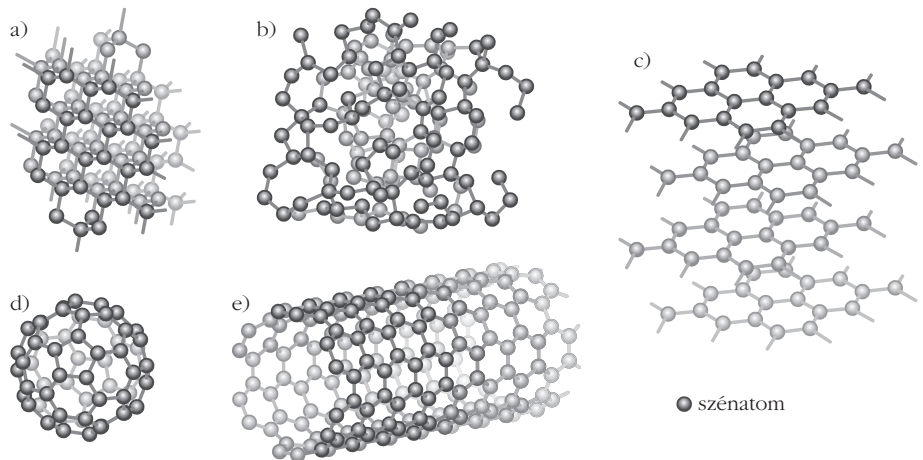


A szén az egyik legsokoldalúbb elem. Számos vegyület – amelyeket szerves anyagok, polimerek néven ismerünk, és amelyekből az élővilág felépül – fő összetevője. Ugyanakkor az elemi szén maga is több változatban fordul elő, a grafit, a gyémánt, a korom, az „orvosi szén” mind ugyanazon elem valamelyik változata.



Szén nanoszerkezetek

Kutatócsoportomban hosszú évek óta foglalkozunk elemi szénre épült nanoszerkezetekkel. Ezek alapja a szén valamelyik nanoméretű formája, amelyek mindegyikét az elmúlt évtizedekben

1. ábra. Az elemi szén módosulatai: a) gyémánt, b) amorf szén – a grafit és gyémánt polikristálya, c) grafit, d) fullerén, e) nanocső (Jojko Sivek, Wikimedia).

Bemutató előadás az Academia Europaea budapesti közgyűlésén, Fizika és Technika Szekció ülése, 2017. szeptember 3.

A szerző köszönetet mond kutatócsoportja jelenlegi és volt tagjainak: *Botka Beának, Datz Dánielnek, Horváth Juditnak, Németh Gergelynek, Pekker Áronnak, Pergerné Klupp Gyöngyinek, Tóth Hajnalkának*, a Wigner kutatóközpontban együttműködő kollégáknak: *Kováts Évának, Pekker Sándornak és Veres Miklósnak*, valamint hazai és külföldi partnereknek: *Székely Editnek* (BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék), *Rudi Hacklnak* (Bajor Tudományos Akadémia Walther Meissner Intézet), *Forró Lászlónak* és *Horváth Endrének* (Lausanne-i Szövetségi Műszaki Egyetem) és *Andrei Khlbystovnak* (Nottinghami Egyetem). A munkát az OTKA és az Európai Unió támogatta.

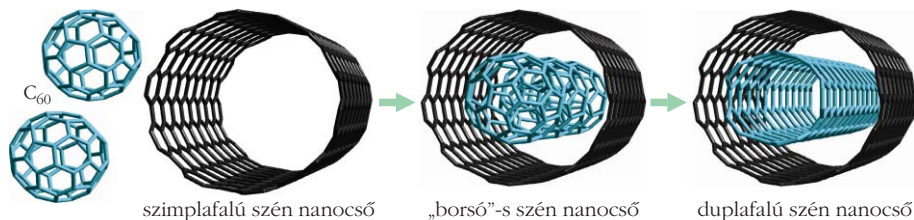


Kamarás Katalin (1953) okleveles vegyészként végzett az ELTE-n. Tudományos munkáját az MTA KFKI Szilárdtestkutató Intézetében kezdte és itt, illetve jogutódjában folytatta. Jelenleg az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont Szilárdtestfizikai és Optikai Intézetének kutatóprofesszora, az MTA rendes tagja. Kutatási területe új anyagok spektroszkópiái tulajdonságainak vizsgálata. Az ELFT Díjbizottságának elnöke.

