

УДК: 620.22:669.017

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА НАНО- И МАКРОСТРУКТУРЫ ТАНТАЛА.

Кузьминов Е.Д., Синявский С.В., Уразова К.Д.

Научный руководитель: Г.В. Ерофеева, профессор, д.п.н., член-корреспондент РАН.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

Аннотация. Настоящая работа посвящена сбору и анализу данных о наноструктуре тантала. В работе подробно описана характерная для данного элемента прямая и обратная решетка, указан их базис и параметр. Уделено внимание энергетическим характеристикам: поверхность Ферми, которая является аналогичной поверхности Ферми ниобия, зона Бриллюэна, которые определяют важные свойства такие как: блеск, ковкость, тепло- и электропроводность. Из сравнительной характеристики тантала в макро- и наноструктурах стало ясно, что для тантала в наноструктуре характерно возрастание удельного сопротивления, повышения твердости при этом плотность и температура плавления материала остается неизменной или имеют незначительные изменения. Выявленные изменения связаны с тем, что размер материала на два порядка превышает 1 нм, что в свою очередь говорит о влиянии классических размерных эффектов. В ходе работы был рассмотрен вопрос о технологии получения порошков тантала, методом диспергирования расплавов, а также путем механического измельчения и тонких пленок тантала, методом катодного и магнетронного распыления, а также их применение в различных областях промышленности, например биомедицина и микроэлектроника.

Annotation. This paper is devoted to the collection and analysis of data on tantalum nanostructure. The work describes in detail the direct and inverse lattice characteristic of this element, their basis and parameter are indicated. Attention is paid to the energy characteristics: the Fermi surface, which is similar to the Fermi surface of niobium, the Brillouin zone, which define important properties such as gloss, malleability, thermal and electrical conductivity. From the comparative characteristics of tantalum in macro and nanostructures, it became clear that tantalum in nanostructure is characterized by an increase in specific resistance, an increase in hardness while the density and melting point of the material remain unchanged or have slight changes. The revealed changes are related to the fact that the size of the material is two orders of magnitude greater than 1 nm, which in turn indicates the influence of classical size effects. The work addressed the issue of technology for producing tantalum powders, using the method of dispersing melts, as well as by mechanical grinding and thin films of tantalum, using the method of cathode and magnetron sputtering, as well as their application in various industries, such as biomedicine and microelectronics.

Введение

В настоящее время большой интерес вызывает использование наноматериалов в научных исследованиях, а также в различных отраслях производства. Постоянная потребность в создании улучшенных, новых материалов, не применяя при этом вредного для окружающей среды и дорогостоящего химического синтеза, дополнительно усиливают интерес к возможностям наноструктур. Подавляющее большинство улучшений характеристик материалов за последние пять лет, так или иначе, были связаны с использованием наноструктур. С их помощью увеличивается стойкость материалов к механическим, термическим и другим нагрузкам, долговечность, транспортабельность, изменяется показатель воспламеняемости.

Наноматериалы характеризуются несколькими основными чертами, делающих их вне конкуренции по сравнению с другими веществами, находящими практическое использование в деятельности человека.

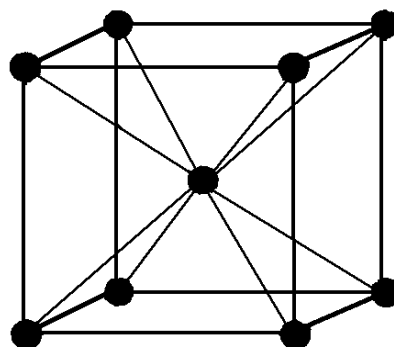
Первый плюс – суперминиатюризация, позволяющая на единице площади разместить больше функциональных наноустройств. Это особенно ценно для нанoeлектроники или для достижения суперплотной магнитной записи информации до 10 Тиррабит на 1 квадратный сантиметр.

Во-вторых, наноматериалы обладают большой площадью поверхности, ускоряющей взаимодействие между ними и средой, в которую они помещены.

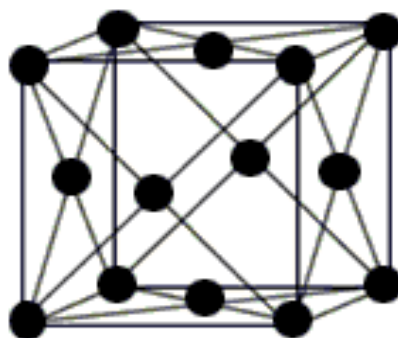
В - третьих, наноматериалы уникальны тем, что такое вещество находится в особом, "наноразмерном", состоянии.

Тантал — химический элемент, металл серебристо-белого цвета с металлическим блеском. Обозначаемый символом Ta (Tantalum), является элементом 6 периода периодической системы химических элементов Д. И. Менделеева, с атомным номером 73. Тантал обладает высокой температурой плавления — 3290 К (3017 °С); кипит при 5731 К (5458 °С). Плотность тантала — 16,65 г/см³. Несмотря на твёрдость, пластичен, как золото. Чистый тантал хорошо поддаётся механической обработке, легко штампуется, раскатывается в проволоку и тончайшие листы толщиной в сотые доли миллиметра. Тантал является отличным геттером (газопоглотителем), при 800 °С он способен поглотить 740 объёмов газа. Обладает парамагнитными свойствами.

