

# Свойства на наночастиците – термични, оптични, електрични, магнитни, механични

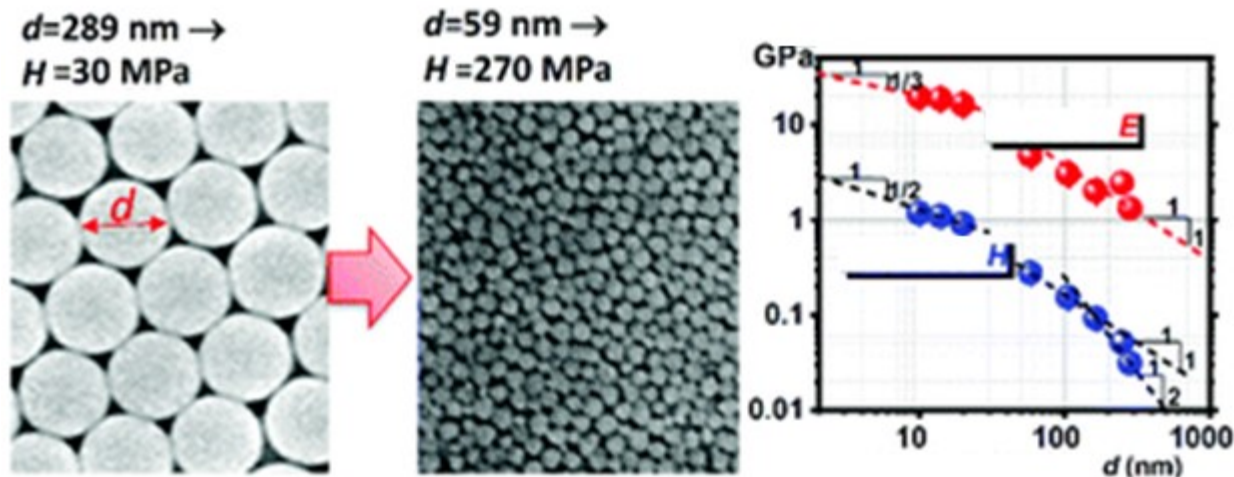
Доц. д-р Мария Александрова

# СЪДЪРЖАНИЕ

- Размерен ефект
- Квантово ограничение
- Термични свойства на наноматериалите
  - *Точка на топене*
  - *Топлопроводимост*
- Оптични свойства на наноматериалите
  - *Цвят на метални наночастици*
  - *Повърхностен плазмонен резонанс в нанометалите*
  - *Луминисценция в полупроводникови наночастици*
- Електронни свойства на наноматериалите
- Електрически свойства на наноматериалите
  - *Електрическа проводимост*
  - *Диелектрична проникваемост и електрическа якост:*
- Магнитни свойства на наноматериалите
- Механични свойства на наноматериалите

- **Размерен ефект**

В сравнение с микроструктурните материали, наноструктурните материали (NSM – nanostructured materials) съдържат в значителната си част гранични поърхности между допиращите се наночастици, които се наричат още зрънца, следователно границите на зрънцата играят важна роля за свойствата на наноматериалите, които стават различни от обемните аналози.



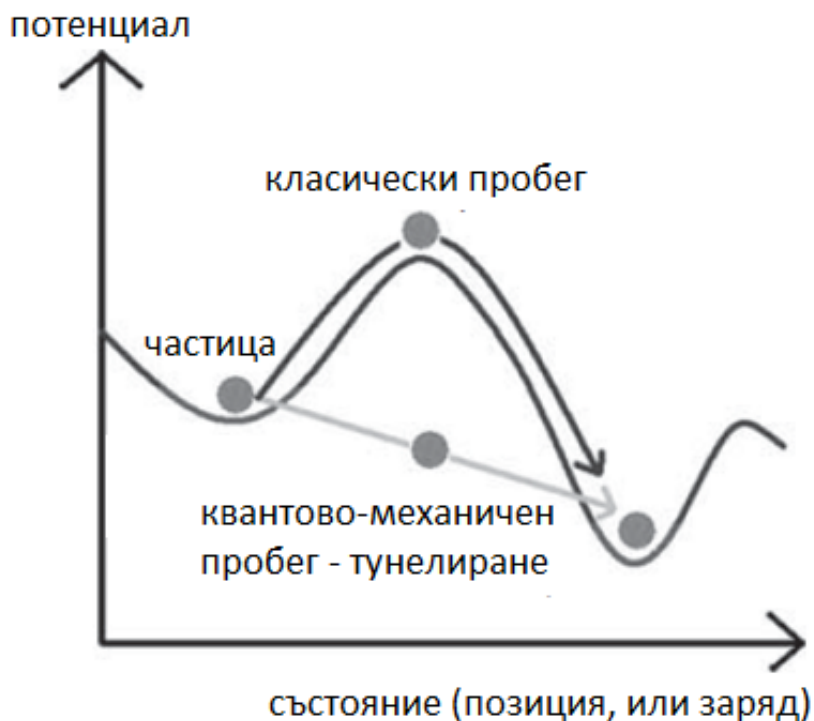
Илюстриране на размерния ефект

*Nanoscale*, 2019,11, 9563-9573

Причините за тези промени произтичат от квантовата физика, като обемните свойства на всеки материал са средна стойност на всички квантови сили, влияещи върху всички атоми. Тъй като градивните единици стават все по-малки, се достига точка, в която усредняването вече не работи.