fedezték fel. A sort a fullerének nyitották 1985-ben, ezek szénből felépülő gömbhéjak, legismertebb közülük a futball-labda alakú C_{60} [1–3]. Felfedezésükért *Harold Kroto*, *Robert Curl* és *Richard Smalley* 1996-ban Nobel-díjat kaptak. A sorban következő szerkezetek a szén nanocsövek voltak, amelyeket egy grafitsík feltekerésével keletkező hengerként tudunk elképzelni (1. ábra), ezeket *Sumio Iijima* fedezte fel 1991-ben [4]. A grafitsík, azaz a grafén sem sokáig maradt elméleti absztrakció: újabb bő évtized múlva *Andre Geim* és *Konstantin Novoselov* figyelte meg az első egyatomos szénréteget, amiért 2010-ben őket is Nobel-díjjal jutalmazták [5].

Szén nanoszerkezetekből készült hibrid anyagok

A fent bemutatott szerkezetek egymással és egyéb szerves vagy szervetlen molekulákkal tovább kombinálhatók, és ily módon igen változatos tulajdonságokkal rendelkező anyagokat lehet létrehozni. A „hibrid anyag” elnevezés egy szerves és egy szervetlen alkotórész kombinációját jelenti, itt a szén a szervetlen összetevő.



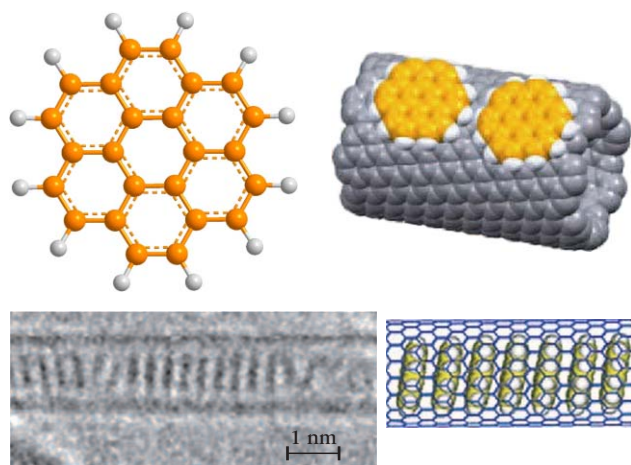
2. ábra. Fullerénmolekulákkal töltött szén nanocső („borsó”) és az abból hőkezeléssel keletkezett duplafalú nanocső [7].

Kétféle hibridet különböztetünk meg: a felülethez „horgonyzott”, illetve az üreges anyagok (fullerének, nanocsövek) belsejébe zárt kis molekulákat. Előbbi esetben „nanoállványokról”, utóbbiban „nanotartályokról” beszélünk. A hibrid szerkezetek a szénváz mechanikai és kémiai stabilitását a molekulák speciális funkcióival egyesítik. Egyedi kémiai reakciók játszódhatnak le a nanotartályok belsejében, hiszen a speciális geometria csak bizonyos irányokban engedi kötéseket létrejöttét. A nanotartályok másik fontos felhasználási területe a bezárt molekulák (például gyógyszerek) szállítása lehet. A nanoállványokhoz rögzített funkciók csoportok – mint egy molekuláris ragasztóként – alkalmasak más nanorészecskék felülethez való rögzítésére.

Szén nanocsövek töltése: nanotartályok

A töltés módszere többféle lehet. Könnyen párolgó vagy szublimáló anyagokat nanocsövekkel együtt vákuumba vagy inert atmoszférába helyezve, a gázfázisba kerülő vendégmolekulák a csövek nyitott végén bediffundálnak a belső térbe. Vajon miért maradnak ott? Mert a csövek falához és egymáshoz is másodlagos, van der Waals-kötésekkel kapcsolódnak. Hőre érzékeny anyagokra ez az eljárás nem alkalmazható, ilyenkor oldatból kell kiindulni. Az oldatból való töltés feltétele, hogy a vendégmolekula és a nanocső közti kölcsönhatás erősebb legyen, mint az oldószeré akár a molekulával, akár a nanocsővel. Még így is

3. ábra. Koronén kölcsönhatása nanocsövekkel: felül balra a koronénmolekula, jobbra a felületre (nanoállvány) adszorbeált koronénmolekulák, alul nanotartályba töltött koronénmolekulák TEM-képe és modellje [7].



