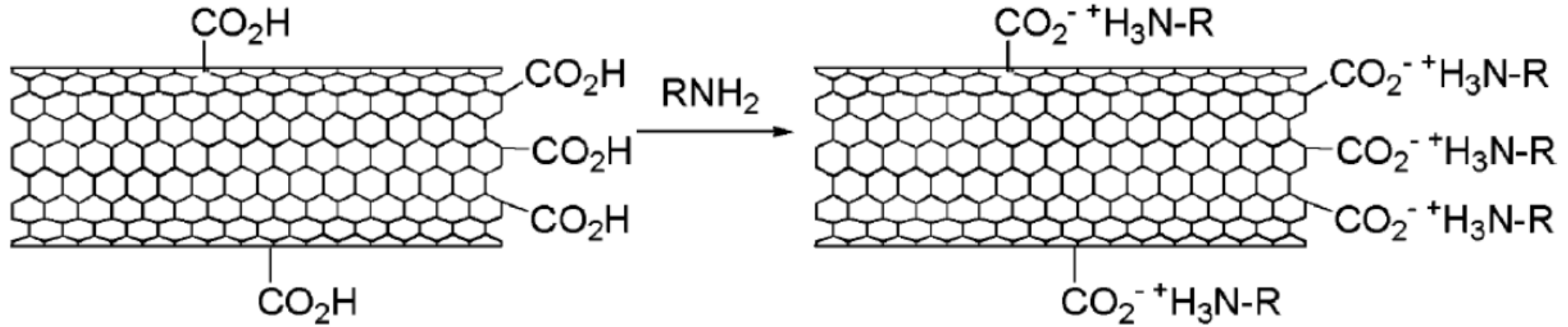
# Наноматериалдарды функционализациялау



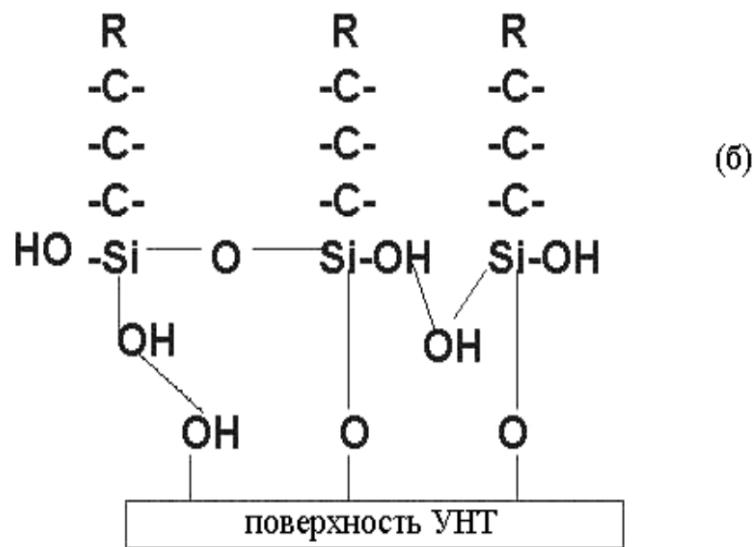
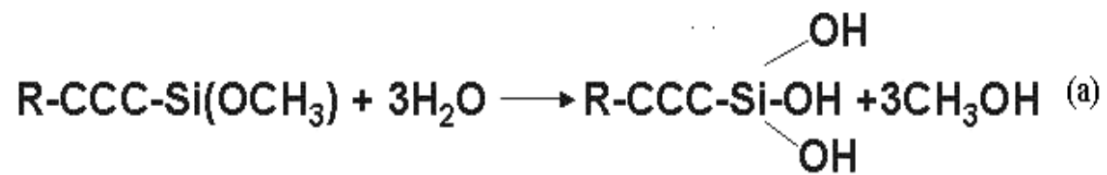
## Тотыққан бірқабатты нанотүтікшелердің этерификация/амидтену схемасы

Мына процестерді тікелей де, немесе алдымен оларды реакцияға қабілетті хлорангидридке айналдыратын аралық саты арқылы да жүргізуге болады. Соңғы нұсқада әуелі карбоксилденген УНТ ( $-\text{COOH}$ ) тионил хлоридімен ( $\text{SOCl}_2$ ) өңделіп, қышқыл хлориді ( $-\text{COCl}$ ) алынады, одан кейін ол алкил/арил аминдермен, аминқышқылдары туындыларымен немесе спирттермен әрекеттестіріледі.  $\text{SOCl}_2$  орнына дегидраттаушы агент ретінде дициклогексилкарбодиимид (DCC) қолдануға болады.