## Квантово ограничение

Поради малките размери на наноматериалите, тяхната маса също е малка и гравитационните сили стават незначителни. Вместо това, електромагнитните сили са доминиращи при определяне на поведението на атомите и молекулите. Съгласно корпускуларно-вълновият дуализъм, за обекти с много малка маса, както напр. електроните, вълнообразната природа има по-изразен ефект. По този начин електроните проявяват вълново поведение и то е представено с вълнова вероятностна функция. Едно от последствията е явление, наречено „тунелиране“.



класическа теория

електрон → потенциална бариера на електрическо поле

← електронът се отблъсква от полето, когато енергията му е по-малка от тази на потенциалната бариера

теория на квантовата механика

електронът (като вълна) →

вълната не се отразява, а преминава през бариерата

тунелирането е завършило →

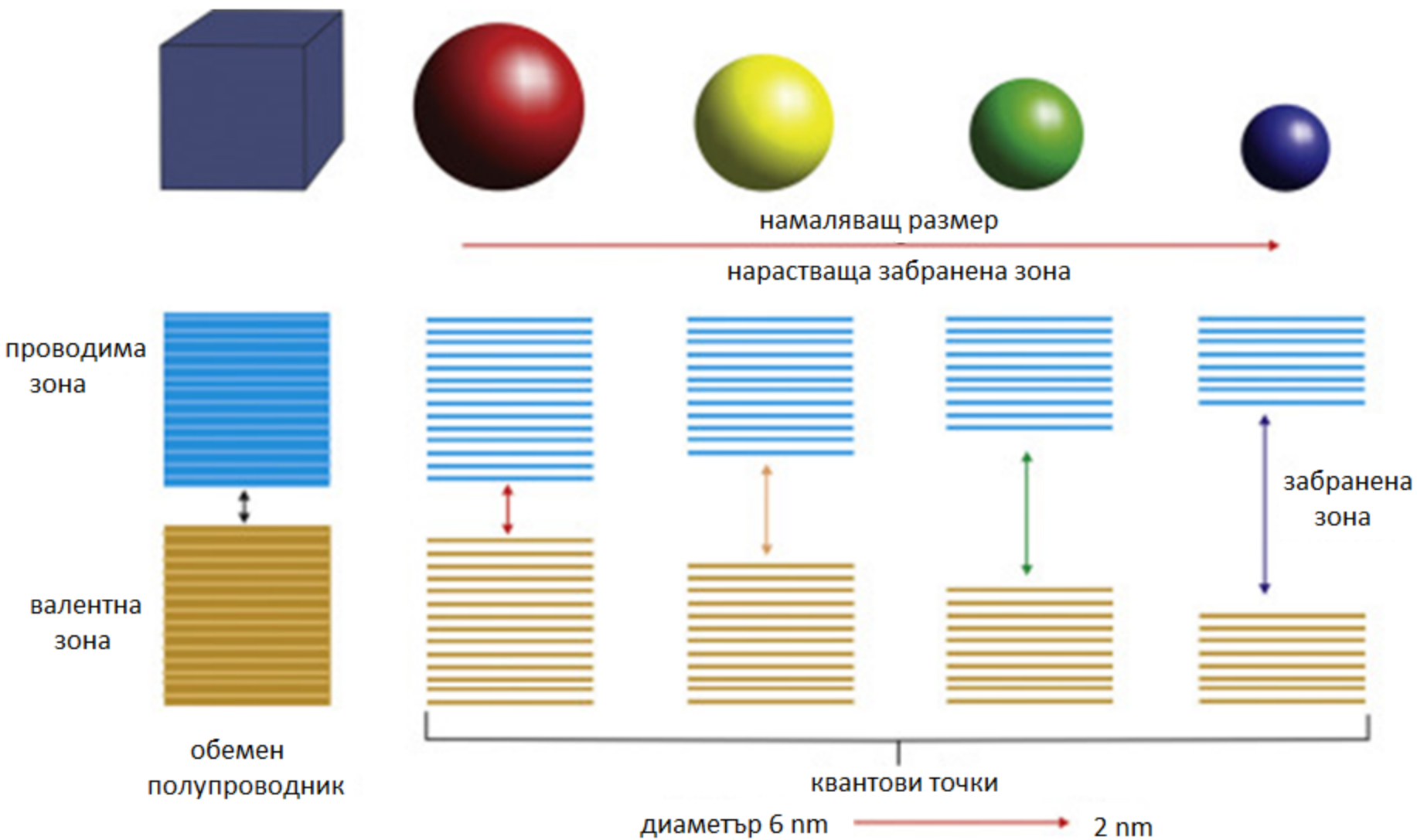
Графично представяне на тунелирането

При обемните материали енергийните участъци от двете страни на забранената не са дискретни енергийни нива, а се сливат, за да формират съответните зони (валентна и зона на проводимост). При наноматериалите, тъй като няма толкова голямо множество от атомни орбитали, които да си влияят, то зоните се трансформират в единични дискретни състояния, които се заемат от електроните, без да има взаимно влияние в енергетично отношение.

