

Újszerű szénstruktúrák, nanocsövek a 21. század építőkövei

A múlt századok technikai vívmányai segítségével bepillantást nyerhettünk olyan világokba, amelyek érzékszerveinkkel közvetlenül nem érzékelhetők. Galilei távcsövével a Jupiter holdjait figyelte meg, az 1600-as évek elején már a tudósok rendelkezésére állt az optikai mikroszkóp. Megfigyelhető, hogy az idő múlásával a távolságskála amit az ember műszerei segítségével tanulmányozhat, egyre kiszélesedik, de felbontóképessége is egyre nő. 1934. jelentette azt az évet, amikor az optikai mikroszkóp elvi mérési határán túl lehetett lépni az elektronmikroszkóp segítségével. Ez tette lehetővé a nanovilág felfedezését, az anyag nanometrikus szerkezetének megismerését. Hogy némi elképzelést nyerjünk arról, hogy mennyire elképesztően parányi struktúrák alkotják ezt a világot, tekintsük a következő példát. Képzeljünk el egy 1 milliméter hosszú gumiszalagot, amelyet kinyújthatunk egy kilométer hosszúra. Az így nyert egy kilométeres szalagon a nanométer távolságnak egy milliméter felelne meg. Ezt a nanovilágot tanulmányozva bukkantak rá a kutatók az anyag újabb és újabb megjelenési formáira.

A periódusos rendszer egyik legérdekesebb eleme a szén. Sajátos elektronszerkezetének köszönhetően, más elemek segítségével óriási szénláncokba rendeződik. Az elemi szénben lévő atomok is különböző térbeli elrendeződésben képesek létezni. Az elemi szén sp^3 -as hibridizációs állapotban a természetben megtalálható legkeményebb anyag, a gyémánt, amelyben a szénatomok tetraéderek középpontjában helyezkednek el úgy, hogy a szomszédos szénatomokkal a kötése a tetraéder csúcsai felé mutatnak. A másik allotrop szénmódosultban, a grafitban pedig sp^2 állapotú szénatomok helyezkednek el egy hatszögű rács csúcsaiban. Minden szénatom három szomszédos atomhoz kapcsolódik, egy síkrácsot képezve. A negyedik elektrona a szénatomnak pedig egy, a rácsra merőleges, nem hibrid, p pályán található. Ezek az elektronpályák egymással párhuzamosak, ezért delokalizált rendszert alkotnak, így az elektronok viszonylag szabadon mozoghatnak a grafitrácsban. Makroszkópikusan a gyémántnak van a legnagyobb keménysége és a grafit pedig egy puha anyag, annak köszönhetően, hogy a grafitban a különböző grafit-síkok könnyen elcsúszhatnak egymáson a köztük ható gyenge kötések miatt. Érdekes megemlíteni, hogy a grafit-síkokban (grafén) található C–C kötések távolsága (0.142 nm) kisebb mint a gyémántban (0.154 nm). Ez azt jelenti, hogy a grafit-sík szénatomjai erősebben kötődnek egymáshoz mint a gyémánt atomjai.

Így nagyobb erőt kellene kifejtünk ahhoz, hogy a grafitban található két atomot szétválasszunk, mint amennyi szükséges a gyémántbeli atomok elválasztásához. A múlt század utolsó évtizedeiben megismert harmadik szén allotrop-módosulat a fullerének családja. Sokatomos (C_{60} , C_{70} stb.) molekulákból épül fel, melyeket váltakozó 6, 5 és 7 szögű görbült síkok mentén kötődő szénatomok alkotnak. Ezekre jellemző, hogy a lazábban kötődő elektronjaik a molekula térrészének belső felén vannak.

A fullerének felfedezése után, 1991-ben egy japán kutató, Sumio Iijima a pusztán szemnek csupán koromszerű anyagnak látszó mintában bukkant rá a szén nanocsövekre. Felfedezésük óta egyre nagyobb érdeklődést keltenek tudományos körökben. Különleges mechanikai és elektromos tulajdonságaik, fantasztikus gyakorlati alkalmazásokat tesznek lehetővé. A nanocsövek szakítási szilárdsága 1 TPa körül van, míg az acélé 230 GPa. A sűrűsége csak 1,3 – 1,4 g/cm³. Ezen tulajdonsága alapján kitűnő adalékanyagok a műanyagokba.

