НАНОМОДДАЛАРДА БЎЛИНИШ ЧЕГАРАЛАРИНИНГ ТУЗИЛИШИ ВА ХУСУСИЯТЛАРИ

Ж.Н.Усмонов, Д.Қурбонова, Ш.Йўлчиев, А.Ҳ.Ҳакимов, С.З.Зайнобиддинов

Мақолада йирик донадорлик поликристаллари ва нанокристаллитлар бўлиниш чегараларининг тузилиши ҳамда кимёвий ва физик хусусиятлари таҳлили асосида ихчамлаштирилган нанокристалларнинг кристаллитлари аро бўлиниш чегарасидаги атомлар зичликларининг ўзгаришлари ва тузилишининг икки ўлчамли умумлашган модели ҳақида маълумотлар келтирилган.

Калит сўзлар: *наномоддалар, донадорлик, поликристалл, дифракция, ихчамлаштирилган модда, наноғовак, аннигляция, кристалл панжара.*

В статье на основе анализа сведений о структуре и физико-химических свойствах границ раздела нанокристаллитов и крупнозернистых поликристаллов приведены данные об изменениях плотности атомов, а также обобщенные двухмерные модели границ разделов наночастиц в компактированных нанокристаллах.

Ключевые слова: *наноматериалы, зернистый, поликристалл, дифракция, компактный материал, нанопоры, аннигляция, кристаллическая решетка.*

Based ondata of analysis the article studies the structure and physico - chemical properties of interfaces between nanocrystals and large - grained polycrystals. It shows changes in the density of atoms and two-dimensional model of generalized partition boundaries of nanoparticles in compacted nanocrystals.

Key words: *nanomaterials, cristal, diffraction, compact material, nanotime, anniglation, crystal lattices.*

– Яримўтказгичлар электроникаси, микроэлектроника фани ва техникасининг қарийб ярим асрлик ривожи инсоният тараққиётининг биз гувоҳи бўлиб турган бугунги даражасини таъминлади. Бунинг асоси яримўтказгичли моддаларнинг янги хусусиятли турларини яратиш, мавжудларини такомиллаштириш технологияларини ишлаб чиқиш эканлиги шубҳасиз. Бу соҳанинг давоми сифатида охирги йилларда жадал суръатлар билан ривожланаётган нанотехнологиялар олим ва мутахасисларнинг диққат марказига айланди. Қисқа муддат ичида бу соҳа кескин ривожланиб, наноэлектроникада, биотехнологияда, тиббиётда ва бошқа кўплаб соҳаларда наноматериаллар қўлланила бошлади ҳамда уларнинг физикавий ва кимёвий хусусиятларини ўрганиш долзарб муаммога айланди. Шу муносабат билан ушбу мақолада нанозарраларнинг айрим муҳим хусусиятлари ҳақидаги маълумотларнинг таҳлилий хулосалари баён қилинмоқда.

– Тадқиқотларнинг кўрсатишича [1], нанокристалл йирик ва донадорлик поликристаллар хоссалари орасидаги фарқ, асосан, уларнинг бўлиниш чегараларининг алоҳида тузилиши билан аниқланади. Энг оддий ҳолатда бир турдаги атомлардан иборат нанокристалл бир-биридан тузилиши билан фарқ қилувчи икки хил тартибдан иборат. Булар ўлчамлари 5-20 нм гача бўлган тартиблаштирилган кристаллит ва кенглиги 1,0 нм гача бўлган кристаллитлараро чегарадир.

– Барча кристаллитлар бир хил тузилишга эга бўлиб, фақат кристаллографик йўналишлари ва ўлчамлари билан фарқ қилади [2]. Бўлиниш чегарасининг тузилиши атомлараро ўзаро таъсирлашиш турлари (ковалент, литал, ионли) ва қўшни кристаллитларнинг ўзаро жойлашиш йўналиши билан белгиланади. Қўшни кристаллитларнинг ҳар хил жойлашиши модда зичлигининг бўлиниш чегарасида бироз камайишига олиб келади. Бундан ташқари, бўлиниш чегарасига тегишли бўлган атомлар кристаллитлардаги атомлардан фарқли бўлган яқин қўшниларга эга.

– Мисол учун палладий нанокристаллари бўлиниш чегарасида моддалар зичлиги оддий палладийникидан 20-40% гача камлиги кўрсатилган [3].