Промяна в ширината на забранената зона когато броят атоми в системата се увеличава или намалява.



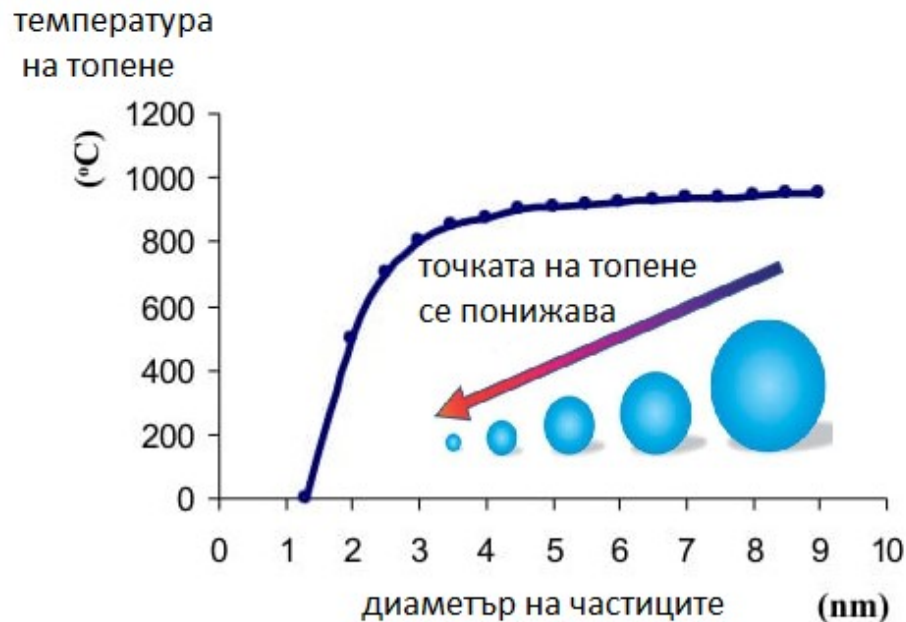
Възможно е материал, който в макромащаб е бил изолатор, като наноматериал да се превърне в полупроводник дори при независна температура, а при завишена температура дори да се превърне в метал. Възможно е наноматериала да придобие и други присъщи за метал свойства, като например магнетизъм.



## Термични свойства на наноматериалите

**Точка на топене:** Точката на топене  $T_m$  на наночастица намалява с намаляването на нейния размер  $d$ .

Този параметър е важен за технологичните трансформации на наноматериалите при обработка за вграждане като функционални елементи в наноустройствата



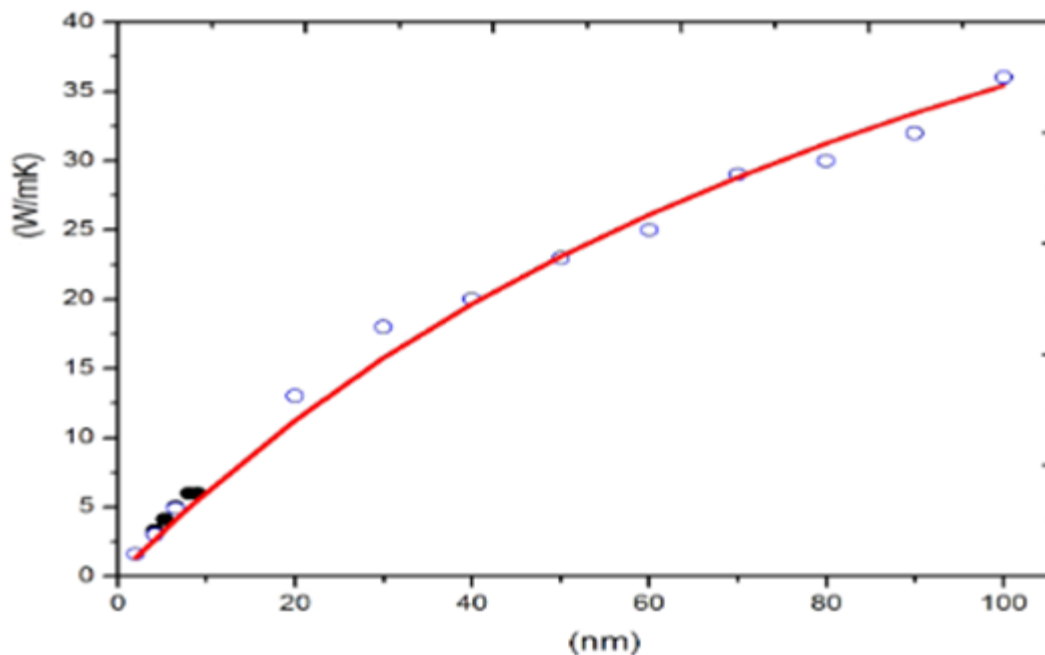
**Топлопроводимост:**

$$k = 1/3Cv\lambda$$

където  $k$  е коефициент на топлопроводност;  $v$  е скоростта на частиците,  $\lambda$  е дължината на средния свободен пробег,  $C = c \cdot n$  е топлинният капацитет на единица обем,  $c$  е топлинният капацитет на единична частица, а  $n$  е броят на частиците.

