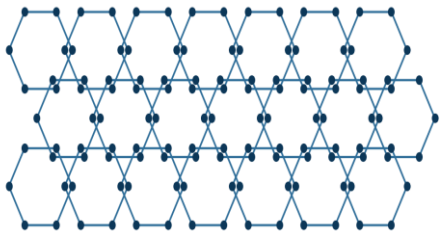
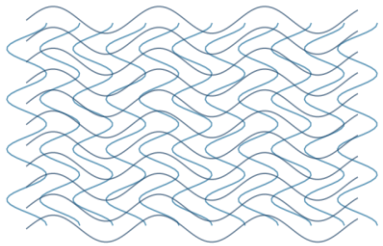
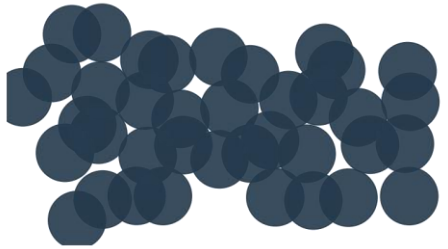
Д 1. Көміртекті наноматериалдарға кіріспе

Графен, нанотүтікшелер, фуллерендер және гидрофобты күйе









Дәрістің мақсаты және күтілетін оқу нәтижелері

Мақсаты

Көміртекті наноматериалдардың құрылымы, жіктелуі, алу жолдары және қасиет–құрылым байланысы туралы жүйелі түсінік қалыптастыру.

- 0D, 1D және 2D көміртекті құрылымдарды ажырату;
- Графен, CNT, C_{60} және көміртек қарасын құрылымы бойынша салыстыру;
- Негізгі синтез және сипаттау әдістерін түсіндіру;
- Гидрофобтылық пен функционалданудың маңызын бағалау.

Дәріс жоспары

01

Көміртектің байланысуы және нанокұрылымдар

02

Графен және оның туындылары

03

Көміртекті нанотүтікшелер

04

Фуллерендер және C_{60}

05

Гидрофобты күйе: беттік химия

06

Әдістер, қолданылу және шектеулер

Дереккөздер: дәріс соңындағы әдебиеттер тізімі

Көміртектің гибридтенуі: құрылымның химиялық негізі

sp^2-гибридтену

Үш σ-байланыс; делокальданған π-электрондар.

Графен, графит, CNT және көптеген фуллерендердің негізі.

sp^3-гибридтену

Төрт σ-байланыс, тетраэдрлік орта.

Алмазға тән; ақаулы көміртекте аралас байланыстар кездесуі мүмкін.

Негізгі идея

Өлшемділік пен қисықтық өзгергенде көміртек атомдарының байланысу ортасы, электрондық күйі, реакциялық белсенділігі және беттік қасиеттері өзгереді.

Көміртекті материалдардың өлшемділік бойынша жіктелуі

0D

Фуллерендер

Молекулалық жабық қаңқа

1D

Нанотүтікшелер

Ұзын ось бойымен созылған түтік

2D

Графен

Атомдық жұқа жазық тор

3D / агрегат

Көміртек қарасы

Біріккен бастапқы бөлшектер агрегаты

Тарихи кезеңдер: классикалық ашылулар

1985

C_{60} фуллерені

Kroto және әріптестері

1991

Көпқабырғалы CNT

S. Iijima

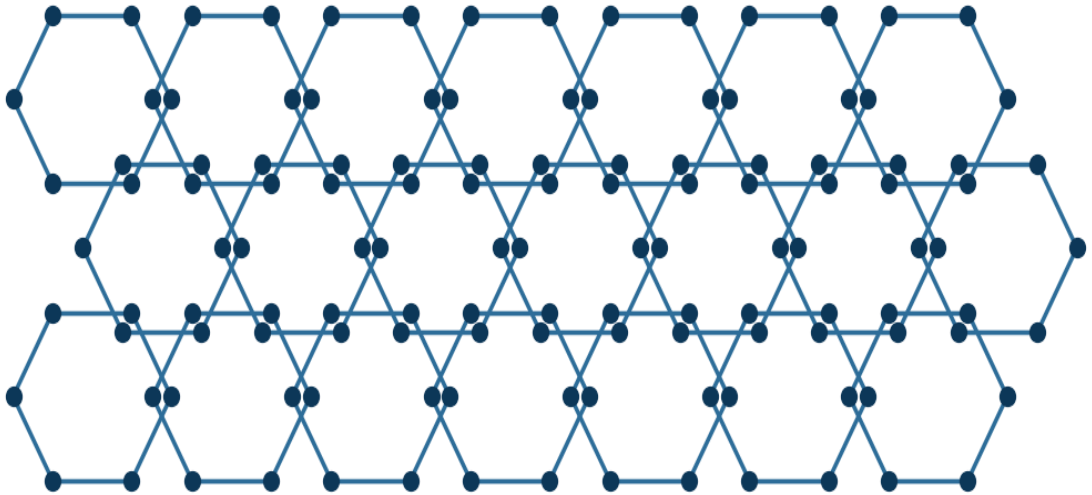
2004

Жеке графен қабаттары

Novoselov және әріптестері

Бастапқы зерттеулер: Nature (1985, 1991) және Science (2004).