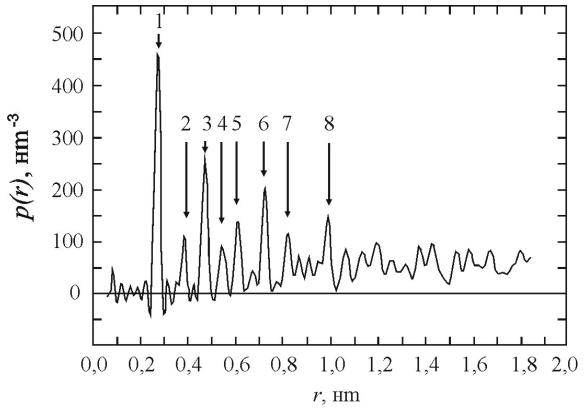
– Нанокристаллитли палладий намуналарида донадорлик чегарала-

С.З.Зайнобидинов *– АДУ физика кафедраси профессори, физика-математика фанлари доктори;*
А.Ҳ.Ҳакимов *– шу кафедра доценти, физика-математика фанлари номзоди;*
Ш.Йўлчиев *– шу кафедра катта ўқитувчиси, физика-математика фанлари номзоди;*
Ж.Н.Усмонов *– Андижон Машинасозлик институти ўқитувчиси;*
Д.Қурбонова *– АДУ физика йўналиши талабаси.*

ридаги атомлар жойлашиш тартиби етарлича юқори даражада эканини тажрибаларда аниқланган. Тажриба натижаларини таҳлил қилиш учун атомлар зичлигининг радиал тақсимот функцияси

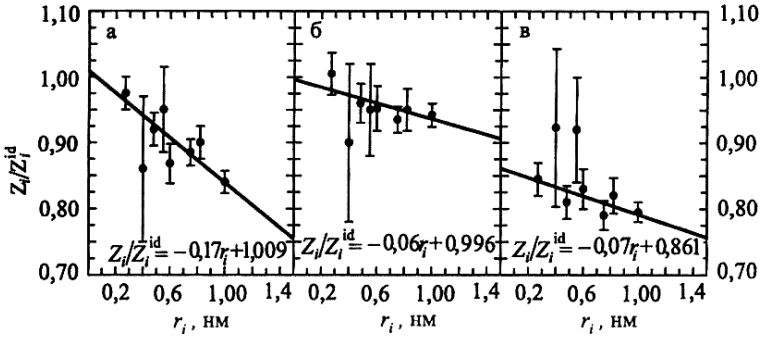
$$\rho(r) = x_\lambda \rho\lambda(r) + (1 - x_\lambda)\langle\rho\rangle_{gb} \qquad (1)$$

ифодадан фойдаланилган [4]. Бунда r - атомлараро масофа; x_λ - кристалл панжара тугунларидаги атомлар ҳиссаси; ρ_λ - кристаллитнинг ташқи қатлам атомлари тугунларда жойлашган нанокристалл учун атомлар зичлиги тақсимоти функцияси; $\langle\rho\rangle_{gb}$ - ҳамма атомлари кристалл панжаранинг тугунларига мос келмайдиган, тасодифий ҳолатларда жойлашган донадорлик чегарасидаги атомлар зичлиги. x_λ нинг қийматини $\rho(r)$ нинг тажрибавий қиймати орқали аниқлаш мумкин. Бунинг учун нисбий координацион сон Z_i / Z_i^{id} ($Z_i - i$ - нчи координацион сферадаги атомлар эксперименталь сони, Z_i^{id} -идеал кристални i – нчи сферадаги координацион сон)нинг атомлараро масофа r га боғлиқлигини чизиб олиш зарур. Z_i / Z_i^{id} нинг энг катта қиймати (r =0 да) кристалл панжара тугунларидаги атомлар ҳиссаси x_λ га тенг (1-расм).



1-расм. *“Қаритилган” ихчам nc-Pd нанокристалл намуналарда атомлар зичлиги тақсимоти дифракцияси; стрелкалар билан биринчи саккизта координацион сфераларга мос келувчи чўққилар кўрсатилган*

1-расмда уй температурасида 4 ой давомида сақлаб турилган ихчам палладий нанокристали намунасида атомлар зичлигининг радиал тақсимоти келтирилган. Бу $\rho(r)$ тақсимот рентген дифракцияси бўйича тажриба натижалари асосида тузилган. Бундай “қаритилган” ёки улар яна қўшимча равишда 973 К да куйдирилган намуналарда r =0 да Z_i / Z_i^{id}, яъни x_λ нинг қиймати ўлчаш аниқликлари чегарасида1 га тенг (2-расм).

