

УДК: 62022:669.017

Сравнительные характеристики элемента ниобия в микро и наноструктурах

Ли ХэньЮй, Тянь Шучжэн, Чжан Мэнфэй

Национальный исследовательский Томский политехнический Университет

Научный руководитель: Ерофеева Галина Васильевна , профессор , д.п.н.

Ниобий, типичный переходный металл, элемент побочной подгруппы пятой группы пятого периода периодической системы химических элементов. Простое вещество ниобий — блестящий металл серебристо-серого цвета с кубической объёмноцентрированной кристаллической решёткой типа α -Fe, обладает отличной пластичностью и коррозионной стойкостью. Следовательно, ниобий широко используется в ядерных реакторах и других областях. В нашей работе мы представляем сравнение свойств с микробным и нанометровым масштабами ниобия, приведены его кристаллическая структура, поверхность Ферми. Результаты показали, по сравнению с микроструктурой, диоксид циркония в наноструктурах имеет свои особенности. Например, ниобий в нанометровом масштабе имеет проводимость в ~ 33 раза выше и уменьшение модуля упругости на 15,8% относительно микрометрового масштаба. В связи с тем, что средний диаметр материала составляет 10 нм, квантовый эффект считается основным фактором изменения этих свойств. Способ получения и применение нано-ниобия также обсуждаются на основе его свойств, ниобий и его сплавы используются как конструкционные материалы для деталей реактивных двигателей, ракет, газовых турбин, химической аппаратуры, электронных приборов, электрических конденсаторов, сверхпроводящих устройств.

Comparative characteristics of the element niobium in micro and nanostructures

Henry Li, Suzeng Tian, Mengfei Zhang

National Research Tomsk Polytechnic University

Scientific adviser: Galina V. Erofeeva, Professor, Ph.D.

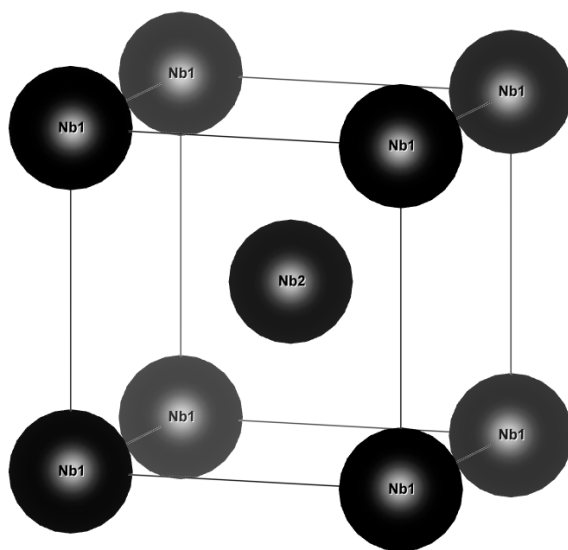
Niobium, a typical transition metal, an element of a secondary subgroup of the fifth group of the fifth period of the periodic system of chemical elements. Simple substance niobium is a brilliant metal of silver-gray color with a cubic, body-centered crystal lattice of type α -Fe, it has excellent plasticity and corrosion resistance. Consequently, niobium is widely used in nuclear reactors and other areas. In our work, we present a comparison of properties with the microbial and nanometer scales of niobium; its crystal structure and Fermi surface are presented. The results showed, compared with the microstructure, zirconium dioxide in nanostructures has its own characteristics. For example, niobium on a nanometer scale has a conductivity of ~ 33 times higher and a decrease in the elastic modulus of 15.8% relative to the micrometer scale. Due to the fact that the average diameter of the material is 10 nm, the quantum effect is considered to be the main factor in the change of these properties. The method of obtaining and using nano-niobium is also discussed

on the basis of its properties, niobium and its alloys are used as structural materials for parts of jet engines, rockets, gas turbines, chemical equipment, electronic devices, electrical capacitors, superconducting devices.