A nanocsövek lehetnek egyfalúak és többfalúak. Egy egyfalú szén-nanocsövet úgy lehetne elképzelni mint egy feltekert grafit-síkot, aminek a végei fél fullerén-molekulákkal vannak lezárva.

A többfalú nanocső pedig koncentrikusan egymásba helyezett egyfalú csövekből áll. Az érdekes dolog bennük az, hogy a grafitcsíkot vagy grafitent nem csak egyféleképpen lehet föltekerni.

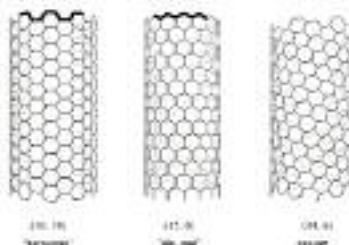
A föltekérésnek korlátozó tényezője, hogy képzeletben kivágva a grafitcsíkból egy szalagot, ennek a szalagnak a végei tökéletesen kell, hogy illeszkedjenek, amikor a csíkot föltekercsük. Hiszen nem tartalmazhat fél hatszögeket a nanocső. A felcsavarást egzakt módon a csavarási vektorral lehet jellemezni (C_h), amit a grafitcsíkban felvett két alapvektor (a_1 és a_2) segítségével képezzük. $C_h = na_1 + ma_2$ ahol az n és m szorzók természetes számok. Így létezik ún. zig – zag, „karosszék” illetve csavart szén nanocső. Gyakorlati alkalmazás szempontjából fontos a csövek csavartsága, mert a cső átmérője mellett ez határozza meg, hogy a nanocső félvezető vagy fémes vezetőképeségű. A karosszék (armchair) típusú nanocsövek mind fémes tulajdonságúak, továbbá minden cső fémes, amelynek a csavarási tényezője teljesíti a következő összefüggést: $n - m = 3p$, ahol p egy természetes szám. Az egyfalú nanocsövek átmérője: 0,4 – 1 nm között van. Ennek köszönhető a vezetőképeség ilyen erős függése a csavartságtól. Ugyanis ebben a távolságtartományban már a kvantummechanikai hatások jelentősek, a jelenség tárgyalására nem kielégítő a klasszikus fizika törvényei.

Ezt felhasználva, akár nanomertrikus szenzorok is készíthetők. Ezek segítségével a csavartság mértékét a vezetőképeséggel lehetne követni. A mai miniatürizálásra összpontosító világban jelentős lenne elektronikai alkalmazhatóságuk is, félvezető tulajdonságaiknak és kis méretüknek köszönhetően. Nanocsöveket elektronikai alkatrészekként alkalmazva, megvalósítható ezen alkatrészek méreteinek egy nagyságrenddel való csökkentése. Az elektronikai alkalmazások szempontjából az ún. Y alakú nanocsöveknek juthat jelentős szerep.

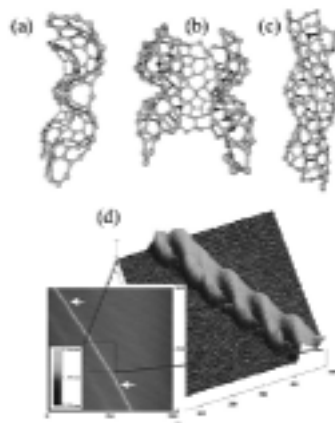
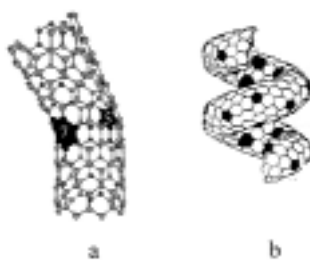
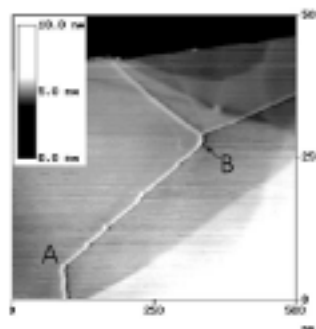
A fullerének vizsgálatából ismert, hogy a hatszögű szerkezettől eltérő ötszögű, hétszögű egységek okozzák a molekula görbültségét. Feltevődik a kérdés: mi lenne ha a nanocsövekben is kialakíthatnának ilyen eltérő szerkezeteket? Lényegében csak a szén – szén kötések irányított átrendezését kellene megoldani. Ilyen „hibák” beépítésével el lehet érni, akár azt is, hogy elágazások képződjenek a csövekben. Több elméleti modell is létezik az elágazások magyarázatára, a legegyszerűbb szerint egy elágazás úgy jön létre, hogy a nanocső képződése során hat darab hétszögös gyűrű épül be megfelelő helyen a hatszögös szerkezetbe.



