

УДК 539.2:621.3.049.77

Грицай Ю. – ст. гр. ХС-21

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

СПЕЦИФІКА ВЛАСТИВОСТЕЙ НАНОМАТЕРІАЛІВ

Науковий керівник: к.т.н., доц. Крамар Г. М.

Найбільші зміни властивостей наноматеріалів і наночастинок відбуваються в діапазоні розмірів кристалітів порядку 10...100 нм. Основними причинами цього є наступні фактори. Для наночастинок частка атомів, що знаходяться в тонкому поверхневому шарі (близько 1 нм), у порівнянні з мезо-та мікрочастинками помітно зростає. В результаті в приповерхневому шарі виникають сильні спотворення кристалічної ґратки і, навіть, може відбуватися зміна типу решітки. Іншим аспектом, є той факт, що на вільній поверхні концентруються точкові та лінійні кристалічні дефекти (в першу чергу вакансії і дислокації). При малих розмірах частинок цей ефект помітно зростає, що може призводити до виходу більшості структурних дефектів на поверхню і очищенню матеріалу наночастинки від дефектів структури і хімічних домішок. В даний час встановлено, що процеси деформації і руйнування протікають в тонкому приповерхневому шарі з певним випередженням порівняно з внутрішніми об'ємами матеріалу, що багато в чому визначає зміну властивостей. Для наночастинок весь матеріал буде працювати як приповерхневий шар, товщина якого оцінюється в діапазоні близько 0,5 ... 20 мкм.

Наступною причиною специфіки властивостей наноматеріалів є збільшення об'ємної частки границь зерен із зменшенням розміру зерен в наноматеріалах - зменшення розміру зерна від 1 мкм до 2 нм збільшує об'ємна частку границь зерен з 0,3 до 87,5%. Об'ємні частки межзеренної і внутрізеренної складової досягають однакового значення (по 50%) при розмірі зерна близько 5 нм. Після зменшення розміру зерна нижче 10 нм починає зростати частка потрійних стиків. З цим пов'язують аномальне падіння твердості в цьому інтервалі розмірів зерна.

З другого боку, межі зерен мають нерівноважний характер, зумовлений присутністю зернограничних дефектів з високою густиною. Ця нерівноважність характеризується високою енергією меж зерен і наявністю пружних напружень, що діють на значних відстанях. Нерівноважність меж зерен викликає виникнення високих напруг і спотворення кристалічної решітки, зміну міжатомних відстаней і появу значних зсувів атомів, аж до втрати дальнього порядку. Результатом цих явищ є значне підвищення мікротвердості.

Важливим фактором, що діє в наноматеріалах, є схильність до появи кластерів. Полегшення міграції атомів вздовж поверхні і по межах розділу, наявність сил притягування між ними, які є більшими порівняно з традиційними матеріалами, призводять до процесів самоорганізації острівкових, стовпчастих та інших кластерних структур на підкладці. Цей ефект використовують для створення впорядкованих наноструктур для оптики та електроніки.

Ще однією причиною специфіки властивостей наноматеріалів є те, що при процесах переносу (дифузія, пластична деформація і т.п.) має місце певна ефективна довжина вільного пробігу носіїв цього перенесення, яка визначається, наприклад, дифузійною довжиною чи довжиною вільного пробігу дислокацій.