Зависимост между големината на наночастиците и температурата на топене.

Когато размерът стане по-малък от свободния пробег и този пробег доминира има намаляване на  $k$ . Това явление се използва в индустрията за производство на топлоустойчиви материали със специално предназначение.

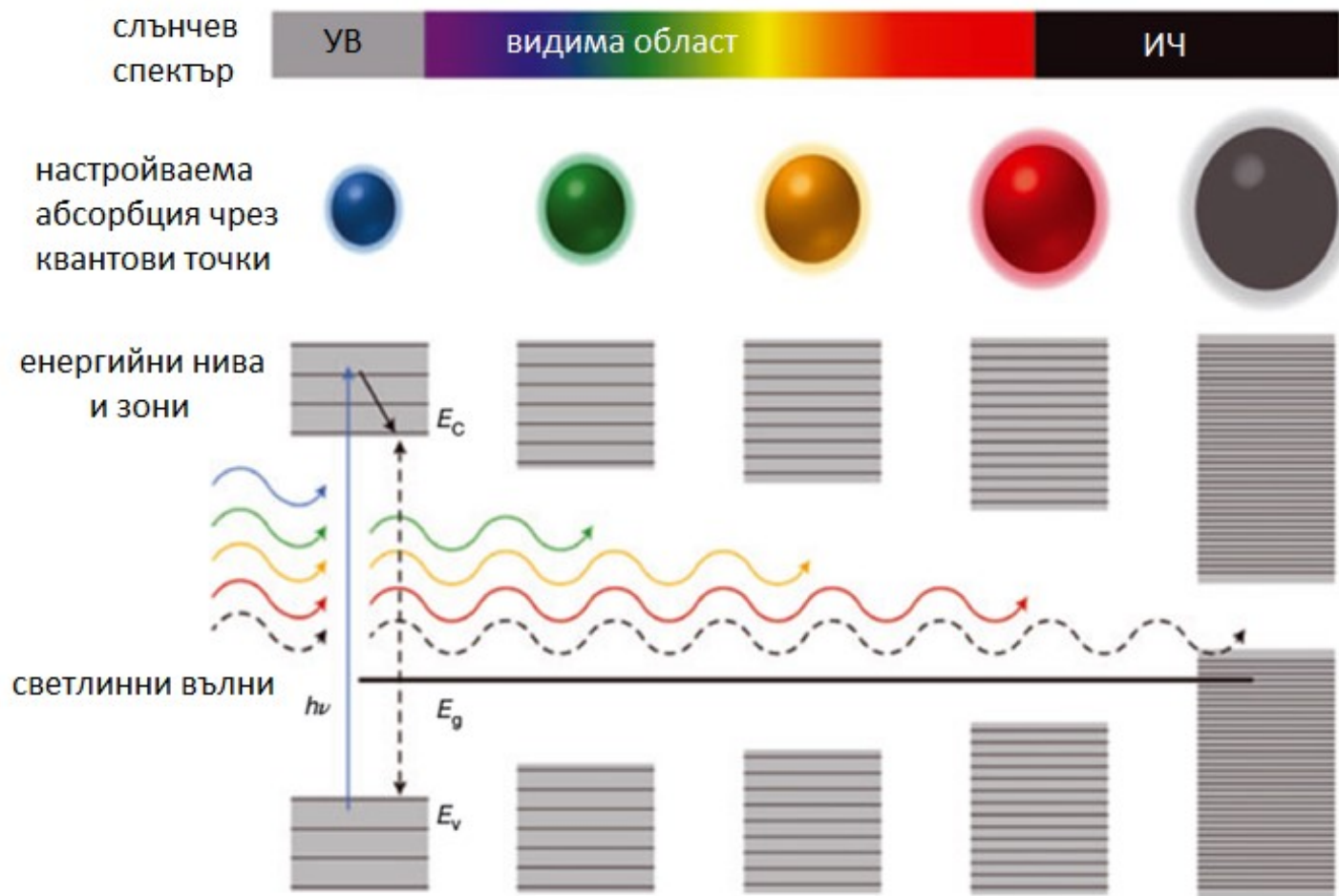


Зависимост между големината на наночастиците и  
коэффициента на топлопроводност.