a C_{60} molekula



Így a nanocső két irányba növekedik tovább, szárai 120 fokot zárva be egymással. Az alábbi képen látható egy ilyen Y elágazás pásztázó alagútmikroszkóppal készült képe (B pont a képen). Egy ilyen alakzat már egy tranzisztorra emlékeztet. Ha ezeket az Y alakú nanocsöveket egy áramkörbe tranzisztor helyett kapcsolnánk, akkor a tranzisztor jelleggörbéjéhez hasonló áram-feszültség görbéket kapnánk. Ez nagymértékben annak köszönhető, hogy az elágazásban a nanocsövek átmérője nem azonos, így a vezetőképesség is különböző. Más struktúrát kapunk ha a grafít hatszöget bizonyos helyen ötszög helyettesíti és az ötszöggel ellenkező oldalon egy hétszög, ennek következtében egy könyök jön létre. Megfigyelhető, hogy a könyök előtt a nanocső zig-zag, míg utána karosszék típusú lesz. Tehát megváltozott a csavarás szöge, ezért a vezetőképesség is. Itt egy fém-félvezető átmenetet kaptunk, lényegében egy nanometrikus diódát. Egy ilyen könyök látható az alagútmikroszkóppal készült képen (A pont).



1992-ben, tehát röviddel a nanocsövek felfedezése után, már olyan modelleket is kidolgoztak, amelyek több ötszöget és hétszöget tartalmaznak periodikusan. Ezen hét és ötszögek periodikus beépítése a cső szerkezetébe egy spirált eredményez. Ezek a spirálszerkezetek már nemcsak elméleti modellek, kísérletileg is megfigyeltek ilyen struktúrákat. Felvetődik a kérdés, hogy mi az, ami a hét és ötszögek beépülését irányítja. Mi az az irányító tényező, amely megmondja a nem hatszöges elemeknek, hogy hová épüljenek be? Bátorabban bányá a hibák beépítésével, elképzelhetők olyan modellek, amelyekben a hét-, öt- és hatszögek közel egyforma arányban vesznek részt. Ezek az ún. haecklite szerkezetek. Az építőelemek megfelelő elrendezésével egészen különleges nanostruktúrák állíthatók elő. Például DNS-re jellemző duplaspirál.

Egy ilyen DNS spirálhoz hasonló nanocső alagútmikroszkópos felvétele látható a mellékelt képen. Kimutatták, hogy az ábrán látott nanocsövek elméletileg előállíthatók, egy a grafénhez hasonló sík szénrácsból, amelyet egy irány mentén fel lehet tekerni.

A nem csak hatszöges elemeket tartalmazó síkrácsból nem szabályos, hanem deformált cső képződik feltekerés után. Elméleti számítások rámutattak, hogy az ilyen haecklite csövek szerkezeti stabilitása hasonló az egyenes nanocsövekéhez.

Ezeknek az újszerű struktúráknak még csak alig kezdték feltérképezni a tulajdonságait. Az eddigi ismeretek alapján állíthatjuk, hogy ezek a XXI. század újszerű anyagainak építőkövei.

Nemes Incze Péter
egyetemi hallgató, BBTE