

УДК 620.22:669.017

ББК 30.37:34.2

Исследование свойств никеля в макро- и наноструктурах

ЛюУян, ЯньСыцзинь

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Email: 1017428118@qq.com

Научные руководитель: Ерофеева Г.В.

Аннотация: Эта статья посвящена изменению свойств Ni при переходе наноматериалу. Указан тип решетки и её параметры. Сначала, отражены характерные для никеля поверхности Ферми и зоны Бриллюэна. Для узнавания как изменяется топология поверхности при изменении размеров вещества, сравниваются свойства в макро- и наноструктурах никеля, например, удельное электрическое сопротивление, температура плавления, плотность, объемная плотность, молярная теплоёмкость. Удельное электрическое сопротивление и температура плавления никеля в наноструктурах существенно уменьшились по сравнению с макроструктурой. Плотность уменьшается 1,05 раз. Молярная теплоёмкость в макро- и наноструктурах почти не изменяется. В макроструктурах нет объемной плотности. Указано какие размерные эффекты оказывают главное влияние на изменение свойств наноматериала - классические размерные эффекты. Показан порядок величины длины волны де-Бройля электронов. Поскольку длина волны де-Бройля $\lambda=0,1-1$ нм для металлов, то её влияние сказывается только для сравнения с ней наноразмеров. В этом случае квантовые размерные эффекты влияют на изменение свойств наноматериала не оказывают, основное влияние на изменение свойств наноматериала оказывают классические размерные эффекты. Указаны особые свойства и физические причины изменения свойств. Приведены технологии получения. Перечислены области применения наноструктурного никеля.

Ключевые слова: никель, наноструктура, размерные эффекты, поверхность Ферми, зона Бриллюэна

Investigation of nickel properties in macro and nanostructures

Liu Wuyang, Yan Sijin

National Research Tomsk Polytechnic University

Email: 1017428118@qq.com

Scientific advisers: Erofeeva G.V.

Abstract: This article is devoted to changing the properties of Ni during the transition to nanomaterial. The lattice type and its parameters are indicated. At first, Fermi and Brillouin zones characteristic of nickel are reflected. To find out how the surface topology changes with a change in the size of a substance, properties in nickel macro- and nanostructures are compared, for example, electrical resistivity, melting point, density, bulk density, molar heat capacity. The electrical resistivity and the melting point of nickel in nanostructures have decreased significantly as compared with the macrostructure. The density decreases 1.05 times. The molar heat capacity in macro and nanostructures remains almost unchanged. There is no bulk density in macrostructures. It is indicated which size effects have the main influence on the change in the properties of a nanomaterial - the classic size effects. The order of magnitude of the de Broglie wavelength of electrons is shown. Since the de Broglie wavelength $\lambda = 0.1-1$ nm for metals, its effect is only affected by comparisons with it of nanoscale. In this case, the quantum size effects do not affect the change in the properties of the nanomaterial, the main effect on the change in the properties of the nanomaterial is the classical size effects. Specified properties and physical causes of changes in properties are indicated. The technology of obtaining. The areas of application of nanostructured nickel are listed.

Keywords: nickel, nanostructure, dimensional effects, Fermi surface, Brillouin zone

1. Структура никеля

1.1 Структура прямой и обратной решётки

При нормальных условиях никель существует как b-модификация в гранцентрированной кубической решетке ($a = 3,5236 \text{ \AA}$). Однако никель с катодным напылением образует a-модификацию с наиболее плотно упакованной гексагональной решеткой ($a = 2,65 \text{ \AA}$, $c = 4,32 \text{ \AA}$), и при нагревании выше $200 \text{ }^\circ\text{C}$ он становится кубическим. Плотный кубический никель имеет плотность $8,9 \text{ г / см}^3$ ($20 \text{ }^\circ\text{C}$) и атомный радиус $1,24 \text{ \AA}$. [6]

Структура прямой решетки никеля является ГЦК. Её параметры: $a = 0,35238 \text{ нм}$.