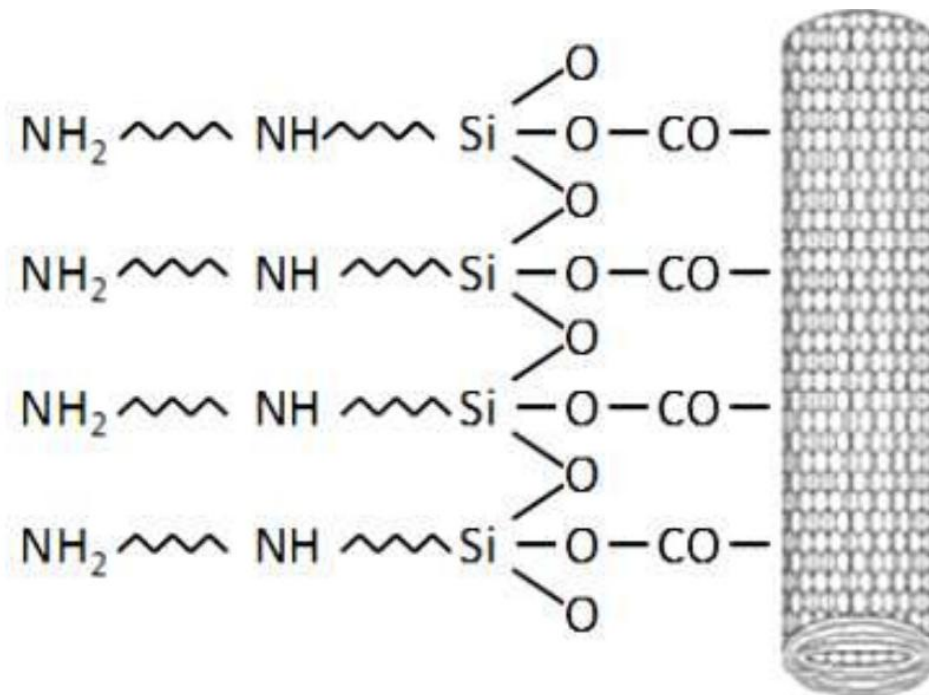
# Наноматериалдарды функционализациялау



Цвиттер-иондардың түзілу сұлбасы.



**Алдын ала тотыққан УНТ бетінде силандану реакцияларының тізбегі**



**Карбоксилденген УНТ-тың 3-(2-аминоэтиламино)пропилтриэтоксисиланмен өзара әрекеттесу өнімі**

# Әдебиеттер

---

1. Kroto H.W.; Heath J.R.; O'Brien S.C.; Curl R.F.; Smalley R.E. C<sub>60</sub>: Buckminsterfullerene. *Nature* **318** (1985) 162–163. [link.springer.com](http://link.springer.com)
2. Krätschmer W.; Lamb L.D.; Fostiropoulos K.; Huffman D.R. Solid C<sub>60</sub>: A New Form of Carbon. *Nature* **347** (1990) 354–358. [ui.adsabs.harvard.edu](http://ui.adsabs.harvard.edu)
3. Kroto H.W. The stability of the fullerenes C<sub>n</sub>... (n=24–70). *Nature* **329** (1987) 529–531 — IPR идеясының бастапқы формулировкасы. [Nature](http://Nature)
4. Fowler P.W.; Manolopoulos D.E. *An Atlas of Fullerenes*. Oxford Univ. Press, 1995 — IPR және изомерия бойынша классика. [scispace.com+1](http://scispace.com+1)
5. Heath J.R. Synthesis of C<sub>60</sub> 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](http://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](http://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](http://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](http://ResearchGate+1)
9. Ahmad S.; Irfan M.; Riffat M. Modelling of C<sub>2</sub> addition route to the formation of C<sub>60</sub>: cyclic-ring, pentagon and fullerene roads (preprint/талдау). 2016. [arxiv.org+1](http://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](http://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](http://ect-journal.kz)
12. Kroto H.W. Nobel Lecture: C<sub>60</sub> Buckminsterfullerene, the Birth of Fullerene Science (1996) — тарихи контекст және модельдерге шолу. [NobelPrize.org](http://NobelPrize.org)