Графен: екіөлшемді көміртек торы



Құрылымы

Бір атомдық қабаттағы алтыбұрышты sp^2 көміртек торы. Электрондар π-жүйесі бойымен делокальданады.

Маңызды қасиеттер

Жоғары меншікті механикалық беріктік; электр және жылу тасымалына қолайлы құрылым. Қасиеттер үлгі сапасына тәуелді.

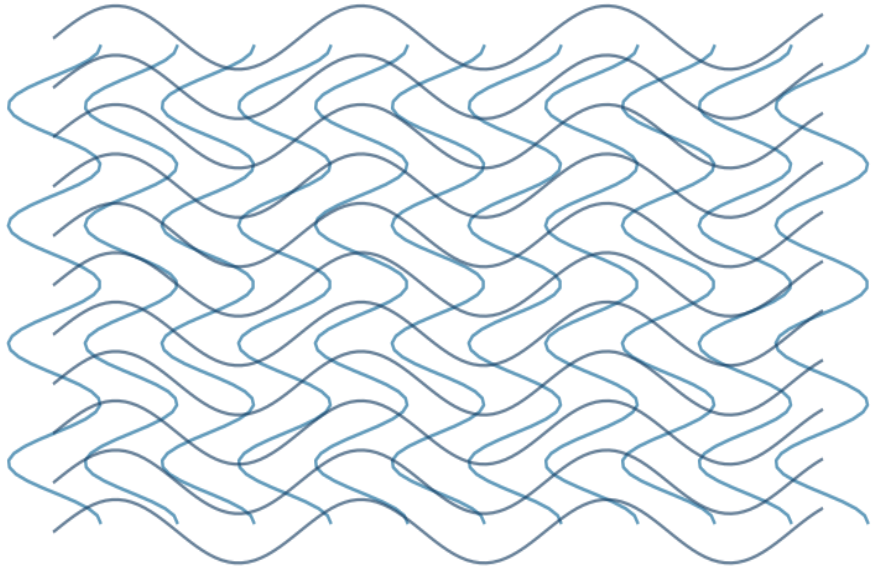
Графен, графен оксиді (GO) және rGO айырмашылығы

Графен	Көп жағдайда аз функционалданған sp^2 тор	Жоғары электрондық өткізгіштік
GO	Эпоксид, гидроксил, карбоксил топтары	Сулануы/дисперсиясы артады
rGO	GO-ны тотықсыздандырған материал	Өткізгіштік ішінара қалпына келеді

Ескерту: rGO — идеал графеннің толық эквиваленті емес; қалдық ақаулар мен O-топтар сақталуы мүмкін.

Дереккөздер: дәріс соңындағы әдебиеттер тізімі

Көміртекті нанотүтікшелердің құрылысы



SWCNT

Бір қабырғалы көміртекті нанотүтікше. Құрылымы оралған графен торымен түсіндіріледі.

MWCNT

Бірнеше коаксиалды графен қабырғалары. Қасиеттер қабырғалар санына, диаметрге, ұзындыққа және ақауларға тәуелді.

Нанотүтікше хиралдылығы және қасиеттері

(n, m) индекстері

Түтік торының оралу бағытын анықтайтын екі бүтін сан.

Armchair: n = m; zigzag: m = 0; қалғандары — хиралды.

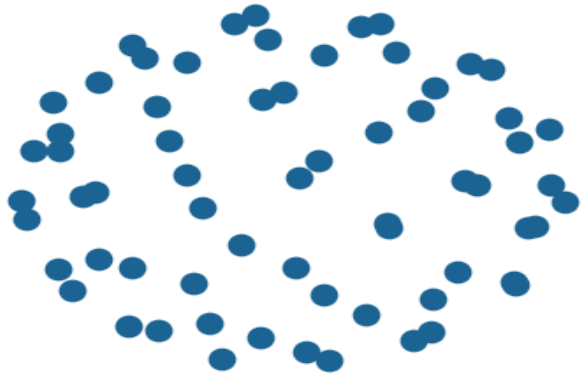
Электрондық қасиеттер

Идеал SWCNT үшін (n − m) mod 3 = 0 шарты металдық не шағын саңылаулы мінез-құлыққа жуықтайды; қалғандары жартылай өткізгіштікке бейім.