Тантал имеет прямую объёмноцентрированную кубическую (ОЦК) решетку с базисом (0;0;0) и (1/2;1/2;1/2). Параметр такой решетки $a = 3,310 \text{ \AA}$ и обратную гранецентрированную кубическую (ОЦК) (Рис.1).



а)



б)

Рис.1. Структура кристалла тантала.

а) Прямая ОЦК решетка, б) обратная ГЦК решетка.

На рис. 2 представлена поверхность Ферми для тантала. Поверхность Ферми для обратной ГЦК решетки тантала аналогична поверхности Ферми ниобия [1]. Она представляет собой четкое представление о поведении электронов в металлах и позволяет объяснить основные свойства данного металла. Например, форма поверхности Ферми определяет такие свойства металлов, как блеск, ковкость, тепло- и электропроводность.

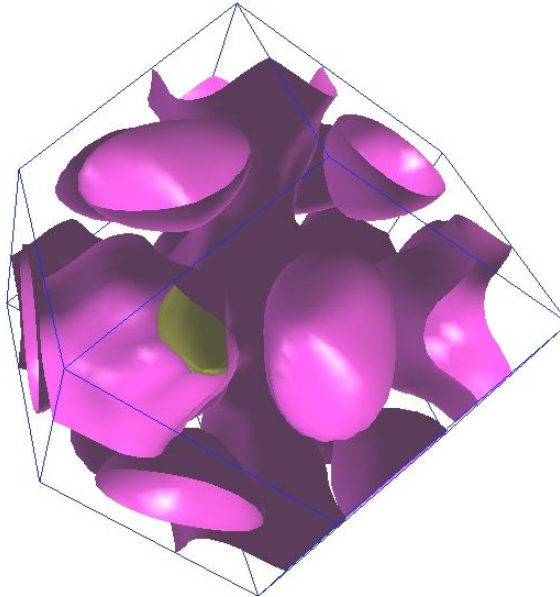


Рис. 2. Поверхность Ферми тантала

Зона Бриллюэна — отображение ячейки Вигнера-Зейтца в обратном пространстве. В приближении волн Блоха волновая функция для периодического потенциала решётки твёрдого тела полностью описывается её поведением в первой зоне Бриллюэна.

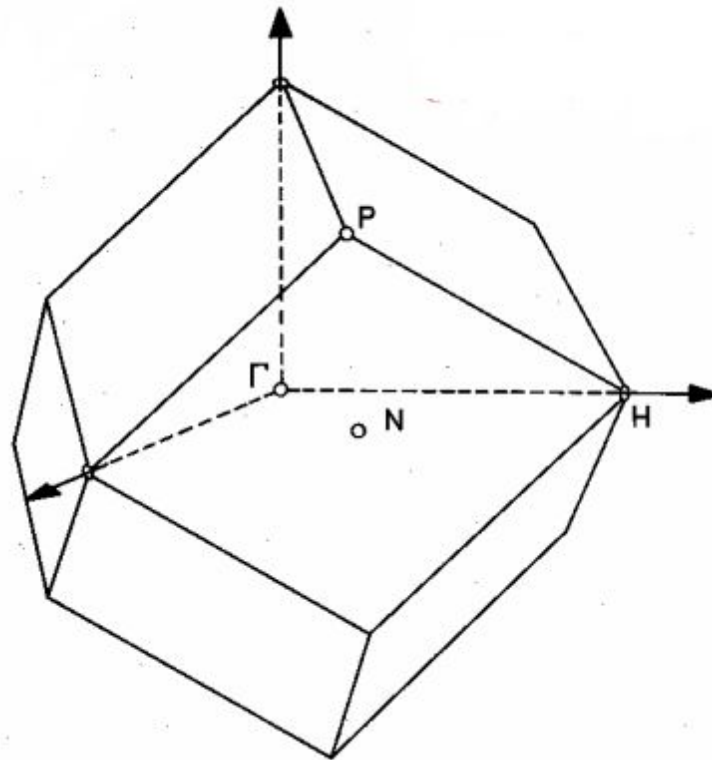


Рис.4. Зона Бриллюэна тантала. (ГЦК решётка).

Сравнительная характеристика Та в макро- и наноструктурах представлена в таблице 1.

Таблица 1. Изменение свойств Та в макро- и наноструктуре

Свойства	Макроструктура	Наноструктура	Размер, нм	Вид наноматериала
Твёрдость, ГПа	0,873	16	100	Тонкая пленка
Температура плавления, К	3290	3269		
Теплоёмкость, $\frac{\text{Дж}}{\text{кг}\cdot\text{град}}$	140(27°C)	110,4(27°C)		
Электросопротивление, Ом * см * 10^6 (400 °C)	33	132		
Плотность, г/см ³	16,6	16,65		

При переходе к наноструктурам (тонкая пленка) в материале Та наблюдается изменение некоторых его характеристик. Так, твердость и электросопротивление наноструктуры увеличились в 13 и 10 раз, соответственно. Также прослеживается незначительное уменьшение теплоемкости [2] и температуры плавления.