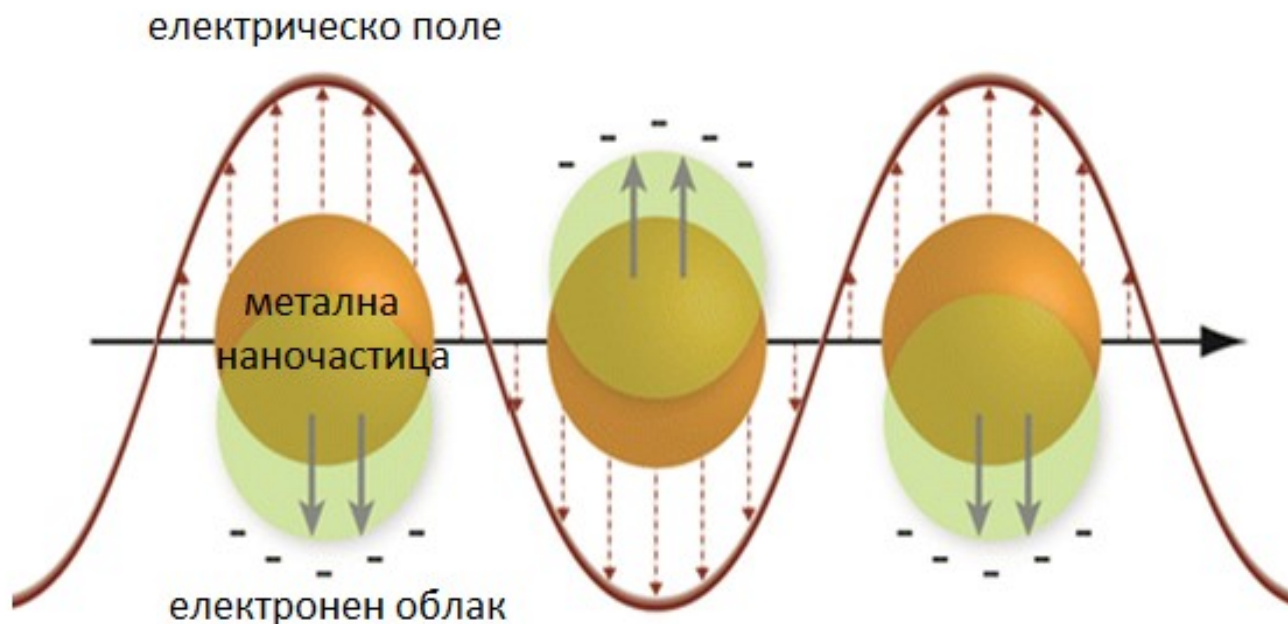
## Оптични свойства на наноматериалите

**Цвят на метални наночастици** Цветът на материала е функция на взаимодействието между светлината и обекта. Ако материал поглъща светлина с определена дължина на вълната, наблюдателят няма да види този цвят в отразената светлина. При наноматериалите цветът зависи от размера и формата на нанообекта.

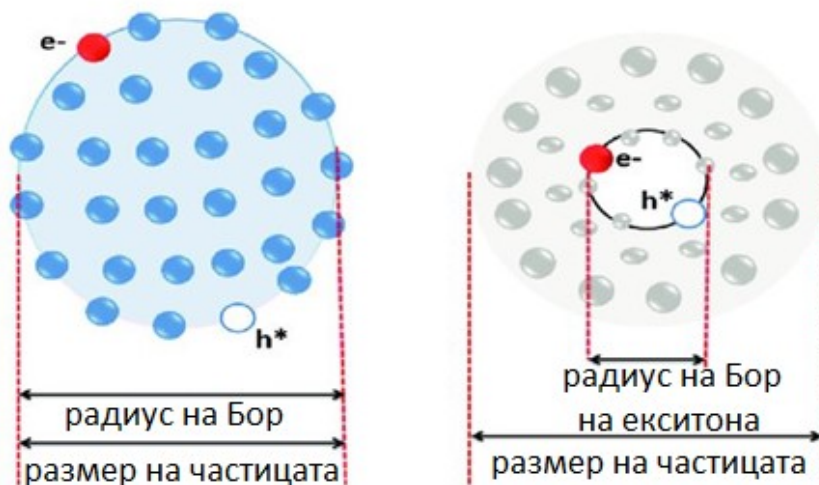
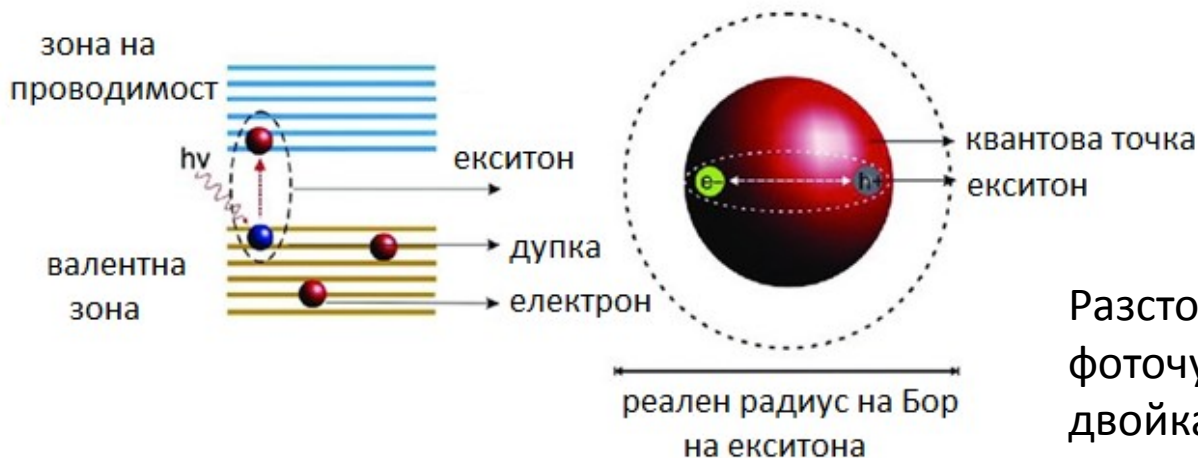


## Повърхностен плазмонен резонанс в нанометалите

Повърхностният плазмонен резонанс е оптично явление, присъстващо в някои метални наночастици и се състои от паралелно разпространение на повърхностни електромагнитни вълни по гранични повърхности на метала с диелектрик. Повърхностният плазмонен резонанс (Surface Plasmon Resonance - SPR) е колективното трептене на електроните от проводимата зона, които са в резонанс с трептящото електрическо поле на падащата светлина.