Нақты үлгілер

Ақаулар, қоспалар, деформация, көпқабырғалылық және түтік аралық өзара әсер нақты электрлік қасиеттерді өзгертеді.

Фуллерендер: C_{60} молекуласының қаңқасы



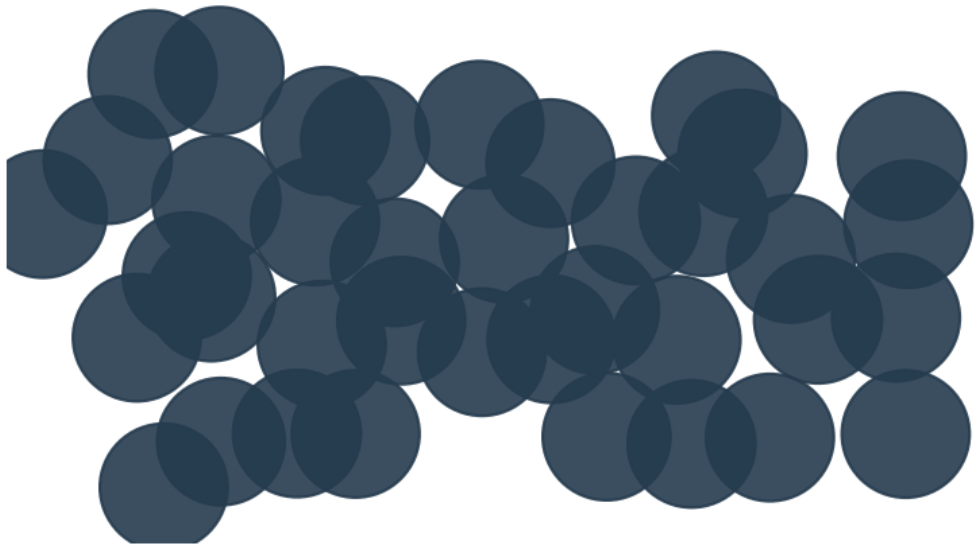
C_{60} құрылымы

60 көміртек атомынан құралған жабық молекулалық қаңқа: 12 бесбұрыш және 20 алтыбұрыш.

Қасиеттері

Графеннен айырмасы — молекулалық дискретті бөлшек. Қисық беті электрондық құрылым мен реакциялық қабілетке ықпал етеді.

Гидрофобты күйе: ұғымдар мен беттік қасиеттер



Өнеркәсіптік carbon black

Бақыланатын жағдайда алынатын ұсақ көміртекті бастапқы бөлшектер мен олардың бірігіп өскен агрегаттары.

Гидрофобтылық

Полярлы топтары аз және сулануы төмен бет суға төзімді сипат көрсете алады. Нақты гидрофобтылық беттік химия мен кедір-бұдырлыққа тәуелді.

IUPAC: өндірістік carbon black және кездейсоқ жанудың soot өнімі — бірдей термин емес.

Суланғыштық: жанасу бұрышы және бет энергиясы

Жанасу бұрышы θ

Су тамшысы және қатты дене арасындағы шекарадағы тепе-теңдік бұрышы. $\theta > 90°$ — гидрофобты бетке тән шартты белгі.

Юнг теңдеуі

$$\gamma SV = \gamma SL + \gamma LV \cos\theta$$

γ — интерфейстердің беттік керілуі.

Маңызды ескерту

Кеуекті ұнтақ үшін тікелей жанасу бұрышын өлшеу қиын: қабат тығыздалуы, кеуектер, сіңу және гистерезис нәтижеге әсер етеді.

Материалдарды алу әдістері: шолу

Графен

Механикалық ажырату; CVD; GO–rGO жолы

CNT

Доғалық разряд; лазерлік буландыру; каталитикалық CVD

Фуллерендер

Графит буландыру, күйелік фракциядан бөліп алу

Көміртек қарасы

Көмірсутектердің бақыланатын термиялық ыдырауы/толық емес жануы

Беттік функционалдану және дисперсия

Коваленттік өзгерту

–OH, –COOH және басқа топтарды енгізу бет химиясын өзгертеді; тым қарқынды тотықтыру тор ақауларын арттыруы мүмкін.

Коваленттік емес өзгерту

Полимерлер, БАЗ немесе π–π өзара әрекеттесетін молекулалар арқылы дисперсия тұрақтылығын жақсарту.