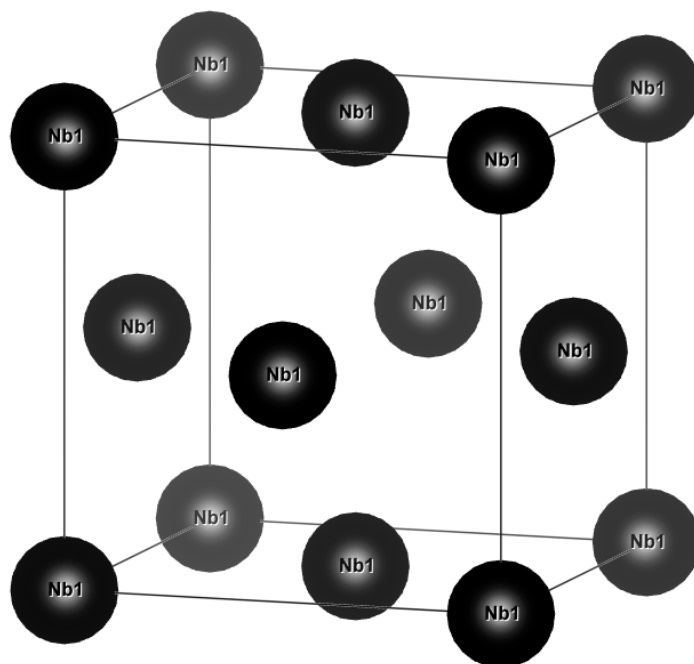
Введение

Ниобий, ранее известный как колумбий, представляет собой химический элемент с символом Nb и атомным номером 41[1]. Это мягкий серый, кристаллический, пластичный переходный металл. Простое вещество ниобий — блестящий металл серебристо-серого цвета с кубической объёмноцентрированной кристаллической решёткой типа ОЦК, $a = 0,3294$ [2].

Кристаллическая структура



Декартово решётка $a = 0.3294$ nm



Обратная решётка

$$a' = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1(a_2 \times a_3)} \quad (1)$$

Вычисление формулы постоянной решетки в обратном пространстве решетки.

Бриллюэна зона и Ферми поверхность

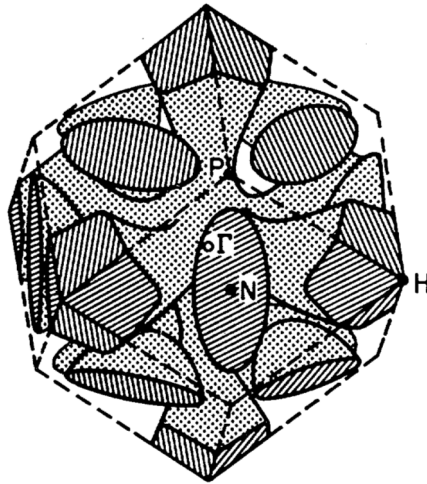


Рис.1 Зона Бриллюэна Nb [3]

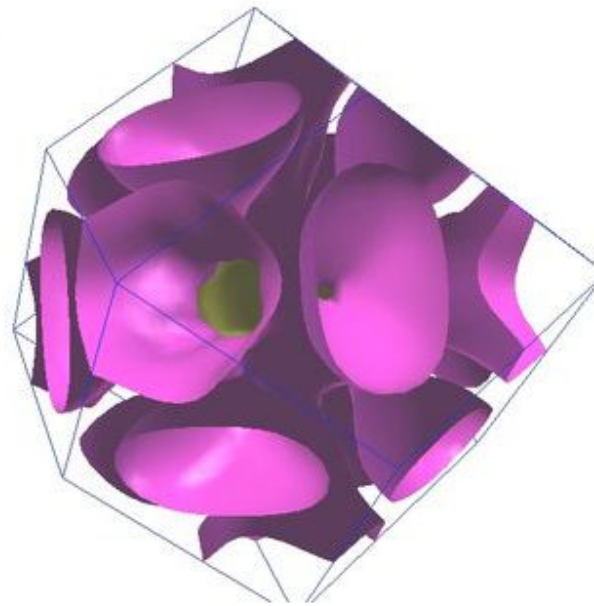


Рис.2 Поверхность Ферми Nb [3]

Из рис.2 видно, что поверхность Ферми тигля имеет сложную структуру, и поверхность Ферми открытая.