nagy a valószínűsége, hogy a nagy feleslegben levő oldószer-molekulák nem maradéktalanul távoznak el a hibrid anyagból. Azonban van egy olyan oldószer, amivel e probléma megkerülhető, ez a szuperkritikus állapotú széndioxid. A szuperkritikus állapotot nem sokkal szobahőmérséklet fölött, 100 bar nyomás körül következik be, és a gázok és folyadékok számos előnyös tulajdonságát kombinálja: gázként tud áthatolni porózus anyagokon, és oldószerként viselkedik molekulákkal szemben, így ebben a közegben nagyon hatásosan lehet megoldani a vendégmolekulák transzportját, a reakció végeztével pedig a szén-dioxid visszaalakul gázzá és nem marad szennyezőként a termékben. A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszékének szuperkritikus folyadékokra szakosodott laboratóriumával [6] való együttműködésünk több hibrid anyag vizsgálatát tette lehetővé. Ezek közül a leglátványosabb a C₆₀-molekulákkal képzett „borsó”. A borsók hevítéskor belső nanocsővé alakulnak (2. ábra).

séklet fölött, 100 bar nyomás körül következik be, és a gázok és folyadékok számos előnyös tulajdonságát kombinálja: gázként tud áthatolni porózus anyagokon, és oldószerként viselkedik molekulákkal szemben, így ebben a közegben nagyon hatásosan lehet megoldani a vendégmolekulák transzportját, a reakció végeztével pedig a szén-dioxid visszaalakul gázzá és nem marad szennyezőként a termékben. A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszékének szuperkritikus folyadékokra szakosodott laboratóriumával [6] való együttműködésünk több hibrid anyag vizsgálatát tette lehetővé. Ezek közül a leglátványosabb a C₆₀-molekulákkal képzett „borsó”. A borsók hevítéskor belső nanocsővé alakulnak (2. ábra).

Szén nanocsövek felületi módosítása

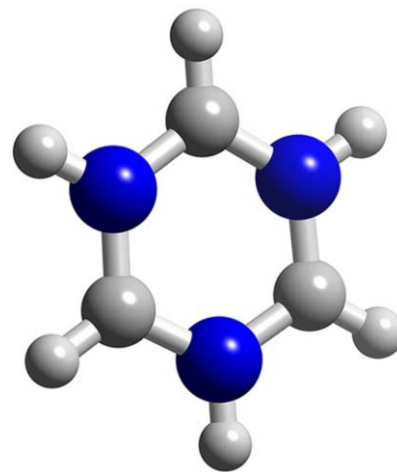
A sík szerkezetű koronénmolekula arra példa, hogy a körülmények változtatásával a nanocsöveket miként lehet nanotartálynak és nanoállványnak is használni. A 3. ábra középső része egy szorosan illeszkedő, nanotartályba töltött koronénoszlopot mutat, ami akkor keletkezik, ha a nanotartály átmérője éppen a vendégmolekuláénak felel meg. Ha annál lényegesen kisebb, akkor az alsó képen bemutatott eset valósul meg, és a molekulák a felülethez kötődnek. Természetesen mind a két eset egyszerre is megvalósulhat, de ilyenkor a felületre adszorbeált molekulák megfelelő oldószerrel lemoshatók, míg a tartályban levők nem oldódnak fel. A külső molekulák észlelhetők, mivel lumineszcenciát mutatnak, a belsőket viszont csak elektronmikroszkóppal lehet kimutatni. Elektronmikroszkóppal követhetők a cső belsejében lezajló reakciók is, amelyek végül itt is egy belső nanocső képződéséhez vezetnek, de valószínűleg egy érdekes közterméken, az úgynevezett grafén nanoszalagon keresztül. Ezek a szalagok grafénból való igen pontos kivágással is előállíthatók (ezzel *Tapasztó Levente* kutatócsoportja foglalkozik az MTA EK MFA-ban), az ilyen „alulról felfelé” építkezés ezeket a módszereket egészíti ki, ezzel is hozzájárulva a szén alapú nanoelektronikához.

