

## МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАНОХИМИИ

Н.Г. Васильева<sup>1</sup>, А.Л. Козлова-Козыревская<sup>1</sup>, Айганым Арынова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный педагогический университет имени Максима Танка, Минск

<sup>2</sup>Казахский государственный педагогический университет имени Абая, Алматы

В данной публикации рассматриваются основные особенности такой достаточно новой области знаний, как нанохимия. Так, определены основные понятия и особенности данной науки, а также ее перспективы развития в современном мире.

**Ключевые слова:** нанохимия, наночастицы, наноструктура, нанокompозиты, размерные эффекты.

Химики, так же, как и физики, и биологи всегда знали и хорошо понимали, что атомы и молекулы являются теми основными «кирпичиками», из которых создается химический фундамент всего существующего. В то же время развитие современных методов исследования с использованием электронной микроскопии высокого разрешения, высокоселективной масс-спектрометрии др. позволило получать сведения о частицах, (например, металлов), содержащих небольшое, менее сотни, количество атомов. Такие частицы (с размером около 1 нм) обнаружили весьма необычные, трудно предсказуемые химические свойства. Например, было определено, что такие наночастицы, (кластеры), обладают высокой активностью и с ними в широком диапазоне температур возможно проведение реакций, которые не идут с частицами микроскопического размера. Так вот: изучением химических свойств таких частиц и занимается нанохимия.

Мир нанохимии – это огромный мир, начинающийся от индивидуальных молекул и продолжающийся на уровне континуальных систем, составляющих фазу. В наночастицах действуют такие силы межмолекулярного взаимодействия, которые «лишают» молекулы индивидуальности, а свойства и поведение молекул в таких ансамблях другие, нежели у индивидуальных молекул.

Какая же главная проблема нанохимии? На наш взгляд, фундаментальная проблема нанохимии – это размерные эффекты. Исследования в этой области связаны с решением различных вопросов, таких, как, например, насколько свойства индивидуальных молекул при их объединении «перемещаются» в свойства фазы; как строятся мосты-контакты между миром единичной, индивидуальной молекулы и макроскопическим миром вещества; как преобразуется иерархия количества в иерархию свойств. Размерные эффекты настолько разнообразны и не всегда предсказуемы, что общее решение проблемы на данный момент отсутствует.

Что касается методов квантовой химии и молекулярной динамики, то с их помощью удастся довольно неплохо ответить лишь на отдельные вопросы: данные области научных знаний способны многое объяснить, однако не всегда способны достоверно предсказать, а ведь очевидно, что настоящая наука начинается лишь тогда, когда способна предвидеть. В этом случае вся нанохимия еще впереди.

Также есть определенные трудности, связанные с понятийным аппаратом и терминологией. Так, до конца еще не определены в литературных источниках различия, например, между терминами «кластер», «наночастица», «квантовая точка». Первый термин «кластер» обычно применяется для частиц, содержащих небольшое количество атомов, а «наночастица» – для куда более крупных агрегатов атомов, например, при описании свойств углерода и металлов [1]. «Квантовой точкой» называют обычно частицы полупроводников и островков, где квантовые ограничения носителей зарядов, или экситонов, влияют на их свойства.

Таким образом, наночастицы можно представить, как некие промежуточные образования между отдельными атомами с одной стороны, и твердым телом – с другой. У подобных частиц наличествует зависимость от размера и широко изменяемый набор свойств. Предполагается, что это плотно упакованные частицы с произвольной внешней формой и структурной организацией. Изучение различных свойств обособленных наночастиц является

одним из направлений нанонауки. Еще одно направление – изучение расположения атомов в структуре изнаночастиц. Следует отметить, что в природе и вне ее нанообъекты – это, как правило, многочастичные системы, поэтому и здесь много различных терминов, таких, как «нанокристалл», «нанофаза», «наносистема», «наноструктура», «нанокомпозиты» и т. п. Однако сердцевину всех названных объектов составляют индивидуальные, изолированные наночастицы.

Установление связи между размером частиц и ее реакционной способностью – одна из важнейших задач и проблем нанохимии. Для наночастиц металлов, например, различают два типа размерных эффектов. Первый – это собственный или внутренний, связанный со специфическими изменениями в поверхностных, объемных и химических свойствах частицы. Другой – внешний, является размерно-зависимым ответом на внешнее воздействие сил, которые не связаны с внутренним эффектом. Специфические размерные эффекты сильнее всего проявляются в малых частицах и наиболее характерны для нанохимии, где превалирует нерегулярная зависимости свойств (или свойства) от размера. Наиболее любопытны превращения, которые связаны с областью, когда размер частиц составляет около 1 нм. Так вот, изучение закономерностей, которые управляют активностью при таких частицах, является, пожалуй, одной из главных проблем современной нанохимии, несмотря на то, что число частиц – это более фундаментальная величина, чем их размер. Зависимость же химической активности от размера вступающих в реакцию частиц можно объяснить следующим образом: свойства индивидуальных атомов элементов и созданных из атомов кластеров и наночастиц отличаются от свойств соответствующих макрочастиц. В первых достаточно большое число атомов находится на поверхности и их доля растет с уменьшением размера частиц, что влечет увеличение также и вклада атомов, находящихся на поверхности, в энергию системы. Это, соответственно, влечет ряд термодинамических следствий, таких, как зависимость от размера частиц температуры плавления наночастиц. С размером, который оказывает влияние на реакционную способность, связаны и такие свойства частиц, как изменение температуры полиморфных превращений, увеличение растворимости, сдвиг химического равновесия.

Итак, понятие «нанохимия» можно определить как некую область науки, которая связана с синтезом (получением) и изучением физико-химических свойств частиц, которые имеют размеры в несколько нанометров. Одной из наиболее важных задач нанохимии является установление связи между размером наночастицы и ее свойствами. Будущее данной науки весьма перспективно, так многие уже имеющиеся достижения связаны с нанотехнологиями. Так, например, в медицине искусственные наноматериалы (органические и неорганические) уже сейчас вводятся в клетки, улучшая диагностику. Использование наноструктур позволяет создавать биосовместимый материал с улучшенными характеристиками. Внедрение нанотехнологий в ЭВМ, повышая объем памяти и быстродействие, например, позволило моделировать макромолекулярные сетки в реальном окружении; создание «виртуальной реальности» на основе наноэлектроники и в робототехнике. Перспективы в космической области сводятся, прежде всего, к созданию прочных, легких и термостойких материалов на основе наноматериалов, а также наноаппаратуры для миниатюрных космических аппаратов. В химической промышленности – изготовление наноматриц для катализаторов, армированных наночастицами полимерных материалов.

#### **Список использованных источников**

1. Марголин, В.И. Основы нанотехнологии: уч.пособие /В.И. Марголин. – СПб.:СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2002. – 313 с.
2. Ивановский А.И. Неуглеродные нанотрубки: синтез и моделирование / А. И. Ивановский // Успехи химии. – 2002. – Т. 71, № 3. – С. 203–224.