Так как размер материала намного больше 1 нм, то мы говорим, что причинами данных изменений являются классические размерные эффекты:

1) Возрастание удельного сопротивления, т.к. происходит уменьшение длины свободного пробега электронов из-за рассеяния на дефектах, примесях, фононах.

2) Наноматериалы имеют более высокие механические характеристики, увеличивается твердость металлов в нанодиапозоне.

3) Наночастицы обладают развитыми границами раздела и высокой кривизной свободных поверхностей. Адсорбционные процессы на таких поверхностях могут оказать сильное влияние на многие физические свойства таких объектов.

В то же время, плотность материала остается постоянной. Это обуславливается тем, что при переходе к наноструктуре кристаллическая решетка не изменяется.

В Таблице 2 показаны некоторые механические свойства при внедрении углерода в материал.

Таблица 2. Изменение свойств ТаС в нано- и макроструктуре

Свойства	Макроструктура	Наноструктура	Размер, нм	Вид наноматериала
Твёрдость, ГПа	0,873	29,0	100	Тонкая плёнка
Температура плавления, К	3290	4250		

Наноструктура корбида тантала имеет прочность в 33 раза превышающую прочность макроструктуры. Так же при переходе к наноразмерам значительно увеличилась температура плавления.

Технологии получения.

Механическим путем измельчают металлы, керамику, полимеры, оксиды, хрупкие материалы. Разновидностью механического измельчения является механосинтез, или механическое легирование, когда в процессе измельчения происходит взаимодействие измельчаемых материалов с получением измельченного материала нового состава.

Другой распространенный механический метод получения порошков наночастиц германия – диспергирование расплавов потоком жидкости или газа. Это высокопроизводительный процесс, который легко осуществить по непрерывной схеме и

автоматизировать, он экономичен и экологичен. В настоящее время наиболее распространен центробежный метод получения металлических порошков. Расплав металла распыляется при помощи диска, вращающегося со скоростью более 20000 об/мин.

Применение

Тантал — ценный металл, который по химическим свойствам немного слабее, чем благородные металлы. Он не растворяется даже в стойких средах, например, в царской водке. Также он устойчив к кислотам и коррозии, поэтому его применяют в металлических конструкциях.

Сфера применения Ta разнообразна. Его применяют для изготовления тонкостенных изделий и изделий сложных форм, в качестве конструкционного материала для химической промышленности, а также как основу для производства кислот (H_2SO_4 , HCl , HNO_3 , уксусной и фосфорной).

Нанокристаллические порошки тантала требуются для изготовления современных высокоемких электролитических конденсаторов. Кроме того порошки тантала используют в космической отрасли для получения бериллидов тантала, ниобия и циркония — перспективных конструкционных материалов с повышенной прочностью при высоких температурах [3], в медицине для термотерапии опухолей в форме нанокластеров тантала, а также для других перспективных исследований [4].

Тантал имеет высокую биологическую совместимость, поэтому нашел свое применение в медицине. Его используют для изготовления пластин, которыми перекрывают пролом черепной коробки человека, а также для сшивания нервных волокон, изготовления глазного протеза.

Элемент нашел свое применение и в металлургии. Его используют в качестве легирования стали. При этом карбид тантала является отличной защитой для стальных форм в процессе литья. Также его применяют для сохранения острых режущих кромок [5].

Незаменимым металл является и для жаропрочных сплавов, которые использует ракетная и космическая промышленность. Сплав из вольфрама и тантала обеспечивает огромную температурную выдержку до 2500 °С. Его применяют для изготовления запчастей сложных систем газового контроля и выхлопных труб, а также форсунок.

Список литературы:

- 1) Ю.П. Гайдуков Успехи физических наук. - Том 100, вып.3 изд. - М: 1970г.
- 2) В.Ю.Бодряков, А.Н. Башкатов. Теплоемкость тантала в нормальном и сверхпроводящем состояниях // Уральский педагогический университет, Екатеринбург. - 2013. - №9.
- 3) Хейг Дж.Р., Линч Дж. Ф., рудник А. и др., Огнеупоры для космоса. Справочник, пер.с англ. – М.: Металлургия, 1967. – 266 с.
- 4) А.Л.Небера, А.В. Лизунов, А.А. Семенов. Танталовые нанокристаллические порошки в применении к задачам медицины. Сборник тезисов Российской научной конференции «МАЯТ-2014» - Звенигород, 2014. – С 91.
- 5) А.Л. Небера, А.В. Лизунов, А.А.Семенов Танталовые порошки с нанокристаллической структурой: получение, свойства, перспективы использования // Композиты и наноструктуры. - 2015. - №3.