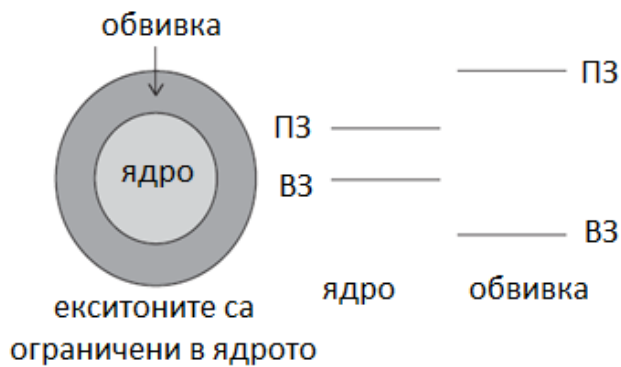


# Фоточувствителност и луминисценция в полупроводникови наночастици



Екситон и радиус на Бор при фоточувствителни наноматериали

Разстоянието, разделящо фоточувствителна полупроводникова двойка носители на заряд в пространството, се нарича радиус на Бор на екситона ( $\alpha_B$ ). Когато физическите измерения на материята станат сравними или по-малки от диаметъра на Бор на екситона ( $2\alpha_B$ ), функционалните свойства на полупроводника стават чувствителни към размера и формата. По-малките частици имат по-широка забранена зона, следователно поглъщат високоенергийни електромагнитни вълни.



Енергийни зони на квантова точка ядро-обвивка в полупроводников хетеропреход.

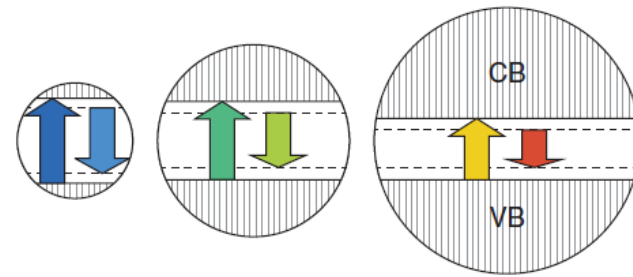
Връзката между размера на флуоресцентните наночастици и енергията на забранената зона се дава с израза:

$$E_g(\text{QD}) = E_g(\text{bulk}) + (2\pi^2/2\mu R^2) - (1.786e^2/\epsilon R) - 0.248E^*Ry$$

където "R" е радиусът на квантовата точка,  $\mu$  е намалената маса, " $\epsilon$ " е проницаемостта на вакуум, а  $E^*Ry$  е ефективната енергия на Ридберг от квантовата механика.



Флуоресценция в наночастици типа ядро-обвивка (core-shell) CdSe -CdS с диаметър 1,7 nm (син); 3,7 nm (зелен) и ~6 nm (червен), свидетелстващи за премащабирането на забранената зона на полупроводника с размера на частиците.



## Електронни свойства на наноматериалите

Благодарение на вълнообразно-подобните си свойства, електроните могат да тунелират квантово механично между две съседни наноструктури и ако се приложи напрежение между две наноструктури, които изравняват дискретните си енергийни нива, възниква тунелиране, което рязко увеличава тунелния ток. Тези Кулонови ефекти водят до електропроводимост, включваща единични електрони и в резултат на това се изисква малко количество енергия, за да се управлява процеса на техния пренос, като това включва превключване на логическите състояния на транзистор или клетка памет. Всички тези явления могат да бъдат използвани за производство на коренно различни видове компоненти за електроника, оптоелектроника и приложения за обработка на информация, като резонансни тунелни транзистори и едноелектронни транзистори.