Жұмыс қағидасы

Қажетті қолдануға сәйкес суланғыштық, беттік заряд, электрөткізгіштік және адсорбциялық орталықтар арасындағы компромисті таңдау.

Құрылымды сипаттау: қандай әдіс нені көрсетеді?

Raman

D, G және 2D аймақтары; реттелу/ақаулар

XPS

Беттегі элементтік құрам мен байланыс күйлері

SEM/TEM

Бөлшек, түтік морфологиясы және қабырғалар

XRD

Қабатаралық реттелу мен кристалдық сипат

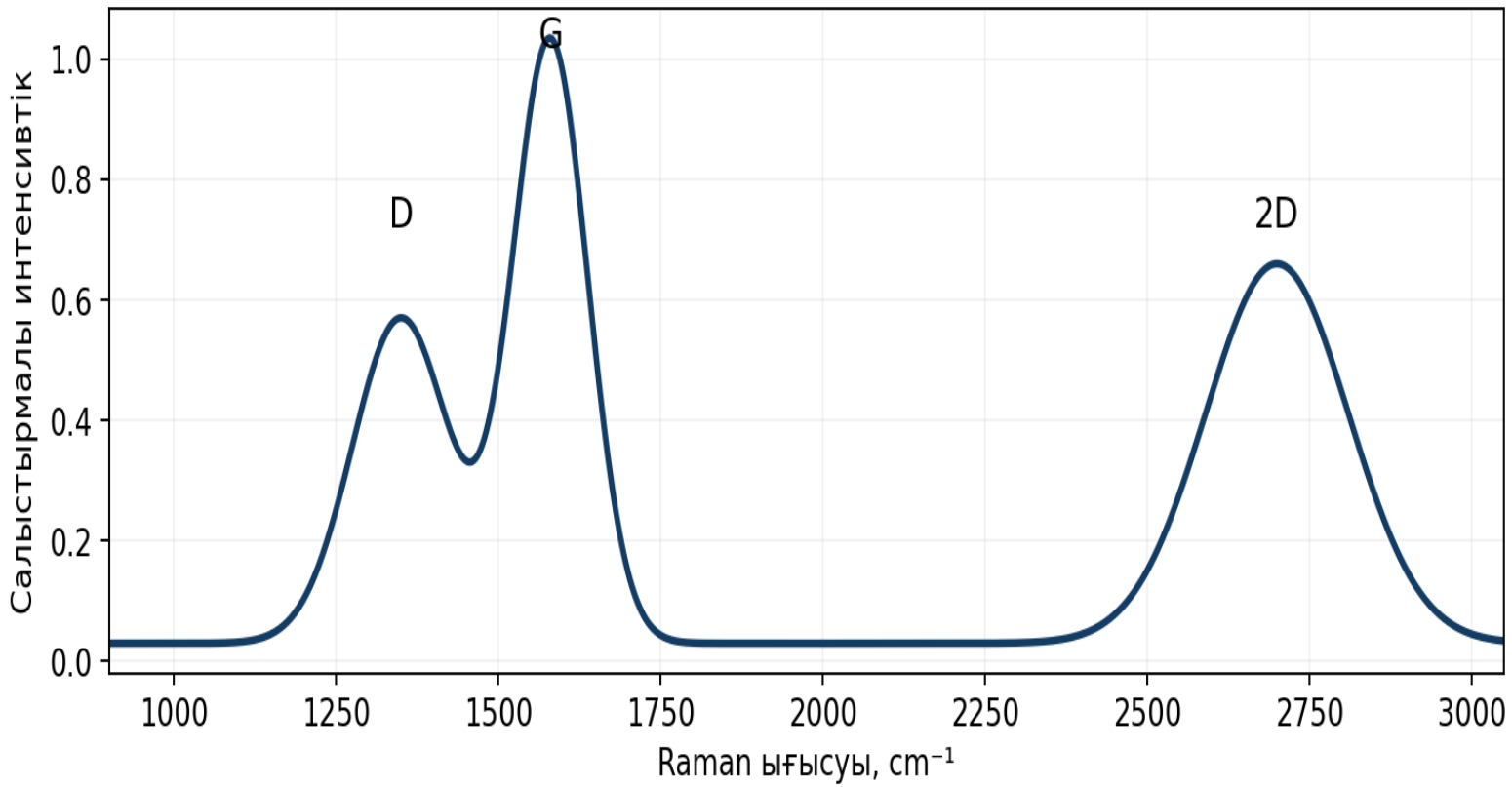
BET / газ адсорбциясы

Қолжетімді беттік аудан мен кеуектілік

TGA

Термиялық тұрақтылық, қалдық және функционал топтар

Raman спектроскопиясы: түсіндіру үлгісі



Түсіндіру

D: ақауларға сезімтал.