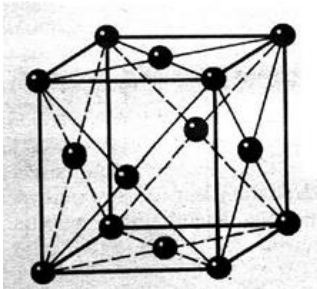


Рис1. Структура прямой решетки никеля

Мы можем получить структуру обратной решетки никеля по примеру построения обратной решетки.

Структура обратной решетки никеля является ОЦК. Её параметры:

$$a^* = 2\pi/a$$

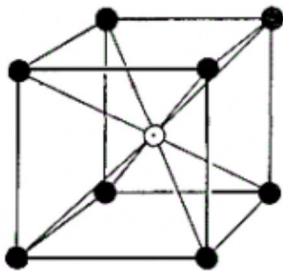


Рис2. Структура обратной решетки никеля

1.2 Зона Бриллюэна и поверхность Ферми

Зона Бриллюэна - отображение элементов Вигнера-Зейтца в обратном пространстве. В приближении блоховской волны волновая функция периодического потенциала решетки

твердого тела полностью описывается ее поведением в первой зоне Бриллюэна [1].

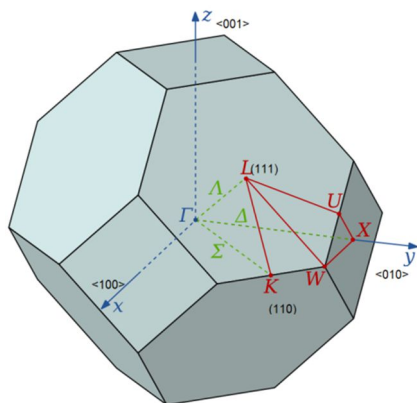


Рис3. Зона Бриллюэна никеля

Поверхность Ферми представляет собой постоянную энергетическую поверхность в k -пространстве, равную энергии Ферми в металлическом или вырожденном полупроводнике. Знание формы поверхности Ферми играет важную роль в общей физике металлов и вырожденных полупроводников, потому что из-за вырождения электронного газа его свойства пропускания, такие как электропроводность, нежелательны, зависят только от электронов вблизи поверхности Ферми. , Поверхность Ферми отделяет состояние заполнения от пустоты при абсолютной нулевой температуре.

Более сложная форма металлической поверхности Ферми может быть объяснена тем фактом, что несколько частично заполненных областей одновременно проходят через одну и ту же энергию Ферми по сравнению с вырожденными полупроводниками. На рисунке различные части поверхности Ферми в результате теоретических расчетов (происходящих из пересечений с различными областями) выделены разными цветами.

Основным методом экспериментального определения топологии поверхности Ферми является электромагнитное измерение. [2]

Это поверхность Ферми никеля является открытой поверхностью Ферми.

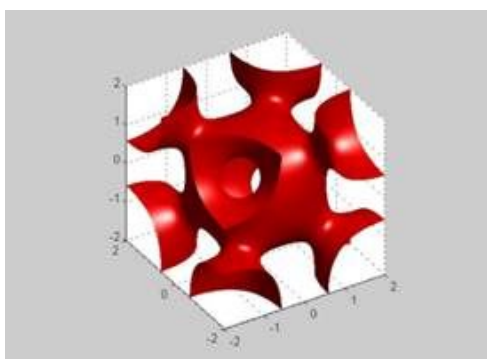


Рис4. Поверхность Ферми никеля в нано

Таблица 1. Сравнение свойств никеля в наноструктурах и макроструктурах

свойства	Макро-	Нано-	Размер (нм)	Вид материаланм
Удельное электрическое сопротивление, кОм*м	68,4	25	60-70	порошок
Плотность, г/см ³	8,902	8,45	40	
объемная плотность, г/см ³	нет	0,63	40	
Температура плавления, °С	1453	507	50	
Молярная теплоёмкость, Дж/к. Моль	26,1	26	60-70	

По данным таблицы видно, что удельное электрическое сопротивление и температура плавления никеля в наноструктурах существенно уменьшились по сравнению с макроструктурой. Плотность уменьшается 1,05 раз. Молярная теплоёмкость в макро- и наноструктурах почти не изменяется. В макроструктурах нет объемной плотности.