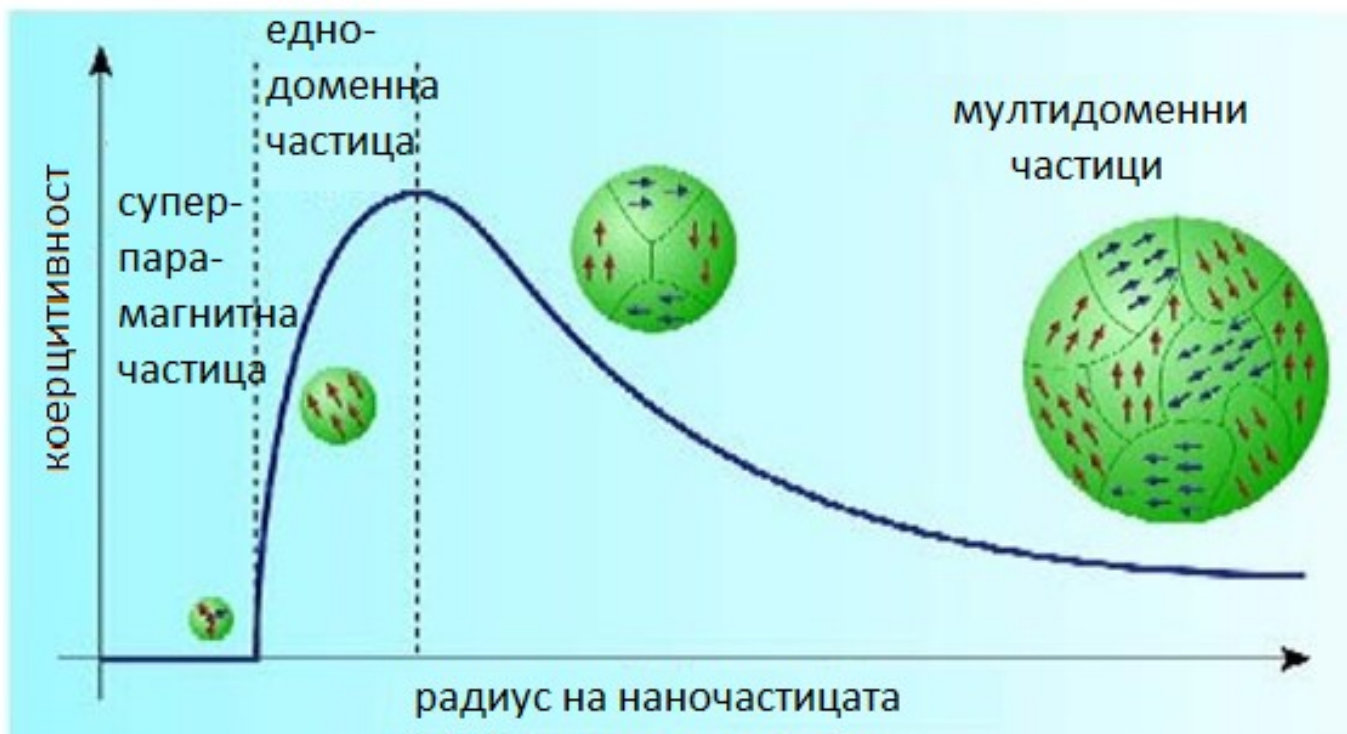
## Електрически свойства при наноматериалите

**Електропроводимост:** Дължината и диаметъра на наножицката или нанотръбата, състоянието на повърхността на проводника, кристална структура и качество (наличие и липса на дефекти), химичен състав, кристалографска ориентация по оста на нанопроводника са все важни параметри, които влияят на транспортния механизъм на електрона и по този начин чрез правилен и добре контролиран химичен синтез може да се постигнат възпроизводими и управляеми електропроводящи свойства на тези материали.

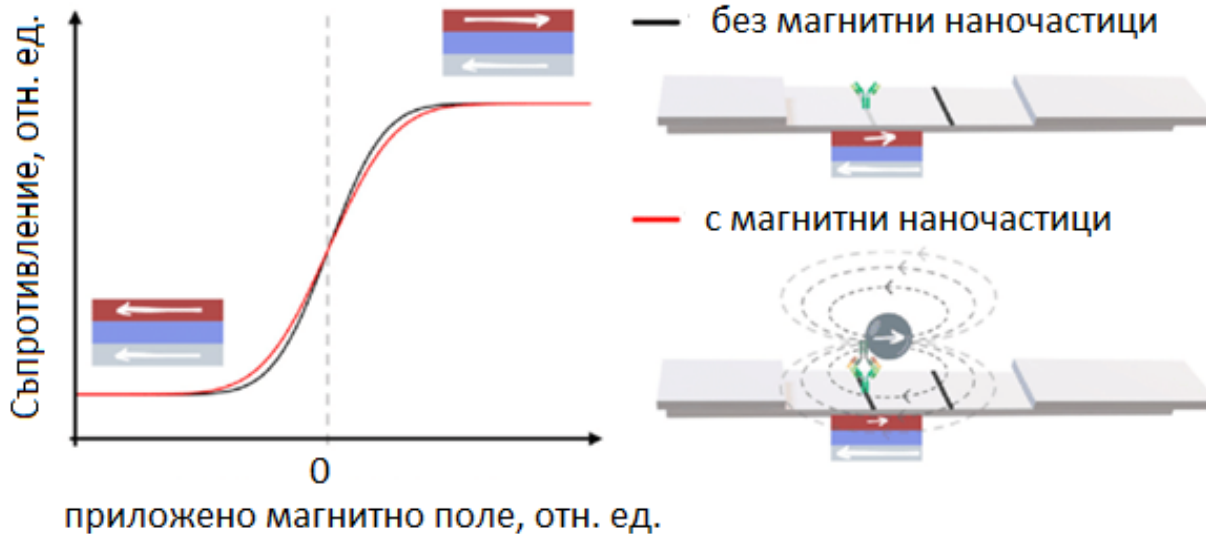
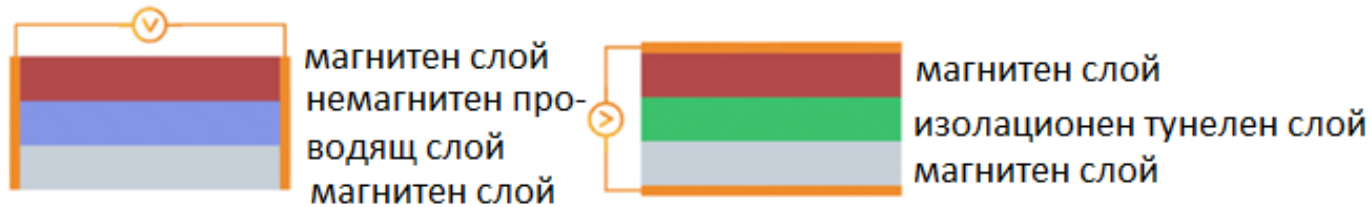
**Диелектрична проникваемост и електрическа якост:** засилват се при наночастиците спрямо техните макро аналози от същия материал.