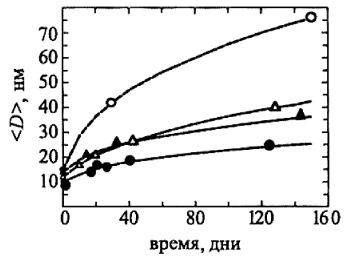


2-расм. *nc-Pd намуналарда нисбий координацион сон Z_i / Z_i^{id} нинг атомлараро r_i масофага боғлиқлиги; а- nc-Pd уй температурасида 4 ой сақлангандан кейин; в-ўша намуна қўшимча 973 К да куйдирилганданкейин; в-янги тайёрланган дастлабки nc-Pd намуна*

Янги тайёрланган намуналар ихчамлаштирилгандан кейин ўн кундан кўп бўлмаган муддатда текширилганда, 8 дан 14% гача атомлар панжара тугунларида жойлашмаган.

Нанокристалларда эркин ҳажмлар бўлиши мумкинлигини эътиборга олмаслик наномоддаларда бўлиниш чегараси ҳиссасини аниқлашда хатоларга олиб келади. Масалан, nc-Pd ни нейтронларнинг

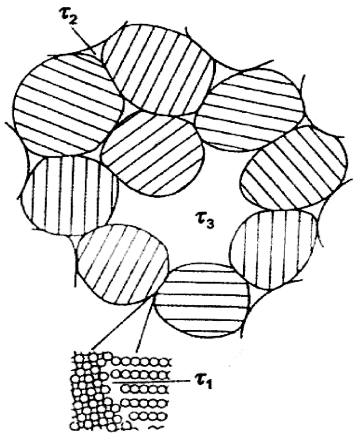
кичик бурчакли сочилиш усулида текшириш натижаларини ғовакларни ҳисобга олмасдан таҳлил қилинганда, кристаллитларнинг ҳажмий ва бўлиниш чегаралари ҳиссалари мос ҳолда 0.3 ва 0.7 эканлиги келиб чиқади, кристаллитлараро модданинг нисбий зичлиги атиги 50% га тенг. Кейинроқ қилинган тадқиқотларда [5] икки фаза зичлиги nc-Pd да 0 гача камайиши кўрсатилган. Бу эса нейтронларни сочувчилар марказлар зичликлари камайган бўлиниш чегаралари эмас, ғоваклар эканлигини кўрсатади. Бундай таҳлиллар нейтронларнинг кичик бурчакли сочилиш усули, наномоддалардаги эркин ҳажмларни истисно қилган ҳолда, бўлиниш чегаралари ҳақида маълумотлар олишда асосий усул эканини кўрсатади. Уларнинг ўзаро жойлашишининг яқин тартиби жуда кичик. Бу эса янги олинган ихчам намуналарда донадорлик чегаралари яқин тартибли номувозанат ҳолатда бўлади демакдир.



3-расм. *Ихчамлаштирилган nc-Pd намуналарида донадорлик ўлчамлари (D)нинг уй температурасида сақланишига нисбатан ўзгариши*

Бундай ҳолат ҳатто уй температурасида ҳам турғун эмас ва 120-150 кун давомида кристаллитлар ўлчамлари 12 дан 25-80 нм гача ортадиган тартибланганроқ ҳолатга ўтади. [4]

Тажриба натижаларини умумлаштириб хулоса қилиш мумкинки, ихчамлаштирилган нанокристалл моддалар бўлиниш чегараларида айрим вакансиялар; вакансиялар бирлашмалари ёки кристаллитлар учликларида ҳосил бўлувчи ғоваклар; кристаллитлар бўлмай қолган жойлардаги йирик ғоваклар каби нуқсонлар бўлиши мумкин (4-расм).



4-расм. *Позитронлар аннигиляцияси усули билан олинган микроскопик эркин ҳажмли нанокристал моддани икки ўлчамли модели (τ - позитроннинг аннигиляция вақти): τ_1 - бўлиниш чегарасидаги вакансиялар, τ_2 - вакансиялар бирлашмаси (тахминан 10 та вакансия ҳажмига тенг наноғовак), τ_3 - кристаллит йўқ жойдаги йирик ғовак*

Адабиётлар:

1. Дудкин В.И., Пахомов А.Н. Квантовая электроника (Приборы и технологии).- М.Техносфера, 2006
2. Суздалев И.П. Нанотехнология. М., Ком.книга. 2006
3. Гусев А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. М.,Физ.мат.лит., 2007
4. Петров Ю.Н. Кластеры малых частиц. М.Наука, 1986
5. WWW.SCIENCERF.Ru/N1.2006 г.

2014 йил 9 июнда қабул қилинган
(Тақризчи: проф. И.Н.Каримов)