2. Причины изменение свойств

2.1 Размерные эффекты

Причины изменение свойств в качестве причины изменение свойств может указать размерные эффекты и влияние при поверхности.

Размерный эффект - это явление в твердых телах, наблюдаемое в условиях одного из размеров исследуемого образца и длины элемента - свободного пробега носителя заряда, длины волны де Бройля, длины диффузии и тому подобного. Имеет классический и квантовый размерный эффект. Классические размерные эффекты наблюдаются в поведении электростатической проводимости тонких металлических и полупроводниковых пленок и проволок, толщина d которых сравнима с длиной свободного пробега электронов. При уменьшении толщины удельное сопротивление ρ

монотонно увеличивается, что связано с дополнительным рассеянием электронов на границах образца. Значение γ во многом зависит от характера рассеяния.

Квантовый размерный эффект (квантовый размерный эффект) представляет собой изменение термодинамических и кинетических свойств кристалла, когда хотя бы одно из его геометрических размеров сравнимо с длиной волны электрона де Бройля. Этот эффект связан с количественным определением энергии носителей заряда, которые ограничены одним, двумя или тремя направлениями. Дискретные уровни квантования возникают, когда бесконечный кристалл ограничен барьером или границей. В принципе, дискретный спектр появляется в любом объеме, определяемом потенциальной стенкой, но в действительности можно наблюдать только достаточно маленький размер тела, поскольку эффект декогеренции вызывает расширение уровня энергии, поэтому энергетический спектр считается непрерывным. Следовательно, квантово-размерные эффекты наблюдаются только тогда, когда хотя бы один размер кристалла достаточно мал.

Квантовые размерные эффекты оказывают главное влияние на изменение свойств наноматериала.[3]

$$\lambda = h/p$$

h - Постоянная Планка

p -импульс частицы

Через мы числением, мы получим длина волны де-Бройля равна 0,165нм.

Поскольку длина волны де-Бройля $\lambda=0,1-1$ нм для металлов , то её влияние сказывается только для сравнения с ней наноразмеров. В этом случае квантовые размерные эффекты влияют на изменение свойств наноматериала не оказывают, основное влияние на изменение свойств наноматериала оказывают классические размерные эффекты.

2.2 Физические причины изменения свойств

Следует сказать, что для наночастиц доля атомов в тонком поверхностном слое (толщина которого обычно составляет около 1 нм) значительно увеличивается по сравнению с мезо и частицами. Фактически, доля приповерхностных атомов будет пропорциональна отношению площади поверхности частицы S к ее объему V . Если указать характерный размер частиц (кристаллитов) как D , то: $S / V \propto D^2 / D^3 \propto 1 / D$. Для поверхностных атомов не все связи со смежными атомами участвуют в большинстве атомов в твердом теле. Среди них. Для атомов, расположенных на фланцах и фланцах поверхности, связь является еще

более ненасыщенной. В результате в поверхностном слое происходит сильное искажение кристаллической решетки, и может даже произойти изменение типа решетки. [5]

С другой стороны, свободная поверхность - это бесконечное потребление емкости точечных и линейных кристаллических дефектов (в основном вакансий и дислокаций). При малых размерах частиц этот эффект значительно усиливается, что может привести к высвобождению большинства структурных дефектов на поверхность и очистке материала наночастиц от структурных дефектов и химических примесей. Сегодня установлено, что процесс деформации и разрушения происходит в тонком поверхностном слое по сравнению с внутренним объемом металлических материалов, что в значительной степени определяет возникновение многих физических эффектов, включая физические пределы текучести и физическую усталость. предел.

Следует отметить, что для наночастиц все материалы будут использоваться в качестве поверхностного слоя, толщина которого оценивается в диапазоне примерно 0,5 ... 20 мкм. Можно также указать на тонкие физические эффекты, выраженные в специфической природе взаимодействия электронов со свободными поверхностями.

Следующая причина особых свойств наноматериалов состоит в том, что объемная доля поверхности раздела увеличивается, а размер зерен или кристаллитов в наноматериале уменьшается.