G: sp^2 тор тербелісі.

2D: қабат құрылымы туралы ақпарат.

График: тек түсіндірмелі сызбалық спектр, нақты өлшеу емес.

Қасиеттердің құрылыммен байланысы

Графен

Жазық π-тор → заряд тасымалы, мембрана/электрод мүмкіндіктері

CNT

Жоғары аспектілік қатынас → армирлеу, өткізгіш желі

C_{60}

Дискретті молекула → электрон-акцепторлық химия

Гидрофобты carbon black

Агрегат морфологиясы мен бет химиясы → композит, жабын, сорбент

Адсорбция: беттік аудан бәрін шешпейді

Сыйымдылыққа әсер етеді

Меншікті бет ауданы; микро/мезокеуектерге қолжетімділік; беттік функционал топтар; ерітінді pH-ы; адсорбат өлшемі; бәсекелес компоненттер.

Салыстырудағы қателік

Әртүрлі ластағыштар, концентрациялар, температуралар мен дозалардағы qmax мәндерін материалдың абсолюттік рейтингі ретінде қарастыру дұрыс емес.

Негізгі критерий: материал–адсорбат–орта–процесс жағдайларын бірге салыстыру.

Қолданылу бағыттары және технологиялық шектеулер

Қолданылуы

- Су және газ тазарту
- Катализ және катализатор тасымалдағыштары
- Полимер композиттері
- Электродтар, сенсорлар, мембраналар

Шектеулер

- Өндіріс бағасы, біркелкілік, масштабтау
- Агломерация және дисперсия тұрақтылығы
- Регенерация және қайта пайдалану
- Шаң-аэрозоль әсерін басқару

Ғылыми жұмысқа арналған өлшеу алгоритмі

1. Материалдың шығу тегі / синтезі
2. Кептіру және үлгіні дайындау
3. SEM/TEM, Raman, XPS арқылы құрылым
4. BET және кеуек өлшемі (қажет болса)
5. Беттік сулану мен зарядты бағалау
6. Қолдану сынағы, қайталаным және қателік

Дереккөздер: дәріс соңындағы әдебиеттер тізімі

Төрт материалдың жинақталған салыстырмасы

Материал	Негізгі пішін	Басым құрылым	Кілтті ерекшелік
Графен	Жазық қабат	2D sp^2	Жазық электрондық жүйе
CNT	Цилиндрлік түтік	1D sp^2	Хиралдылық, аспектілік қатынас
C_{60}	Жабық қаңқа	0D молекула	Қисық молекулалық бет
Carbon black	Агрегаттар	Ретсіз/турбостратты	Бет химиясы, агрегация

Қорытынды: негізгі ғылыми тұжырымдар

- Көміртектің sp^2 торы әртүрлі өлшемді нанокұрылымдар түзеді.
- Графен — 2D қабат; CNT — 1D түтік; фуллерен — 0D жабық қаңқа.
- Көміртек қарасында агрегат морфологиясы мен беттік химия маңызды.
- Функционалдану, ақаулар және дисперсия материал қасиеттерін өзгертеді.
- Қолдану тиімділігі нақты өлшеумен және бірдей жағдайда салыстырумен дәлелденеді.

Бақылау сұрақтары

- Графен, CNT және C_{60} айырмашылығы неде?
- SWCNT хиралдылығы қандай параметрлермен анықталады?
- Графен оксиді мен rGO-ның бет химиясы қалай ерекшеленеді?
- Неліктен carbon black пен soot терминдерін ажырату қажет?
- Raman, XPS және BET талдауы қандай ақпарат береді?
- Гидрофобтылықты анықтауда қандай қиындықтар кездеседі?

Негізгі ғылыми әдебиеттер және DOI

1. Kroto H. W. et al. (1985). C_{60}: Buckminsterfullerene. Nature 318, 162–163. DOI: 10.1038/318162a0

2. Iijima S. (1991). Helical microtubules of graphitic carbon. Nature 354, 56–58. DOI: 10.1038/354056a0

3. Novoselov K. S. et al. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. Science 306, 666–669. DOI: 10.1126/science.1102896

4. IUPAC Gold Book. Carbon black. DOI: 10.1351/goldbook.C00824

5. ISO/TR 10929:2012. Nanotechnologies — Characterization of multiwall carbon nanotube samples (анықтамалық стандарт).