Свойство микро- и наноструктур Nb

Сравнение свойств Nb в микро и нано структурах

Параметры	микро	Нано	Размер, нм	Вид наноматериала
Плотность	8,57 г/см ³ [4]	8,57 г/см ³ [7]	10	Нанопорошок
Температура плавления	2750 К [4]	2750 К [7]	10	
Модуль Юнга	95±15 GPa [5]	80±30 GPa[7]	10	
Твердость	4-7 GPa [5]	1 GPa [7]	10	
Проводимость	15 μΩсм [6]	500 μΩсм [7]	10	

Физические причины изменения свойства в наноматериале

Из сравнения свойств циркония в микроструктуре и нано структуре, можно сказать, что некоторые свойства ниобий изменились. Ниобий наночастицы, нанодоты или нанопорошок представляют собой сферические или граненые частицы с высокой площадью поверхности. Наномасштабные частицы ниобия обычно составляют 10-20 нм (нм) с удельной площадью поверхности (SSA) в диапазоне 30-60 / г. Сравнивая свойства наноструктур и микроструктур, мы обнаружили, что твердость наноструктур уменьшилась, а электропроводность увеличилась.

Физические причины специфики заключаются в следующем:

1. Ниобий в нано материале обладает склонностью к самоорганизации кластерных структур;
2. Большая доля атомов находится на выступах и уступах поверхности. Поэтому свободная поверхность является стоком бесконечной емкости для точечных и линейных кристаллических дефектов;
3. Поверхностные эффекты механических свойств;
4. Тонкие физические эффекты взаимодействия электронов со свободной поверхностью.

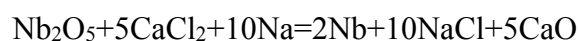
Размерные эффекты, влияющие на изменение свойств наноструктур по сравнению с микроструктурами разделяются на классические и квантовые. Если размеры наноструктуры сравнимы с длиной волны де Бройля, основное влияние имеют квантовые размерные эффекты. В данном случае, длина волны де Бройля равна:

Размер наноструктуры ниобия равен 10нм, λ и размер частицы мало чем отличаются. Поэтому квантовые размерные эффекты в рассматриваемом случае имеют значения,

основное влияние на изменение свойств диоксида оказывают квантовые размерные эффекты.

Получение наноразмерного ниобия

Замена менее активных металлов более активными металлами является распространенным методом получения металлов, поэтому для получения металлического порошка ниобия с более низким содержанием кислорода с использованием процесса восстановления пара магния. Чистый ниобий получают в реакции:



Наночастицы ниобия с высокой степенью чистоты были получены с помощью процесса содиотермического восстановления с использованием Nb_2O_5 в качестве сырья, LiCl , NaCl , KCl и CaCl_2 в качестве разбавителей и натрия в качестве восстанавливающего реагента[8].

Применение

Частицы нано ниобия также доступны в материалах с высокой степенью чистоты и высокой чистоты, с покрытием и диспергированными формами. Они также доступны в виде дисперсии в группе производства АЕ наножидкости. Нанофлюиды обычно определяются как суспендированные наночастицы в растворе либо с использованием поверхностно-активного вещества, либо с помощью технологии поверхностного заряда. Доступны также технические рекомендации по выбору нанопористых дисперсий и нанесения покрытий. Другие наноструктуры включают наностержни, нанотовары, наноноры, нанопирамиды и другие нанокомпозиты. Поверхностно-функционализованные наночастицы позволяют адсорбировать частицы на поверхности с использованием химически связанных полимеров.

Список литературы

- [1] Meija, J.; et al. (2016). "Atomic weights of the elements 2013 (IUPAC Technical Report)". Pure and Applied Chemistry. 88 (3): 265–91.
- [2] bulk structure and bulk lattice parameter (s): Vol. III/24c 1.6, p.24
- [3] Reference PhysRevB.1.366 Pure and Applied Chemistry. — 2013. — Vol. 85, no. 5. — P. 1047—1078.
- [4] Thermodynamic Properties of Elements, H to Ni: Vol. IV/19a1 p.72
- [5] Nonmagnetic transition metals: Nb (Niobium) (Z = 41): Vol. III/23c1 2.11.7. p.196-204
- [6] Structure and hardness of vacuum arc deposited multi-component nitride coatings of Ti, Zr and Nb, Surface and Coatings Technology, Volume 125, Issues 1–3, March 2000, Pages 257-262.
- [7] Niobium Nanoparticles American elements -URL: <https://www.americanelements.com/niobium-nanoparticles-7440-03-1>.
- [8] Preparation of niobium nanoparticles by sodiothermic reduction of Nb₂O₅ in molten salts, Na Wang, Kai Huang, Jungang Hou, Hongmin Zhu, Rare Metals December 2012, Volume 31, Issue 6, pp 621–626.