Границы зерен несбалансированы из-за наличия дефектов границ зерен высокой плотности. Этот дисбаланс характеризуется наличием избыточной энергии и дальнего упругого напряжения на границе зерна, граница зерна имеет кристаллическую упорядоченную структуру, а дислокации границы зерна и их композиты являются источником упругого поля. Неравновесие границ зерен приводит к высоким напряжениям и искажениям решетки, изменениям расстояния между атомами и появлению значительных смещений атомов, вплоть до потерь на дальний порядок. Результатом является значительное увеличение микротвердости. [3]

Важным фактором роли наноматериалов является также тенденция появления кластеров. Способствует миграции атомов (атомов) вдоль поверхности и вдоль границы раздела и наличию сил притяжения между ними, что больше, чем наноматериалы для обычных материалов, что часто приводит к образованию островков, колонн и других кластерных структур на подложке. Самоорганизующийся процесс.

Технология получения и применение

Дисперсионный метод должен каким-то образом измельчать крупнозернистый материал до нанометрового размера, потребляя при этом большое количество энергии при резком увеличении границы раздела между твердыми частицами. Жидкость (или газ).

Следовательно, общая поверхность всех частиц, содержащихся в порошке металлического Ni, имеющего средний размер 0,1 мм, была увеличена в 1000 раз при диспергировании до размера 100 нм, и сам порошок стал воспламеняться, то есть воспламенялся при контакте с ним. На самолете [4]

Основным ассортиментом никеля является металлургия, которая предполагает производство высоколегированной нержавеющей стали. Добавляя никель в расплав чугуна, металлурги могут получать жесткие и прочные сплавы с более высокой коррозионной стойкостью и высокой термостойкостью. Никелевый сплав сохраняет свои качества ... многократный нагрев в течение длительного времени.

Благодаря этим характеристикам жаропрочной никелевой стали используется:

- Пищевая промышленность и промышленность;
- в нефтехимической промышленности и строительстве;
- лекарства и медикаменты;
- авиастроение и машиностроение;
- производство подводных кабелей;
- производство нагревательных элементов для промышленного оборудования;
- производство постоянных магнитов;
- Изготовление станков и спецтехники;
- изготовление внутренних элементов здания;
- в мебельной промышленности;
- Производство бытовой техники и бытовой техники;

Благодаря их пластичности и легкостиковки из никеля можно получать очень тонкие изделия, такие как полосы, полосы и никелевые листы. Никель также активно используется при изготовлении проволоки и катанки.

Список литературы:

1. Под ред. Дрица М. Е. Свойства элементов. — Металлургия, 1985. — С. 484-489. — 672 с. Пичугин В.Ф., <<Теория и свойства кристаллов и неупорядоченных материалов>>, Учебное пособие, Томск: Изд-во ТПУ, 2003.-273 с.
2. Рамбиди Н.Г. Березкин А.В. физические и химические основы нанотехнологий. — М:Физмат лит. -2009.-456 с.
3. Е.В. Антипов nano.msu.ru/files/basics/lecture_Antipov.pdf
4. А.А. Барыбин, В.А. Бахтина, Томилины В.Н., и Н.П. Физико-химия наночастиц и наноструктур Изд-во <<Проспект>>, -2015, -208 с.
5. Редкол.: Кнунянц И. Л. (гл. ред.). Химическая энциклопедия: в 5 т. — Москва: Большая Российская энциклопедия, 1992. — Т. 3. — С. 240. — 639 с. — 50 000 экз. — ISBN 5-85270-039-8.
6. Michael E. Wieser, Norman Holden, Tyler B. Coplen, John K. Böhlke, Michael Berglund, Willi A. Brand, Paul De Bièvre, Manfred Gröning, Robert D. Loss, Juris Meija, Takafumi Hirata, Thomas Prohaska, Ronny Schoenberg, Glenda O'Connor, Thomas Walczyk, Shige Yoneda, Xiang-Kun Zhu. Atomic weights of the elements 2011 (IUPAC Technical Report) (англ.) // Pure and Applied Chemistry. — 2013. — Vol. 85, no. 5. — P. 1047-1078. — DOI:10.1351/PAC-REP-13-03-02.