Egy másik, nemrégiben az érdeklődés középpontjába került anyagcsoport is hatásosan kombinálható szén nanocsövekkel. A perovszkit-típusú, ólom- vagy ónhalogenidekre épülő fotovoltaiikus anyagokról van szó, amelyek az eddigieket sokszorosán meghaladó határfokkal alkalmazhatók napelemekben. A réteges szerkezetű napelemekben az egyes rétegek szerepe

és kölcsönhatásuk meghatározó. *Forró László* lausanne-i csoportjában a hatásfokot azal növelték, hogy nanoszerkezetű perovszkit tűkristályokat, nanodrótokat növesztettek. Ha ezeket nanocsövek felületére visszük fel, természetesen kombináljuk a hordozó mechanikai stabilitását a fényérzékeny perovszkit funkciójával, de azt is meg tudtuk mutatni, hogy az alkotórészek között elektromos kölcsönhatás is fellép: a perovszkitban fény hatására megjelenő töltéshordozók a nanocsőben, mint vezető rétegben tudnak továbbterjedni. Az ezirányú erőfeszítések remélhetőleg új, különleges napelemek kifejlesztéséhez járulnak majd hozzá (4. ábra).



4. ábra. Ólomjodid alapú perovszkit nanodrótok szén nanocső hordozón. Optikai mikroszkópos felvétel.



5. ábra. A bórazin – $B_3N_3H_6$ – molekula.

Bórnitrid nanocsövek

Látómezőnk a szén periódusos rendszerbeli két szomszédjára, a bórra és a nitrogénre kiszélesítve olyan vegyület, a bórnitrid található, amely elektron szerkezete hasonlít a szénéhez. Ez a szerkezet úgy épül fel, hogy a nitrogénatom a külső elektronhéjáról egy elektront átad a bórnak. Mivel a két atom elektronvonzó képessége (elektronegativitása) különböző, az átadott elektronok nem alkotnak delokalizált kovalens rendszert, hanem az atomtörzsekhez kötve maradnak, amit a köztük fellépő Coulomb-kölcsönhatás tovább stabilizál. A bórnitrid alapú nanoszerkezetek alapegysége a benzollal analóg bórazin (5. ábra).

A bórazinból a szénanalóghoz igen hasonló nanocsöveket lehet felépíteni, azzal a különbséggel, hogy míg a szén nanocsövek jó elektromos vezetők és a látható fény nagy részét elnyelik, a bórnitridből készültké átlátszók és szigetelők. Bár a bórnitrid nanocsövek átmérője nagyobb, és általában többfalúak, ezek is alkalmasak töltésre. A 2. ábrán bemutatott módszerrel olyan duplafalú nanocsövet sikerült létrehozunk, amelyben egy vezető belső csövet vesz körül egy szigetelő réteg, azaz egy nanoméretű árnyékolt vezetőket (6. ábra). Ehhez hasonló hibrid szerkezetek nagy jövő előtt állnak a nanoelektronikában.

Összefoglalás

Őszintén remélem, hogy e rövid áttekintésben ízelítőt tudtam adni a modern anyagtudomány egy olyan területéről, ahol fizikusok, vegyészek és műszaki szakemberek együttműködve tudnak hozzájárulni új, az életünket egyre könnyebbé tevő technológiák fejlődéséhez. Szeretnénk, ha a nem túl távoli jövőben ezt a munkát az élettudományok felé is ki tudnánk bővíteni.

Irodalom

- Braun T.: *A káprázatos C_{60} molekula*. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1996.
- Faigel Gy.: Fullerének. *Fizikai Szemle* 44 (1994) 349–351.
- Kamarás K. A természet futball-labdái. *Természet Világa* 123 (1992) 99–101.
- Kónya Z., Bíró L. P., Hernádi K., B. Nagy J., Kiricsi I.: Szén nanocsövek előállítása, tulajdonságai és alkalmazási lehetőségei. *A kémia újabb eredményei* 90, 121–299, Akadémiai Kiadó, Budapest, 2001.
- Márk G. I., Vancsó P., Bíró L. P.: Lehet-e tökéletes nanoelektronikai eszközöket készíteni tökéletes grafénből? *Fizikai Szemle* 63 (2013) 381–385.
- Székely E., Simándi B.: A szuperkritikus szén-dioxid alkalmazásai. *Magyar Kémiai Folyóirat – Kémiai Közlemények* 120 (2014) 23–25.
- Botka B., Ph.D. disszertáció. BME, 2016.

6. ábra. Belső szén nanocsőből és külső bórnitrid köpenyből álló „árnyékolt nanokábel”, a *Small Methods* folyóiratban megjelent cikkünk ihlette annak címképét.