## Магнитни свойства на наноматериалите

Типичният размер на класически домейн се очаква да е около 1  $\mu\text{m}$ . Когато размерът на магнитния материал се намали, броят повърхностни атоми става важна част от общия брой атоми, повърхностните ефекти стават важни и квантовите ефекти започват да надделяват. Когато размерът на тези домейни достигне наноскалата, голямото съотношение повърхност към обем води до това, че значителна част от атомите имат различно магнитно свързване със съседни атоми, водещо до различно магнитно състояние. Така например обемното злато и платината са немагнитни, но при наноразмерите действат като магнитни частици.



Огромно магнитосъпротивление се наблюдава в наноразмерни многослойни структури, състоящи се от силен феромагнетик (Fe, Co, Ni) и по-слаб магнитен или немагнитен буферен метал (Cr, Cu). Обикновено този ефект се използва за съхранение на данни или в ролята на сензор. Магнитните наночастици се използват в редица приложения като формиране на изображения, магнитни носители за съхранение на данни с висока плътност, миниатюрни сензори на магнитни смущения.

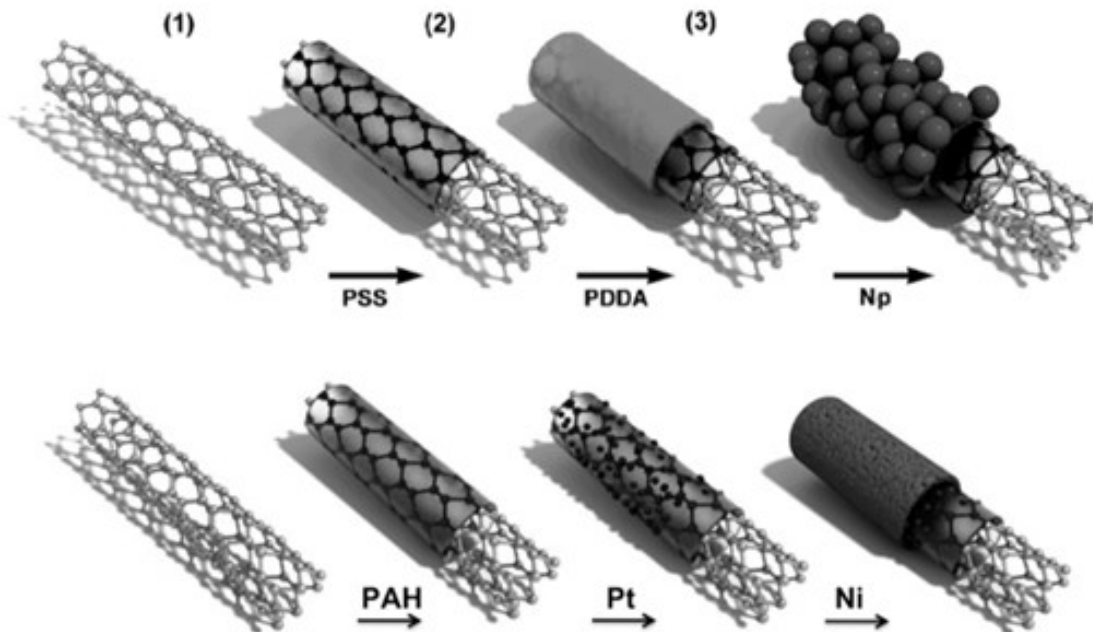




## Механични свойства на наноматериалите

Заради намаления обем и доминантните повърхностни свойства се очаква дислокации (усуквания на кристалната решетка) в наноматериалите да няма или те да са незначителни. Силата на дислокациите, заради външно приложен механичен стрес се намаляват с около 3 пъти и силите на взаимодействие между дислокациите се намалява с около 10 пъти.

Механични свойства на наночастици, състоящи се от метални и керамични материали са силно повлияни от поръзността и размера на зърната и показват подсилени механични свойства като свръхпластичност; повишаване на твърдостта и повишаване на износоустойчивостта.



Нанокompозитите засилват механичните свойства.

**БЛАГОДАРЯ ЗА ВНИМАНИЕТО!**